C3.5 Cuantificarea Bohr-de Broglie a atomului de H

$$\begin{cases} \Delta x = \Delta r = 2\pi r \\ \Delta p = p/n = \begin{cases} 0 & \ldots n \to \infty \ldots \textit{frontiera} \quad \textit{atomica} \\ \infty & \ldots n \to 0 \ldots \textit{centrul} \quad \textit{atomic} \end{cases} \end{cases}$$

Considerând atomul de Hidrogen ca modelul (simplu) al miscării circulare a electronului în jurul nucleului, variația de coordonată (circulară) și de impuls (radial) înregistrate de electron se scriu corespunzător, generând prin combinarea în relația de tip Heisenberg-de Broglie (din lecția C.3.4) condiția de cuantificare specifică, unde s-a considerat (ab initio) o discretizare peste mulțimea numerelor naturale, precum în cazul cuantificării Planck, excluzându-se valoarea zero (colapsul atomic). În aceste condiții, pentru mișcarea electronului în câmp central (potențial Coulombian) energia totala se scrie succesiv în termenii de impuls asociat. Această energie își realizează starea de echilibru dinamic (bilanț energetic de sarcină optim) prin satisfacerea condiției variaționale ceea ce generează cuantificarea variabilelor de impuls, coordonată și energie atomică într-o manieră unitară.

$$rp = \hbar n \ , \ n = 1, 2, \ldots$$

$$E = T(p) + V(r)$$

$$= \frac{p^2}{2m_0} - \frac{Ze_0^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}$$

$$= \frac{p^2}{2m_0} - \frac{Ze_0^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar}\frac{p}{n}$$

$$\left(\frac{\partial E}{\partial p}\right)_{optim} = 0$$

$$\begin{cases} p_{opt,n} = \dfrac{e_0^2 m_0}{4\pi\varepsilon_0\hbar}\left(\dfrac{Z}{n}\right) \\ r_{opt,n} = \dfrac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{e_0^2 m_0}\left(\dfrac{n^2}{Z}\right) \\ E_{opt,n} = -\dfrac{1}{2}\dfrac{e_0^4 m_0}{(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}\left(\dfrac{Z}{n}\right)^2 = -\dfrac{1}{2}\dfrac{Z^2}{n^2}[u.a.] \end{cases}$$

Pentru simplificare, se introduce o energie fizică-chimică fundamentală numită *unitate atomică* sau hartree (Hartree) astfel

$$1u.a. \equiv 1E_h(hartree) = \frac{e_0^4 m_0}{(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2} \equiv 2R_\infty hc \equiv m_0 c^2\alpha^2 \cong 27.2eV$$

cu R_∞ constanta lui Rydberg

$$R_\infty = \frac{m_0 e_0^4}{8c\varepsilon_0^2 h^3} = \frac{m_0 c\alpha^2}{2h}\left[m^{-1}\right]$$

şi unde

$$\alpha = \frac{e_0^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{\hbar c} \cong \frac{1}{137}$$

este recunoscută drept constanta (universală) de structură-fină (indicând limita maximă a numarului atomic al unui element chimic stabil, în Sistemul periodic, Z=137!).