

République Algérienne Démocratique et Populaire

Ministère de L'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Dr.Moulay Tahar-Saida-

Faculté des science



Département de Physique

Mémoire De Licence système (L.M.D)

Spécialité : Physique

Option Physique

Thème

**La classification complète des atomes sous
la base de la théorie du champ moyen**

Présenté Par :Malti Hadjer et Mokaddem Zahra

Sous la direction de :

Dr.Mr Kouidri

devant le jury:

Mr. A. Djedid

Mr. Boudali

Mrs. Hachmaoui

Soutenu le :..... //.....



Remerciements

*Mes remerciements s'adressent d'abord à ALLAH le
tout puissant et à son prophète MOHAMED
(paix et salut sur lui)
pour les chances qui me sont offertes
pour réaliser ce travail.
C'est à lui que nous adressons toute notre gratitude en
Premier lieu*

*En second lieu, nous voudrions adresser nos vifs remerciements
à tous nos professeurs de l'institut des sciences et technologie qui
Ont contribué à notre formation.*

*Enfin, nous tenons à remercier notre encadreur
Mr. KOUIDRI qui a toujours été disponible malgré
nombreuses occupations,
et dont les encouragements et les conseils judicieux
nous furent d'une très grande utilité.*



HADJER - Zahra

Dédicaces

*Toutes les lettres ne sauraient trouver les mots qu'il faut...
Tous les mots ne sauraient exprimer la gratitude,
L'amour, le respect, la reconnaissance...
Aussi, c'est tout simplement que*





Je dédie cette thèse ...

À MES CHERS PARENTS

Aucune dédicace ne saurait exprimer mon respect, mon amour éternel et ma considération pour les sacrifices que vous avez consenti pour mon instruction et mon bien être.

Je vous remercie pour tout le soutien et l'amour que vous me portez depuis mon enfance et j'espère que votre bénédiction m'accompagne toujours.

Que ce modeste travail soit l'exaucement de vos vœux tant formulés, le fruit de vos innombrables sacrifices, bien que je ne vous en acquitterai jamais assez.

Puisse Dieu, le Très Haut, vous accorder santé, bonheur et longue vie et faire en sorte que jamais je ne vous déçoive.

A Ma Chère Tante Aicha

Ma conseiller, et amie fidèle, qui m'a assisté dans les moments difficiles et m'a pris doucement par la main pour traverser ensemble des épreuves pénibles....

Je te suis très reconnaissante, et je ne te remercierai jamais assez pour ton amabilité, ta générosité, ton aide précieuse.

A MES CHERS ET ADORABLE FRÈRES

Ashraf le généreux, Mohammed mon petit frère que j'adore, Sofiane, que j'aime profondément.

En témoignage de mon affection fraternelle, de ma profonde tendresse et reconnaissance, je vous souhaite une vie pleine de bonheur et de succès et que Dieu, le tout puissant, vous protège et vous garde.

A MA GRAND MERE CHERIE

*Qui m'a accompagné par ses prières, sa douceur, puisse Dieu lui prêter longue
vie et bcp de santé et de bonheur dans les deux vies.*

A LA MEMOIRE DE MES GRAND-PERES

ET MA GRANDE MERE

*J'aurais tant aimé que vous soyez présents.
Que Dieu ait vos âmes dans sa sainte miséricorde*

À MES CHERS ONCLES , TANTES, « Sayed »

A MES CHERS COUSINS COUSINES « Malti »

*Veillez trouver dans ce travail l'expression de mon respect le plus profond et
mon affection la plus sincère.*

MES CHERS Naima ,Haifaa ,Djilali, Chikh

*Aucune dédicace ne saurait exprimer tout l'amour que j'ai pour
vous, Votre joie et votre gaieté me comblent de bonheur.
Puisse Dieu vous garder, éclairer votre route et vous aider à réaliser
à votre tour vos vœux les plus chers.*

À MES AMIS DE TOUJOURS : Zahra, Amina,Hayat Wahiba.R, Sabah.M

et tout les filles de Mosalla Aicha Radhi Allah Anha ,...

*En souvenir de notre sincère et profonde amitié et des moments
agréables que nous avons passés ensemble.
Veillez trouver dans ce travail l'expression de mon respect le plus
profond et mon affection la plus sincère.*

*À TOUTES LES PERSONNES QUI ONT PARTICIPÉ A
L'ÉLABORATION DE CE TRAVAIL À TOUS CEUX QUE J'AI
OMIS DE CITER*

Je dédie ce travail

À mon père :

En signe de reconnaissance de l'immense bien que vous avez fait pour moi concernant mon éducation qui aboutit aujourd'hui à la réalisation de cette étude.

Recevez à travers ce travail, toute ma gratitude et mes profonds sentiments. Que Dieu le tout puissant soit à vos côtés et vous accorde une meilleure santé (amen).

À ma mère :

*Plus qu'une mère pour moi, pour m'avoir donnée la vie et la joie de vivre. Ta bonne éducation, tes conseils et tes bénédictions n'ont jamais fait défaut, que Dieu le tout puissant t'accorde son paradis éternel (amen).
maman ; Je vous aime.*

AMES CHERS ET ADORABLE SOEURS

Nacira, la prunelle de mes yeux, Tuita, la douce, au coeur si grand, Talba l'aimable, Farah le généreuse, Hiba ma petite Soeur que j'adore, Yakout, que j'aime profondément.

En témoignage de mon affection fraternelle, de ma profonde tendresse et reconnaissance, je vous souhaite une vie pleine de bonheur et de succès et que Dieu, le tout puissant, vous protège et vous garde.

À MES CHERS ONCLES, TANTES, LEURS EPOUX ET EPOUSES « Belgharbi »

À MES CHERS COUSINS COUSINES « Mokaddem »

Veillez trouver dans ce travail l'expression de mon respect le plus profond et mon affection la plus sincère.

À MA CHÈRE TANTE ET SON FILS LAÏDE

*Aucune dédicace ne saurait exprimer tout l'amour que j'ai pour vous, Votre joie et votre gaieté me comblent de bonheur.
Puisse Dieu vous garder, éclairer votre route et vous aider à réaliser à votre tour vos vœux les plus chers.*

À MON CHÈRE Mamia

Mon conseiller, et ami fidèle, qui m'a assisté dans les moments difficiles et m'a pris doucement par la main pour traverser ensemble des épreuves pénibles....

Je te suis très reconnaissante, et je ne te remercierai jamais assez pour ton amabilité, ta générosité, ton aide précieuse.

***À MES AMIS DE TOUJOURS : HADJER, KHAWLA,
FAIZA, KHADIJA, IKRAM, et tous les amies de Promotion
ET BANAT LMOSALLA...***

*En souvenir de notre sincère et profonde amitié et des moments agréables que nous avons passés ensemble.
Veuillez trouver dans ce travail l'expression de mon respect le plus profond et mon affection la plus sincère.*

Table des matières

Remerciement

Dédicaces

Qui est Hartree – Fock ?.....	1
-------------------------------	---

Introduction générale.....	2
----------------------------	---

Chapitre I: théorie du champ moyen

I-1-Introduction.....	3
-----------------------	---

I-2-Principe variationnel.....	3
--------------------------------	---

I-3-Méthode Hartree -Fock.....	3
--------------------------------	---

I-4- Fonction d'onde de Hartree.....	3
--------------------------------------	---

I-4-1 Equation aux valeurs propre de Schrödinger.....	6
---	---

Chapitre II: Section efficace

II-1 Définition et notation.....	12
----------------------------------	----

II-2 Section efficace.....	13
----------------------------	----

II-3 Calcul du nombre de particules par unité de volume (n_{cible}) ou par unité de surface (densité des particules volumique ou surfacique) (S cible).....	14
---	----

II-4-Probabilité d'interaction.....	14
-------------------------------------	----

II-4-1 Unité usuelle pour la section efficace.....	15
--	----

II-5 Calcul de la probabilité d'interaction.....	15
--	----

II-4-Section efficace différentielle.....	16
---	----

II-5-Diffusion classique et paramètre d'impact - application à l'expérience de Rutherford.....	17
--	----

II-6-Diffusion par une sphère dure de rayon R.....	19
--	----

II-6-1 Conclusion de l'expérience de Rutherford et validité.....	19
--	----

Chapitre III : Résultat et discussions

III-1-Résultats et discussions.....	21
-------------------------------------	----

III-2-Méthode d'Euler.....	21
----------------------------	----

III-3-Organigramme de calcul.....	23
-----------------------------------	----

III-4- Comment classer les atomes dans le tableau périodique de	
---	--

Mendeleïev?.....	24
------------------	----

III-5-Evolution de l'énergie de première ionisation dans le tableau	24
---	----

III-6-Evolution du rayon atomique dans le tableau	25
---	----

Conclusion	27
------------------	----

Conclusion	31
-------------------------	----

Annexe.....	32
-------------	----

Bibliographie

Qui est Hartree-Fock ?

Douglas Hartree



Naissance	27 mars 1897 Cambridge, Royaume-Uni
Décès	12 février 1958 Cambridge (à 61 ans)
Nationalité	Anglais
Champ	Physique et Maths
Institutions	Université de Victoria (Manchester) Université de physique et technologies
Diplôme	Université de Victoria (Manchester)
Renommé pour	Développé la méthode de Hartree- Fock
Distinction	Prix Niels Bohr (1921)



Introduction générale

Introduction Générale

La physique des matériaux s'est développée tout au long du *XXième* siècle, d'une façon spectaculaire en donnant naissance à des avancées technologiques. Ces avancées ont permis de comprendre et de prévoir les atomes via tableau de Mendeleïev. La détermination de ces propriétés se repose généralement sur le modèle proposé comme première étape et sur la résolution de la fameuse équation dite ici équation de Schrödinger.

Plusieurs modèles ont été établis dans le but de déterminer et de prévoir la forme générale de la fonction potentielle. Dans ce travail nous allons utiliser l'approximation de Hartree-Fock comme première détermination de ce problème à N corps en interaction.

Le but de ce travail de License est de déterminer les fonctions d'ondes solution de l'équation de Schrödinger ainsi que les sections efficaces correspondantes tout en frappant une cible avec un atome de charge Ze via le potentiel Coulombien.

Le deuxième chapitre est consacré à nous familiariser à l'étude de la théorie des diffusions tout en se restreint à la diffusion élastique (conservation de l'énergie et l'impulsion).

Le dernier chapitre représente la partie la plus laborieuse de notre travail où on applique tous l'outil théorique déjà vu au chapitre précédent à des équations numériques accessibles aux calculs.

Finalement nous terminerons ce mémoire par une petite conclusion.



CHAPITER I

THEORIE DU CHAMP

MOYEN

I-1 Introduction :

Nous nous intéresserons dans ce chapitre à étudier la théorie du champ moyen d'une manière rigoureuse. Pour cela nous rappelons la méthode variationnelle qui se base principalement sur le choix des fonctions d'essai: un nombre de fonctions qui minimisent l'énergie totale du système. Nous en donnerons ici un bref aperçu.

I-2 Principe variationnel

Le principe variationnel représente pour la physique un outil fondamental non seulement pour minimiser l'énergie mais aussi pour déterminer les meilleures fonctions possibles qui répondent au principe.

$$E(\Phi_A) = \frac{\langle \Phi_A | \hat{H}_c | \Phi_A \rangle}{\langle \Phi_A | \Phi_A \rangle} \geq E_0 \quad (\text{I-1})$$

I-3 Méthode de Hartree- Fock

La méthode de Hartree-Fock est une méthode beaucoup plus puissante en physique générale et plus particulièrement en physique des matériaux. Elle présente un intérêt commun tant dans le domaine de la physique atomique que de la physique moléculaire par le fait qu'elle repose sur le principe variationnel. Dans cette méthode on suppose l'existence d'un potentiel moyen mono atomique, appelé potentiel de Hartree-Fock responsable de décrire avec une bonne approximation l'état fondamental.

L'hamiltonien du système d'atomes à plusieurs électrons (Z e) s'écrit en se basant sur l'approximation de Born Oppenheimer qui sépare le mouvement des noyaux du mouvement des électrons:

$$H = H_{el} + H_{nuc} \quad (\text{I-2})$$

Ou

$$H_{el} = T_e + V_{eN} + V_{ee} \quad (\text{I-3})$$

$$H_{nuc} = T_N + V_{NN} \quad (\text{I-4})$$

Ou on s'intéresse ici qu'à la partie électronique la partie nucléaire traduit

L'effet des vibrations, des translations et des rotations des noyaux qui n'est pas notre sujet de recherche.

