

Chalmers Tekniska Högskola och Göteborgs Universitet  
Sektionen för Fysik och Teknisk Fysik  
Arne Rosén, Halina Roth  
Uppdaterad av Erik Reimhult, januari 2002

# A4

## Enelektronspektrum

Namn.....

Kurs.....

Utförd den.....

Handledare.....

Godkänd den.....

av.....

## **Mål**

Försöket avser att:

- Demonstrera kvantisering av elektronernas energinivåer i atomer.
- Experimentellt bestämma våglängderna för några av väteets spektrallinjer i det synliga området.
- Beräkna Rydbergskonstanten utifrån de uppmätta spektrallinjerna för väte.
- Konstruera ett energinivåschema för väteatomen.
- Bestämma väteatomens jonisationsenergi.
- Uppmäta delar av natriums spektrum i det synliga området.
- Utifrån det uppmätta spektrallinjerna bestämma vilka övergångar som observerats och räkna ut energinivåernas position för natrium.

## **Inledning**

Om en elektrisk urladdning skickas genom ett gasfyllt rör börjar gasen att lysa. I mitten på 1800-talet studerades ljuset från sådana urladdningsrör mycket intensivt. En viktig upptäckt var att det utsända ljuset endast bestod av ett fåtal färger, våglängder, vilka är olika beroende på typen av atomer som finns i gasen. Genom att bryta upp ljuset i ett prisma kan man projicera de olika färgerna som skarpa linjer på en skärm och ett spektrum av den här typen kallas därför linjespektrum. Matematiska formler som talade om våglängderna för väteets linjer gavs av först Balmer och sedan Rydberg, men till att börja med kunde man inte förklara deras uppkomst.

Spektroskopiska mätningar av det här slaget ger information om strukturen hos de enskilda atomerna i gasen och gick hand i hand med utvecklingen av alltmer förfinade atommodeller. Den första moderna atommodellen skapades av J.J. Thomson (1904) och byggde helt och hållet på klassisk fysik. Ernst Rutherford visade att atomer måste ha en positivt laddad kärna och han skapade en ny modell 1911 med planetsystemet som förebild, där elektronerna kretsade som planeter runt en positivt laddad kärna och hölls på plats av den elektrostatiske interaktionen.

Rutherfords modell var omöjlig enligt klassisk fysik. En laddning som accelereras utsänder elektromagnetisk strålning och en elektron som kretsar runt en kärna är ständigt accelererad. Ingen elektromagnetisk strålning observerades från atomer i grundtillståndet (som inte tillförts energi). Dessutom innebär utsändande av elektromagnetisk strålning att energi går förlorad från atomen och elektronen borde därmed gå in i en spiralbana för att relativt snabbt krascha i atomkärnan. Rutherfords atommodell var alltså inte stabil enligt lagarna för klassisk fysik. Inget i modellen hindrade heller elektronerna från att inta vilken bana som helst runt atomkärnan och om elektronerna kan kretsa på ett godtyckligt avstånd borde vi från en gas få ett kontinuerligt spektrum (alla våglängder) istället för att observera ett linjespektrum.

Den som formellt löste problemet var den danske fysikern Niels Bohr. Bohr presenterade 1913 ett antal postulater (grundläggande antaganden) som avvek från klassisk fysik och utgjorde ett av de första stegen mot den moderna kvantfysiken. I Bohrs modell tilläts elektronerna bara att röra sig i vissa banor där de inte utsände

strålning och efter att modellen utvecklats vidare av bl a Wilson och Sommerfeld kunde den användas för att förutsäga mycket fina detaljer i väteets spektrum. Även andra atomer med endast en elektron i det yttersta skalet, som natrium, kan delvis beskrivas med Sommerfelds modell.

För att förstå spektra uppmätta från mer komplicerade atomer, som exempelvis helium, fick man vänta tills kvantmekaniken formulerades av bl a Schrödinger (1925). Då övergavs tanken på bestämda elektronbanor och istället gavs elektronerna både partikel och vågegenskaper, vilket tillät dem att beskrivas som fördelade med en viss sannolikhet i rummet och tiden. De möjliga sannolikhetsfördelningarna beskrivs av lösningarna till den berömda Schrödingerekvationen.

### **Rydbergs formel**

Redan 1888 ställde den svenske fysikern Janne Rydberg upp en formel för våglängderna på de spektrallinjer man kunde se från en gas av väteatomer. Han härledde sin formel direkt från experimentella data och fick

$$\frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right) \quad n, n' = 1, 2, 3, \dots, \quad n' > n. \quad (1)$$

$R_{\infty}$  är en konstant som kallas Rydbergskonstanten. Med den här generella formeln kunde man beskriva alla synliga och osynliga linjer i väteets spektrum som man hade hittat.

