

**République Algérienne Démocratique et Populaire**  
**Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche**  
**Scientifique**

**Université Dr Moulay Tahar de Saïda**

**Faculté des Sciences**

**Département de physique**



Mémoire de fin L'étude pour obtenir la licence

**Filière : science de la matière**

**Spécialité : physique**

**Thème**

*Etude classique et quantique de l'atome d'hydrogène*

**Représente par :**

- Benbrahim Khaled ben el Walid

**Devant le jury :**

Mr Boudali AEK      Président

Mr Boutaleb          Examineur

Mr Kouidri Smail    Rapporteur

Mr Djeddid Ahmed   Examineur

Soutenu le : 16 – 06 – 2014

Année universitaire : 2013/2014

## **Dédicace**

*Je dédie ce modeste travail à :*

*A l'homme de ma vie, mon exemple éternel, mon soutien moral et source de joie et de bonheur, celui qui s'est toujours sacrifié pour me voir réussir, que dieu te garde dans son vaste paradis, à toi mon père.*

*A la lumière de mes jours, la source de mes efforts, la flamme de mon cœur, ma vie et mon bonheur ; maman que j'adore.*

*Aux personnes dont j'ai bien aimé la présence dans ce jour, à tous mes frères et mes sœurs, et mes amis Lahcen-Abdo-Nori-Karroum-Abdelhadi-Mohamed-Slimane-Nouh-Yyacine-habib et mes cousins Mustafa et Abdelkader je dédie ce travail dont le grand plaisir leurs revient en premier lieu pour leurs conseils, aides, et encouragements.*

*Aux personnes qui m'ont toujours aidé et encouragé, qui étaient toujours à mes côtés, et qui m'ont accompagnaient durant mon Chemin d'études supérieures, mes aimables amis, collègues d'étude,*

## Remerciement

Je remercie dieu le tout puissant de nous avoir donné la santé et la volonté d'entamer et de terminer ce mémoire.

Tout d'abord, ce travail ne serait pas aussi riche et n'aurait pas pu avoir le jour sans l'aide et l'encadrement de Dr. Smail Kouidri on le remercie pour la qualité de son encadrement exceptionnel, pour sa patience, sa rigueur et sa disponibilité durant notre préparation de ce mémoire.

Je remercie infiniment le président de jury et ces membres d'avoir accepté d'examiner ce travail.

Je remercie s'adresse également à tous me professeurs pour leurs générosités et la grande patience dont ils ont su faire preuve malgré leurs charges académiques et professionnelles.

J'ai remercié profondément toutes les personnes qui m'ont aidé et soutenue de près ou de loin

## Introduction Générale

Ce travail de mémoire s'intègre dans le cadre de l'obtention d'un diplôme de licence en physique. Son sujet porte sur l'étude classico-quantique de l'atome d'hydrogène. Pour cela revenant à définir les atomes d'une manière générale. Cependant nous savons que les atomes sont constitués de particules chargées (électrons + noyaux) susceptibles d'interagir avec un rayonnement électromagnétique extérieur. En fait, considérer le noyau atomique comme infiniment massif est une approximation raisonnable que l'on peut d'ailleurs dépasser en introduisant la masse réduite ; ainsi le noyau est évacué physiquement du problème et est remplacé par son champ Coulombien agissant sur les électrons, qui sont de fait les particules directement couplées au champ électromagnétique.

L'exemple le plus simple est l'étude de l'atome d'hydrogène, d'ailleurs étudier les éléments chimiques du tableau de Mendeleïev revient à étudier son premier élément qui est l'hydrogène. De ce fait, l'étude de l'atome d'hydrogène a une grande importance historique. Ce fut Bohr qui décrivit, dès 1910, un premier modèle semi-empirique de l'atome d'hydrogène permettant de trouver les niveaux d'énergie de l'électron dans cet atome et d'en déduire les longueurs d'onde du spectre expérimental. En 1926, Erwin Schrödinger écrivit sa fameuse équation pour l'atome d'hydrogène. Il montra que les solutions de cette équation permettaient de retrouver les valeurs des niveaux d'énergie obtenus par Bohr. L'équation de Schrödinger allait rapidement servir de fondement à la mécanique quantique en étant généralisée à tous les systèmes.

Ce mémoire est divisé en trois parties dont la première est consacrée à l'étude classique de l'atome d'hydrogène en se reposant sur un modèle semi-empirique dit modèle de Bohr. La deuxième partie est destinée à l'étude quantique et la troisième partie constitue la plus importante de notre travail ou dans laquelle nous allons convertir tous nos équations théoriques vues aux parties précédentes à des équations numériques adaptables à des programmes basé sur des algorithmes de la méthode d'Euler.

Finalement je vais terminer ce travail par une petite conclusion qui porte sur tous ce que nous allons le faire au chapitre III.



# **Chapitre I**

## **Etude classique**

**Modèle semi-classique de l'atome d'hydrogène****Théorie de Bohr****Introduction**

Au début du XX<sup>e</sup> siècle, un modèle qui, enfin, commençait à répondre à certaines questions soulevées par la structure et les spectres atomiques a été avancé. En 1913, Niels Bohr a proposé un modèle de structure atomique en prenant comme exemple l'atome d'hydrogène. Son modèle décrivait non seulement la structure de l'atome, mais il expliquait aussi les spectres atomiques et, de surcroît, prédisait correctement l'existence d'un plus grand nombre de raies atomiques. Le modèle de Bohr semblait être tout ce que les physiciens recherchaient. Pourtant, il y avait un problème – le modèle de Bohr dépassait le cadre de la physique classique et s'aventurait dans le nouveau monde de la physique quantique. Par conséquent, de nombreux hommes de science demeuraient sceptiques. Néanmoins, le modèle de Bohr était de loin supérieur à tout modèle antérieur et il a été accepté à titre de modèle semi-classique de l'atome.

Bohr en se reposant sur les lois de l'électromagnétisme, qui stipule que toute particule chargée ayant un mouvement accéléré émette ou perde un rayonnement électromagnétique la conduit à inventer en 1913 ces hypothèses audacieuses : les orbites circulaires des électrons sont stables et leur rayon a une valeur fixe. C'est en émettant ou en absorbant un photon que l'électron peut passer d'une orbite à une autre. En appliquant ces hypothèses à l'atome le plus simple, celui d'hydrogène, ça lui permettra d'expliquer les niveaux d'énergie avec un grand succès, puis encouragé par Rutherford, Bohr publie en 1913 un article en trois parties, intitulé "On the Constitution of Atoms and Molécules" et connu par la suite comme "La Trilogie". C'est la première partie de ce texte qui est commentée dans la suite du présent article.

Après une courte description de l'atome de Rutherford, Bohr souligne les insuffisances de ce modèle en opposition avec le modèle de Thomson, à savoir l'instabilité des électrons. Le modèle de Rutherford ne contient aucune longueur spécifique, il est donc incapable de prédire la taille des atomes, qui sont des paramètres introduits à la main dans la théorie Bohr annonce d'emblée l'essentiel : en renonçant aux lois classiques de l'électrodynamique et en faisant appel à la constante de Planck, on peut expliquer la stabilité de l'atome et, par une simple analyse dimensionnelle, obtenir une taille spécifique de l'atome, en conformité avec des données expérimentales

Dans cette première section de la « Trilogie », Bohr traite la façon dont l'électron est lié au noyau. Il considère un système simple, formé d'un noyau lourd, chargé positivement, et un électron, très léger, dont la vitesse est petite par rapport à celle de la lumière. Ces hypothèses sont raisonnables, le rapport entre la masse de l'électron et celle de l'atome d'hydrogène étant connu à l'époque. On peut donc considérer le noyau pratiquement fixe et appliquer la mécanique newtonienne pour étudier ce système.

La force d'interaction coulombienne entre l'électron et le noyau est inversement proportionnelle au carré de la distance qui les sépare, de manière analogue à la force gravitationnelle exercée par le soleil sur une planète. Le mouvement de l'électron autour du

noyau est analogue au mouvement d'une planète autour du soleil, dont les équations étaient connues depuis deux siècles.

### Spectre de l'atome d'hydrogène

Le modèle de l'atome d'hydrogène de Bohr permettait de bien expliquer les spectres d'émission et d'absorption. Il fournissait, non seulement, une description conceptuelle de ces spectres, mais il prédisait également correctement la longueur d'onde des raies spectrales des spectres d'émission et d'absorption de l'hydrogène. D'ailleurs, le modèle de Bohr expliquait pourquoi les raies d'absorption correspondent aux raies d'émission. Explorons ces notions plus en détails.

Selon le modèle de Bohr, un électron n'émet ou n'absorbe de l'énergie que s'il se déplace entre des niveaux d'énergie. L'énergie qui est émise ou absorbée par un atome se présente sous forme de photons.

La quantité d'énergie qui est émise ou absorbée est égale à la différence d'énergie entre les niveaux énergétiques.

Sous forme d'équation, elle s'exprime :

$$\Delta E = E_i - E_f = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (I - 1)$$

$\Delta E$  : variation de l'énergie s'exprimé en joule ou eV

$E_i$  : énergie initiale s'exprimé en joule ou eV

$E_f$  : énergie finale s'exprimé en joule ou eV

La fréquence ou la longueur d'onde d'un photon est reliée à son énergie.