Alors puisque la masse du noyau est plus grande que celle des électrons on suppose que le centre de masse de l'atome coïncide avec le noyau

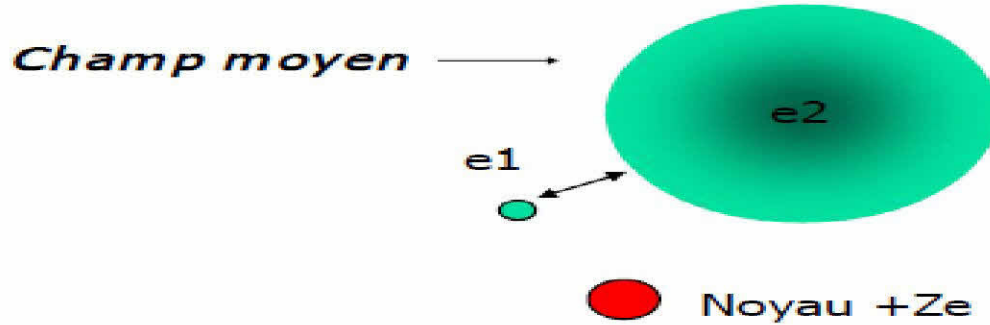


Fig.1.1

$$H = \sum_i \left[\frac{P_i^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right] + \sum_{i>j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \quad (\text{I-5})$$

Avec $e^2 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0}$

Où

$\sum_{i=1}^Z \frac{Pe^2}{2m_e}$: terme cinétique.

$\sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i}$: terme attractif exercé sur chaque electron par le noyau.

Qui se réduit en introduisant le potentiel moyen comme:

$$H = \sum_i \left[\frac{P_i^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + \sum_{j<i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \right] \quad (\text{I-6})$$

Où $W_Z(r_i) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \sum_{j<i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}$ (I-7)

Représente le potentiel moyen de Hartree.

Essayant maintenant de simplifier le plus tôt possible l'équation (I-4):

$$H = \sum_i h_Z(r_i) \quad (I-8)$$

Avec $h_Z(r_i)$ est l'hamiltonien de Hartree.

Le potentiel de Hartree de l'équation (I-4) intervient que l'énergie directe ce qui laisse la fonction d'onde comme étant un produit de fonctions d'onde symétrique mais la notion de spin nous a obligé de réécrire le potentiel de Hartree comme une somme d'un potentiel directe et d'un potentiel d'échange d'ou la théorie de Fock :

$$E = \sum_{i=1}^N \varepsilon_{n_i} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \{J_{ij} - K_{ij}\} \quad (I-9)$$

Où K_{ij} est l'énergie directe" (énergie coulombienne)

$$K_{ij} = \int d\vec{r}_i \int d\vec{r}_j |\varphi_{n_i}(\vec{r}_i)|^2 |\varphi_{n_j}(\vec{r}_j)|^2 \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (I-9-a)$$

Et J_{ij} est l'énergie d'échange:

$$J_{ij} = \int d\vec{r}_i \int d\vec{r}_j \varphi_{n_i}(\vec{r}_i) \varphi_{n_j}^*(\vec{r}_j) \frac{e^2}{r_{ij}} \varphi_{n_i}(\vec{r}_j) \varphi_{n_j}(\vec{r}_i) \quad (I-9-b)$$

La nouvelle fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger est un déterminant de Slater:

$$\Psi(1,2,\dots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(\xi_1, s) & \phi_1(\xi_2, s) & \dots & \phi_1(\xi_N, s) \\ \phi_2(\xi_1, s) & \phi_2(\xi_2, s) & \dots & \phi_2(\xi_N, s) \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \phi_N(\xi_1, s) & \phi_N(\xi_2, s) & \dots & \phi_N(\xi_N, s) \end{vmatrix} \quad (I-10)$$

Où $\phi_i(\xi_i, s) = \varphi(\xi_i) \cdot \chi(s)$ (ou $\chi(s)$ sont les fonctions de spin avec s up ou down).

Or nos fonctions d'onde $\phi_i(\xi_i)$ forment une base.

En effet d'après la notation de Dirac :

$$\langle \xi_i | \xi_i \rangle = \langle \xi_i | \xi_i \rangle$$

$$\langle \xi_i | \xi_j \rangle = \delta_{ij}$$

$$\sum_i \langle \xi_i | \xi_i \rangle = 1$$

I-5-Fonction d'onde de Hartree:

Afin de mieux apprécier la puissance de cette méthode et de se rendre compte de son caractère self- consistant, nous l'appliquons maintenant à la détermination du niveau de l'état fondamental de l'atome d'hélium.

Lorsqu'on néglige le spin, la fonction d'onde du système est de la forme "fonction d'onde de Hartree ".

$$\Phi_H = \varphi_{n_1}(r_1) \cdot \varphi_{n_2}(r_2) \quad (I-11)$$

Où l'orbitale individuelle $\varphi_{n_1}(r_1)$ doit satisfaire à l'équation de Hartree:

$$\left[\frac{\nabla^2}{2m_e} - \frac{2e^2}{r_1} + V(r_1) \right] \varphi_{n_1}(r_1) = \varepsilon_{n_1} \varphi_{n_1}(r_1) \quad (I-12)$$

Et $\varphi_{n_2}(r_2)$ à une équation similaire.

I-5-1 Equation aux valeurs propre de Schrödinger :

Notons, qu'en général, il faut résoudre des équations couplées, mais comme pour l'état fondamental, la fonction d'onde $\varphi_{n_2}(r_2)$ est également une fonction de type $|1S\rangle$; il y a donc seulement une équation aux valeurs propres de Schrödinger à résoudre dans ce cas.

Hartree choisit comme potentiel $V(r_1)$, l'énergie d'interaction coulombienne directe entre l'électron (1) et la densité de charge, moyenne de l'électron (2), c'est-à-dire:

$$V(r_1) = -|e| \int \frac{|\varphi_{n_2}(r_2)|^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d\vec{r}_2 \quad (I-13)$$

D'où le potentiel vaut:

$$V_H(r_1) = -\frac{2|e|^2}{r_1} + V(r_1) \quad (I-14)$$

Le problème est donc de trouver la valeur propre ε_{n_1} et la fonction propre $\varphi_{n_1}(r_1)$ correspondant à l'état le plus bas (et de manière similaire pour ε_{n_1} et $\varphi_{n_2}(r_2)$). Nous ne pouvons évidemment pas espérer une solution analytique du problème. Généralement, une telle équation intégrale-différentielle est résolue par itérations successives.

On part donc d'une fonction $\varphi_{n_2}(r_2)$ aussi proche que possible de la solution exacte, par exemple la fonction d'essai:

$$\varphi_{n_2}(r_2) = \frac{\alpha^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha r_2} \quad \text{avec: } \alpha = \frac{27}{16} \frac{1}{a_0} \varphi_{n_2}(r_2) \quad (\text{I-15})$$

Pour beaucoup plus de précision, veuillez consulter le tableau qui détermine la configuration électronique de chaque élément chimique, le terme spectroscopique, l'énergie d'ionisation et rayon orbital.

Les tableaux VII.2.a, VII.2.b, et VII.2.c fournissent les configurations électronique, les termes et énergies associées à l'état fondamental des éléments (atomes neutres).

Le rayon orbitale est exprimé en Angströms et correspond au maximum de la densité de probabilité de l'orbital extrême.

Z	Elément	Configuration électronique	Terme spectroscopique	Energie d'ionisation(eV)	Rayon orbital
1	H	1s	$^2S_{1/2}$	13.505	0.529
2	He	1s ²	1S_0	24.580	0.291
3	Li	[He] 2 s	$^2S_{1/2}$	5.390	1.586
4	Be	[He] 2s ² 2p	1S_0	9.320	1.040
5	B	[He] 2s ² 2p	$^2P_{1/2}$	8.296	0.776
6	C	[He] 2s ² 2p ²	3P_0	11.264	0.620
7	N	[He] 2s ² 2p ³	$^4S_{3/2}$	14.54	0.521
8	O	[He] 2s ² 2p ⁴	3P_2	13.614	0.450
9	F	[He] 2s ² 2p ⁵	$^2P_{3/2}$	17.42	0.396
10	Ne	[He] 2s ² 2p ⁶	1S_0	21.559	0.354
11	Na	[Ne] 3 s	$^2S_{1/2}$	5.138	1.713
12	Mg	[Ne] 3 s ²	1S_0	7.644	1.279
13	Al	[Ne] 3 s ² 3 p	$^2P_{1/2}$	5.984	1.312

14	Si	[Ne] 3 s ² 3 p ²	³ P ₀	8.149	1.068
15	P	[Ne] 3 s ² 3 p ³	⁴ S _{3/2}	11.00	0.919
16	S	[Ne] 3 s ² 3 p ⁴	³ P ₂	10.357	0.810
17	Cl	[Ne] 3 s ² 3 p ⁵	² P _{3/2}	13.01	0.725
18	Ar	[Ne] 3 s ² 3 p ⁶	¹ S ₀	15.755	0.659
19	K	[Ar] 1 s	² S _{1/2}	4.339	2.162
20	Ca	[Ar] 4 s ²	¹ S ₀	6.111	1.690
21	Sc	[Ar] 4 s ² 3 d	² D _{3/2}	6.56	1.570
22	Ti	[Ar] 4 s ² 3 d ²	³ F ₂	6.83	1.477
23	V	[Ar] 4 s ² 3 d ³	⁴ F _{3/2}	6.74	1.401
24	Cr	[Ar] 4 s ² 3 d ⁴	⁷ S ₃	6.76	1.453
25	Mn	[Ar] 4 s ² 3 d ⁵	⁶ S _{5/2}	7.432	1.278
26	Fe	[Ar] 4 s ² 3 d ⁶	⁵ D ₄	7.896	1.227
27	Co	[Ar] 4 s ² 3 d ⁷	⁴ F _{9/2}	7.86	1.181
28	Ni	[Ar] 4 s ² 3 d ⁸	³ F ₄	7.633	1.139
29	Cu	[Ar] 4 s ² 3 d ⁹	² S _{1/2}	7.723	1.191
30	Zn	[Ar] 4 s ² 3 d ¹⁰	¹ S ₀	9.391	1.065
31	Ga	[Ar] 4s ² 3d4p	² P _{1/2}	6.00	1.254
32	Ge	[Ar] 4s ² 3d4p ²	³ P ₀	8.13	1.090
33	As	[Ar] 4s ² 3d4p ³	⁴ S _{3/2}	10.00	1.001
34	Se	[Ar] 4s ² 3d4p ⁴	³ P ₂	9.750	0.918
35	Br	[Ar] 4s ² 3d4p ⁵	² P _{3/2}	11.84	0.85
36	Kr	[Ar] 4s ² 3d4p ⁶	¹ S ₀	13.996	0.79
37	Rb	[Kr] 5s	² S _{1/2}	4.176	2.287
38	Sr	[Kr] 5s ²	¹ S ₀	5.692	1.836

39	Y	[Kr] 5s ² 4d	² D _{3/2}	6.6	1.693
40	Zr	[Kr] 5s ² 4d ²	³ F ₂	6.95	1.593

Tableaux VII.2.a

Z	Elément	Configuration électronique	Terme spectroscopique	Energie d'ionisation (eV)	Rayon orbital
41	Nb	[Kr] 5s4d ⁴	⁶ D _{1/2}	6.77	1.589
42	Mo	[Kr] 5s4d ⁵	⁷ S ₃	7.18	1.520
43	Tc	[Kr] 5s ² 4d ⁵	⁶ S _{5/2}	-	1.391
44	Ru	[Kr] 5s4d ⁷	⁵ F ₅	7.5	1.410
45	Rh	[Kr] 5s ² 4d ⁸	⁴ F _{9/2}	7.7	1.364
46	Pd	[Kr] 4d ¹⁰	¹ S ₀	8.33	0.567
47	Ag	[Kr] 5s ² 4d10	² S _{1/2}	7.574	1.286
48	Cd	[Kr] 5s ² 4d10	¹ S ₀	8.991	1.184
49	In	[Kr] 5s ² 4d ¹⁰ 5P	² P _{1/2}	5.785	1.382
50	Sn	[Kr] 5s ² 4d ¹⁰ 5P ²	³ P ₀	7.332	1.240
51	Sb	[K r] 5s ² 4d ¹⁰ 5P ³	⁴ S _{3/2}	8.64	1.193
52	Te	[Kr] 5s ² 4d ¹⁰ 5P ⁴	³ P ₂	9.01	1.111
53	I	[Kr] 5s ² 4d ¹⁰ 5P ⁵	² P _{3/2}	10.44	1.044
54	Xe	[Kr] 5s ² 4d ¹⁰ 5P ⁶	¹ S ₀	12.127	0.986
55	Cs	[Xe] 6s	² S _{1/2}	3.893	2.518
56	Ba	[Xe] 6s ²	¹ S ₀	5.210	2.060
57	La	[Xe] 6s ² 5d	² D _{3/2}	5.61	1.915
58	Ce	[Xe] (6s ² 4f5d)	(³ H ₅)	6.91	1.978
59	Pr	[Xe] 6s ² 4f ³	(⁴ I _{9/2})	5.76	1.942
60	N d	[Xe] 6s ² 4f ⁵	⁵ I ₄	6.31	1.912
61	Pm	[Xe] 6s ² 4f ⁶	(⁶ H _{5/2})	-	1.882