### **Bohrs teori för väteliknande system**

Niels Bohr var den som först lyckades ge en fysikalisk modell som förklarade Janne Rydbergs resultat. Bohrs atommodell innebär att atomens kärna och elektronerna som kretsar kring den lyder den klassiska fysikens lagar. Viktigast är den elektromagnetiska interaktionen mellan den positivt laddade kärnan och de negativt laddade elektronerna. Enligt Bohr behöver vi lägga till tre postulater för små system som atomer om vi vill räkna ut storleken på interaktioner (krafter) och energier.

De postulat som Bohr ställde upp var:

1. Elektronen rör sig runt kärnan i cirkulära banor under inflytande av den elektrostatiska växelverkan med kärnan.
2. Bara vissa banor är tillåtna. I de tillåtna banorna utstrålar inte elektronen någon energi och rörelsen kan beskrivas med klassisk mekanik.
3. En elektron kan spontant hoppa från en bana med högre energi ( $E_{n'}$ ) till en med den lägre energin ( $E_n$ ). Överskottsenergin utsänds som en foton (ljuspartikel) vars energi är  $hf = E_{n'} - E_n$ . Våglängden ges då av:

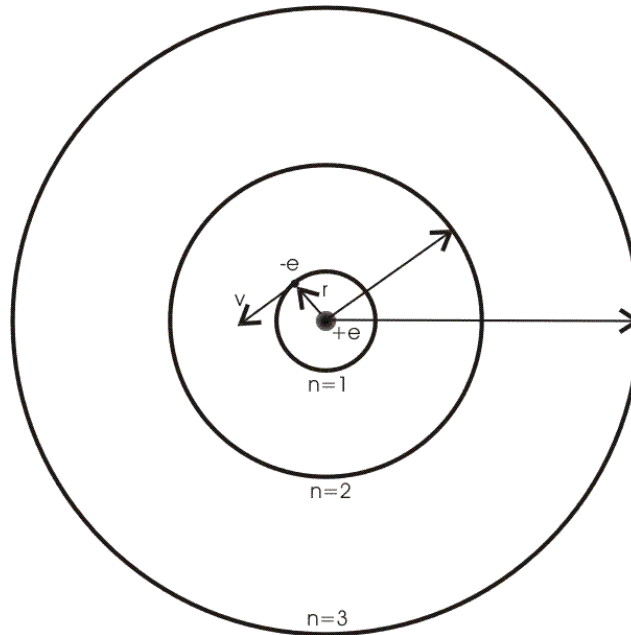
$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{hc} (E_{n'} - E_n), \quad (2)$$

$c$  är ljusets hastighet och  $h$  Plancks konstant. Ekvationen kallas Bohrs frekvensvillkor.

4. För de tillåtna banorna är elektronens rörelsemängdsmoment en multipel av Plancks konstant:

$$L = m_e v r = n \frac{h}{2\pi} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3)$$

Villkoret kallas Bohrs kvantiseringsregel.



**Figur 1. Bohrs atommodell.**

Utifrån Bohrs postulat kan vi beräkna de tillåtna radierna för elektronbanorna, energin elektronen har i de olika banorna och vilken färg ljuset har som sänds ut när elektronen byter bana. Allt som behövs är att ställa upp uttrycken för elektronens potentiella energi relativt kärnan och dess rörelseenergi, samt låta den attraktiva coulombkraften balansera centripetalkraften. Allt enligt klassisk mekanik och elektrostatik.