Sous forme d'équation, elle s'exprime :

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (I - 2)$$

$E$  : L'énergie de photon (en joule ou eV)

$h$  : la constante de Planck  $6.63 \cdot 10^{-34} \text{ js}^{-1}$  ou  $4.14 \cdot 10^{-15} \text{ eV.s}$

$\nu$  : la fréquence s'exprime en hertz (HZ)

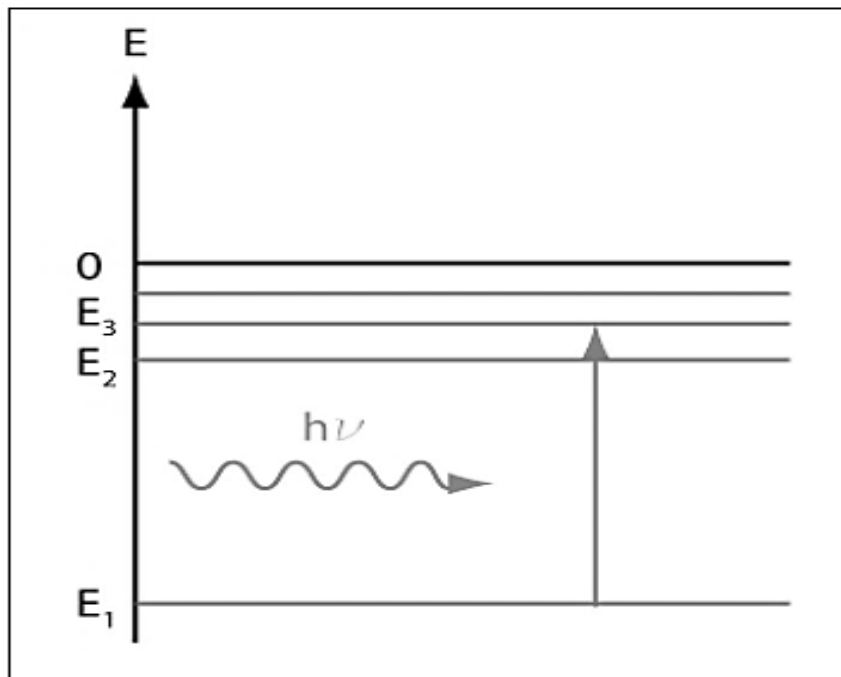
$\lambda$  : la longueur d'onde (en mètre)

$c$  : la vitesse de la lumière  $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$

L'idée de quantification de l'énergie a été introduite en 1900, par le physicien allemand Max Planck. Il l'utilisa pour expliquer le spectre d'émission thermique des corps noirs. En étudiant les radiations émises par un métal chauffé au rouge, il constata que la matière émet de l'énergie d'une façon discontinue, c'est-à-dire par «paquets» appelés quanta d'énergie. Selon Planck, chaque «paquet» ou quantum d'énergie équivaut à  $h\nu$  où  $h$  est une constante de proportionnalité et  $\nu$  est la fréquence de la radiation émise ou absorbée.

**Absorption**

Quand un électron « saute » sur un niveau d'énergie plus élevé (niveau d'énergie finale supérieur niveau d'énergie initiale), il doit absorber de l'énergie. Chacune des transitions possibles nécessite une quantité particulière d'énergie. Les raies sombres d'un spectre d'absorption correspondent aux longueurs d'onde de photon particulières qui sont nécessaires pour qu'un électron passe d'un niveau d'énergie inférieur à un niveau d'énergie plus élevé.

**Figure I-1** : absorption de rayonnement

Un spectre d'absorption (figure s'obtient en interposant sur la trajectoire de la lumière blanche l'élément absorbant. On obtient des raies (ou des bandes) noires sur fond arc-en-ciel

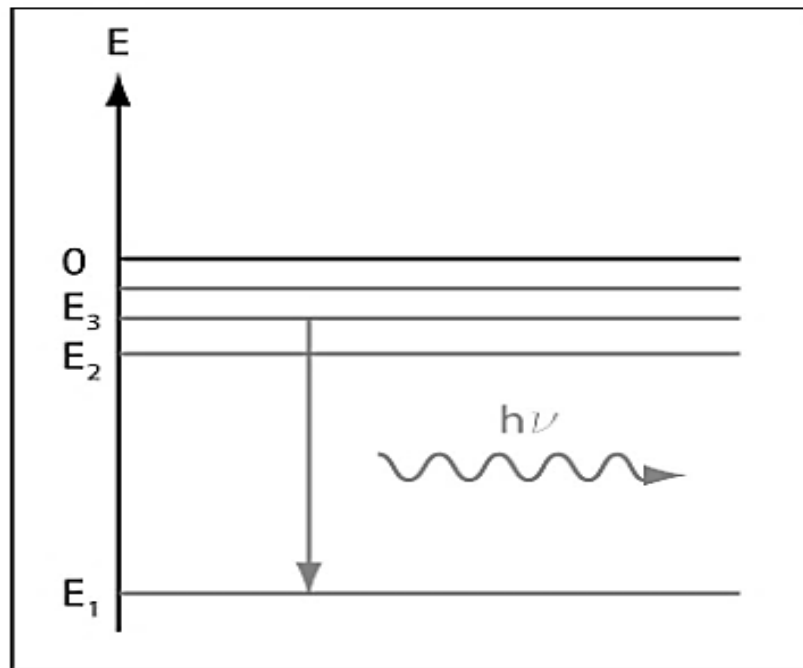
**Figure I-2** : Spectre d'absorption de l'hydrogène, dans le domaine visible.

Le spectre d'absorption correspond aux passages vers les niveaux excités de l'atome d'hydrogène initialement à l'état fondamental.



**Emission**

Quand un électron « tombe » à un niveau d'énergie plus bas, il émet de l'énergie. Chacune des transitions possibles produit l'émission d'une quantité spécifique d'énergie. Les raies observées dans un spectre d'émission correspondent aux longueurs d'onde de photon spécifiques qui sont émises lorsqu'un électron saute d'un niveau d'énergie élevé à un niveau plus faible.

**Figure I-3 :** Emission de rayonnement

Le spectre d'émission de l'atome d'hydrogène est discontinu. On ne peut distinguer que quelques raies colorées auxquelles correspondent des longueurs d'ondes discrètes que l'on peut mesurer à l'aide d'un spectromètre adéquat.

**Figure I-4:** Spectre d'émission de l'hydrogène, dans le domaine visible.

Expérimentalement, le spectre de l'atome d'hydrogène est obtenu en excitant les atomes d'hydrogène par une décharge électrique. Lors du retour des atomes excités vers des états d'énergie inférieure, il y a émission de rayonnement électromagnétique conduisant à un spectre de raies classées en séries. Le spectre d'émission correspond à toutes les radiations émises par des atomes excités retournant à l'état fondamental, soit directement, soit en passant par des niveaux d'énergie intermédiaires à leur niveau initial.

En 1885, Johann Jacob Balmer publia une formule empirique permettant de calculer les longueurs d'onde du spectre de l'atome d'hydrogène. Cette formule, que Johannes Robert

Rydberg généralisa en 1890, peut s'écrire pour la partie visible du spectre de l'atome d'hydrogène :

Formule (empirique de Balmer-Rydberg) :

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (I - 3)$$

$R_H$  est une constante appelée constante de Rydberg. Sa valeur expérimentale vaut :

$$R_H = 1.096776 \cdot 10^{-7} \text{ m}$$

Les premières raies spectrales de l'hydrogène que l'on ait étudiées sont situées dans le domaine visible du spectre, bien qu'elles aillent en se resserrant vers une limite située dans le proche ultraviolet. Cette série de raies s'appelle la "série de Balmer", du nom du physicien suisse ayant découvert la loi qui régit l'espacement en longueurs d'onde des raies. Les premières raies sont numérotées au moyen de l'alphabet grec. La première raie,  $H_a$  a la longueur d'onde 656,2 nm elle est donc rouge ; la seconde,  $H_b$ , est bleue à 486,1 nm, la troisième,  $H_g$  est violette à 434,0 nm, et ainsi de suite. Les dernières sont très rapprochées ; il n'y a plus de raies pour des longueurs d'onde plus courtes que 364,6 nm. Cette longueur d'onde limite est la "limite de la série de Balmer".

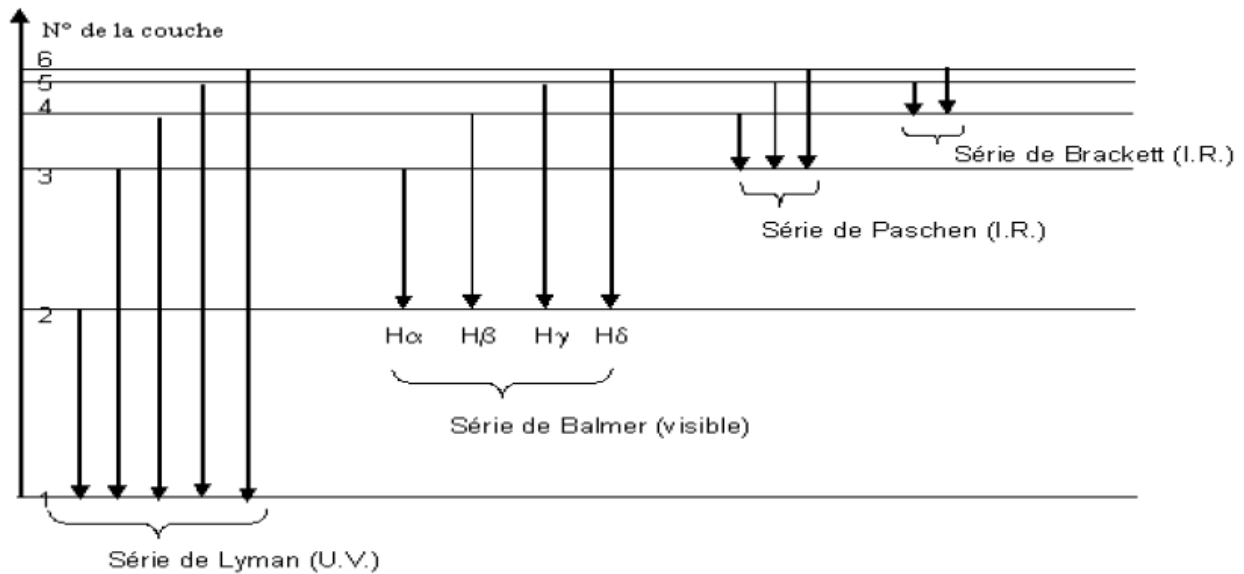
Lorsque le niveau inférieur est le plus bas (niveau fondamental), la série de raies porte le nom de série de Lyman. Cette série de raies est située dans l'ultraviolet.

Au contraire, la série de raies correspondant à un niveau inférieur de rang  $n = 3$  est située dans l'infrarouge : on l'appelle série de Paschen. La série de Balmer est celle qui correspond au niveau inférieur  $n = 2$ .

On trouve aussi 2 série dans les domaines infrarouge dans les niveaux d'énergie respectivement  $n=4$  appelé série de Brackett et série de Pfund correspondant à  $n=5$ .