62	S m	[Xe] 6s ² 4f ⁷	⁷ F ₀	5.6	1.854
63	Eu	[Xe] 6s ² 4f ⁷	⁸ S _{7/2}	5.67	1.826
64	Gd	[Xe] 6s ² 4f ⁷ 5d	⁹ D ₂	6.16	1.713
65	Tb	[Xe] 6s ² 4f ⁹	(⁶ H _{15/2})	6.74	1.775
66	Dy	[Xe] 6s ² 4f ¹⁰	(⁵ I ₈)	6.82	1.750
67	Ho	[Xe] 6s ² 4f ¹¹	(⁴ I _{15/2})	-	1.727
68	Er	[Xe] 6s ² 4f ¹²	(³ H ₆)	-	1.703
69	Tm	[Xe] 6s ² 4f ¹³	² F _{7/2}	-	1.681
70	Yb	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴	¹ S ₀	6.2	1.658
71	Lu	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d	² D _{3/2}	5.0	1.553
72	Hf	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ²	³ F ₂	5.5	1.476
73	Ta	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ³	⁴ F _{3/2}	7.88	1.413
74	W	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ⁴	⁵ D ₀	7.98	1.360
75	R e	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ⁵	⁶ S _{5/2}	7.87	1.310
76	Os	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ⁶	⁵ D ₄	8.7	1.266
77	Ir	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ⁷	⁴ F _{9/2}	9.2	1.227
78	Pt	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ⁸	³ D ₃	8.96	1.221
79	Au	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ⁹	² S _{1/2}	9.223	1.187
80	Hg	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰	¹ S ₀	10.434	1.126

Tableaux VII.2.b

Z	Elément	Configuration électroniques	Terme spectroscopique	Energie D'ionisation(eV)	Rayon Orbital
81	Ti	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p	² P _{1/2}	6.106	1.319
82	Pb	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ²	³ P ₀	7.415	1.215
83	Bi	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ³	⁴ S _{3/2}	7.287	1.295

84	Po	[Xe] $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^4$	3P_2	8.43	1.212
85	At	[Xe] $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^5$	$(^2P_{3/2})$	-	1.146
86	Rn	[Xe] $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^5$	1S_0	10.746	1.090
87	Fr	[Rn] $(7s)$	$(^2S_{1/2})$	-	2.447
88	Ra	[Rn] $7s^2$	1S_0	5.277	2.042
89	Ac	[Rn] $7s^2 6d$	$^2D_{3/2}$	6.7	1.895
90	Th	[Rn] $7s^2 6d^2$	3F_2	-	1.788
91	Pa	[Rn] $7s^2 5f^3 6d$	$(^4K_{11/12})$	-	1.804
92	U	[Rn] $7s^2 5f^4 6d$	5L_6	4	1.775
93	Np	[Rn] $(7s^2 5f^4 6d)$	$(^6L_{11/12})$	-	1.741
94	Pu	[Rn] $(7s^2 5f^6)$	$(^7F_0)$	-	1.784
95	Am	[Rn] $(7s^2 5f^7)$	$(^8S_{7/2})$	-	1.757
96	Cm	[Rn] $(7s^2 5f^9 6d)$	$(^9D_2)$	-	1.657
97	Bk	[Rn] $(7s^2 5f^9)$	$(^6H_{15/2})$	-	1.626
98	Cf	[Rn] $(7s^2 5f^{10})$	$(^5I_8)$	-	1.598
99	Es	[Rn] $(7s^2 5f^{11})$	$(^4I_{15/2})$	-	1.576
100	Fm	[Rn] $7s^2 5f^{12}$	$(^3H_6)$	-	1.557
101	Md	[Rn] $(7s^2 5f^{13})$	$(^2F_{7/2})$	-	1.527
102	No	[Rn] $(7s^2 5f^{14})$	$(^1S_0)$	-	1.581
103	Lw	[Rn] $(7s^2 5f^{14} 6d)$	$(^2D_{3/2})$	-	-

Tableaux VII.2.c



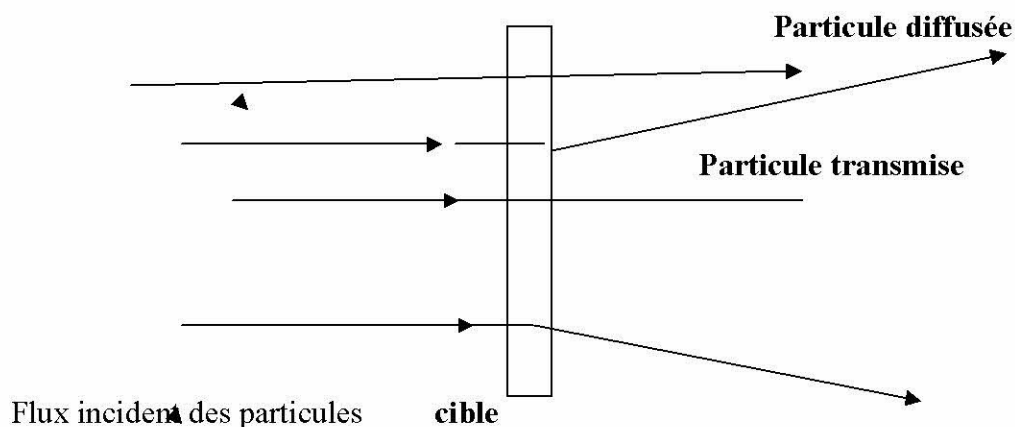
CHAPITRE II

SECTION

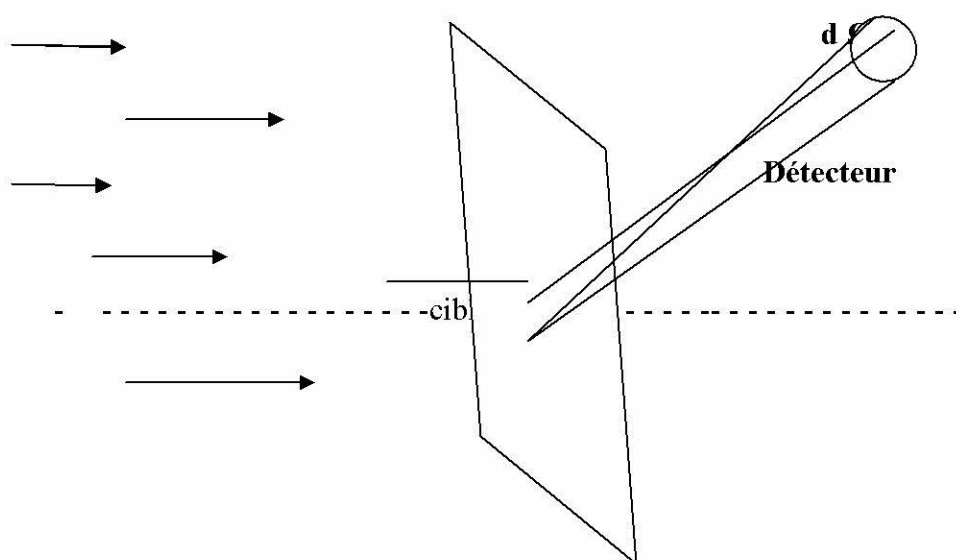
EFFICACE

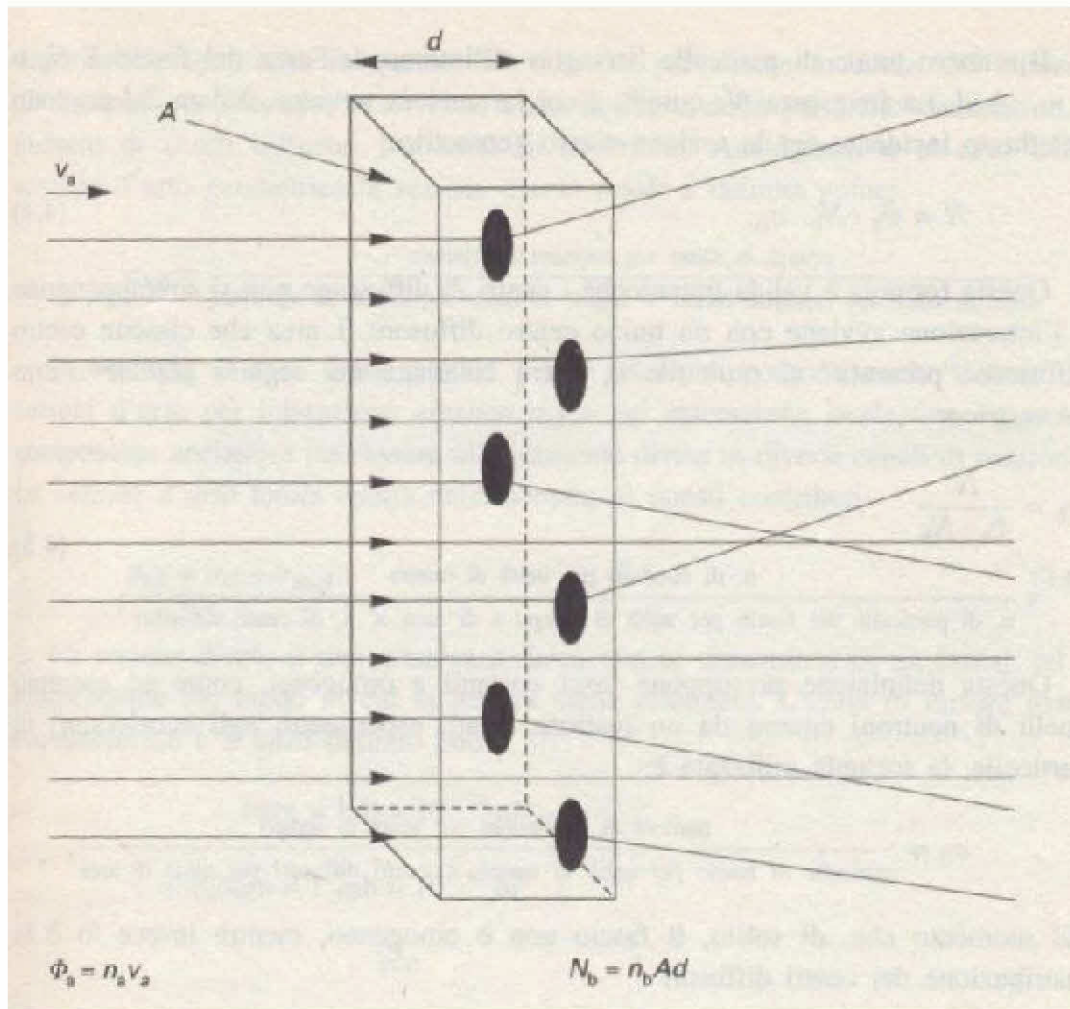
II-1 Définitions et notations:

Pour explorer les propriétés du atome on fait généralement des expériences de diffusion (« collision ») de particules d'un faisceau qu'on envoie sur une cible et on observe la diffusion « derrière » la cible. Ce qui intéresse en général le physicien c'est la probabilité qu'une « réaction se produise ». En fait la mesure consiste à faire un grand nombre de mesures entre un grand nombre de particules incidentes et un grand nombre de atomes cible et de mesurer les particules diffusées par un détecteur. On s'intéresse à la moyenne des valeurs mesurées. La probabilité qui nous intéresse c'est le rapport entre le taux d'interaction et le flux incident. Nous allons voir que cette probabilité qu'on appelle section efficace est indépendante des variables caractérisant le faisceau et la cible, c'est-à-dire l'intensité du faisceau et la géométrie et densité de la cible .



Particules





II-2 Section efficace:

Le nombre de particules que l'on détecte est bien sûr proportionnel au nombre de particules incidentes et au nombre de atome cible. La relation de proportionnalité s'exprime par l'intermédiaire d'un coefficient de proportionnalité σ .

La relation entre le taux d'interaction (T) (nombre de particules « diffusées » par unité du temps) et la section efficace (σ) est alors:

$$T = \sigma \cdot N_{\text{cible}} = \sigma \cdot S_{\text{cible}} S. \quad (\text{II-1})$$

Avec:

$\square$ - le flux, c'est-à-dire le nombre de particules incidentes par unité de surface et par unité du temps,

N_{cible} - le nombre de particules cible dans le volume de la cible correspondant à la surface (S) couverte par le faisceau,

S_{cible} - le nombre de particules cible par unité de surface (densité surfacique de particules).