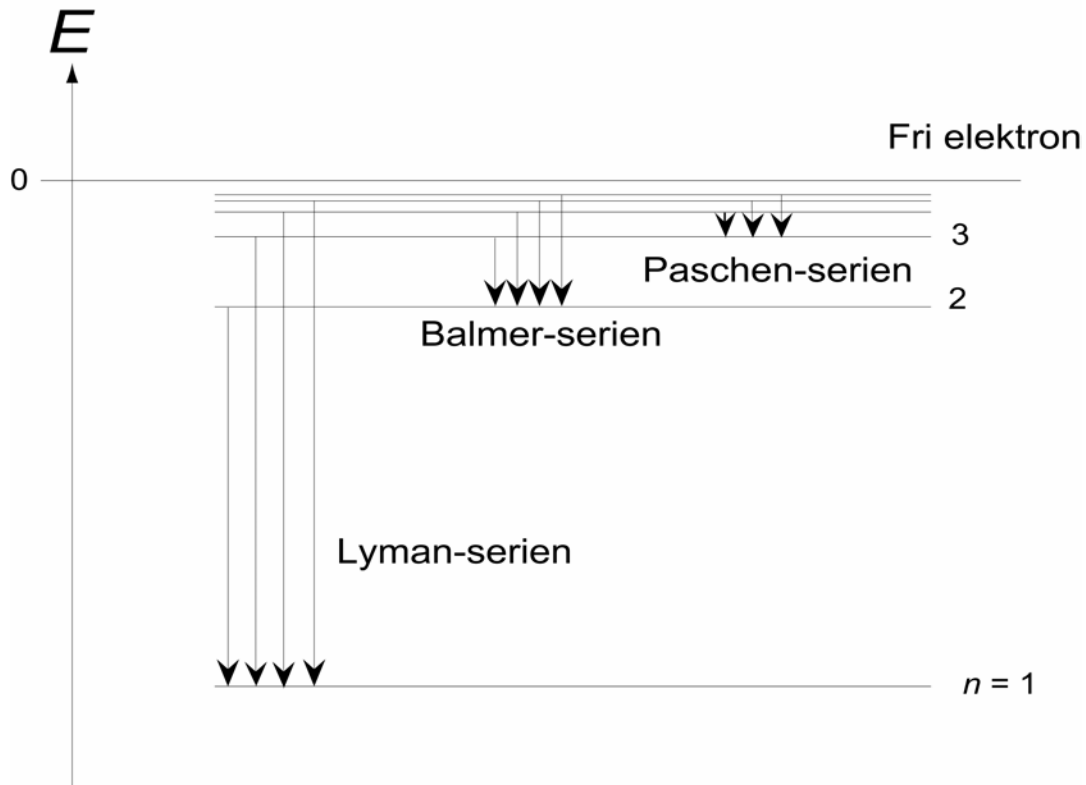
Löser man ekvationerna (se Appendix I) fås elektronens totala energi i de tillåtna banorna:

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4)$$

$E_n$  beror bara på en rad kända naturkonstanter (elektronens massa  $m_e$ , elementarpartikelladdningen  $e$ , dielektricitetskonstanten  $\epsilon_0$ , Plancks konstant  $h$ ) och heltalet  $n$  som numrerar banan. Energin kan alltså endast anta ett – visserligen oändligt – men numrerbart antal värden. Att endast vissa värden kan antas kallas i modern fysik för kvantisering.  $n = 1$  ger den innersta banan och elektronens lägsta möjliga energi.

Energivåerna brukar ritas in i ett energinivådiagram för att få en översiktssbild som även visar möjliga övergångar för elektroner mellan olika energinivåer. Ett skalentligt

energinivådiagram för väte utan absoluta värden visas i Figur 2. Övergångar till en viss energinivå kallas för *serier*, vilka för väte (ett urval visat i Figur 2) är döpta efter personerna som upptäckte dem.



Figur 2. Vätets energinivåer

### En jämförelse mellan Bohr och Rydberg

De spektrallinjer vi observerar härrör, enligt Bohrs andra postulat, från de fotoner (ljuspartiklar) som sänds ut då elektronen hoppar mellan två energinivåer. De möjliga våglängderna ges enligt (2) och (4) av

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{hc} (E_{n'} - E_n) = \frac{m_e e^4}{8 \epsilon_0^2 h^3 c} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right), \quad n, n' = 1, 2, 3, \dots, n' > n. \quad (5)$$

där  $n'$  betecknar en högre liggande energinivå än  $n$  och  $c$  är ljushastigheten. Om vi jämför ekvation (1) som Rydberg ställde upp rent empiriskt och ekvation (11) som vi härlett med hjälp av Bohrs atommodell ser vi att uttrycken är identiska om vi väljer

$$R_\infty = \frac{m_e e^4}{8 \epsilon_0^2 h^3 c}. \quad (6)$$

Vi har alltså fått fram ett teoretiskt uttryck som gör det möjligt att beräkna Rydbergskonstanten och de korrekta våglängderna för vätets spektrallinjer.

## Jonisationsenergi

Elektronens potentiella energi är vanligtvis definierad så att den är noll då elektronen befinner sig oändligt långt borta från kärnan. Om elektronen har en energi som är lägre än noll är den alltså bunden till atomkärnan. Om atomen ges ett så stort energitillskott att elektronen inte längre är bunden till kärnan, d v s har den totala energin noll, säger man att atomen är joniserad. Den lägsta energi som krävs för att jonisera atomen från grundtillståndet kallas jonisationsenergin.