On peut résumer les série dans le tableau suivant :

Transition	Série	Domaine de longueur d'onde
$n_{\infty} \rightarrow n=1$	Série de Lyman	Ultra-violet
$n_{\infty} \rightarrow n=2$	Série de Balmer	Visible
$n_{\infty} \rightarrow n=3$	Série de Paschen	Infrarouge proche
$n_{\infty} \rightarrow n=4$	Série de Brackett	Infrarouge moyen
$n_{\infty} \rightarrow n=5$	Série de Pfund	Infrarouge lointain



**Figure I-5:** représentation de chaque transition

### Relation semi empirique de Bohr

En se basant sur la formule (I-2) donnée pour le spectre, Bohr utilisa une relation semi empirique qui stipule que lorsque l'électron tourne autour du noyau son rayon prend des valeurs discontinus on dit que r est quantifié et en explicitant ceci d'une manière analytique

$$\oint \vec{p} \cdot \vec{ds} = nh \quad (I - 4)$$

$ds$ : la longueur tel que :  $ds = r d\theta$

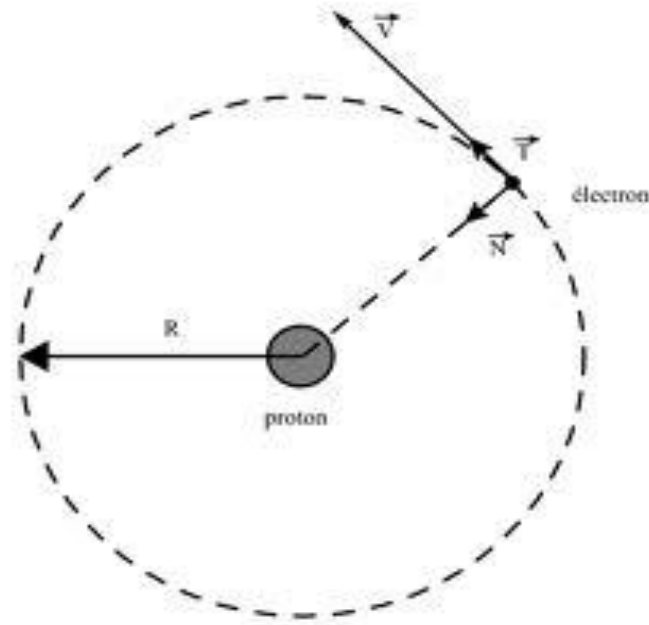
$\vec{p} = m\vec{v}$  : la quantité du mouvement dans la mécanique classique.

$h$ : la constante de Planck, elle est égale à :  $6.626 \cdot 10^{-34} \text{ j.s}^{-1}$

$n$  : nombre entier

### L'étude classique de l'atome d'hydrogène

L'étude classique de l'atome d'hydrogène repose sur l'étude du mouvement de l'électron autour du noyau



**Figure (I-6) : Structure simple de l'atome d'hydrogène**

L'électron tourne autour du noyau il sera soumis qu'à deux forces :

- une force électrostatique  $V$  induit par la charge positive du noyau (proton) : elle représente la force exercée l'une par l'autre (l'électron et le proton) ces forces représentées par la loi de Coulomb

$$f_e = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (\text{I} - 5)$$

$q_1$  : la charge de proton

$q_2$  : la charge de l'électron

$r$  : la distance entre l'électron et le proton

$\frac{1}{4\pi\epsilon_0}$  : est une constante égale à :  $9 \cdot 10^9 \text{ c}^2 / (\text{m} \cdot \text{J})$

- une force normale induit par le mouvement circulaire uniforme de l'électron par ce dernier est appelée aussi la force centrifuge elle est représentée par :

$$f_n = \frac{mv^2}{r} \quad (\text{I} - 6)$$

Ou :

$v$  : la vitesse de l'électron

$r$  : la distance entre les centre de l'électron et le noyau

$m$  : la masse de l'électron ( $9.1 \cdot 10^{-31} \text{kg}$ )

Puisque que le mouvement de l'électron est circulaire uniforme alors sa force tangentielle est nulle  $F_t = 0$  et par conséquent :

$$\gamma_t = \frac{dv}{dt} = 0 \quad (\text{I} - 7)$$

et son accélération normale est :

$$\gamma_n = \frac{v^2}{r} \quad (\text{I} - 8)$$

En égalisant les deux forces vus précédemment on obtient :

$$\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{mv^2}{r} \quad (\text{I} - 9)$$

Cette relation nous permettra d'évaluer le rayon de l'atome :

$$r = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 mv^2} \quad (\text{I} - 10)$$

En utilisant la relation (I - 4) et en remplaçant les expressions de  $d$  et de  $p$  on obtient :

$$mvr \int_0^{2\pi} d\theta = nh$$

Avec :  $h = 2\pi\hbar$  et  $\hbar = 1.0456 \cdot 10^{-34} \text{J}\cdot\text{s}^{-1}$

$$mvr \int_0^{2\pi} d\theta = 2\pi n$$

$$mvr_n = n\hbar$$

$$r_n = \frac{n\hbar}{mv} \quad (\text{I} - 11)$$

En comparant les expressions du rayon  $r$ , (I - 10) et (I - 11), on obtient :

$$\frac{n\hbar}{mv} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 mv^2} \quad (\text{I} - 11a)$$

$$n\hbar = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 v} \quad (\text{I} - 11b)$$

$$v = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 n\hbar} \quad (\text{I} - 12)$$

ce qui nous donne l'expression de r :

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{mq^2} n^2 \quad (\text{I} - 13)$$

Si n=1 :

$$r_1 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{mq^2} \quad (\text{I} - 13a)$$

$$r_1 = 0.53 \text{ \AA}$$

Donc on peut déduire l'expression de rayon en fonction le nombre entier n :

$$r_n = r_1 n^2$$

1<sup>er</sup> conclusion : à partir de les équations (I – 11) et (I – 12) on peut conclue de quantification le rayon r en fonction de n.

- le premier rayon correspond à n=1 est t'appelé le rayon de Bohr talque :  $r_1=0.53\text{\AA}$

on a :  $1\text{\AA} = 10^{-10}\text{m}$

En évaluant l'énergie totale de l'électron c'est une la somme de l'énergie cinétique et l'énergie potentielle :

$$E_t = E_c + E_p \quad (\text{I} - 14)$$

$$= \frac{1}{2}mv^2 - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

$E_c$ : L'énergie cinétique

$E_p$ : L'énergie potentielle, elle est due à l'attraction du noyau elle liée à la position de l'électron.

On remplace l'expression de rayon (I – 11) dans la relation de l'énergie totale :

$$E_t = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{q^2mv}{4\pi\epsilon_0n\hbar} \quad (\text{I} - 14a)$$

Ainsi on remplace l'expression de la vitesse relation (I – 12) dans (I – 14a) :

$$E_t = \frac{1}{2}m \left[ \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0n\hbar} \right]^2 - m \left[ \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0n\hbar} \right]^2$$

$$E_n = -\frac{1}{2}m \left[ \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0n\hbar} \right]^2$$

Lorsque n=1 l'énergie totale doit être :

$$E_1 = -\frac{1}{2}m \left[ \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \right]^2 \quad (\text{I} - 14b)$$

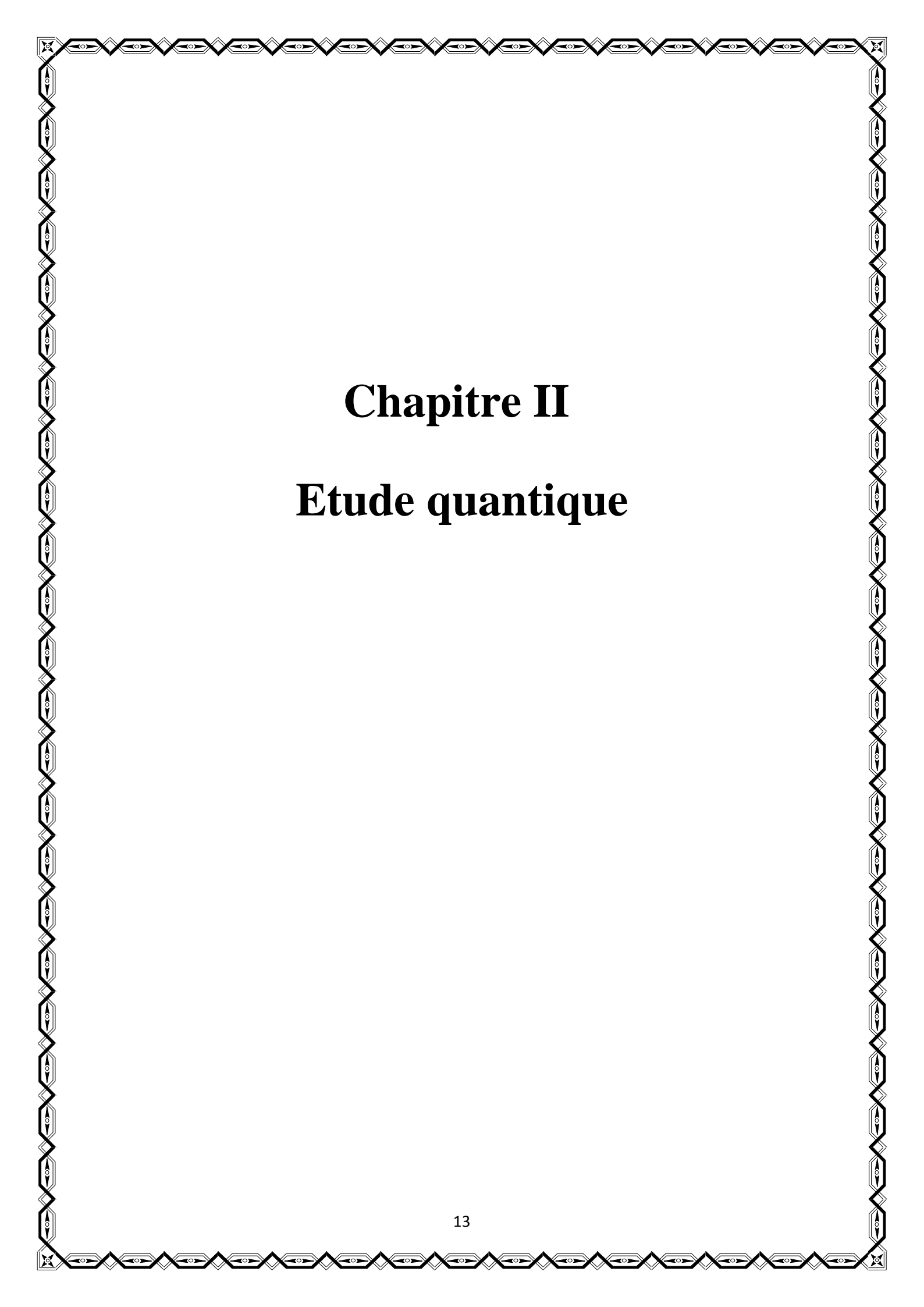
$$E_1 = -13.6 \text{ ev}$$

On écrit l'expression de l'énergie en fonction de premier valeur de l'énergie correspond à n = 1 :

$$E_n = \frac{E_1}{n^2}$$

$$E_n = -\frac{13.6}{n^2} \quad (\text{I} - 15)$$

2<sup>ème</sup> Conclusion : à partir de l'équation de l'énergie totale et les expressions de la vitesse et de rayon on peut conclure l'énergie est quantifiée c.à.d. l'énergie en fonction de nombre entier n. s'exprimer cette valeur en (électronvolt)