II-3 Calcul du nombre de particules par unité de volume (n_{cible}) ou par unité de surface (densité des particules volumique ou surfacique) (S_{cible}):

Soit d l'épaisseur, ρ la masse volumique et A est la masse atomique du milieu cible, N_{cible} le nombre d'Avogadro. Le nombre de particules cible par unité de volume N_{cible} est donné par:

$$n_{\text{cible}} = N_{\text{cible}} / V = (n_{\text{mol}} N_A) / V = \left(\frac{M}{A} N_A \right) / V = \rho N_A / A \rightarrow n_{\text{cible}} = \rho N_A / A \quad (\text{II-2})$$

On peut aussi exprimer le nombre de particules dans la cible N_{cible} :

$$N_{\text{cible}} = n_{\text{cible}} V = n_{\text{cible}} S d = (\rho N_A / A) S d \quad (\text{II-3})$$

et le nombre de particules cible par unité de surface S_{cible} :

$$S_{\text{cible}} = N_{\text{cible}} / S = (n_{\text{cible}} S d) / S = n_{\text{cible}} d = (\rho \cdot d) N_A / A \quad (\text{II-4})$$

$$S_{\text{cible}} = N_{\text{cible}} / S \text{ (unité de mesure cm}^{-2}\text{)} \quad (\text{II-5})$$

II-4-Probabilité d'interaction :

Dans la discussion de l'interaction des particules avec la matière, on s'intéresse souvent à la probabilité (P) qu'une particule interagisse avec un milieu d'épaisseur donnée, qui est donnée par le rapport entre le taux d'interaction T et le taux de particules incidentes $\square S$:

$$P = \frac{T}{\Phi S} = \sigma S_{\text{cible}} = \sigma \cdot N_A (\rho \cdot d) / A \quad (\text{II-6})$$

On voit que la probabilité d'interaction dépend directement de la quantité (ρd) , appelée la densité de masse surfacique, qui a comme unité de mesure le g/cm^2 . De plus on voit apparaître l'unité de mesure de σ : ρ étant sans dimension, σ a les dimensions d'une surface. On peut imaginer σ comme une surface géométrique : une particule qui frapperait la cible dans cette aire serait diffusée, tandis qu'à l'extérieur de cette aire elle traverserait la cible sans diffusion. Cependant il faut faire très attention : cette aire représente la probabilité d'un processus : elle n'a rien à voir avec la taille physique des centres diffuseurs de la cible, par exemple.

Exemple : une mesure récente de diffusions de neutrons froids sur une cible de Gd donne une section efficace de $10^{-20} m^2$ ce qui équivaudrait à un rayon d'environ $10^{-10} m$, ce qui représente le rayon d'un atome !!!!

II-4-1 Unité usuelle pour la section efficace :

$$1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2 = 10^{-28} \text{ m}^2$$

II-5 Calcul général de la probabilité d'interaction :

Puisque la probabilité d'interaction par unité de distance est :

$$W = p / d = N_A \rho (\sigma/A) = \sigma \cdot n_{\text{cible}} \quad (\text{II-7})$$

où n_{cible} désigne le nombre de atome cible par unité de volume (densité volumique des atomes cible).

La probabilité pour une particule incidente d'avoir une interaction entre x et $x+dx$ est

$$W dx = N_A (\sigma/A) \rho dx = \sigma \cdot n_{\text{cible}} dx \quad (\text{II-8})$$

Le flux de particules incidentes Φ après le passage de la tranche dx aura varié de

$$d\Phi = -\Phi \cdot W dx = -\Phi \cdot \sigma \cdot n_{\text{cible}} dx \quad (\text{II-9})$$

En intégrant sur une épaisseur x on obtient la loi de variation du flux de particules incidentes :

$$\Phi(x) = \Phi_0 \cdot e^{-\sigma \cdot n_{\text{cible}} \cdot x} \quad (\text{II-10})$$

Où $\Phi(x)$ c'est le flux de particules qui n'ont pas interagi après la distance x .

Le nombre de particules qui ont interagi est donc :

$$\Phi(x) = \Phi_0 (1 - e^{-\sigma \cdot n_{\text{cible}} \cdot x}) \quad (\text{II-11})$$

Exemple: Quelle est la fraction de rayons gammas transmises derrière une cible de Plomb de 1 cm d'épaisseur si la section efficace totale d'interaction est de 10 barns ? On donne la masse volumique du Plomb $\rho = 1.13 \cdot 10^4 \text{ kg/m}^3$ et la masse molaire du Plomb $A = 0.207$

kg/mole, $N_A = 6.02 \cdot 10^{23} \text{ mole}^{-1}$.

$$n_{\text{cible}} = (\rho/A) \cdot 6.02 \cdot 10^{23} \text{ mole}^{-1} = 3.3 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}.$$

$$x = 10^{-2} \text{ m}, \sigma = 10^{-27} \text{ m}^2, n_{\text{cible}} \cdot \sigma \cdot x = 0.33, \text{ d'où } \Phi/\Phi_0 = e^{-0.33} = 0.72.$$

Ce calcul suppose que l'on s'intéresse à tous les processus d'interactions et que l'on ne s'intéresse pas à la direction d'émission des particules diffusées. Ce sera le cas de l'observation d'un flux de neutrons (voir cours sur les neutrons) et on verra aussi des applications dans le cours sur les interactions des rayons gammas.

Dans le cas le plus général la section efficace de diffusion comprend les processus élastiques (particule diffusée défléchie, mais cible et particule gardant leur nature), inélastiques (la cible peut être dans un état excité) et d'absorption de la particule.

II-6 Section efficace différentielle :

La distribution angulaire des particules diffusées peut apporter des informations sur l'interaction qui a eu lieu entre le faisceau et le noyau cible (par exemple sur la forme du potentiel d'interaction). De plus, en général, les détecteurs ont une certaine granularité et sont donc capables de mesurer le nombre de particules diffusées dans une direction définie par (Θ, ϕ) dans un angle solide élémentaire $d\Omega$ (coordonnées sphériques).

Comme précédemment on définit la section efficace différentielle : $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)$

Le nombre dn de particules diffusées dans la direction (Θ, φ) dans l'angle solide élémentaire $d\Omega$ est :

$$dn = N \left(\sigma \cdot n_{\text{cible}} \cdot x \right) = N \left[\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) d\Omega \cdot n_{\text{cible}} \cdot x \right] \quad (\text{II-12})$$

En intégrant dans tout l'espace on retrouve bien sûr :

$$\sigma_T = \int \frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} d\Omega = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} d\Omega \sin \theta d\theta d\varphi \quad (\text{II-13})$$

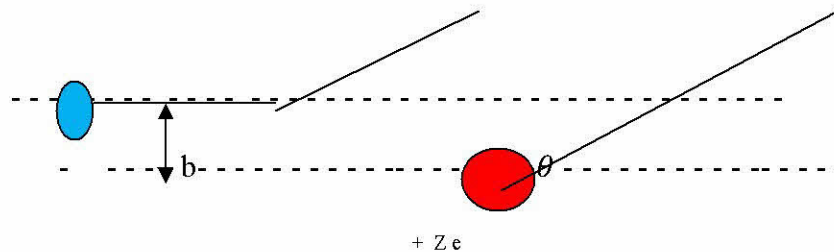
Où σ_T c'est la section efficace définie précédemment.

II-7 Diffusion classique et paramètre d'impact - application à l'expérience de Rutherford :

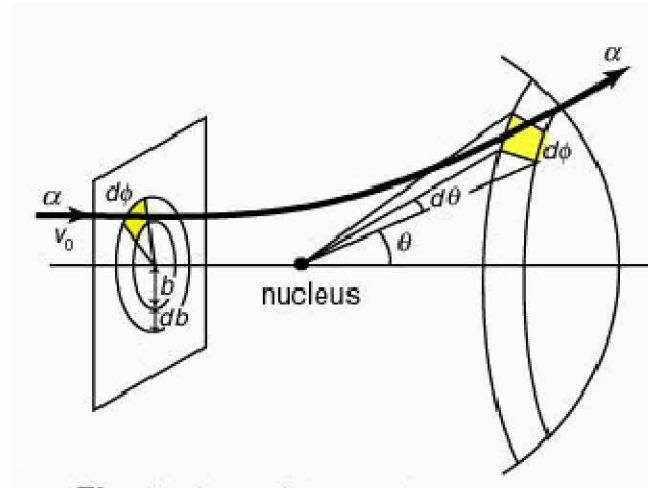
Nous allons considérer le cas d'un potentiel d'interaction central $V(r)$ qui dépend seulement de la distance r par rapport au centre du potentiel.

Le faisceau incident sera dans la direction de l'axe z et donc la section efficace différentielle sera une fonction de Θ seulement, pas de φ . Un cas particulier est celui de la diffusion de particules α sur un noyau.

On définit le paramètre d'impact du projectile b comme la distance entre la trajectoire du projectile et l'axe passant par le centre de la cible, dans la région sans interaction (à grande distance avant la cible).



Du fait de la symétrie, toutes les particules qui ont des paramètres d'impact compris entre b et $b+db$ seront diffusées entre θ et $\theta + d\theta$ et. Elles sont donc associées à une «surface» $2\pi b \cdot db$ perpendiculaire au faisceau.



Nous aurons donc $d n$ particules diffusées à l'angle $(\theta, \theta + d\theta)$:

$d n = N_i \cdot n_{cible} \cdot X \cdot \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) d\Omega$ qui est aussi le nombre de collisions associées à la surface.

$2\pi b \cdot db$, soit $(N_i \cdot n_{cible} \cdot X) 2\pi b \cdot db$. D'où $N_i \cdot n_{cible} \cdot X \cdot \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) d\Omega = (N_i \cdot n_{cible} \cdot X) 2\pi b \cdot db$.

Soit si l'on tient compte de $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$, on obtient :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2\pi b db}{d\Omega} = \frac{2\pi b db}{2\pi \sin\theta d\theta} = \frac{b}{\sin\theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right| \quad (\text{II-14})$$

Dans le cas de la diffusion coulombienne (potentiel en $1/r$) on démontre assez facilement grâce au principe fondamental de la dynamique que :

$$\text{tg} \frac{\theta}{2} = \frac{a}{2b} \quad \text{Avec} \quad b = \frac{Zz}{E_\alpha} e^2 \quad (14-a)$$

En dérivant cette formule écrite sous la forme :

$$b = \frac{a}{2} \text{ctg} \frac{\theta}{2} \quad (14-b)$$

On obtient :

$$|db| = \frac{a}{4} \sin^{-2} \frac{\theta}{2} |d\theta| \quad (14-c)$$

On utilisant

$$\sin \theta = 2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \quad (II-15)$$

On arrive facilement à :

$$d\sigma/d\Omega = \frac{\alpha^2}{16} \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (II-16)$$

La formule classique pour la diffusion coulombienne sur un atome ponctuel.

II-8 Diffusion par une sphère dure de rayon R :

$$b = R \sin \frac{(\pi - \theta)}{2} = R \cos \frac{\theta}{2} \quad (II-17)$$

$$\left| \frac{db}{d\theta} \right| = \frac{R}{2} \sin \frac{\theta}{2}$$

D'où

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \frac{R \cos(\theta/2)}{\sin \theta} \frac{R}{2} \sin \frac{\theta}{2} = \frac{R^2}{4} \quad (II-18)$$

→ La section efficace différentielle est isotrope.

La section efficace totale est donnée par:

$$\sigma_T = \int \frac{R^2}{4} d\Omega = \pi R^2 \quad (II-19)$$

II-9 Conclusion de l'expérience de Rutherford et validité

Les résultats de l'expérience de l'époque mettaient en évidence l'existence d'un atome en confirmant les formules ci-dessus. En effet en utilisant les formules classiques pour la distance d'approche des particules α de 5 MeV envoyées sur une cible d'or très mince, on calcule une distance d'approche à $\sim 3 \cdot 10^{-14}$ cm, qui est beaucoup plus faible que le rayon atomique et donc on déduit la présence d'un atome central contrairement au modèle de Thomson qui postulait l'atome comme une entité de 10^{-10} cm une distribution de charge uniforme.

Comme on peut le voir dans la figure suivante, si la formule marche bien pour des angles assez petits, elle diverge des résultats expérimentaux à grands angles. Il faut se souvenir qu'on a supposé un calcul classique et un atome ponctuel. Le décrochement visible sur la figure est en fait dû essentiellement à l'absorption par l'atome. Ce qu'on voit apparaître c'est l'effet d'une force nouvelle à courte distance, la force d'interaction forte qui devient prépondérante. D'où l'idée de sonder la structure d'atome en utilisant des projectiles de grande énergie et d'autre nature. .[**Voir annexe**].

CHAPITRE III
COMPARAISON
ET RESULTATS

III-1 Résultats et discussions:

Nous arrivons maintenant à la partie la plus importante de notre travail où nous allons convertir tout ce que nous avons vu aux chapitres I et II, les équations théoriques, aux équations numériques adaptables aux calculs.