## Kvantteori för enelektronsystem

När Schrödinger 1925 lanserade sin Schrödingerekvation övergavs tanken på att elektronerna rör sig i välbestämda banor. Man hade tidigare i experiment funnit att partiklar på vissa sätt beter sig som en våg, precis som ljus hade visat sig ha vissa partikelegenskaper. Till exempel bryts elektronstrålar som skjuts mot en spalt upp i samma mönster som ljus, medan fotoner kan fås att krocka med elektroner i en elastisk stöt (Comptoneffekt).

Elektronens tillstånd, t ex var den finns i rummet, beskrivs i kvantmekaniken av en vågfunktion,  $\psi$ . Genom att lösa Schrödingerekvationen får vi reda på både de möjliga tillstånden beskrivna av vågfunktionerna och vilken energi elektronen har i respektive tillstånd. För att räkna ut energitillstånden för en väteatom ställer vi upp Schrödingerekvationen

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V(r) \right] \Psi = E\Psi, \quad (7)$$

där  $m_e$  är elektronens massa,  $\hbar = h/2\pi$ ,  $\nabla^2$  den s k Laplaceoperatoren, vilken innebär att man deriverar två gånger m a p alla rumskoordinater och  $E$  är energin för elektronen.  $V(r)$  är den potential elektronen befinner sig i, d v s Coulombfältet från laddningen i kärnan.

Lösningen för vågfunktionen kan i sfäriska koordinater delas upp i två delar,  $R(r)$  som endast beror avståndet från kärnan,  $r$ , och  $Y(\theta, \varphi)$  som beror på de sfäriska vinkelkoordinaterna  $\theta$  och  $\varphi$ , d v s

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (8)$$

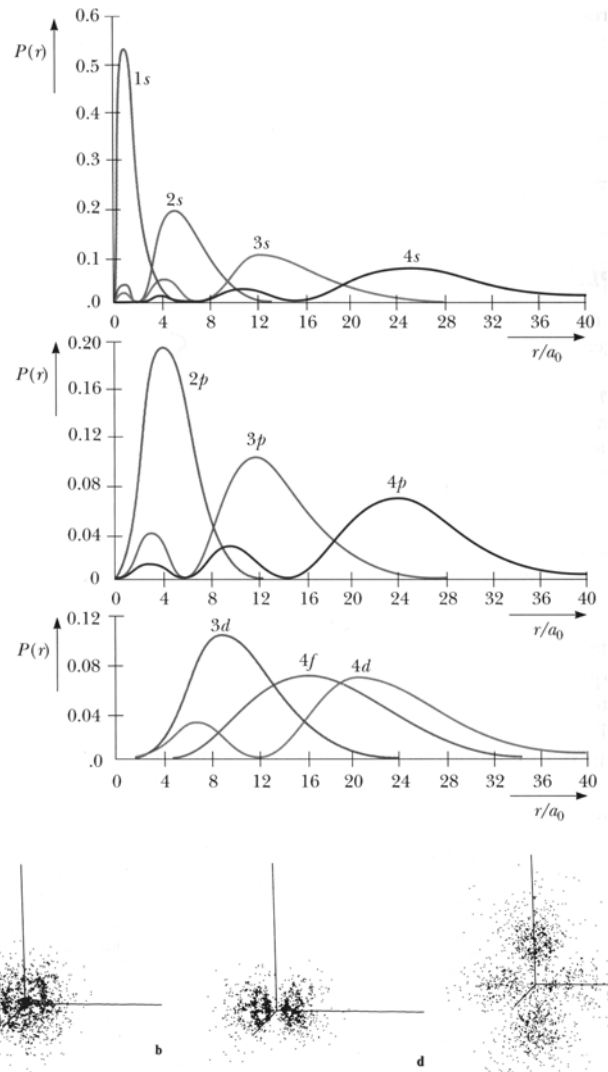
Antalet möjliga lösningar till ekvationen är oändligt, men uppräknliga vilket innebär att de kan numreras. I fallet väteatomen kan dessutom relativt enkelt slutna uttryck för vågfunktionen beräknas. De olika lösningarna numreras m h a tre kvanttal:  $n$ ,  $l$  och  $m$  som kan anta värdena:

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

Eftersom  $|\Psi(r, \theta, \varphi)|$  ger sannolikheten att finna elektronen på en viss plats i rummet, beskriver  $R_{n,l}(r)$  och  $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  sannolikheten att finna elektronen på ett visst avstånd från kärnan respektive vid en viss vinkel. Eftersom dessa funktioner ser olika ut för olika värden på  $n$ ,  $l$  och  $m$  påverkar kvanttalen sannolikhetstätheten i rummet. Exempel på hur dessa sannolikhetsfördelningar ser ut ges i Figur 3.



