Introduction à la Mécanique quantique

Le développement de la Mécanique quantique dans les années 1920 a constitué une véritable révolution dans les idées en Physique. Cette nouvelle théorie a pris naissance lorsque PLANCK a développé la théorie de l'émission du corps noir en 1900, théorie qui a permis d'expliquer le spectre du rayonnement émis par les corps. À partir de là, les choses ont rapidement évolué pour arriver à la mise en place de cette théorie nouvelle principalement entre 1920 et 1930.

1 L'apparition de la quantification

1.1 La loi de Planck

En 1859 KIRCHHOFF étudie les émissions de rayonnement par les corps chauffés. Il est amené à définir ce qui fut ultérieurement appelé un corps noir. Il s'agit d'un corps qui absorbe toute l'énergie qu'il reçoit. Ce corps ne sera à l'équilibre à la température T que s'il émet autant d'énergie qu'il en reçoit. Pour obtenir un corps noir, on peut imaginer une enceinte aux parois internes très absorbantes que l'on a percée d'un petit trou : tout rayonnement qui entre est absorbé soit directement, soit après quelques réflexions internes. Dans ce travail KIRCHHOFF effectue des développements théoriques qui montrent que le spectre d'émission du corps noir n'est fonction que d'une seule chose : de sa température T. Le spectre est totalement indépendant de la nature et de la forme de l'objet.

En 1879, STEFAN montre que la puissance surfacique rayonnée par un corps noir est uniquement fonction de la température selon la loi :

$$j_{ray} = \sigma T^4$$

où σ est une constante évaluée expérimentalement à $\sigma=5,67\times10^{-8}\,\mathrm{W\cdot m^{-2}\cdot K^{-4}}$. La loi de Stefan est alors uniquement empirique. Sur le même plan, Wien montre que dans le spectre du rayonnement du corps noir, le maximum est obtenu à une longueur d'onde que l'on relie à la température par, là encore, une loi empirique dite de Wien :

$$\lambda_{max} T = 2895 \, \mu \text{m} \cdot \text{K}$$

Les physiciens de la fin du XIX^e proposent alors des modélisations du phénomène engendrant différentes formes de la densité spectrale $\frac{\mathrm{d}j_{ray}}{\mathrm{d}\nu}$ de rayonnement où ν est la fréquence :

$$\frac{\mathrm{d}j_{ray}^{\mathrm{Wien}}}{\mathrm{d}\nu} = A \,\nu^{3} \,\exp\left(-\frac{B\nu}{T}\right) \quad \mathrm{et} \quad \frac{\mathrm{d}j_{ray}^{\mathrm{Rayleigh-Jeans}}}{\mathrm{d}\nu} = C \,\nu^{2} \,T$$

Toutefois, chacune de ces lois convenait à un certain domaine de fréquences mais posait des problèmes pour d'autres. Planck propose alors un modèle qui fournit une densité spectrale répondant particulièrement bien aux études expérimentales :

$$\frac{\mathrm{d}j_{ray}^{\mathrm{PLANCK}}}{\mathrm{d}\nu} = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1}$$

Planck est propose une loi qui ne fait intervenir que des constantes fondamentales de la Physique comme c la vitesse de la lumière dans la vide et la constante de Boltzmann k_B . Il introduit une constante notée h qui est évaluée à $h=6,62\times 10^{-34}\,\mathrm{J}\cdot\mathrm{s}$ et propose l'idée qui paraît incongrue à l'époque de considérer que les échanges d'énergie entre le rayonnement et la matière s'effectuent par paquets d'énergie $h\nu$ où ν est la fréquence. On passe à la densité spectrale en longueur d'onde en effectuant un changement de variable grâce à la formule $\nu=\frac{c}{\lambda}$. On obtient alors :

$$\frac{\mathrm{d}j_{ray}^{\mathrm{PLANCK}}}{\mathrm{d}\lambda} = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_B T}\right) - 1}$$

Cette loi correspond aux courbes de la figure 1. Elle permet de retrouver les deux lois - empiriques au départ - de Stefan et de Wien. La théorie de Planck est ainsi couronnée de succès même si, à l'époque, l'échange d'énergie par paquet $h\nu$ qui deviendra ensuite le photon paraissait totalement artificiel.