# **Chapitre II**

## **Etude quantique**



### Etude quantique de l'atome de l'hydrogène

L'étude quantique de l'atome d'hydrogène repose sur la détermination des valeurs propres de l'hamiltonien  $H$  qui décrit le mouvement relatif du proton et de l'électron dans le repère de centre de masse, considérons un système de deux particule des masse  $m_1$  et  $m_2$ , est sont repérer par  $r_1$  et  $r_2$  respectivement, supposons que le potentiel qui décrire en fonction  $r_1$  et  $r_2$ ,  $v(r_1 - r_2)$ . On a l'expression de Lagrangien sous forme :

$$\mathcal{L}(r_1, r', r_2, r') = T - V = \frac{1}{2} m r_1'^2 + \frac{1}{2} m r_2'^2 - V(r_1 - r_2) \quad (\text{II} - 1)$$

Et le moment conjugué des six coordonnées des deux particules sont les composantes des quantités de mouvements :

$$p_1 = m_1 r_1' \quad (\text{II} - 2a)$$

$$p_2 = m_1 r_2' \quad (\text{II} - 2b)$$

On introduire les trois coordonnées de centre de masse (centre gravité) :

$$r_G = \frac{m_1 r_1 + m_2 r_2}{m_1 + m_2} \quad (\text{II} - 3)$$

Et les trois coordonnées :

$$r = r_1 - r_2 \quad (\text{II} - 4)$$

$$\begin{cases} r_1 = r + r_2 \\ r_2 = r_1 - r \end{cases} \quad (\text{II} - 4a)$$

On peut remplacer la valeur de  $r_1$  dans (II - 3) :

$$r_G = \frac{m_1(r + r_2) + m_2 r_2}{m_1 + m_2} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} r + r_2$$

$$r_2 = r_G - \frac{m_1}{m_1 + m_2} r \quad (\text{II} - 5)$$

Et si on remplace la valeur de  $r_2$  dans (II - 3) :

$$r_1 = r_G + \frac{m_2}{m_1 + m_2} r \quad (\text{II} - 6)$$

Maintenant on peut écrivons le Lagrangien avec des nouveaux variable à partir de remplacé les expressions (II - 5) et (II - 6) dans (II - 1) :

$$\mathcal{L}(r_G, r_G', r, r') = \frac{1}{2} \left( r_G' + \frac{m_2}{m_1 + m_2} r' \right)^2 + \frac{1}{2} m_2 \left( r_G' - \frac{m_1}{m_1 + m_2} r' \right)^2 - V(r)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} m_1 \left[ r_G'^2 + \frac{2r_G' r'_2 m_2}{m_1 + m_2} + \frac{(m_2 r'_2)^2}{(m_1 + m_2)^2} \right]^2 + \frac{1}{2} m_2 \left[ r_G' - \frac{2r_G' r'_1 m_1}{(m_1 + m_2)^2} + \frac{(m_1 r'_1)^2}{(m_1 + m_2)^2} \right]^2 - V(r) \\
&= \frac{1}{2} m_1 r_G'^2 + \frac{1}{2} m_2 r_G'^2 + \frac{1}{2} r'^2 \left[ \frac{m_1 m_2^2}{(m_1 + m_2)^2} + \frac{m_1^2 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \right] - V(r) \\
&= \frac{1}{2} r_G'^2 M + \frac{1}{2} r'^2 \left[ m_2 \frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} + m_1 \frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \right] - V(r)
\end{aligned}$$

Tel que :  $M = m_1 + m_2$  :

Et on a la masse réduit  $\mu$  sous forme :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\mu} &= \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \\
\mu &= \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}
\end{aligned} \tag{II - 7}$$

L'équation devient :

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(r_G, r_G', r, r') &= \frac{1}{2} M r_G'^2 + \frac{1}{2} r'^2 \left[ \frac{m_2}{(m_1 + m_2)} \mu + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mu \right] - V(r) \\
\mathcal{L}(r_G, r_G', r, r') &= \frac{1}{2} M r_G'^2 + \frac{1}{2} \mu r'^2 - V(r)
\end{aligned} \tag{II - 8}$$

Les moments conjuguée des variable  $r_G$  et  $r$  s'obtient par la simplification de (II - 8) :

Pouvons simplifie le premier terme, à partir (II - 3) :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} M r_G'^2 &= \frac{1}{2} (m_1 + m_2) \left( \frac{m_1 r'_1 + m_2 r'_2}{m_1 + m_2} \right)^2 \\
\frac{1}{2} M r_G'^2 &= \frac{1}{2} \frac{(m_1 r'_1 + m_2 r'_2)^2}{M}
\end{aligned}$$

Et à partir (II - 2) :

$$\frac{1}{2} M r_G'^2 = \frac{1}{2} \frac{(P_1 + P_2)^2}{M}$$

Et  $P_G = P_1 + P_2$ , donc la relation devient :

$$\frac{1}{2} M r_G'^2 = \frac{1}{2M} P_G^2$$

Ou  $P_G$  est l'impulsion totale du système.

Maintenant on peut simplifier le deuxième terme on a :

$$P = \mu r' = \left( \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \right) (r'_1 - r'_2)$$

$$P = \frac{(m_2 m_1 r'_1 - m_1 m_2 r'_2)}{(m_1 + m_2)}$$

Où  $P$  : est appelée l'impulsion relative des deux particules :

On divise la relation sur  $\mu$  :

$$\frac{P}{\mu} = r' = \frac{m_2 P_1 - m_1 P_2}{m_1 m_2}$$

On remplace  $r'$  dans la deuxième terme :

$$\frac{1}{2} \mu r'^2 = \frac{1}{2} \mu \left( \frac{P}{\mu} \right)^2$$

$$\frac{1}{2} \mu r'^2 = \frac{1}{2\mu} P^2$$

On peut exprimer la fonction de L'Hamilton du système en fonction des nouvelles variable dynamique que nous venons d'introduire :

$$\mathcal{H}(r_G, P_G, r, P) = \frac{P_G^2}{2M} + \frac{P^2}{2\mu} + V(r) \quad (\text{II} - 9)$$

On déduit immédiatement les équations du mouvement :

$$P'_G = 0 \quad \text{Et} \quad P'_G = -\nabla V(r)$$

Comme le centre de masse animé d'un mouvement rectiligne uniforme par rapport au repère choisi initialement, le repère où ils repos ( $P_G = 0$ ) est aussi repère d'inertie, dans ce repère de masse, le premier terme de cette équation est nul, la fonction de Hamilton, c'est-à-dire l'énergie totale de système réduit :

$$\mathcal{H}(r, p) = \frac{p^2}{2\mu} + V(r) \quad (\text{II} - 10)$$

Où la premier terme représente l'énergie cinétique et le deuxième le potentiel du système :

Si on remplace l'expression de potentiel la fonction de l'Hamilton écrit sous la forme suivante :

$$\mathcal{H}(r, p) = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r} \quad (\text{II} - 11)$$

Talque  $\mu$  : la masse réduit du système très voisin de masse l'électron :

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx \left(1 - \frac{m_e}{m_p}\right)$$

et en représentation aux valeur propre  $\{|r\rangle\}$  de l'Hamiltonien  $H$  s'écrit :

$$H\varphi = E\varphi \quad (\text{II} - 12)$$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{e^2}{r} \right] \varphi(r) = E\varphi(r) \quad (\text{II} - 13)$$

On peut représenter la fonction  $\varphi(r)$  sous la forme suivant car le potentiel  $-\frac{e^2}{r}$  comme un potentiel centrale :

$$\varphi(r) = \frac{1}{r} u_{k,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (\text{II} - 14)$$

$u_{k,l}(r)$  est donnée par l'équation radiale :

$$\mu = rR(r) \quad (\text{II} - 15)$$

c.à.d. l'équation doit être devient sous forme :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} \right] u_{k,l}(r) = E_{k,l} u_{k,l}(r) \quad (\text{II} - 16)$$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} - E_{k,l} \right] u_{k,l}(r) = 0 \quad (\text{II} - 17)$$

On adjoint à cette équation la condition :

$$u_{k,l}(0) = 0 \quad (\text{II} - 18)$$

Nous pouvons montrons que le spectre de l'hamiltonien  $H$  constitue deux partie, la premier partie est une partie discrète caractérisé par les valeurs propres sont négative, et une partie continu est par contre la première partie elle caractérisé par valeurs propre positive,

Considérons en effet la figure suivant (II-1) ou représenté le potentiel effectif pour une valeur donnée de  $l$ , la figure fait pour  $l \neq 0$  mais le raisonnement demeurent valable pour  $l=0$

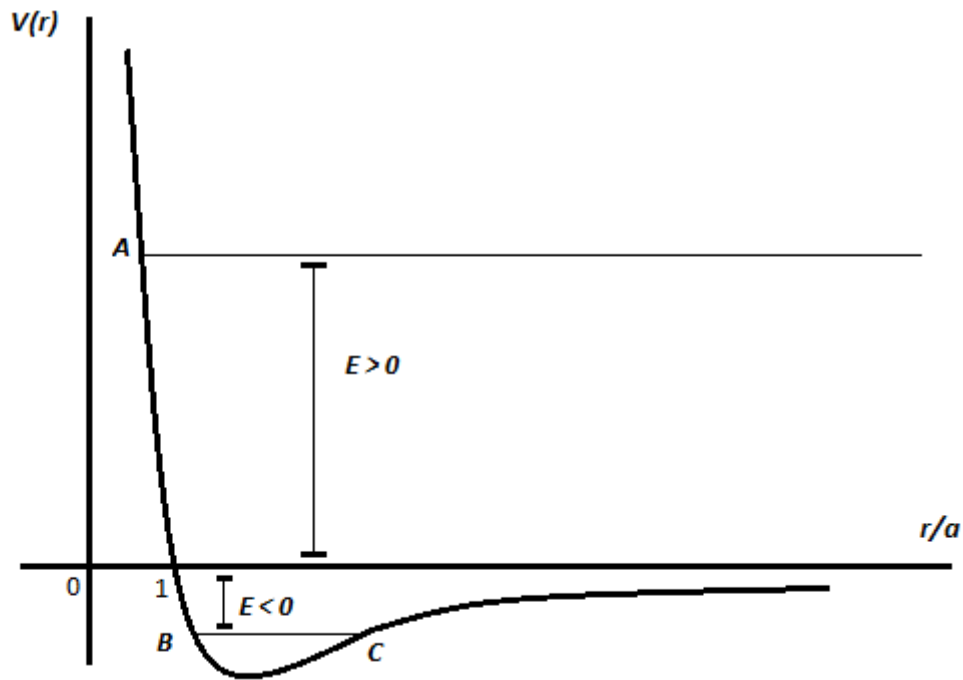


Figure (II-2) : le potentiel effectif pour une valeur donnée de  $l$

Cette figure fait une bon description les deux partie :

Pour la valeur négative de l'énergie le mouvement classique est limité à l'intervalle BC est une mouvement borné, nous allons voir que loin que l'équation(II – 16) n'a de solution acceptable que pour certains valeur discrets de E, le spectre  $H$  est donc discret et les fonction propre sont normalisable par contre les valeur propre de l'énergie positive ( $E > 0$ ) le mouvement classique n'est pas borné par conséquent le spectre Hamiltonien est continu et les fonction propre correspondantes n'étant pas normalisable.