**Figur 3. Överst: Den radiella fördelningen av laddnings-  
tätheten i väteatomen,  $P(r)$ , för  $n = 1, 2, 3$  och  $4$ . Nedert:  
Laddningstätheten i rummet för b)  $n=2, l=0$  d)  $n=2, l=1$  h)  $n=3,$   
 $l=2$ .**

Till varje lösning på vågfunktionen, d v s uppsättning  $\{n, l, m\}$ , hör en energi  $E_{n, l, m}$ . I fallet väteatomen beror potentialen endast på avståndet från kärnan,  $r$ , vilket får till följd att energin endast blir beroende av huvudkvanttalet  $n$ . Faktum är att elektronens totala energi med Schrödingerekvationen blir exakt samma som för den enklare Bohrmodellen

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2}. \quad (9)$$

Enligt gammal tradition brukar  $l$ -kvanttalet i experimentella sammanhang betecknas med bokstäver på följande sätt:

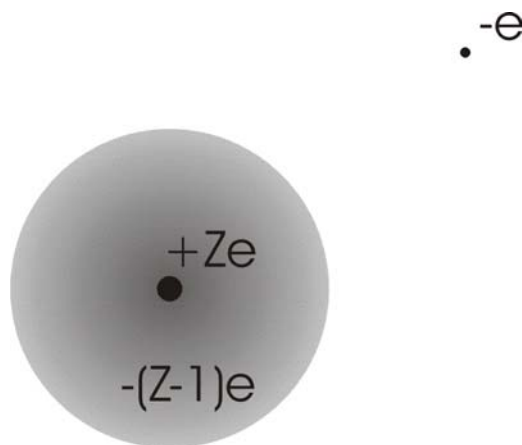
$l =$	0	1	2	3	4	5
	s	p	d	f	g	h

### Väteliknande system – Natrium

Större atomer än väte har mer än en elektron. Enligt den så kallade Pauliprincipen kan två elektroner inte samtidigt befinna sig i samma tillstånd. Varje tillstånd är unikt identifierat av en uppsättning av fyra kvanttal för en atom (de tre kvanttal  $n$ ,  $l$  och  $m$  vi fick genom att lösa Schrödingerekvationen samt elektronens spinn  $m_s$ ). Att befinna sig i olika tillstånd innebär alltså att minst ett av kvanttalen är olika. Pauliprincipen innebär att alla elektroner inte kan befinna sig i det energimässigt lägsta möjliga tillståndet  $\{n=0, l=0, m=0, m_s=\pm 1/2\}$ , utan vi får successivt fylla upp atomens energinivåer för att finna grundtillståndet.

Elektroner som har samma  $n$  och  $l$  sägs befinna sig i samma skal. Ett fyllt sådant skal är sfäriskt symmetriskt och elektroner i ett fyllt skal är hårdare bundna än elektroner i ett icke-fyllt skal. En konsekvens av Pauliprincipen är att ett skal innehåller som mest  $2(2l+1)$  elektroner. Alla ädelgasernas elektroner befinner sig i slutna skal vilket gör dem väldigt icke-reaktiva. Alla grundämnen i den vänstra spalten i det periodiska systemet, t ex natrium, har på andra sidan 11 elektroner, vilket innebär att vi kan fylla 1s och 2s skalerna (tillsammans 10 elektroner), men får en elektron över som för en atom utan extra energi befinner sig i 3s-tillståndet.