Nous commencerons par la résolution de l'équation radiale :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r} - E_{k,l} \right] u_{k,l}(r) = 0 \quad (\text{III} - 1)$$

Résoudre (III-1) numériquement revient à construire un organigramme de calcul inspirés par un programme écrit en fortran qui repose sur la méthode d'Euler décrite comme suit :

III-2 Méthode d'Euler :

Pour résoudre numériquement l'équation de Schrödinger, il semble pertinent d'appliquer la méthode de discrétisation de l'espace et des opérateurs. Sous les hypothèses que $\Psi(x)$ est au moins de classe C^2 , un développement de Taylor nous permet d'écrire les deux égalités suivantes :

$$\Psi(x+h) - \Psi(x) = h \frac{d\Psi}{dx}(x) + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2\Psi}{dx^2}(x) + O(h^3) \quad (\text{III} - 2)$$

$$\Psi(x-h) - \Psi(x) = -h \frac{d\Psi}{dx}(x) + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2\Psi}{dx^2}(x) + O(h^3) \quad (\text{III} - 3)$$

Le somme de ces deux égalités :

$$\frac{\Psi(x+h) + \Psi(x-h) - 2\Psi(x)}{h^2} = \frac{d^2\Psi}{dx^2}(x) + O(h^2) \quad (\text{III} - 4)$$

Apparaît alors équivalent discret de l'opérateur Δ (à une dimension, mais le cas à trois dimensions s'en déduit aisément). La précision de cette expression est en $O(h^2)$.

En discrétisant l'espace d'un pas "h" et en injectant le résultat précédent dans l'équation de Schrödinger, il vient :

$$\frac{\Psi(x+h) + \Psi(x-h) - 2\Psi(x)}{h^2} + f(x)\Psi(x) + O(h^2) = 0 \quad (\text{III} - 5)$$

$$\Psi(x+h) + \Psi(x-h) - 2\Psi(x) + h^2 f(x)\Psi(x) + O(h^4) = 0 \quad (\text{III}6)$$

Cette équation peut être réécrite de façon à faire apparaître une relation de récurrence entre les valeurs de Ψ aux nœuds du maillage. Le pas de la discrétisation est fixé à h et l'origine est définie par le point O.

La fonction d'onde discrète s'écrit alors $\Psi_n = \Psi(nh)$ avec n un entier. De même, $f_n = f(nh)$. En ces termes, l'équation s'écrit :

$$\Psi_{n+1} = [1 - h^2 f_n]\Psi_n - \Psi_{n-1} + O(h^4) \quad (\text{III-7})$$

Le potentiel V étant à support compact il existe M tel que V soit nul ($V = 0$) pour $x < 0$ et $x > M$ (quitte à redéfinir le point O). Les solutions sur ces parties où le potentiel est nul ($V = 0$) sont connues : ce sont des ondes planes de la forme : pour $k = \sqrt{cE}$

$$\Psi(x < 0) = e^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (\text{III} - 8)$$

$$\Psi(x > M) = Ce^{ikx} \quad (\text{III} - 9)$$

à un terme complexe A près qui n'est pas intéressant ici (ainsi B est directement le coefficient de réflexion en amplitude et C celui de transmission en amplitude).

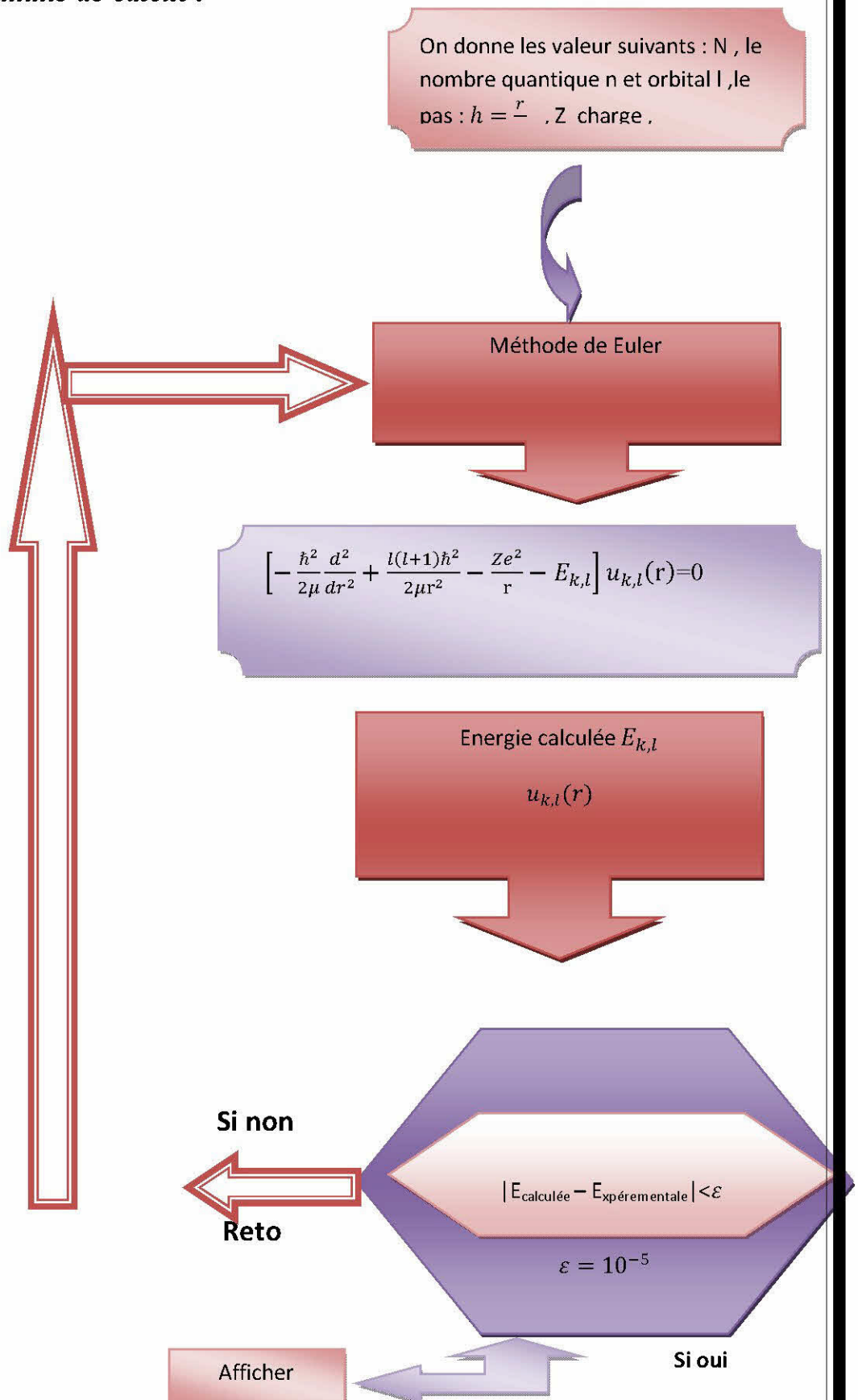
Lors de la résolution numérique, l'algorithme débute à $x = -2h$. La connaissance des deux premières valeurs de Ψ_n (il s'agit de l'onde plane écrite précédemment) permet d'initier la récurrence qui donne accès à tous les Ψ_n .

Une fois que l'algorithme arrive à $x = M$, il renvoie la valeur de C (le coefficient de transmission en amplitude) et refait les calculs dans le sens inverse (par symétrie la formule est la même) une fois revenue à $x = 0$, il renvoie une nouvelle valeur de B .

Pour la bonne valeur de B , la distance entre le complexe d'entrée et celui de sortie est nulle. Il est donc nécessaire de faire appel à un autre algorithme qui va chercher le minimum de la fonction qui prend B comme argument et qui renvoie la distance (au carré) entre le complexe

B d'entrée et celui de sortie.

III-3 Organigramme de calcul :



III-4 Comment classer les atomes dans le tableau périodique de Mendeleïev?

1. Les éléments sont classés par Z croissant
2. Les lignes du tableau périodique sont nommées périodes et sont identifiées par la valeur du nombre quantique principal n de la couche de valence. Tous les éléments d'une même période ont même configuration de cœur.
3. Les colonnes de ce tableau regroupent les éléments de même configuration électronique de valence et forment les familles d'éléments. Les éléments d'une même famille présentent des propriétés chimiques similaires.
4. Les règles de remplissage permettent de comprendre la forme donnée à ce fameux tableau périodique : jusqu'au remplissage de la sous-couche « $4s$ », on distingue deux blocs : un bloc s et un bloc p .

	1	2	3	...	12	13	14	15	16	17	18	
Période 1 n=1	1s ¹										1s ²	
Période 2 n=2	2s ¹	2s ²					2s ² 2p ¹	2s ² 2p ²	2s ² 2p ³	2s ² 2p ⁴	2s ² 2p ⁵	2s ² 2p ⁶
Période 3 n=3	3s ¹	3s ²					3s ² 3p ¹	3s ² 3p ²	3s ² 3p ³	3s ² 3p ⁴	3s ² 3p ⁵	3s ² 3p ⁶
Période 4 n=4	4s ¹	4s ²					4s ² 3d ¹⁰ 4p ¹	4s ² 3d ¹⁰ 4p ²	4s ² 3d ¹⁰ 4p ³	4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁴	4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁵	4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁶
Période 5 n=5	5s ¹	5s ²		...			5s ² 4d ¹⁰ 5p ¹	5s ² 4d ¹⁰ 5p ²	5s ² 4d ¹⁰ 5p ³	5s ² 4d ¹⁰ 5p ⁴	5s ² 4d ¹⁰ 5p ⁵	5s ² 4d ¹⁰ 5p ⁶
...	...	...					...	...	...	...	...	...
	Bloc s						Bloc p					

Bloc s : alcalins et alcalinoterreux ; **Bloc p** : métaux trivalents, métalloïdes, halogènes, gaz rares ; **Bloc d** : métaux de transitions. Et à partir de la 4ème ligne le bloc d intervient (10 électrons au maximum), de même qu'à partir de la sous-couche $6s$, la sous-couche $4f$ doit alors être remplie (14 électrons au maximum). Bloc f : lanthanides et actinides.

III-5 Evolution de l'énergie de première ionisation dans le tableau

D'une façon générale, les énergies d'ionisation décroissent le long d'une colonne du Tableau périodique des éléments et croissent de gauche à droite le long d'une période de la table. Plus l'électron est éloigné du noyau plus il est facile de l'arracher (première énergie d'ionisation diminue).

TABLEAU PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENTS

Annotations:

- FAMILLE:**
 - Métaux (bleu)
 - Métaux alcalins (rouge)
 - Métaux alcalino-terreux (orange)
 - Métaux de transition (vert)
 - Lanthanides (jaune)
 - Actinides (violet)
 - Métalloïdes (rouge foncé)
 - Non-métaux (vert clair)
 - Chalcogènes (bleu clair)
 - Halogènes (jaune clair)
 - Gaz nobles (bleu très clair)
- ÉTAT PHYSIQUE (100°C, 101 kPa):**
 - No - gaz
 - Liq - liquide
 - Ts - solide
 - Ts - synthétique
- Callout for Pt (Platine):**
 - NUMÉRO ATOMIQUE: 78
 - MASSA MOLAIRE ATOMIQUE RELATIVE (A_r): 195,08
 - CONFIGURATION ÉLECTRONIQUE: [Xe] 4f¹⁴ 5d⁹ 6s¹
 - SYMBÔLE ATOMIQUE: Pt
 - NOM DE L'ÉLÉMENT: PLATINE

DES ÉLÉMENTS (vertical label on the left)

Sous-niveaux (vertical label on the left, with a red arrow pointing upwards)

LANTHANIDES

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
LANTHANE	CERIE	PRASEODYME	NEODYME	PROMETHIUM	SAMARIUM	EUROPIUM	GADOLINIUM	TERBIUM	DYSPROSIUM	HOÏMIUM	ERBIUM	THULIUM	YTTÉRIUM	LUTÉTIUM

ACTINIDES

Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
ACTINIUM	THORIUM	PROACTINIUM	URANIUM	NEPTUNIUM	PLUTONIUM	AMÉRICIUM	CURIUM	BERKÉLIUM	CALIFORNIUM	EINSTEINIUM	FERMIDIUM	MENDÉLÉV	NOBELIUM	LAWRENCIUM

(1) Pure & Applied Chemistry, Vol. 78, No. 11, pp. 2051-2068 (2006)
<http://www.iupac.org/publications/pap/2006/pdf/07811x2001.pdf>

(2) La masse atomique relative est donnée avec cinq chiffres significatifs. Pour les éléments qui n'ont pas de radioactivité stable, la valeur entre parenthèses indique le nombre de masse de l'isotope le plus abondant ou le plus proche de la stabilité.

(3) Les configurations électroniques pour lesquelles subsiste un doute ne sont pas données.

Figure III-1: Tableau Périodique

III-6 Evolution du rayon atomique dans le tableau

Nous assimilons les atomes à des sphères e rayon r . le rayon est une fonction croissant de n (dans une colonne) et pour n constant (dans une période), r est une fonction décroissante de Z .