Pour simplifier les raisonnements nous allons prendre méthode de changement de variable, on prendre les formules de premier rayon de l'atome d'hydrogène et l'énergie correspondant aux premiers niveaux énergétique on peut proposer un nouveaux terme  $\rho$  et  $\lambda_{k,l}$  talque :

$$\rho = \frac{r}{r_0} \quad (\text{II} - 19)$$

$$\rho r_0 = r \quad (\text{II} - 19a)$$

$$\lambda = \sqrt{\frac{-E_{k,l}}{E_1}} \quad (\text{II} - 20)$$

La quantité de l'énergie sous le radical est positive puisque nous cherchons les états liée. Maintenant nous pouvons remplaçons les expressions de rayon de Bohr  $r_0$  et l'énergie  $E_1$  sous les formule suivants :

$$E_1 = -\frac{1}{2} m \left[ \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \right]^2 \quad (\text{II} - 20 - a)$$

$$r_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{mq^2} \quad (\text{II} - 20 - b)$$

Si on pose  $e^2 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0}$  les deux formules deviennent :

$$a_0 = r_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad (\text{II} - 21)$$

$$E_1 = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \quad (\text{II} - 22)$$

On peut remplacements (II - 19a) dans (II - 17) :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu\rho^2 r_0^2} - \frac{e^2}{\rho r_0} - E_{k,l} \right] u_{k,l}(\rho) = 0 \quad (\text{II} - 22 - a)$$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu \left(\frac{\hbar^4}{\mu^2 e^4}\right)} \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu\rho^2 \left(\frac{\hbar^4}{\mu^2 e^4}\right)} - \frac{e^2}{\rho \left(\frac{\hbar^2}{\mu e^2}\right)} - E_{k,l} \right] u_{k,l}(\rho) = 0 \quad (\text{II} - 22 - b)$$

$$\left[ -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)\mu e^4}{2\hbar^2\rho^2} - \frac{\mu e^4}{\rho\hbar^2} - E_{k,l} \right] u_{k,l}(\rho) = 0 \quad (\text{II} - 22c)$$

On peut multiplier la relation par  $\left(-\frac{2\hbar^2}{\mu e^4}\right)$  la relation devient :

$$\left[ \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \lambda_{k,l}^2 \right] u_{k,l} = 0 \quad (\text{II} - 23)$$

Talque :  $\lambda_{k,l}^2 = \frac{-E_{k,l}}{E_1}$  et  $E_1$  s'exprime sous la relation (II - 22) .

### Résolution de l'équation radiale :

Pour résoudre l'équation nous pouvons faire le développement de la fonction  $u_{k,l}(\rho)$  en série entière. Avant ça on peut discuter et chercher où la fonction porte une raison physique, le comportement asymptotique de  $u_{k,l}(\rho)$  lorsque  $\rho$  tend vers l'infini les deux termes  $\left(\frac{1}{\rho}\right)$  et  $\left(\frac{1}{\rho^2}\right)$  peuvent être négligés devant les autres termes. L'équation elle va se réduire sous la forme suivante :

$$\left[ \frac{d^2}{d\rho^2} - \lambda_{k,l}^2 \right] u_{k,l} = 0 \quad (\text{II} - 24)$$

la solution de cette équation est équivalent de  $u_{k,l}$  égale  $e^{\pm\rho\lambda_{k,l}}$  multiplie par un puissance de  $\rho$  mais le problème si en peut choisir le terme positive dans l'exponentiel la fonction doit être borné vers l'infini et il n' pas porte n'importe quelle sens physique donc l'équation qui vérifie

$$u_{k,l}(\rho) = y_{k,l}(\rho)e^{-\rho\lambda_{k,l}} \quad (\text{II} - 25)$$

Et on peut remplacer la formule dans l'équation (II - 23) :

$$\left[ \frac{d^2}{d\rho^2} - 2\lambda_{k,l} \frac{d}{d\rho} + \left( \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) \right] y_{k,l}(\rho) = 0 \quad (\text{II} - 26)$$

il faut ajouter à cette équation la condition  $u_{k,l} = 0$  ,c'est-à-dire :

$$y_{k,l} = 0 \quad (\text{II} - 27)$$

Nous pouvons recherche des solutions sous forme série entier :

Considérons l'expression de  $y_{k,l}(\rho)$  sous forme :

$$y_{k,l} = \rho^s \sum_{q=0}^{\infty} c_q \rho^q \quad (\text{II} - 28)$$

Est par définition  $c_0$  le premier coefficient non nul ( $c_0 \neq 0$ ) de ce développement cette condition implique que  $s$  est strictement positif.

Ont calculons les dérivée :  $\frac{d}{d\rho} y_{k,l}$  et  $\frac{d^2}{d\rho^2} y_{k,l}$  à partir de leur formule :

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\rho} y_{k,l}(\rho) &= \frac{d}{d\rho} \left[ \rho^s \sum_{q=0}^{\infty} c_q \rho^q \right] \\ &= \sum_{q=0}^{\infty} \left[ \frac{d}{d\rho} \rho^s (c_q \rho^q) + \rho^s \frac{d}{d\rho} (c_q \rho^q) \right] \\ &= \sum_{q=0}^{\infty} [s\rho^{s-1} c_q \rho^q + c_q q \rho^s \rho^{q-1}] \end{aligned}$$

$$= \sum_{q=0}^{\infty} [sq^{s+q-1}c_q + qc_q\rho^{s+q-1}]$$

On peut éjecter le facteur  $(c_q q^{s+q-1})$  :

$$\frac{d}{d\rho} y_{k,l}(\rho) = \sum_{q=0}^{\infty} (q+s)c_q \rho^{q+s-1} \quad (\text{II} - 29)$$

Calculons le terme  $\frac{d^2}{d\rho^2} y_{k,l}$  :

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{d\rho^2} y_{k,l}(\rho) &= \frac{d}{d\rho} \left[ \sum_{q=0}^{\infty} (q+s)c_q \rho^{q+s-1} \right] \\ &= \sum_{q=0}^{\infty} \left( \frac{d}{d\rho} (s+q)\rho^{s+q-1} + \frac{d}{d\rho} \rho^{s+q-1} (s+q)c_q \right) \\ &= \sum_{q=0}^{\infty} \left[ \frac{d}{d\rho} (s+q)c_q \rho^{s+q-1} + \frac{d}{d\rho} \rho^{s+q-1} (s+q)c_q \right] \end{aligned}$$

On a :  $\frac{d}{d\rho} (s+q)c_q \rho^{s+q-1} = 0$  car elle ne dépend pas de  $\rho$  :

$$\frac{d^2}{d\rho^2} y_{k,l}(\rho) = \sum_{q=0}^{\infty} (s+q)(s+q-1)c_q \rho^{s+q-2}$$

Pour obtenir le premier membre  $c_0$  on peut remplacer l'expression de  $y_{k,l}$  dans l'équation (II - 26) :

$$\begin{aligned} &= \sum_{q=0}^{\infty} \left[ (q+s)(q+s-1)c_q \rho^{s+q-2} - 2\lambda(q+s)c_q \rho^{s+q-1} + \left( \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) \rho^s c_q \rho^q \right] = 0 \\ &= \sum_{q=0}^{\infty} \left[ (q+s)(q+s-1)c_q \rho^{q+s-2} - 2\lambda(q+s)c_q \rho^{q+s-1} + (2\rho^{-1} - l(l+1)\rho^{-2})\rho^{s+q} c_q \right] \\ &= \sum_{q=0}^{\infty} \left[ (q+s)(q+s-1)c_q \rho^{q+s-2} - 2\lambda(q+s)c_q \rho^{q+s-1} + 2\rho^{q+s-1} c_q - l(l+1)\rho^{q+s-2} c_q \right] \\ &= \sum_{q=0}^{\infty} \left[ \rho^{q+s-2} c_q \left( (q+s)(q+s-1) - l(l+1)c_q \right) + \rho^{q+s-1} [2c_q - 2\lambda c_q (q+s)] \right] = 0 \end{aligned}$$



Pour cette équation égale zéro implique que les deux termes est nul :

$$\begin{cases} \rho^{q+s-2} c_q [(q+s)(q+s-1) - l(l+1)] = 0 \\ \text{et} \\ \rho^{q+s-1} [2c_q - 2\lambda c_q (q+s)] = 0 \end{cases}$$

Pour la valeur de  $q=0$  l'équation va réduite sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \rho^{s-2} c_0 [s(s-1) - l(l+1)] = 0 \\ \text{et} \\ \rho^{s-1} c_0 (2 - 2\lambda s) = 0 \end{cases}$$

et on a :

$\rho^{s-2}$  et  $\rho^{s-1}$  est différent de zéro, et  $c_0 \neq 0$

$$\begin{cases} s(s-1) - l(l+1) = 0 \\ \text{et} \\ 1 - \lambda s = 0 \end{cases} \quad (\text{II} - 30)$$

Pour la première équation va prendre deux valeurs possibles :

$$\begin{cases} s = l + 1 \\ s = -l \end{cases} \quad (\text{II} - 31)$$

Nous avons plus haut que seul le comportement à l'origine  $s=l+1$  peut conduire à solution acceptable (condition de  $y_{k,l} = 0$ ). en égalent ensuite à zéro le coefficient de terme général en  $\rho^{q+s-2}$ , on obtient avec ( $s=l+1$ ) la relation de récurrence suivante :

$$q(q+2l+1)c_q = 2[(q+l)\lambda_{k,l} - 1]c_{q-1} \quad (\text{II} - 32)$$

Cette équation permet, si l'on se fixe  $c_0$ , de calculer  $c_1$ , puis  $c_2$ , et ainsi de proche en proche calculer tous les coefficient  $c_q$ , comme  $\frac{c_q}{c_{q-1}}$  tend vers zéro quand  $q$  tend vers l'infini, la série correspondante est donc convergence quel que soit  $\rho$ , nous avons ainsi déterminé, pour la valeur quelconque de  $\lambda_{k,l}$ , la solution de l'équation différentiel satisfait à la condition de  $y_{k,l}(\rho) = 0$ .