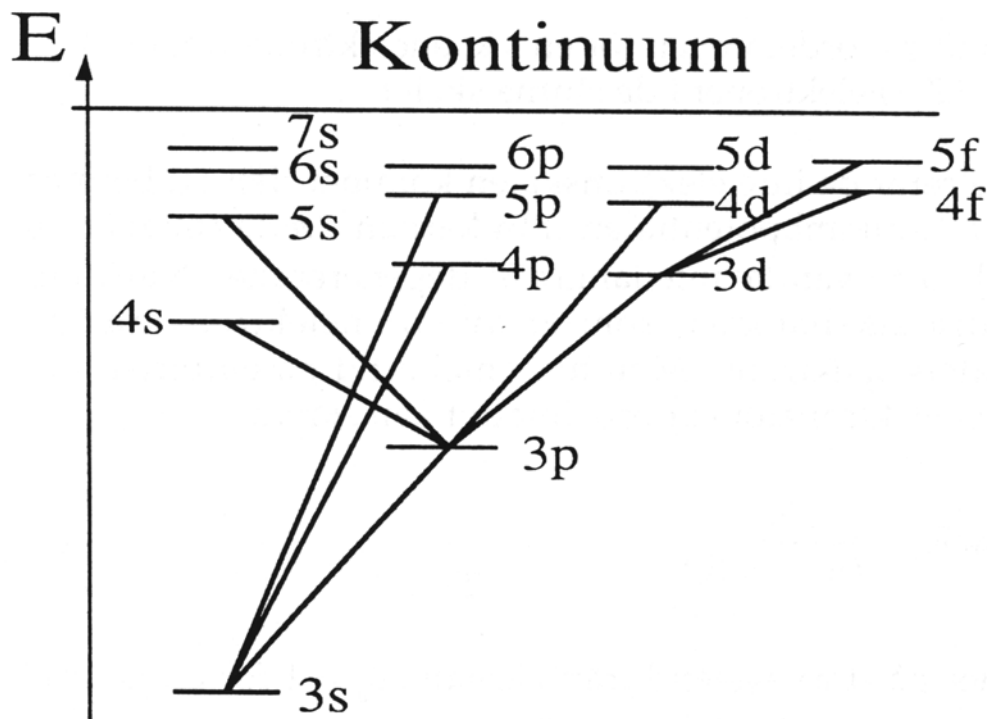
Den yttersta elektronen är lösare bunden och i allmänhet den som lyfts upp till högre liggande tillstånd då atomen tillförs energi. Natrium kommer därmed att vara likt väte så till vida att de övergångar vi observerar alla kommer från när den yttersta elektronen byter tillstånd. Eftersom den i medeltal befinner sig utanför de andra elektronerna kan vi approximera natrium med väte eftersom de åtta elektronerna innanför tar ut, ”screenar”, laddningen från kärnan så att den yttre elektronen känner av en effektiv laddning hos kärnan på  $+e$  (Figur 5).



Figur 5. Den yttersta elektronen ser en effektiv laddning på  $+e$ .



Den yttersta elektronen befinner sig med en viss sannolikhet även bland och innanför de andra elektronerna (jfr Figur 3). När den gör det känner den av en starkare potential från kärnan och sannolikheten för att befinna sig längre in varierar även med kvanttalet  $l$ . För natrium kommer energin alltså även att bero på  $l$  och den exakta positionen för energinivåerna går inte längre att beräkna analytiskt. Ett skalenligt energinivådiagram för de lägst liggande nivåerna som är tillgängliga för den yttersta elektronen visas i Figur 6.



**Figur 6. De lägst liggande energinivåerna för natriums av natriums yttersta elektron. Ett urval av de tillåtna övergångarna är inritade.**

När elektronen byter tillstånd i natrium är alla övergångar inte lika sannolika. En del är så osannolika att de kallas *förbjudna* övergångar eftersom de i princip inte sker. *Tillåtna* övergångar är de som uppfyller urvalsreglerna:

$$\Delta l = \pm 1 \text{ och } \Delta m = 0, \pm 1.$$

För huvudkvanttalet,  $n$ , finns inga urvalsregler.

För att kunna observera emission från ett ämne så exciterar man atomerna och observerar det emitterade ljuset då atomerna relaxerar (faller tillbaka till den ursprungliga energinivån). Detta sker i labben i en sk urladdningslampa. Intensiteten hos en spektrallinje beror till stor del på hur många atomer som exciterats till den övre energinivån. I en urladdningslampa kan man anta en termisk fördelning genom kollisioner mellan atomerna, d v s en så kallad Boltzmannfördelning:

$$N = N_0 e^{-\Delta E/k_b T}, \quad (10)$$

där  $N$  är antalet atomer med en elektron i ett tillstånd med energin  $\Delta E$  över grundtillståndet,  $N_0$  är det totala antalet atomer,  $k_B$  Boltzmanns konstant och  $T$  temperaturen på gasen. En övergång från ett lågt liggande tillstånd ger därför en starkare linje än en övergång från ett högt liggande exciterat tillstånd. Dessutom är det en högre sannolikhet för elektronen att efter excitationen befinna sig i ett tillstånd med ett högt värde på  $l$ -kvanttalet, så övergångar från ett tillstånd med högre  $l$  är starkare än övergångar från tillstånd med lägre  $l$  om deras energi är lika stor.