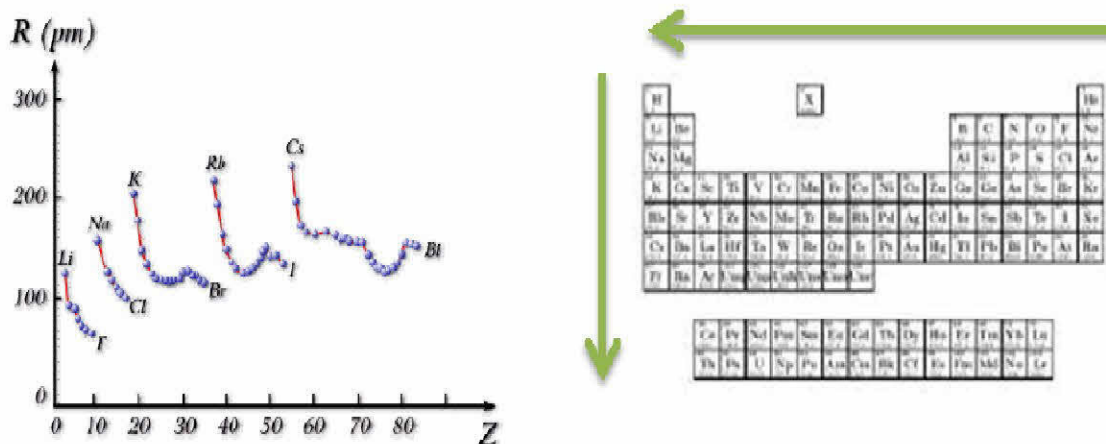


Figure III-2: Evolution du rayon atomique dans le tableau

Le volume de l'atome est déterminé par les dimensions des O.A. des électrons de la couche de valence. Or, la grandeur de l'O.A. est fixée en premiers lieu par n . Chaque fois que l'on passe à une nouvelle période, le volume des atomes croît brusquement. Au sein d'une même période, il y a contraction des O.A. lorsque la charge du noyau ($Z^* = Z - \sigma$), croît en raison des forces attractives de Coulomb : le fait d'ajouter un électron supplémentaire fait augmenter Z d'une unité, alors que la constante d'écran varie peu, cet électron se plaçant sur le dernier niveau. La figure III-1 montre les variations de l'énergie en fonction de Z .

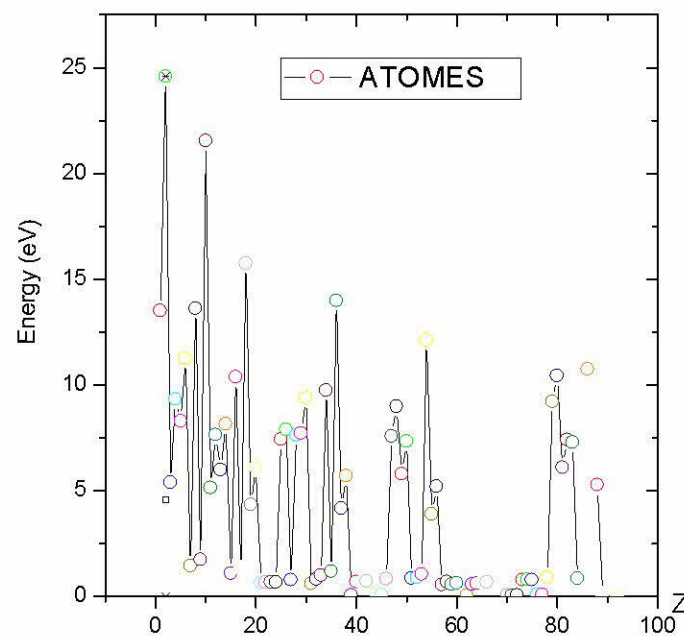


Figure III-3: Variation de l'énergie en fonction de Z

Conclusion:

Dans ce chapitre nous avons calculés numériquement la fonction d'onde ainsi que son énergie pour l'atome d'hydrogène en se basant sur la méthode d'Euler. Nous avons déterminés la section efficace pour chaque Z.

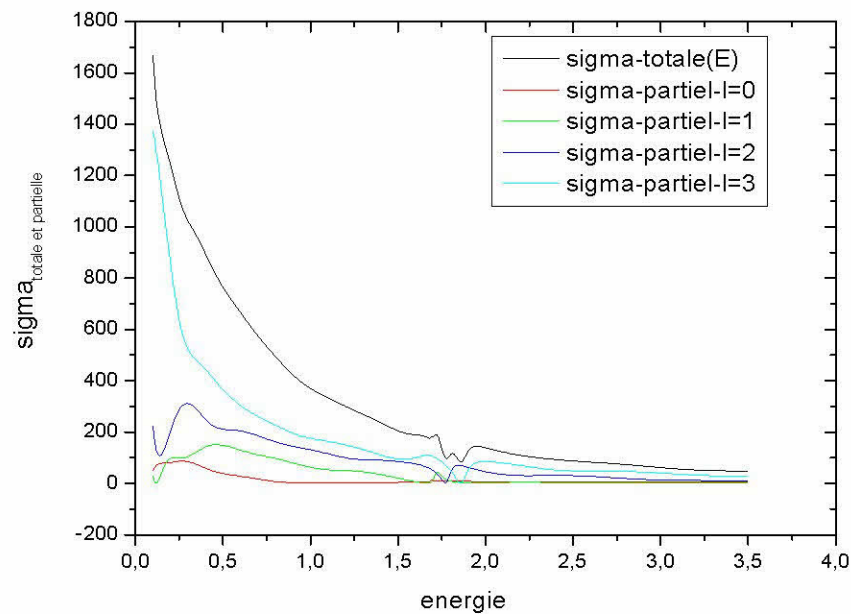


Figure III-4: Section efficace totale et partielle en fonction de l'énergie

D'après cette figure on remarque bien que la section efficace totale diminue au fur à mesure que l'énergie augmente relative à la loi de variation théorique décrite par :

$$\sigma_l(k) = \frac{8\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) \propto k^{-4l}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{q_1 q_2}{16\pi \epsilon_0 E \sin^2(\theta/2)} \right)^2$$

ou k^2 est l'énergie.

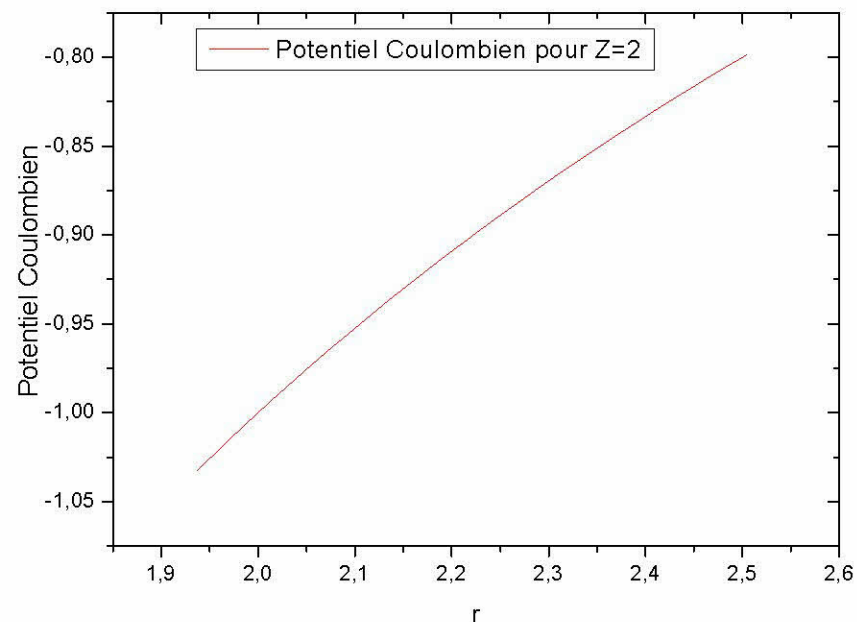
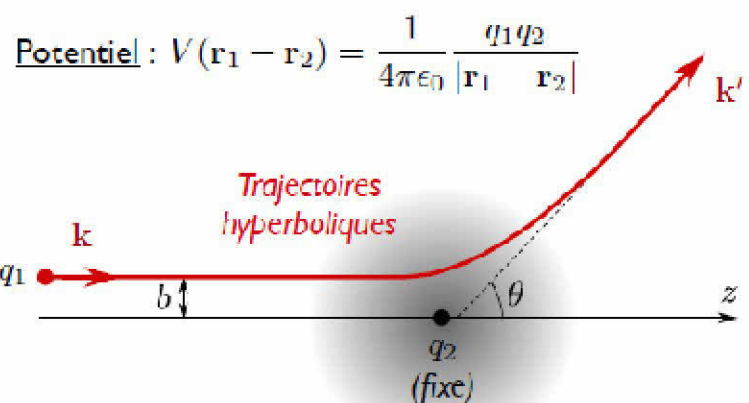
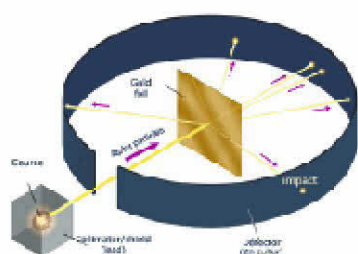


Figure III-5 Potentiel Coulombien en fonction de r

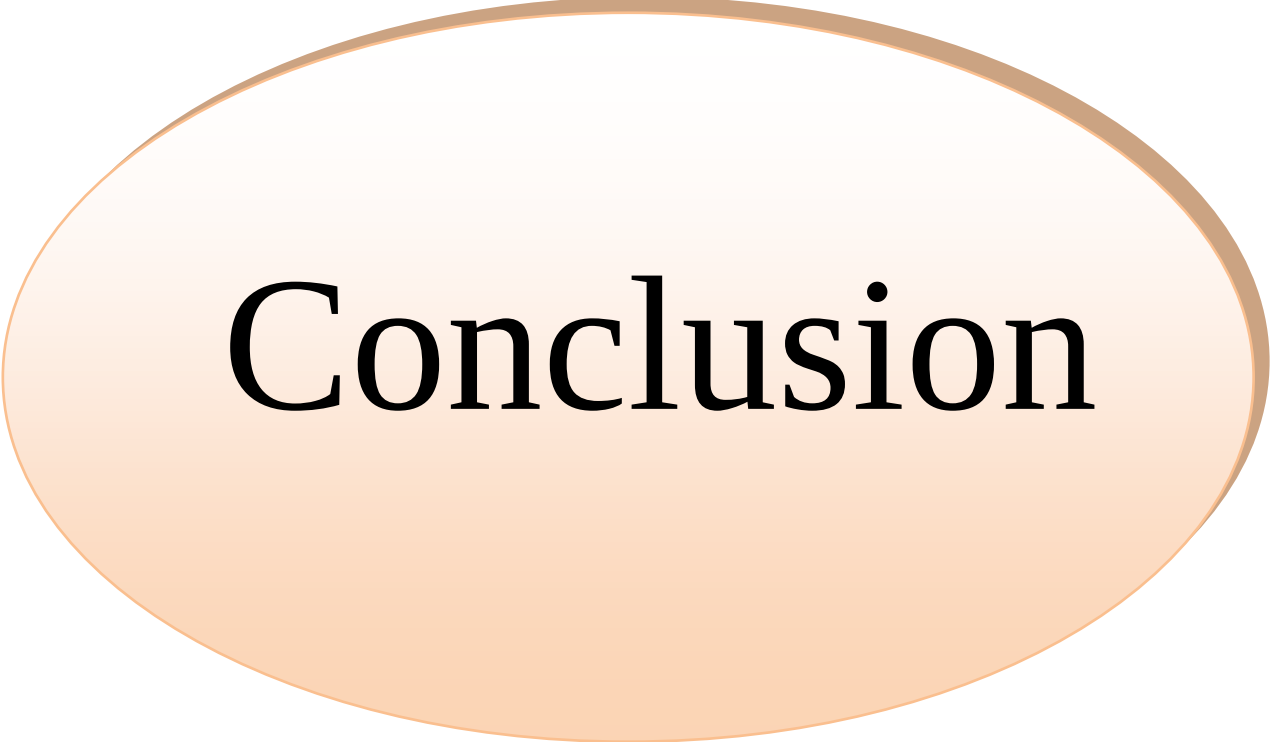
La même variation est aussi indiquée pour le cas de notre potentiel Coulombien loi inverse de r.



Angle de diffusion

$$\theta(b) = 2 \operatorname{arccot} \left(\frac{8\pi\epsilon_0 E b}{q_1 q_2} \right) \Leftrightarrow b(\theta) = \frac{q_1 q_2}{8\pi\epsilon_0 E} \cot \left(\frac{\theta}{2} \right)$$

Nos résultats sont en bon accord avec celle trouvés par d'autres auteurs.