### Quantification de l'énergie. Fonction radiale :

Nous allons imposer à la solution précédente d'avoir un comportement asymptotique acceptable physiquement. Ceci va entraîner une quantification des valeurs possible  $\lambda_{k,l}$ .

Si le crochet du deuxième membre de (II - 32) ne s'annule pour aucun entier  $q$  le développement la série entier de l'expression de  $y_{k,l}(\rho)$  est une véritable série infini, pour laquelle : si  $q \rightarrow \infty$  on a :

$$\frac{c_q}{c_{q-1}} \approx \frac{2\lambda_{k,l}}{q} \quad (\text{II} - 33)$$

Or le développement de série entier de la fonction  $e^{2\rho\lambda_{k,l}}$  s'écrit :

$$\begin{cases} e^{2\rho\lambda_{k,l}} = \sum_{q=0}^{\infty} d_q \rho^q \\ d_q = \frac{(2\lambda_{k,l})^q}{q!} \end{cases} \quad (\text{II} - 34)$$

Ce qui entraîne :

$$\frac{d_q}{d_{q-1}} = \frac{2\lambda_{k,l}}{q} \quad (\text{II} - 35)$$

En rapprochant cette équation (II – 33) de (II – 35), on comprend que la série que la série étudie a pour les grandes valeur de  $\rho$ , un comportement dominé par  $e^{2\rho\lambda_{k,l}}$ , la fonction  $u_{k,l}(\rho) = e^{-\rho\lambda_{k,l}} y_{k,l}(\rho)$  est alors en  $e^{+\rho\lambda_{k,l}}$ , ce qui n'est pas acceptable physiquement

Il faut par conséquent rejeter tous les cas où le développement de (II – 28) est une série infinie, et les valeurs possible de  $\lambda_{k,l}$  sont celles pour lesquelles  $y_{k,l}$  (II – 28) ne comporte qu'un nombre fini de termes, c'est-à-dire pour lesquelles  $y_{k,l}$  se réduit à un polynôme : la fonction  $u_k$  correspondante est alors acceptable physiquement, puisque son comportement asymptotique est dominé par  $e^{-\rho\lambda_{k,l}}$ . Il suffit donc qu'il existe un entier  $k$  de tel que le crochet du deuxième membre de (II – 32) s'annule pour  $k = q$  : le coefficient  $c_k$  correspondant est alors nul, et avec lui tous les coefficient de rang supérieur, puisque la nullité de  $c_k$  entraîne celle  $c_{k+1}$ , et ainsi de suite. nous repérons les valeur correspondante de  $\lambda_{k,l}$ , pour  $l$  fixé, précisément par entier  $k$  (remarquons que  $k$  est supérieur ou égale 1, puisque  $c_0$  ne s'annule jamais), on alors d'après le (II – 32) :

$$\lambda_{k,l} = \frac{1}{k+l} \quad (\text{II} - 36)$$

Et on a :

$$\lambda_{k,l} = \sqrt{\frac{-E_{k,l}}{E_1}}$$

$$\lambda_{k,l}^2 = \frac{1}{(k+l)^2} = \frac{-E_{k,l}}{E_1}$$

Pour  $l$  donnée, les seules énergies négatives possible pour les entier de  $k$  sont :

$$E_{k,l} = \frac{-E_1}{(k+l)^2} \quad (\text{II} - 37)$$

Nous pouvons discuter ce résultat on a  $y_{k,l}$  est un polynôme, dont le terme de plus bas degré est en  $\rho^{l+1}$  et celui de plus haut degré en  $\rho^{k+1}$  ; ses différents coefficients peuvent être calculés, en fonction de  $c_0$ , en résolvant la relation de récurrence (II – 32) qui s'écrit, compte tenu de (II – 36):

$$c_q = -\frac{2(k-q)}{q(q+2l+1)(k+l)} c_{q-1} \quad (\text{II} - 38)$$

On peut trouver :

$$c_q = (-1)^q \left(\frac{2}{k+l}\right)^q \frac{(k-1)!}{(k-q-1)!} \frac{(2l+1)!}{q!(q+2l+1)} \quad (\text{II} - 39)$$

$u_{k,l}(\rho)$  est ensuite donnée par la formule (II – 25) et  $c_0$  déterminé à un facteur de phase par un condition de normalisation il faut bien sûr revenir à la variable auparavant à la variable en utilisant (II – 19), on obtient finalement la véritable fonction radiale  $R_{k,l}(r)$ , en divisant  $u_{k,l}(r)$  par  $r$  les trois formes suivantes données de ces fonctions radiales :

$$R_{k=1,l=0}(\rho) = 2(a_0)^{-3/2} e^{-r/a_0} \quad (\text{II} - 40a)$$

$$R_{k=2,l=0}(\rho) = 2(a_0)^{-3/2} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0} \quad (\text{II} - 40b)$$

$$R_{k=1,l=1}(\rho) = 2(a_0)^{-3/2} \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \quad (\text{II} - 40c)$$

### Discussion des résultats

Montrons à partir de formules (II – 37) et (II – 40) que pour l'atome d'hydrogène l'énergie de d'ionisation  $E_1$  définie en (II – 22) et le rayon de Bohr (II – 21) jouent un rôle important, les deux quantités donnent un ordre de grandeur de l'énergie et l'extension spatiale des fonctions d'onde associées de l'état liés de l'atome d'hydrogène.

On peut écrire les deux quantités sous la forme suivante :

$$\begin{cases} E_1 = \frac{1}{2} \alpha^2 \mu c^2 \\ a_0 = \frac{1}{2} \lambda_c \end{cases} \quad (\text{II} - 41 - a - b)$$

Ou  $\alpha$  : est la constante de structure fine, qui une constante sans dimension jouant un rôle très important en physique,

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad (\text{II} - 42)$$

et ou  $\lambda_c$  est défini par :

$$\lambda_c = \frac{\hbar}{\mu c} \quad (\text{II} - 43)$$

Comme  $\mu$  est peu différent de masse  $m_e$ , masse au repos de l'électron, pratiquement  $\lambda_c$  est égale à la longueur d'onde de Compton de l'électron, qui donné par :

$$\frac{\hbar}{m_e} \approx 3.8 * 10^{-3} \text{A}^\circ$$

La premier quantité indique que  $a_0$  est de l'ordre de cent fois la longueur d'onde de Compton de l'électron , quand l'égalité de deuxième quantité elle montre que l'ordre de grandeur de l'énergie de liaison de l'électron est compris entre  $10^{-4} \mu c^2$  et  $10^{-5} \mu c^2$  , ou  $\mu c^2$  est pratiquement égal à l'énergie au repos de l'électron :

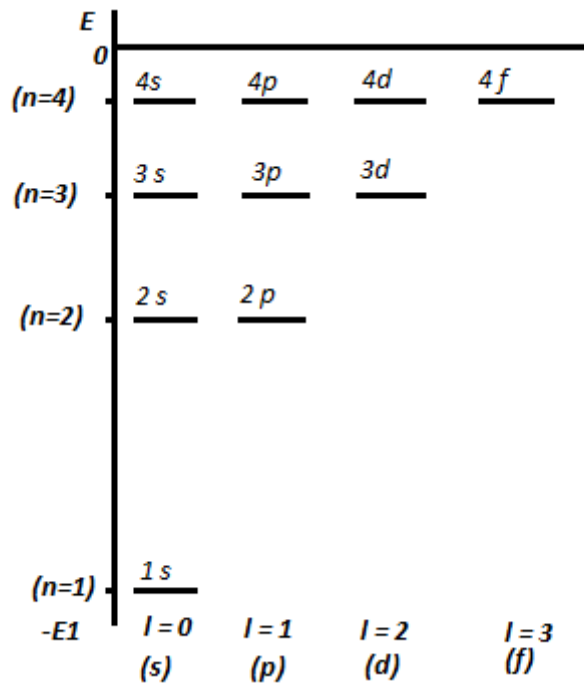
$$m_e c^2 \approx 0.51 * 10^6 \text{ eV}$$

Il s'ensuit que :

$$E_1 \ll m_e c^2$$

### Niveaux d'énergie :

Pour  $l$  est fixé, il existe une infinité de valeurs possible pour l'énergie, correspondant à  $k=1,2,3,\dots$ . Chacune d'elles est dégénérée au moins  $(2l + 1)$  fois, il s'agit de dégénérescence essentielle liée au fait que l'équation radiale ne dépend que du nombre quantique  $l$  de non de  $m$ , en plus ici mais il existe une dégénérescence accidentelles la formule  $(\Gamma - 37)$  indique que deux valeurs propres  $E_{k,l}$  et  $E_{k',l'}$  correspondants à des équations radiales différents ( $l \neq l'$ ) sont égales si  $k + l = k' + l'$ . La figure suivante :



**Figure (II-3) :** Représente chaque valeur de  $l$  correspondante de niveau d'énergie fixé

Dans le cas particulière de l'atome l'hydrogène,  $E_{k,l}$  ne dépend pas de  $k$  et  $l$  séparément, mais seulement de leur somme. Posons :

$$n = k + l \tag{II - 44}$$

Les différents niveaux d'énergie sont repérer par l'entier  $n$  (supérieur ou égale à 1), la formule (II-37) :

$$E_n = \frac{-E_{k,l}}{(k + l)^2} \tag{II - 45}$$

Lorsque  $n = k + l$  l'équation devient :

$$E_n = -\frac{E_{k,l}}{n^2} \tag{II - 46}$$

D'après (II - 44) , il est équivalent de ce donner  $k$  et  $l$  , pour repérer les fonction propres. Suivant l'usage, nous utilisons à partir de ces nombre  $n$  et  $l$  , ou  $n$  est t'appelée le quantique principal ; une valeur  $n$  caractérisé ce que l'on appelle une couche électronique. Comme  $k$  forcément un entier supérieur ou égale 1, il n'y a qu'un nombre fini de valeur de  $l$  associées à une même valeur de  $n$  d'après cette relation si  $n$  est fixé , on peut avoir

$$l = 0,1,2 \dots \dots \dots n - 1 \tag{II - 47}$$

On dit que la couche caractérisée par  $n$  comporte  $n$  sous couche correspondante chacune à l'une(II - 47).enfin chaque sous couche comporte  $(2l + 1)$  état distincts, associés aux  $(2l+1)$  valeur possible de  $m$  si  $l$  fixé.