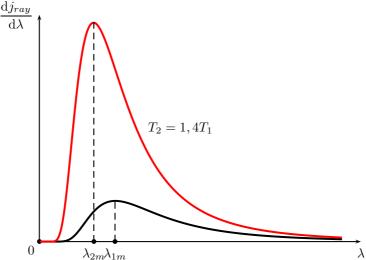


FIGURE 1 – Spectre du rayonnement du corps noir pour deux températures différentes

1.2 Les confirmations

1.2.1 Effet photoélectrique

À la fin du XIX $^{\rm e}$, on a étudié l'interaction entre la lumière et la matière en envoyant du rayonnement sur des différents métaux. On a pu constater que dans certaines conditions, il était possible d'arracher des électrons au métal. Dans un métal, l'électron possède une énergie. Pour arriver à l'arracher, il faut lui fournir par différents modes une énergie W_s appelé énergie ou travail d'extraction. On peut fournir cette énergie par effet thermoélectronique, c'est-à-dire en élevant la température du métal conducteur ce qui n'est pas très compliqué à réaliser puisqu'en faisant passer un courant d'intensité assez élevée, il y a échauffement du conducteur par effet Joule. Les électrons possèdent alors une énergie suffisante pour vaincre la barrière de potentiel constituée par l'énergie d'extraction. Dans le tableau situé après, on trouve quelques valeurs d'énergie d'extraction pour des métaux.

							Cu
W_s en eV	1,9	2,2	2,3	2,4	2,8	3,4	4,3

Dans l'expérience de l'effet photoélectrique, on apporte l'énergie nécessaire pour vaincre le travail d'extraction pour du rayonnement lumineux. On a constaté qu'il y avait bien arrachement d'électrons lorsque le rayonnement contenait de l'UV. Le physicien ROBERT MILLIKAN a conduit des expériences très précises sur l'effet photoélectrique. Il a travaillé avec un dispositif schématisé sur la figure 2. On dispose d'une cathode en forme de portion de surface cylindrique recouverte d'un métal comme le zinc par exemple. L'anode est un fil chargé de récupérer les électrons émis par la cathode que l'on appelle la photocathode dans ce cas. La cathode et l'anode sont placées dans un bon vide à l'intérieur d'une ampoule transparente aux rayonnements utilisés. On mesure tension et intensité qui résultent à la fois de l'effet photoélectrique mais aussi de la polarisation de l'ensemble cathode-anode réalisée grâce à la présence d'un générateur de tension continue de force électromotrice E_q qui peut être positive ($E_q > 0$) ou négative ($E_q < 0$).

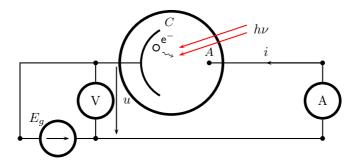


FIGURE 2 – Dispositif d'étude de l'effet photoélectrique

Lorsque la cellule photoélectrique est éclairée par une lumière monochromatique de fréquence ν , on fait varier la tension $u = V_A - V_C$ et on constate que le courant est non nul au-delà d'une valeur de la tension $u = -U_0$ et que pour des valeurs positives de u, assez rapidement, la courbe de l'intensité forme un palier. Par

contre si l'on change la puissance d'éclairage P_e , la position du palier d'intensité change en proportion. Ces constations effectuées par MILLIKAN sont visibles sur le graphique de la figure 3.

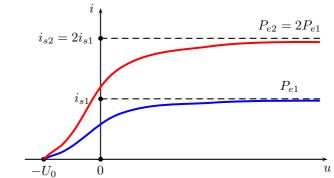


Figure 3 – Intensité en fonction de la tension de polarisation u

La tension U_0 est appelée tension d'arrêt. Pour comprendre cette notion, il est important de voir que lorsque la tension accélératrice imposée par le générateur correspondant à u>0 n'est pas nécessaire pour obtenir un courant i>0 et donc des électrons qui atteignent l'anode. Sur le graphique, on voit bien que $i_{u=0}\neq 0$. Ceci s'explique en disant que les électrons arrachés par l'énergie du rayonnement que nous allons noter \mathcal{E}_r reçoivent un peu plus d'énergie que le travail d'extraction W_s . Ils possèdent une énergie cinétique en quittant le métal qui leur permet d'atteindre l'anode, provoquant ainsi un courant non nul pour u=0. On peut donc écrire que :