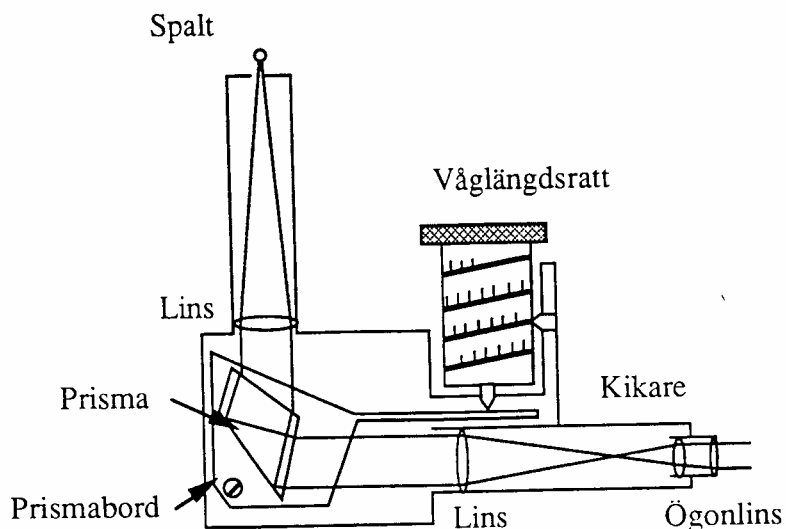
## Utförande

Vätets spektrum produceras genom en elektrisk urladdning i ett s k Geisslerör. Väte förekommer i naturen främst som molekyler – två väteatomer är kovalent bundna till varandra i en vätemolekyl – och Geisslerörret är speciellt utformat för att dela (dissociera) molekylerna i sina ursprungsatomer, så att det blir möjligt att iaktta väteatomernas linjer.

Våglängderna för de linjer i vätes spektrum som ligger i det synliga området bestäms med hjälp av en prismaspektrometer. Strålgången genom prismaspektrometern visas i Figur 7. Spaltöppningen placeras nära ljuskällan. Spektrometerspalten bör ställas så att så smala, synliga, spektrallinjer som möjligt erhålls. Fokus justeras med hjälp av ratten ovanpå kikaren och i änden på kikaren finns en lins med hjälp av vilken hårcorset regleras. Våglängden läses av genom att vrida på prismet med våglängdsratten så att den spektrallinje vars våglängd önskas är mitt för hårcorset och sedan studera pilens läge på våglängdsratten. Skalan på ratten är graderad i nanometer, där siffrorna ger tiotalet nanometer och strecken ental.

Innan de egentliga mätningarna kan göras måste utrustningen kalibreras. Sikta in spalten mot natriumlampan och placera den starka gula linjen i hårcorset. Den gula linjen har våglängden 589,3 nm. Ifall våglängdsratten inte visar 589 nm, bör den justeras till att visa det genom att skruven till ratten lossas. Vrid den därefter till 589 nm och lås fast med skruven.

För att undvika mätfel p g a glapp i mekanismen bör våglängdsratten alltid vridas åt samma håll under mätningarna. Samma procedur upprepas för att bestämma våglängderna för natriums spektrallinjer, men med den gula natriumlampan placerad framför spalten.



Figur 7. Experimentuppställning

### ***Instuderingsfrågor***

1. Redogör för Bohrs postulat.
2. Vilka av Bohrs postulat strider mot den klassiska fysiken?
3. Redogör för Pauliprincipen.
4. Beskriv i stora drag principerna för och uppbyggnaden av en prismaspektrometer.
5. Vid laborationen fungerar ögat som detektor av det ljus som passerar spektrometern. Hur varierar ögats känslighet med våglängden?
6. Förklara varför natriums spektrum kan studeras i en laboration som heter "Enelektron-spektrum".
7. Varför splittras energinivåerna upp med avseende på l-kvanttalet för natrium?
8. Hur lyder de två regler som i huvudsak bestämmer intensiteten för en elektronövergång i natriums spektrum?