La dégénérescence totale du niveau d'énergie  $E_n$  est donc :

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = \frac{2(n-1)n}{2} + n = n^2 \quad (\text{II} - 48)$$

### Notation spectroscopie :

La notation spectroscopique consiste à désigner une sous couche par le nombre  $n$  correspondante suivi de la lettre qui caractérise la valeur de  $l$  aussi le niveau fondamental,

Ne peut utiliser classification alphabétique sur les couches électroniques  $l$  par exemple :

Si on prend :  $l = 0 \leftrightarrow s$ ,  $l = 1 \leftrightarrow p$  ..... chaque valeur de  $l$  correspondants à une notation alphabétique, donc si l'on que appelle quelque fois la « couche k » on peut comprendre que elle est composé par une seule couche électronique correspondante  $l=0$  car la couche k est impliqué que le nombre  $n=1$ , est  $l$  définie par la relation (II - 47) donc on peut noter « la couche k » de 1s, et si on trouve la nom de « couche L » ou bien la premier niveaux excité correspondante à  $n=2$ , on peut trouver de valeur de  $l$ ,  $l=0$  et  $l=1$ ; porte sous la notation alphabétique 2s et 2p et le deuxième état excité correspondante à  $n=3$  (couche M) construire à 3 sous-couche électronique 3s, 3p, 3d on peut noter que les lettres majuscule associé quelquefois aux couches successives d'emblée l'ordre alphabétique, à partir de lettre K).

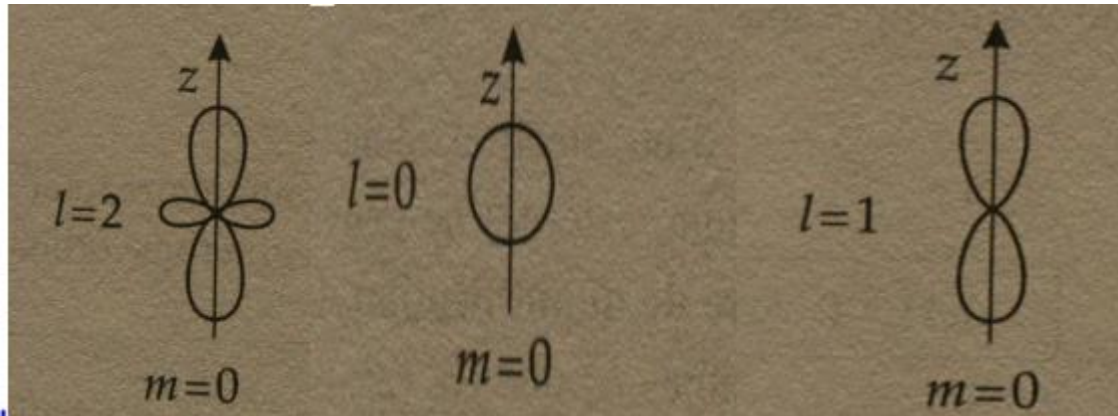
### Fonctions d'onde :

Les fonctions d'onde associées au état propre dépend de  $L_z$  qui a représenter le moment cinétique orbitale et son carré  $L^2$ , et l'Hamiltonien  $H$  de l'atome d'hydrogène sont généralement repérer non pas par les trois nombre quantique  $k, l, m$  mais par  $n, l, m$ , les opérateur constituants un E.C.O.C la donnée des trois  $n, l$  et  $m$  qui équivaut de à celle des valeur propre de  $H$  et  $L^2$ , et  $L_z$  respectivement, spécifie sans ambiguïté la fonction propre de  $\varphi_{n,l,m}(r)$  correspondante.

### A-Dépendance angulaire :

Comme n'importe quel potentiel central, les fonctions  $\varphi_{n,l,m}(r)$  sont constituées des produits d'une fonction radiale par harmonique sphérique  $Y_l^m(\theta, \varphi)$  qui est représenter la fonction propre de  $L^2$ , pour visualiser leur dépendance angulaire on peut porter, sur l'axe caractérisé par les angle  $\theta$  et  $\varphi$ , une longueur propositionnelle à  $|\varphi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)|^2$  pour  $l$  fixé quelconque, c'est-à-dire propositionnelle à  $|Y_l^m(\rho)|^2$ . La surface que l'on obtient ainsi de révolution autour de l'axe Oz, car on sait que  $Y_l^m(\theta, \varphi)$  ne dépend de  $\varphi$  que par l'intermédiaire du facteur  $e^{im\varphi}$  et que par conséquent  $|Y_l^m(\theta, \varphi)|^2$  est indépendante de  $\varphi$ , il suffit donc de représenter sa section par un plan contenant Oz, c'est ce que fait la figure suivant :





Figure(II-3) :dépendance angulaire correspondante des valeurs bien définie de  $l$

La dépendance angulaire de chaque fonction d'onde stationnaire de l'atome d'hydrogène, correspondante à des valeur de  $l$  et  $m$  bien définies, dans chaque direction d'angle polaire  $\theta$  et  $\varphi$  on porte  $|Y_l^m(\theta, \varphi)|^2$  on obtient ainsi une surface de révolution autour de l'axe (Oz), pour  $l = 0$  et  $m = 0$  on remarque que la surface est une sphère et elle devient plus compliqué pour les différent valeur de  $l$  ( $l = 1$  et  $l = 2$ ),

### B- dépendance radiale :

Les fonctions radiales  $R_{n,l}(r)$ , dont chacune est caractéristique d'une sous-couche, peuvent être calculées, on prendra cependant garde de changement de notation introduit par la formule (II - 44), le comportement de  $R_{n,l}(r)$  au voisinage  $r = 0$  est en  $r^l$  par conséquence, seul les états appartenant aux sous-couche  $s$  ( $l = 0$ ) donnent la probabilité de présence non-nulle à l'origine. Plus  $l$  est grand, plus étendue la région entourant le proton dans laquelle la probabilité de la présence de l'électron est négligeable. ce fait certain nombre de conséquences physique, notamment le phénomène de capture des électrons par certains noyaux, et dans la structure hyperfine des raies.

on peut retrouver enfin la formule (II - 11 - b) qui donne les rayons des orbites successives de Bohr. Considérons en effet les divers états pour les quels  $l = n - 1$ . Donnons-un angle solide infinitésimal  $d\Omega$  autour d'une direction fixe d'angle polaires  $\theta$ , et calculons la variation avec  $r$  de la densité de probabilité dans cet angle solide, pour chacune des états précédents. D'une façon générale, la probabilité de présence de l'électron dans l'élément de volume  $d^3r = r^2 dr d\Omega$  situé au point  $(r, \theta, \varphi)$  est donnée par :

$$d^3\mathcal{P}_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = |\varphi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 dr d\Omega \quad (\text{II} - 49)$$

$$= |R_{n,l}(r)|^2 r^2 dr |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \quad (\text{II} - 49a)$$

Ici, nous avons fixé  $\theta, \varphi$ , et  $d\Omega$ , la probabilité pour fixé que l'électron se trouve l'angle solide considéré, entre  $r$  et  $r + dr$ , est alors proportionnelle à  $r^2 |R_{n,l}(r)|^2$  la présence de facteur de  $r^2$  provient de l'expérience de l'élément de volume en coordonnées sphérique). Les cas qui nous intéressent sont ceux pour lesquels  $l = n - 1$  c'est-à-dire  $k = n - l = 1$ , le

polynôme qui intervient  $R_{n,l}(r)$  comporte un seul terme  $(r/a_0)^{n-1}$ . la densité de probabilité est donc proportionnelle à :

$$f_n = \frac{r^2}{a_0^2} \left[ \left( \frac{r}{a_0} \right)^{n-1} e^{-r/na_0} \right]^2 \quad (\text{II} - 50)$$

$$= \left( \frac{r}{a_0} \right)^{2n} e^{-\frac{2r}{na_0}} \quad (\text{II} - 50a)$$

cette fonction présente un maximum pour :

$$r = r_n = n^2 a_0$$

qui est le rayon de l'orbite de Bohr correspondante à l'énergie  $E_n$ .

le tableau ci-dessus donne pour finir l'expression des fonction des fonction d'équation premier niveaux d'énergie :

Niveau 1s	$\varphi_{n=1,l=0,m=0} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$
Niveau 2s	$\varphi_{n=2,l=0,m=0} = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}} \left( 1 - \frac{r}{2a_0} \right) e^{-r/2a_0}$
Niveau 2p	$\varphi_{n=2,l=1,m=1} = -\frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \sin \theta e^{i\varphi}$ $\varphi_{n=2,l=1,m=0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cos \theta$ $\varphi_{n=2,l=1,m=-1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \sin \theta e^{-i\varphi}$





# Chapitre III

## Résultat et discussion

### Résultats et discussions

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

Nous commencerons par la résolution de l'équation radiale :

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

Résoudre cette équation numériquement revient à construire un organigramme de calcul inspirés par un programme écrit en fortran 77 qui repose sur la méthode d'Euler suivante :

### 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  $\Delta$  (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  $\Psi$  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  $k = \sqrt{cE}$