$$\mathcal{E}_r = W_s + E_{c,i}$$

Par conséquent, on peut envisager de les freiner en imposant une tension négative u < 0! Une fois extraits du métal, les électrons subissent une force électrique qui les ralentit. Si la force - et donc le champ électrique \vec{E} qui règne entre l'anode et la cathode - est suffisamment grande, il arrive un moment où tous les électrons extraits font demi-tour sans atteindre l'anode et rebroussent chemin jusqu'à la cathode. Les derniers électrons arrivant juste devant l'anode sont ceux pour $u = -U_0$. Si l'on applique le théorème de l'énergie cinétique à l'électron arraché entre la cathode et l'anode, on a $0 - E_{c,i} = \int_C^A (-e\vec{E}) \cdot d\vec{\ell} = -e(V_C - V_A) = -eU_0$. Ainsi, on peut écrire que la tension d'arrêt souvent appelée potentiel d'arrêt est reliée à l'énergie cinétique des électrons extraits du métal :

$$E_{c,i} = eU_0$$
 d'où $\mathcal{E}_r = W_s + eU_0$

On change la puissance de l'éclairage sans changer sa fréquence ν . On pourrait s'attendre à ce que les électrons récupèrent plus d'énergie cinétique $E_{c,i}$ au moment de l'extraction et donc qu'à chaque valeur de la puissance P_e corresponde une valeur de U_0 différente et surtout une valeur de U_0 qui augmente avec la puissance lumineuse. Ce qu'il y avait de très surprenant pour l'époque, c'est que U_0 restait toujours le même quelle que soit P_e . Par contre, obtenir un courant de saturation proportionnel à P_e est plutôt intuitif. Plus on arrache d'électrons grâce à la puissance lumineuse plus élevée plus le courant obtenu lorsque l'on accélère de façon importante les électrons sera élevé.

Face à l'incompréhension de la valeur fixe de U_0 , il a été logique d'essayer de voir ce qui pouvait l'influencer. Ce fut fait en étudiant l'évolution de U_0 avec la fréquence ν du rayonnement éclairant le métal. Là encore, une surprise était au rendez-vous. Le graphique $U_0 = f(\nu)$ était une fonction affine pour un métal donné. De plus, si l'on changeait de métal pour la cathode, l'abscisse à l'origine était croissante avec l'énergie d'extraction du métal mais la pente invariablement la même! Ces constatations sont visibles sur le graphique de la figure 4.

L'ensemble de ces constatations fut expliqué en 1905 par EINSTEIN, ce qui lui valut le prix NOBEL de physique en 1921. EINSTEIN a proposé que les échanges d'énergie entre le rayonnement et la matière s'effectuent uniquement par paquets d'énergie que l'on nommera plus tard photons. Si ν est la fréquence du rayonnement utilisé, l'énergie du photon ou du paquet d'énergie est $h\nu$. Un photon permet ou non d'arracher un électron du métal. Pour cela il faut que l'énergie $h\nu$ soit supérieur au travail d'extraction W_s . On a toujours une interaction entre un photon et un électron du métal. Il n'y a pas d'interaction entre un électron et plusieurs photons successivement qui pourraient apporter apporter l'énergie d'extraction par accumulation d'énergie absorbée. On a donc $\mathcal{E}_r = h\nu$. On en déduit que :

$$eU_0 = h\nu - W_s = h(\nu - \nu_s)$$

On introduit la fréquence seuil ν_s qui correspond à la fréquence minimale pour laquelle l'effet photoélectrique est observé. Cela correspond bien aux constatations, si le rayonnement possède une fréquence inférieure à cette

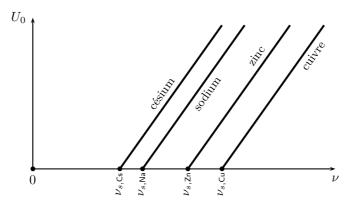


FIGURE 4 – Tension d'arrêt en fonction de la fréquence ν d'éclairage

fréquence seuil, le photon n'a pas assez d'énergie pour extraire l'électron du métal. Le courant photoélectrique est nul, voir la figure 3. Plus l'énergie d'extraction est élevée, plus la fréquence seuil est élevée. Les abscisses à l'origine sont bien ordonnés comme le tableau des travaux d'extraction le donne.

Les droites de la figure 4 ont toutes la même pente donnée par :

$$U_0 = \frac{h}{e} \ (\nu - \nu_s)$$

Cette pente $\frac{h}{e}$ a été mesurée de façon très précise et la concordance avec la valeur de la constante de Planck a été remarquable. Pour rappel, on a $h=6,62\times 10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s}$.