Conclusion

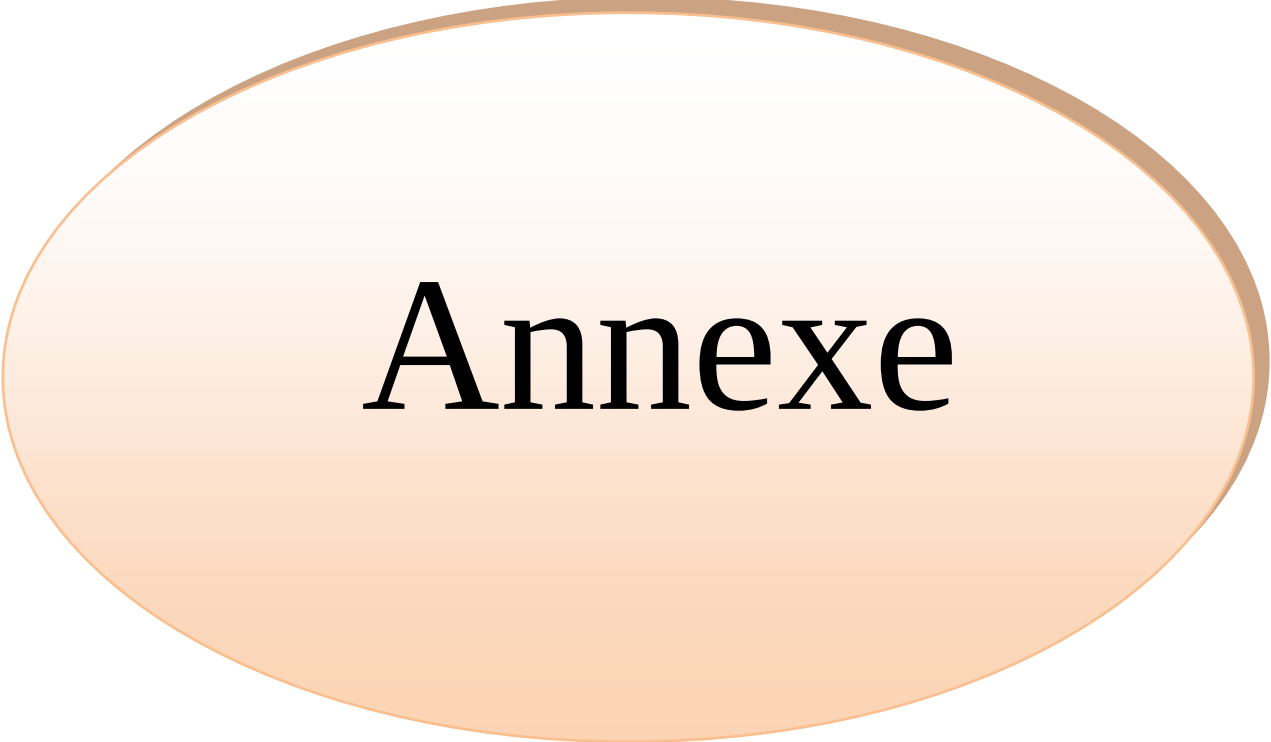
Conclusion générale

Ce travail entre dans le cadre de préparation d'un diplôme de licence LMD option physique son titre intitulé: **La classification complète des atomes** d'une manière quantique partant d'un modèle plus simple dit modèle de la diffusion toute en se reposant sur le calcul de la section efficace *via* le potentiel Coulombien. Nous avons déterminés l'énergie d'ionisation des atomes en fonction de Z . La méthode de Hartree-Fock était la plus importante dans la résolution de ce fameux problème non seulement analytique mais aussi numérique.

Nous avons utilisé le processus de la diffusion élastique en vue de la détermination des Z , car connaissant les sections efficaces expérimentales données par les références on peut en déduire de la formule de la section efficace le numéro Z de chaque particule bien toute en savant le numéro Z' de la cible.st en bon accord.

La comparaison de nos résultats calculés avec les données des énergies d'ionisation utilisé par la référence

Finalement comprendre la physique des matériaux c'est comprendre l'infiniment petit dit aussi l'atome qui compose ce monde merveilleux et Bazard.



Annexe

1-Diffusion élastique :

On parle de la diffusion élastique lorsqu'il n'y a pas de changement d'énergie entre la radiation avant et après diffusion.

Le problème de la diffusion élastique entre deux particules de même masse interagissant via un potentiel $V(r_1 - r_2)$ est régi par l'hamiltonien :

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + V(r_1 - r_2) \quad (\text{II-20})$$

Il est commode de séparer le mouvement du centre de masse et celui du mouvement relatif en utilisant les opérateurs position et impulsion du centre de masse R_G et P_G de coordonnée relative (r et p) :

$$\left\{ \begin{array}{l} R_G = (r_1 + r_2)/2, \quad r = (r_1 - r_2) \\ P_G = p_1 + p_2, \quad p = (p_1 - p_2)/2 \end{array} \right\} \quad (\text{II-21})$$

L'hamiltonien (I-20) devient alors :

$$H = \frac{P_G^2}{4m} + \frac{p^2}{m} + V(r) \quad (\text{II-22})$$

Le problème se décompose en deux ; celui d'une particule libre de masse $2m$, et celui d'une particule de masse $m_r = \frac{m}{2}$ (dite masse réduite) soumise à un potentiel $V(r)$. Toutes les propriétés collisionnelles relèvent de cette particule fictive.

2-Amplitude de diffusion:

Le traitement quantique du processus de diffusion d'une particule sur un potentiel peut être fait en termes de vecteurs propres de l'hamiltonien du mouvement relatif, d'énergie positive $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r}$:

$$\left(\frac{p^2}{m} + V(r) \right) \psi_k(r) = E_k \psi_k(r) \quad (\text{II-23})$$

Où on suppose que le potentiel $V(r)$ tend vers 0 lorsque r tend vers l'infini. On définit b la portée du potentiel, l'extension de la région sur laquelle le potentiel d'interaction est non nul, si le potentiel a une extension finie, une définition plus générale est donnée dans la section

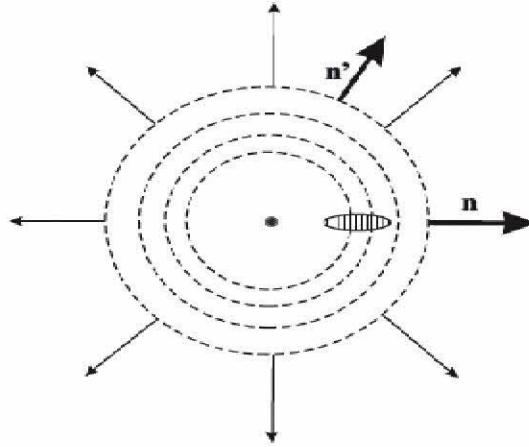


Figure I: Représentation schématisée de la diffusion d'un paquet d'onde se propageant le long de la direction n , par un potentiel $V(r)$.

Loin de la région d'interaction r très supérieur b on cherche des solutions asymptotiques du type :

$$\psi_k(r) \approx e^{ik \cdot r} + f_k(k, n, n') \frac{e^{ikr}}{r} \quad (\text{II-24})$$

L'interprétation physique de la solution est claire, il s'agit de la superposition de l'onde plane de l'atome incident, et d'une onde sphérique sortante relative à la composante diffusée. Pour chaque position l'amplitude de diffusion $f(k)$ dépend de l'énergie de la particule E_k , de la direction d'observation n' , et de la direction initiale n (voir figure I). A partir de (I-23), on trouve que les solutions stationnaires de diffusion vérifient la condition suivante:

$$f_k(k, n, n') = -\frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \int e^{-ik' \cdot r'} V(r') \psi_k(r') d^3r' \quad (\text{I-25})$$

A partir de cette dernière on obtient directement la section différentielle et totale de diffusion du potentiel :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_k(k, n, n')|^2, \quad \sigma(k, n) = \int |f_k(k, n, n')|^2 d^2n' \quad (\text{II-26})$$

Il est intéressant de noter que la solution (II-25) est implicite puisqu'elle relie la valeur asymptotique de $\psi_k(r')$ à sa valeur dans la région de diffusion. Cependant dans la limite de faible énergie, lorsque k très inférieur $1/b$, le problème se simplifie considérablement. Les contributions de l'intégrale (II-25) proviennent uniquement du volume à l'intérieur de la portée effective du potentiel dans la limite de faible énergie kr' on peut alors remplacer $\exp$ par 1 ; ce qui enlève toute dépendance de la direction et donc rend la diffusion isotrope. L'état stationnaire de diffusion s'écrit alors :

$$\psi_k(r) \approx e^{ik \cdot r} + f_k(k) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (\text{II-27})$$

3- Potentiel radial et développement en ondes partielles :

Le calcul exact de l'amplitude de diffusion nécessite la solution de l'équation de Schrödinger (I-23). Ce problème, qui normalement est extrêmement compliqué, peut être simplifié largement en considérant des potentiels à symétrie sphérique. Dans ce cas l'amplitude de diffusion dépend uniquement de l'angle entre n et n' , est donc $f_k = f_{k'}$. Il est utile alors de définir z la direction de l'onde incidente et de décomposer l'onde diffusée sur la base des vecteurs propres de L_z et L^2 où L est l'opérateur moment angulaire relatif :

$$\psi_k(r) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_m^l(\theta, \varphi) \frac{u_{k,l,m}(r)}{r} \quad (\text{II-28})$$

Où φ est l'angle azimutal autour de l'axe des z , et Y_m^l sont les harmoniques sphériques. L'onde plane incidente a un moment angulaire nul par rapport à l'axe des z , sa décomposition en harmoniques sphériques ne contiendra que des composantes $m_z=0$ et on trouve que :

$$e^{ikz} \approx \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) ((-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{ikr}), \quad kr \gg 1 \quad (\text{II-29})$$

Où $P_l(\cos \theta)$ sont des polynômes de Legendre. On trouve alors que l'onde plane incidente est la superposition d'ondes sphériques $P_l(\cos \theta)$ entrantes et sortantes, dont la phase relative dépend du moment angulaire relatif. Grâce au développement (II-29) on peut écrire la valeur asymptotique de l'expression (II-28) en termes d'harmoniques sphériques :

$$\psi_k(r) \approx \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) ((-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{2i\delta_l} e^{ikr}) \quad (\text{II-30})$$

Les déphasages $\delta_l(k)$ sont réels car la symétrie sphérique du potentiel interdit toute redistribution de courant entre les différentes ondes partielles. Le calcul des états stationnaires de diffusion se réduit à la détermination des coefficients $\delta_l(k)$ en insérant la solution (II-27)

dans l'équation de Schrödinger (II-22). On ne considère que les contributions $m=0$. Si les $\frac{u_k}{r}$ sont réguliers à l'origine, ils satisfont l'équation de Schrödinger 1D :

$$u''_{k,l}(r) + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m_r}{\hbar^2} V(r)\right) u_{k,l}(r) = 0 \quad (\text{II-31})$$

En égalisant les valeurs asymptotiques de (II-28) et (II-29) on obtient :

$$u_{k,l}(r) \sim ((-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{2i\delta_l} e^{ikr}) \quad (\text{II-32})$$

L'amplitude de diffusion f_k et la section efficace de diffusion se déduisent directement de la soustraction de (II-29) de (II-30)

$$f_k(\theta, \varphi) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta) \quad (\text{II-33})$$

Les $\delta(k)$ se calculent directement en intégrant l'équation (II-31) :

$$\sigma(k) = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l(k), \quad \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) \quad (\text{II-34})$$

4- Collisions entre particules identiques:

La diffusion entre particules identiques nécessite un traitement particulier car, à cause du principe de symétrisations, la fonction d'onde du système doit être symétrique ou antisymétrique selon qu'on considère des bosons ou des fermions. Ceci implique que les états stationnaires de diffusion qu'on vient de traiter doivent satisfaire les bonnes propriétés de symétrie par échange de particule.

L'échange des particules dans un problème de diffusion équivaut au changement de l'angle θ avec $\pi - \theta$, la solution (II-24) pour un potentiel central s'écrit :

$$\psi_k(r) \approx e^{ik \cdot r} + \varepsilon e^{-ik \cdot r} + \frac{e^{ikr}}{r} (f_k(\theta, \varphi) + \varepsilon f_k(\pi - \theta, \varphi)) \quad (\text{II-35})$$

Où ε vaut +1 pour des bosons et -1 pour des fermions. La section efficace différentielle devient :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_k(\theta, \varphi) + \varepsilon f_k(\pi - \theta, \varphi)|^2 \quad (\text{II-36})$$

La nouveauté est que dans le cas des particules identiques, à cause de la parité des polynômes de Legendre.