## Uppgifter

### Väte

1. Identifiera vilken serie övergångar de observerade linjerna tillhör Beräkna Rydbergskonstanten,  $R_\infty$ , genom att använda de uppmätta våglängderna för vätetets spektrallinjer och.
2. Rita ett energinivåschema för de sex första energinivåerna i väteatomen med hjälp av den uppmätta Rydbergskonstanten och formeln

$$E_n = - \frac{hcR_\infty}{n^2},$$

där  $n$  varieras för att få de olika energinivåerna i väteatomen. Rita in de övergångar mellan nivåer som motsvarar spektrallinjerna ni har sett som pilar.

3. Bestäm väteatomens jonisationsenergi.

### Natrium

4. Mät upp våglängderna för natriums synliga övergångar och fyll i Tabell 1 på nästa sida ( $E[\text{eV}] = 1239.83/\lambda[\text{nm}]$ ).
5. Identifiera med ledning av det skalenliga energinivådiagrammet för Na i Figur 6 de saknade övergångarna.
6. Beräkna utifrån Tabell 1 natriums energinivåer, givet att natriums jonisationspotential är 5.139 eV och fyll i Tabell 2.
7. Rita ett energinivådiagram med nivåerna från Tabell 2 och markera de tillåtna övergångarna mellan dessa nivåer och 3s-, 3p- och 3d-nivåerna med pilar.

### Viktiga konstanter

$h = 4,14 \times 10^{-15} \text{ eV s}$  (Plancks konstant)

$c = 3,00 \times 10^8 \text{ m/s}$  (Ljusets hastighet i vakuum)

$e = 1,60 \times 10^{-19} \text{ C}$  (Elementarpartikelladdningen)

$\epsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12} \text{ As/Vm}$  (Dielektricitetskonstanten)

$m_e = 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}$  (Elektronens massa)

**Tabell 1. Natriums spektrallinjer.**

Färg	Intensitet	$\lambda$ (nm)	$\Delta E$ (eV)	Övergång
IR	3000	1139.0		4s→3p
IR	3000	819		3d→3p
Röd	500			
Gul	5000			
Grön	1500			
Grön	200			6s→3p
Blå-grön	500			
Blå	200			
UV	1500	330.2		4p→3s
UV	500	285.3		5p→3s
UV	200	268		6p→3s

**Tabell 2. Natriums energinivåer.**

Energiniivå	$E$ (eV)
3s	
4s	
5s	
6s	
3p	
4p	
5p	
6p	
3d	
4d	
5d	
6d	

## Appendix I

Betrakta en modell för väteatomen i analogi med planetsystemet (Figur 1). Elektronen har massan  $m_e$  och laddningen  $-e$  och hålls på plats i sin bana av den elektrostatiske attraktionskraften till kärnan med massan  $M$  och laddningen  $e$ . Då kärnans massa är mycket större än elektronens massa ( $M/m_e \approx 1800$ ) kan vi betrakta atomkärnan som orörlig. Från klassisk mekanik vet vi att cirkulära banor fås när den attraherande elektrostatiske kraften är lika med centripetalkraften,

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{m_e v^2}{r}. \quad (\text{I-1})$$

Ur ekvationerna (3) och (I-1) kan vi finna radierna för elektronens tillåtna banor

$$r = \frac{\epsilon_0 h^2 n^2}{\pi m_e e^2}. \quad (\text{I-2})$$

Radien är alltså en funktion av  $n$ , som är ett diskret heltal och endast ett diskret antal radier är därmed tillåtna. Radien för den lägsta möjliga banan i väteatomen ( $n=1$ ) kallas för Bohrradien, betecknas med  $a_0$ , och är en ofta använd längdenhet i atomfysiken, d v s

$$a_0 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2}. \quad (\text{I-3})$$

Eftersom vi inte direkt mäter radien för elektronbanan vill vi snarare ha ett uttryck för energin som elektronen har i de olika banorna. Den totala energin är summan av elektronens potentiella (läges) och kinetiska (rörelse) energi. Den potentiella energin härrör från kärnans elektrostatiske potential. Genom att enligt konvention sätta energin lika med noll på oändligt avstånd från atomkärnan fås

$$E_p = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (\text{I-4})$$

Den kinetiska energin fås också med vanlig klassisk mekanik och ekvation (I-1) som

$$E_k = \frac{m_e v^2}{2} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}. \quad (\text{I-5})$$

Det ger den totala energin för atomen

$$E_{tot} = E_p + E_k = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}. \quad (\text{I-6})$$

Genom att sätta in ekvation (I-2) för  $r$  i (I-6) kan vi skriva energin som ett slutet uttryck som endast innehåller kända naturkonstanter, samt heltalet  $n$ .

$$E_{tot} \equiv E_n = -\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{I-7})$$