Dans sa théorie de la relativité restreinte, EINSTEIN complète les propriétés du photon associé à un rayonnement de fréquence ν ou de longueur d'onde λ . Le photon est une particule sans masse qui se déplace à la célérité c dans le vide et dont la quantité de mouvement p est reliée à l'énergie par :

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = pc$$

Pour une onde électromagnétique de pulsation ω ou de fréquence $\nu = \omega/2\pi$ et de vecteur d'onde $\vec{k} = k\vec{u}$, les photons associés ont une énergie E et une quantité de mouvement \vec{p} données par :

$$E = \hbar\omega = h\nu$$
 et $\vec{p} = \hbar \vec{k} = \frac{h}{\lambda} \vec{u}$

Dans cette équation, $\hbar=h/2\pi$. Une simulation de l'effet photoélectrique est disponible à l'adresse suivante :

http://phet.colorado.edu/en/simulation/photoelectric

1.2.2 Effet Compton

L'effet COMPTON est une collision élastique entre un photon de grande énergie – il appartient en terme de rayonnement au domaine des rayons X – et un électron faiblement lié à un noyau d'atome. Cet électron est, en général, un électron des couches les plus externes de l'atome. En 1923, le physicien américain ARTHUR COMPTON a réalisé l'expérience de diffusion des rayons X à travers une cible en graphite. Il a mesuré la longueur d'onde des photons X diffusés en fonction de l'angle θ . Les résultats expérimentaux obtenus ont alors parfaitement validé les expressions relativistes de la quantité de mouvement et de l'énergie. Le succès de l'expérience a permis de valider l'expression de la quantité de mouvement $p = h/\lambda$ du photon et par là même la dualité onde-corpuscule de la lumière. Le schéma de l'expérience est réalisé à la figure 5.

La collision est élastique puisqu'elle concerne un électron de la cible et un photon et puisqu'après le choc il y a toujours un électron expulsé de la cible et un photon. Les lois de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie relativiste ¹nous permettent d'écrire que :

$$\begin{cases} \frac{h}{\lambda_0}\vec{e_x} = \vec{p} + \frac{h}{\lambda}\vec{u} \\ \frac{hc}{\lambda_0} + mc^2 = \sqrt{\vec{p}^2c^2 + m^2c^4} + \frac{hc}{\lambda} \end{cases}$$

^{1.} L'énergie en Relativité restreinte est donnée par l'expression $E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$ où p représente la quantité de mouvement de la particule de masse m.

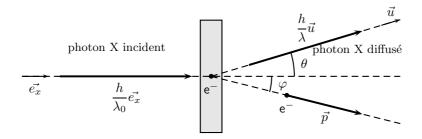


FIGURE 5 – Diffusion Compton de photons X

Les calculs débutent en projetant sur l'axe Ox de vecteur unitaire $\vec{e_x}$ la conservation de la quantité de mouvement. On projette une seconde fois sur un axe perpendiculaire à Ox qui pourrait sans doute être l'axe Oy. Nous obtenons les deux équations scalaires suivantes : $\frac{h}{\lambda_0} = p\cos\varphi + \frac{h}{\lambda}\cos\theta$ et $\frac{h}{\lambda}\sin\theta - p\sin\varphi = 0$. L'équation de conservation de l'énergie peut se simplifier un peu en divisant par c. On obtient $\frac{h}{\lambda_0} + mc = \sqrt{p^2 + m^2c^2} + \frac{h}{\lambda}$. Il est intéressant d'isoler la racine pour pouvoir élever au carré : $\left(\frac{h}{\lambda_0} - \frac{h}{\lambda} + mc\right)^2 = p^2 + m^2c^2$. On peut éliminer p^2 de cette formule en utilisant le fait que $p^2\cos^2\varphi + p^2\sin^2\varphi = p^2$. Cela signifie que l'on peut écrire que :

$$\left(\frac{h}{\lambda_0} - \frac{h}{\lambda}\cos\theta\right)^2 + \frac{h^2}{\lambda^2}\sin^2\theta = p^2$$

Le calcul se poursuit en développant les carrés. On a

$$p^{2} + m^{2}c^{2} = \frac{h^{2}}{\lambda_{0}^{2}} + \frac{h^{2}}{\lambda^{2}} - \frac{2h^{2}}{\lambda_{0}\lambda}\cos\theta + m^{2}c^{2}$$