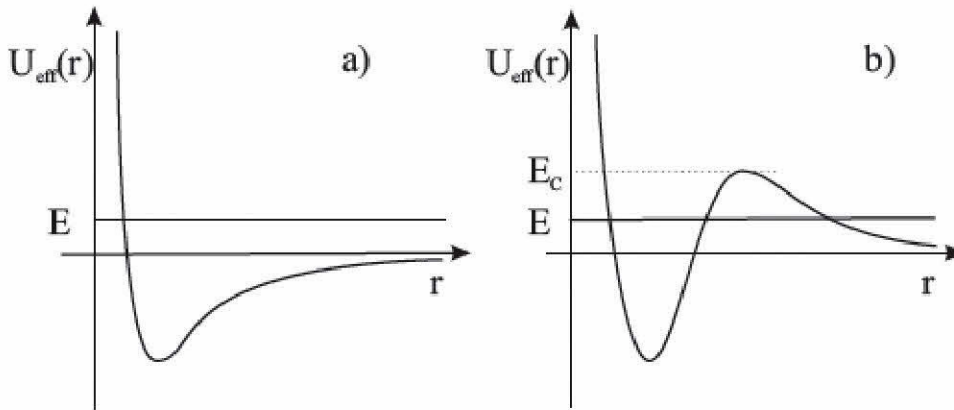


Figure II : Potentiel effectif de l'interaction atome-atome pour a) $l=0$, collision en onde s, b) l collision en onde supérieure. E est l'énergie du mouvement relatif, et E_c est la hauteur de la barrière centrifuge.

$(-1)^l$, seulement certaines ondes partielles donnent une contribution à la section efficace de diffusion : celles en l pair pour les bosons, et celles en l impair pour les fermions.

Pour des particules identiques la section efficace de diffusion s'écrit :

$$\sigma(k) = \frac{8\pi}{k^2} \sum_{l \text{ pair}} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) \quad \text{Pour les bosons} \quad (\text{II-37})$$

$$\sigma(k) = \frac{8\pi}{k^2} \sum_{l \text{ pair}} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) \quad \text{Pour les fermions} \quad (\text{II-38})$$

4-Limite de faible énergie:

Les propriétés de diffusion dans la limite où l'énergie du centre de masse est très faible par rapport à la portée du potentiel se déduisent par la résolution de l'équation (II-31) en négligeant le terme k^2 . Il est important de remarquer que le potentiel effectif du problème radial comprend deux termes : le premier est celui de l'interaction atome-atome, qui a pour origine le déphasage entre les ondes sphériques entrantes et sortantes, le deuxième, a pour origine la barrière centrifuge due au moment angulaire relatif des atomes. Ce dernier terme, qui est présent pour toutes les ondes partielles sauf $l=0$, joue un rôle important sur les déphasages $\delta_l(k)$ car, en étant répulsif, peut masquer le potentiel d'interaction atome-atome, et donc annuler les $\delta_l(k)$.

Pour des faibles énergies les $\delta_l(k)$ ont une dépendance du type:

$$\delta_l(k) \propto k^{2l+1} \quad (\text{II-39})$$

Ce qui donne les amplitudes de diffusion :

$$f_k(\theta, \varphi) \propto k^{2l} \quad (\text{II-40})$$

Les sections efficaces de diffusion pour les ondes partielles

$$\sigma_l(k) = \frac{8\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) \propto k^{4l} \quad (\text{II-41})$$

On déduit de cette expression, à faible température, pour les collisions en ondes, la section de diffusion prend une valeur constante :

$$\lim_{k \rightarrow 0} \sigma_{l=0}(k) = 8\pi a^2 \quad \text{Pour particules indiscernables bosoniques} \quad (\text{II-41a})$$

$$\lim_{k \rightarrow 0} \sigma_{l=0}(k) = 4\pi a^2 \quad \text{Pour particules discernables} \quad (\text{II-41b})$$

Où a est la longueur de diffusion définit par :

$$a = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_0(k)}{k} \quad (\text{II-42})$$

5- Approximation de Born :

5-1 Solution approchée de l'équation intégrale de la diffusion:

On peut écrire solution de l'équation de Schrodinger sous la forme :

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\vec{r}) = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) V(\vec{r})\psi(\vec{r}) \quad (\text{II- 43})$$

La solution générale de cette équation est donnée par l'équation intégrale:

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar} \int \frac{e^{i\vec{k} \cdot |\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} V(\vec{r}')\psi(\vec{r}')d\vec{r}' \quad (\text{II-44})$$

Qui porte le nom de "équation de Lippman-Schwinger".

Montrons que l'expression (I-44) est bien solution de (I-43):

Pour cela, il suffit d'appliquer l'opérateur $\nabla^2 + k^2$ aux membre de gauche et de droite de l'équation (I-44).

D'une part,

$$(\nabla^2 + k^2)e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = \left[-(\vec{k})^2 + k^2\right] e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = 0 \quad (\text{II-45})$$

D'autre part, afin d'effectuer l'opérateur

$$(\nabla^2 + k^2) \left(\frac{e^{i\vec{k} \cdot |\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) \quad (\text{II-46})$$

Notons que

$$\nabla^2 \left(\frac{e^{ik.r}}{r} \right) = -k^2 \left(\frac{e^{ik.r}}{r} \right) + e^{ik.r} \nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) \quad (\text{II-47})$$

Et comme

$$\left(\frac{1}{r} \right) = \frac{1}{2\pi^2} \int d\vec{r} \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{k^2} \quad (\text{II-48})$$

D'où

$$\nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) = -4\pi\delta(\vec{r}) \quad (\text{II-49})$$

et

$$(\nabla^2 + K^2) \left(\frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) = -4\pi e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (\text{I-50})$$

Par conséquent, nous avons bien :

$$(\nabla^2 + K^2) \Psi(\vec{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} (-4\pi) \int \delta(\vec{r} - \vec{r}') V(\vec{r}') d\vec{r}' = \frac{2m}{\hbar^2} V(r) \Psi \quad (\text{I-51})$$

Or pour un observateur (détecteur) à une distance r , loin de la région d'action potentiel de diffusion, on peut développer l'exponentielle dans la limite $|\vec{r}| \gg |\vec{r}'|$.

$$\frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \approx \frac{e^{ikr}}{r} \cdot e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'} = \frac{e^{ikr}}{r} \cdot e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}} \quad (\text{II-52})$$

Ou $\hat{r} = \frac{\vec{r}}{r}$ et $\vec{k}' = k \cdot \hat{r}$ est le vecteur d'onde de la particule diffusée dans la direction du détecteur.

D'où le développement asymptotique (pour grandes valeurs de r) de la solution générale (I-52) devient :

$$\square^*(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \left[\int e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}} V(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') d\vec{r}' \right] \frac{e^{ikr}}{r} \quad (\text{II-53})$$

Qui bien de la forme :

$$f(\theta, \varphi) = - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (\text{II-53})$$

Nous constatons donc qu'une solution pour l'amplitude de diffusion $f(\theta, \varphi)$ nécessite la connaissance de la fonction d'onde $\Psi(\vec{r}')$ correspondant à une énergie déterminée du spectre continu.

En procédant par itérations successives, la solution pour $\Psi(\vec{r})$ peut s'écrire formellement:

$$+ \int d\vec{r}' \int d\vec{r}'' G(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') G(\vec{r}', \vec{r}'') V(\vec{r}'') \Psi^{(0)}(\vec{r}'') + \dots \quad (\text{II-54})$$

Ou

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar} \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad (\text{II-54-a})$$

Et la solution d'ordre zéro $\Psi^{(0)}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ c-à-d l'onde plane incidente, solution du problème en absence de potentiel de diffusion.

Lorsque le potentiel de diffusion est une faible perturbation par rapport à l'énergie de la particule incidente, on peut se limiter à la première itération et l'on obtient

$$f(\theta, \varphi) = - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}} V(\vec{r}) d\vec{r} \quad (\text{II-55})$$

Encore appelée "amplitude de diffusion dans la première approximation de Born".

On écrit généralement :

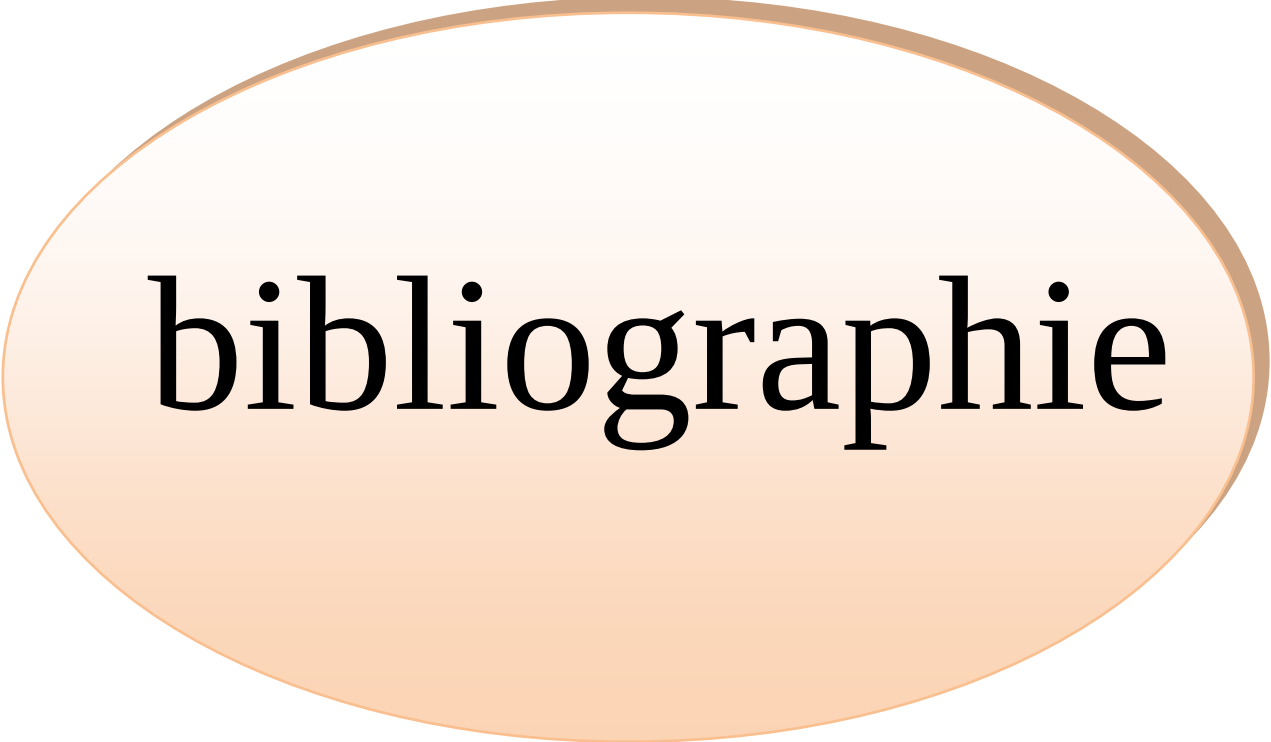
$$f(\theta, \varphi) = - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} V(\vec{r}) d\vec{r} \Rightarrow \sigma(\theta, \varphi) = |f(\theta, \varphi)|^2 \quad (\text{II-56})$$

Où $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$ porte le nom de vecteur d'onde de transfert. Dans le cas d'un potentiel central et pour des collisions élastiques $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$ on a:

$$q^2 = (\vec{k}' - \vec{k})^2 = 2k^2 - 2\vec{k}' \cdot \vec{k} = 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (\text{II-57})$$

Il en résulte que l'impulsion de transfert $p = \hbar q$ ou

$$q = 2k \sin \frac{\theta}{2} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \sin \frac{\theta}{2} \quad (\text{II-58})$$



bibliographie

Bibliographie :

- D. Blokhintsev, Principes de mécanique quantique, Éditions Mir, Moscou, 1981.
- J.M. Lévy-Leblond, F. Balibar, Quantique. Rudiments, Inter-Editions, Paris, 1984.
- Cl. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, Mécanique quantique, tomes I & II, Hermann, 1980.
- E. Merzbacher, Quantum Mechanics, John Wiley, 3rd ed., 1998.
- S. Gasiorowicz, Quantum Physics, John Wiley, 1997.
- L.D. Landau, E.M. Lifshitz, Quantum Mechanics, Pergamon Press, 3rd ed., 1981.
- V.K. Thankappan, Quantum Mechanics, John Wiley, 2nd ed., 1993.
- A.B. Wolbarst, Symmetry and Quantum Mechanics, Van Nostrand Reinhold Comp., 1977.
- W. Louisell, Radiation and noise in Quantum Electronics, McGraw-Hill, 1964.
- A.Z. Capri, Nonrelativistic Quantum Mechanics, Benjamin/Cummings, 1985.
- J.J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics, Benjamin/Cummings, 1985.
- W. Greiner, B. Müller, Quantum Mechanics, vol. I & II, Hermann, 1980.
- T. Fliessbach, Quantenmechanik, Spektrum Akademischer Verlag, 1995.
- R.W. Robinett, Quantum Mechanics, Oxford University Press, 1997.

-Mémoire Licence LMD 2013/2014