Dans l'autre membre de l'équation, nous développons aussi les carrés. On obtient :

$$\left(\frac{h}{\lambda_0} - \frac{h}{\lambda} + mc\right)^2 = \frac{h^2}{\lambda_0^2} + \frac{h^2}{\lambda^2} + m^2c^2 - \frac{2h^2}{\lambda_0\lambda} + 2mc\left(\frac{h}{\lambda_0} - \frac{h}{\lambda}\right)$$

La comparaison des deux développements impose l'égalité :

$$-\frac{2h^2}{\lambda_0 \lambda} \cos \theta = -\frac{2h^2}{\lambda_0 \lambda} + 2mc \left(\frac{h}{\lambda_0} - \frac{h}{\lambda}\right)$$

En réduisant au même dénominateur la différence des fractions et en simplifiant par $\frac{h}{\lambda_0 \lambda}$, on arrive à l'expression qu'ARTHUR COMPTON a vérifiée expérimentalement :

$$\lambda - \lambda_0 = \frac{h}{mc} (1 - \cos \theta) = \Lambda (1 - \cos \theta)$$

 Λ est appelée longueur d'onde COMPTON. Les valeurs numériques connues de h, c et m masse de l'électron permettent d'obtenir $\Lambda = 2,43\,\mathrm{pm}$. Cela permet de très bien décrire les décalages de longueurs d'ondes $\lambda - \lambda_0$ en fonction de l'angle.

2 Quantification de l'énergie

2.1 Observations

Les observations expérimentales de la fin du XIXe siècle ont montré que les spectres atomiques présentaient des raies très fines et non pas un continuum comme on aurait pu le penser a priori. De plus, ces raies se sont avérées spécifiques de chaque atome. Le plus étudié d'entre eux a été le plus simple, à savoir l'atome d'hydrogène. On a observé de nombreuses raies formant des séries. Rydberg en 1889 propose une loi empirique adaptée à toutes les raies observées. Elle fait intervenir deux entiers naturels n_1 et $n_2 > n_1$ et une constante R_H - spécifique de l'atome considéré, en l'occurrence l'atome d'hydrogène - la constante de Rydberg qui était déterminée assez précisément à cette époque. On a $R_H \simeq 1, 1 \times 10^7 \, \mathrm{m}^{-1}$. La loi de Rydberg est :

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Une telle formule faisant intervenir deux entiers naturels ne pouvait être justifiée par aucune théorie connue à l'époque. C'est Bohr qui proposa un modèle révolutionnaire de l'atome d'hydrogène afin de retrouver la formule de Rydberg.

2.2 Le modèle de Bohr

Ce modèle considère l'électron de charge -e, de masse m, en mouvement circulaire de rayon r autour du noyau constitué par un proton de charge +e. La seule force prise en compte est la force électrique de COULOMB, on néglige le poids. Le référentiel d'étude est le référentiel terrestre considéré comme galiléen. L'étude s'effectue dans le cadre de la Mécanique classique. Le principe fondamental de la Dynamique permet d'écrire que :

$$m\vec{a} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}\vec{e_r}$$

Le mouvement est supposé circulaire, la force étant centrale, il est nécessairement uniforme. L'accélération s'exprime en fonction de la vitesse selon $\vec{a}=-\frac{v^2}{r}\vec{e_r}$. Cette relation nous permet d'exprimer $v=\sqrt{\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 mr}}$. Bohr a proposé de rendre compte des raies observées dans le spectre de l'hydrogène en disant que le moment cinétique de l'électron dans son mouvement autour du proton était quantifié. Il a proposé d'écrire :

$$L = n \frac{h}{2\pi} = n \, \hbar$$

où n est un entier naturel non nul et h la constante de Planck. Sur le mouvement circulaire, la vitesse de l'électron est $\vec{v} = v\vec{e_{\theta}}$, le vecteur position établi en prenant le proton comme origine est $\overrightarrow{OM} = r\vec{e_r}$. Le moment cinétique est donc $\vec{L} = \overrightarrow{OM} \wedge m\vec{v} = mrv\vec{e_z}$ où $\vec{e_z}$ est bien entendu le troisième vecteur de la base cylindrique $(\vec{e_r}, \vec{e_{\theta}}, \vec{e_z})$. La proposition de Bohr revient à écrire que :

$$mrv = n\frac{h}{2\pi} = n\,\hbar$$

À partir de cette expression, nous allons rechercher l'expression de l'énergie mécanique de l'électron dans l'atome d'hydrogène. L'énergie cinétique est $E_c=\frac{1}{2}mv^2$. L'énergie potentielle correspond à l'interaction électrique de Coulomb, nous avons vu que son expression était $E_{pot}=-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$. Avec l'expression de la vitesse, on constate que $E_p=-2E_c$. L'énergie mécanique de l'électron est donc $E_m=E_c+E_{pot}=-E_c=-\frac{1}{2}mv^2=-\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r}$. On peut éliminer le rayon r de l'expression de l'énergie mécanique en utilisant la condition de quantification de Bohr. En effet, nous avons $m^2r^2v^2=mr^2(mv^2)=mr\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}=n^2\hbar^2$. On en déduit que le rayon de la trajectoire circulaire de l'électron est quantifié selon la loi :

$$r = n^2 r_B$$
 avec $r_B = \frac{h^2 \varepsilon_0}{\pi m e^2} = 53 \,\mathrm{pm}$

 r_B est le rayon de Bohr. Cette expression permet de déterminer l'énergie mécanique de l'électron. Nous obtenons :

$$E_m = -\frac{E_0}{n^2}$$
 avec $E_0 = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}$

En utilisant les valeurs numériques des constantes intervenant dans l'expression de E_0 , on trouve que $E_0 = 2,18 \times 10^{-18} \,\mathrm{J}$ et comme $1,6 \times 10^{-19} \,\mathrm{J} = 1 \,\mathrm{eV}$, on obtient l'expression la plus souvent utilisée pour E_0 à savoir $E_0 = 13,6 \,\mathrm{eV}$. Les niveaux d'énergie de l'électron dans l'atome d'hydrogène sont représentés sur le schéma de la figure 6. Le noyau constitué d'un proton possède une masse très élevée par rapport à l'électron (1 800 fois environ), on peut le considérer comme immobile. L'énergie de l'atome est donc constituée de l'énergie mécanique de l'électron sans que l'on doive y ajouter l'énergie cinétique du proton.

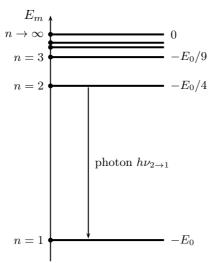


FIGURE 6 - Niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène

Lorsque l'atome d'hydrogène est dans son état fondamental (n=1), il possède l'énergie $E_m=-E_0$. Si on lui fournit de l'énergie par un choc, par de la lumière, il peut occuper temporairement les niveaux d'énergie plus élevés. On dit qu'il est alors dans un état excité. Lorsqu'il revient dans son état fondamental, il émet un photon dont l'énergie représente exactement la différence d'énergie entre les deux niveaux concernés par la transition. Imaginons que la transition s'effectue entre le niveau d'énergie caractérisé par l'entier n_1 et le niveau d'énergie plus basse caractérisé par $n_2 < n_1$. La relation donnant la fréquence $\nu_{n_1 \to n_2}$ du photon émis ou encore sa longueur d'onde $\lambda_{n_1 \to n_2} = c/\nu_{n_1 \to n_2}$ est :

$$h\nu_{n_1\to n_2} = E_0 \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2}\right)$$
 ou encore $\frac{1}{\lambda_{n_1\to n_2}} = \frac{E_0}{hc} \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2}\right)$

Dans cette formule, on rencontre $R_H = \frac{E_0}{hc} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2h^3c}$ la constante de Rydberg, qu'avant 1913 on avait mesurée de façon très précise à l'aide des raies présentes dans le spectre de l'hydrogène. Au début du XX^e siècle, il y avait un excellent accord entre la théorie de Bohr et les mesures expérimentales. D'ailleurs, nous avons vu que le rayon de la trajectoire de l'électron évoluait comme $r = r_B n^2$. Si l'on prend le cas de l'état fondamental n = 1, on a $r = r_B$ et une énergie $-E_0$. Si $n \to \infty$ alors $r \to \infty$ mais l'énergie de l'atome est nulle. Éloigner l'électron à l'infini du noyau correspond à l'ionisation de l'atome. Pour ioniser cet atome, il est nécessaire de lui apporter l'énergie $E_0 = 13,6$ eV. Elle porte tout simplement le nom d'énergie d'ionisation. Sa valeur a été aussi mesurée de façon très précise. La théorie de Bohr était donc bien installée à ceci près que décréter la quantification du moment cinétique orbital de l'électron autour du noyau apparaissait comme une idée plus opportuniste qu'une idée inscrite dans la logique des théories physiques de l'époque.