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

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

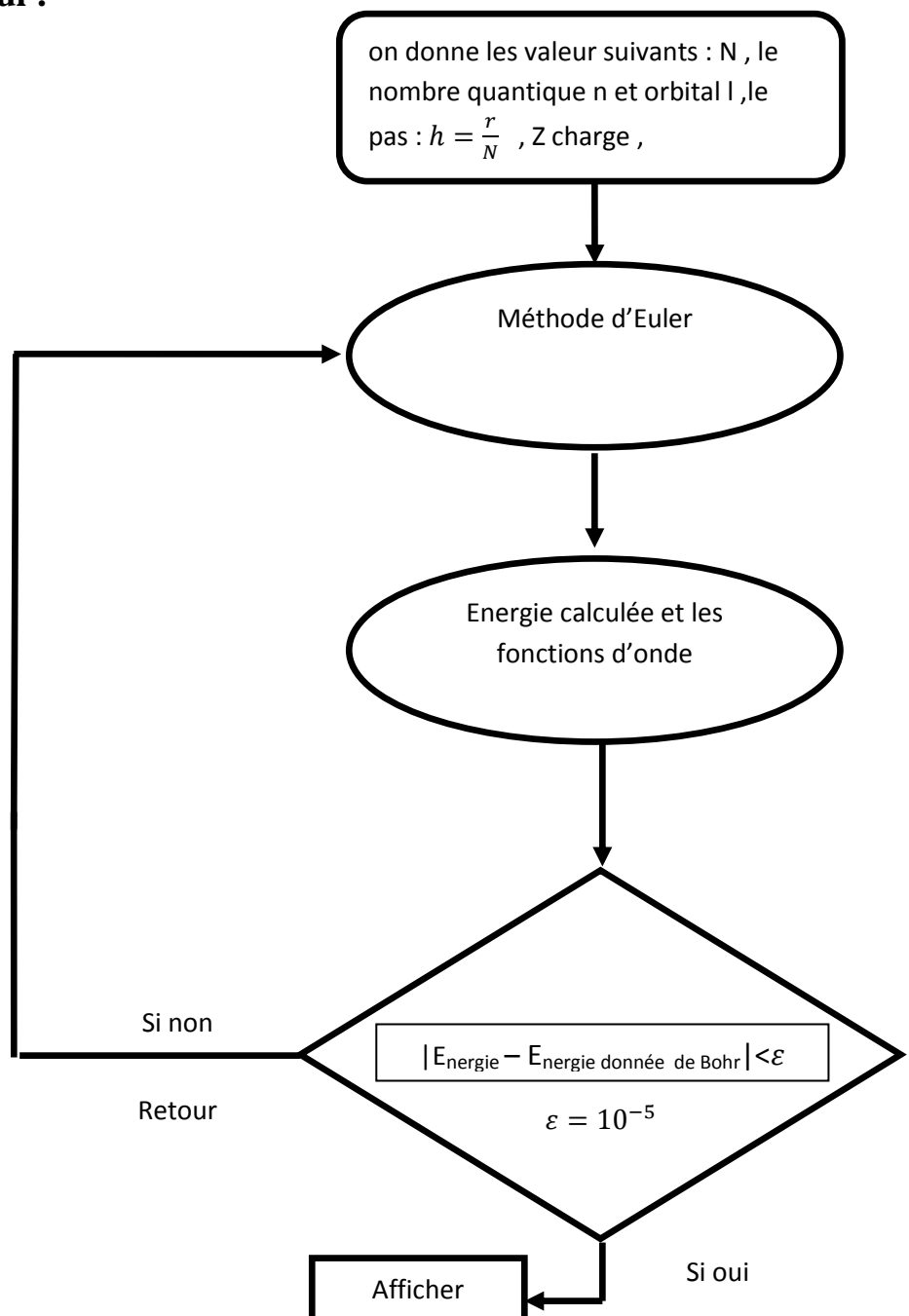
à un terme complexe A près qui n'est pas intéressant ici (ainsi B est directement le coefficient de réflexion en amplitude et C celui de transmission en amplitude).

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

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.

**Organigramme de calcul :**



## Discussions des résultats

Présentation de la distribution de probabilité radiale pour  $n=1$  :

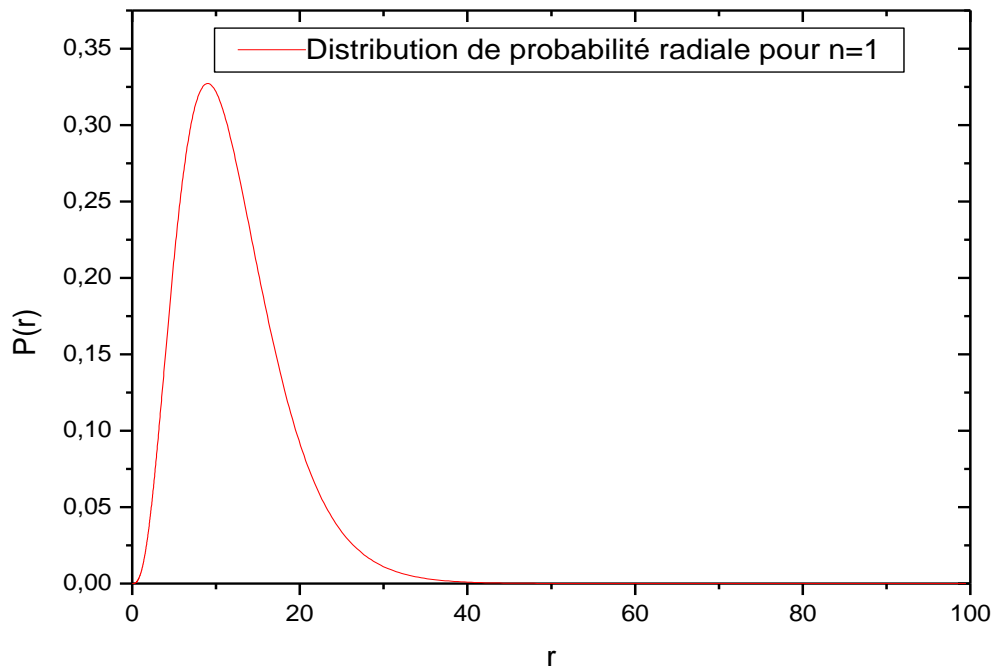


figure 1 : représentation la probabilité

Présentation de la fonction d'onde et de sa probabilité pour  $n=1$  :

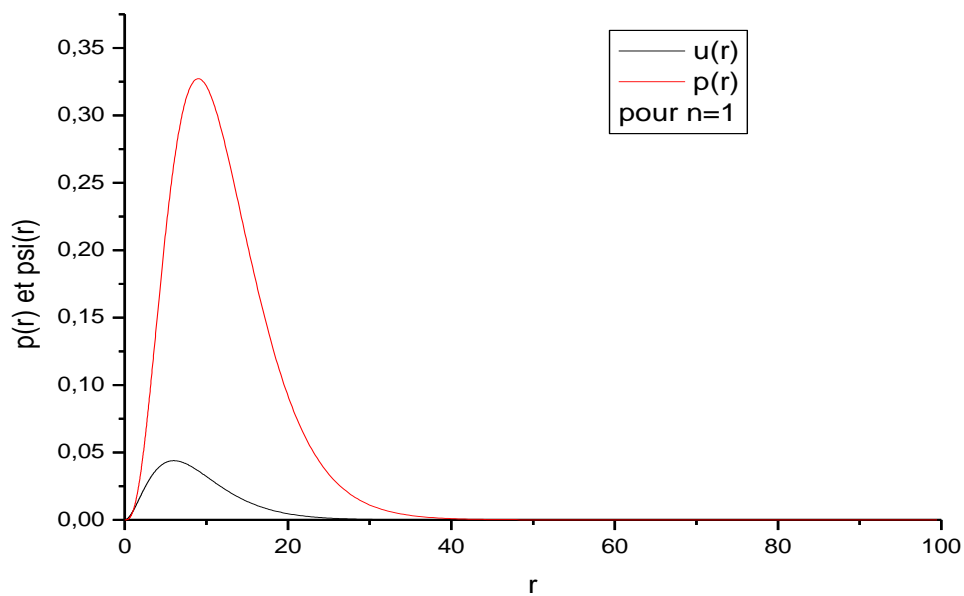
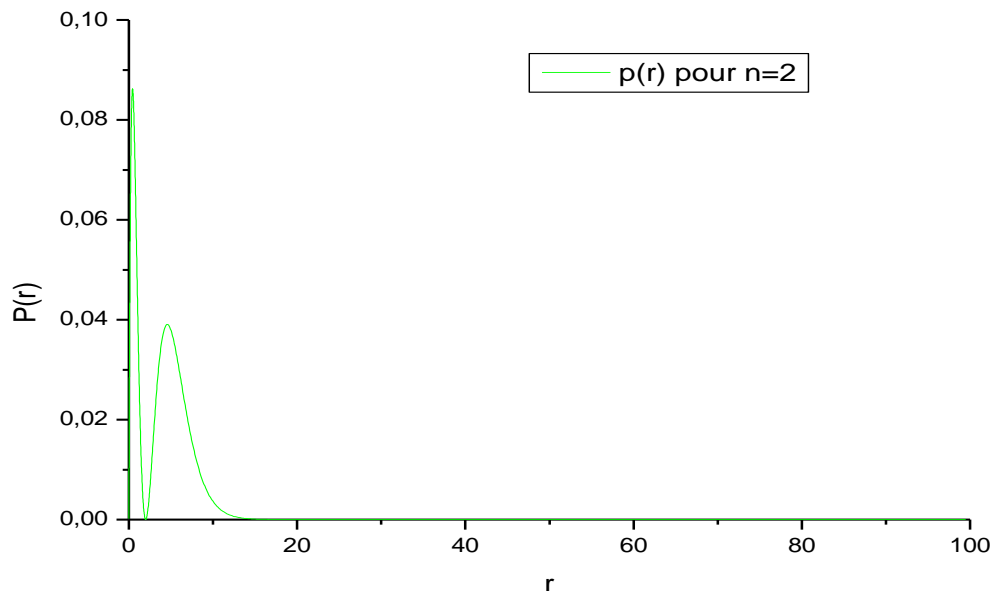


Figure II : présentation la probabilité et la fonction d'onde pour  $n=1$

La figure (III-2) présente la variation de la distribution de probabilité radiale pour  $n=1$ , on remarque que la forme Gaussienne qui présente un maximum au point  $r=8.89$  c'est-à-dire un nuage électronique maximal. Ce nuage s'annule au fur à mesure qu'on s'éloigne du noyau.

#### Présentation de la distribution de probabilité radiale pour $n=2$ :



**Figure III : probabilité pour  $n=2$**

La probabilité de présence contient deux pics relatives à la fonction d'onde  $u_{k,l,n=2}$  situé aux points  $r = 0.28$  et  $r = 4.77$  du fait qu'on est dans un état excité.

#### 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 distribution de probabilité radiale pour les états  $n=1$  et  $n=2$ . Nos résultats sont en bon accord avec celle trouvés par Bohr.

#### Référence :

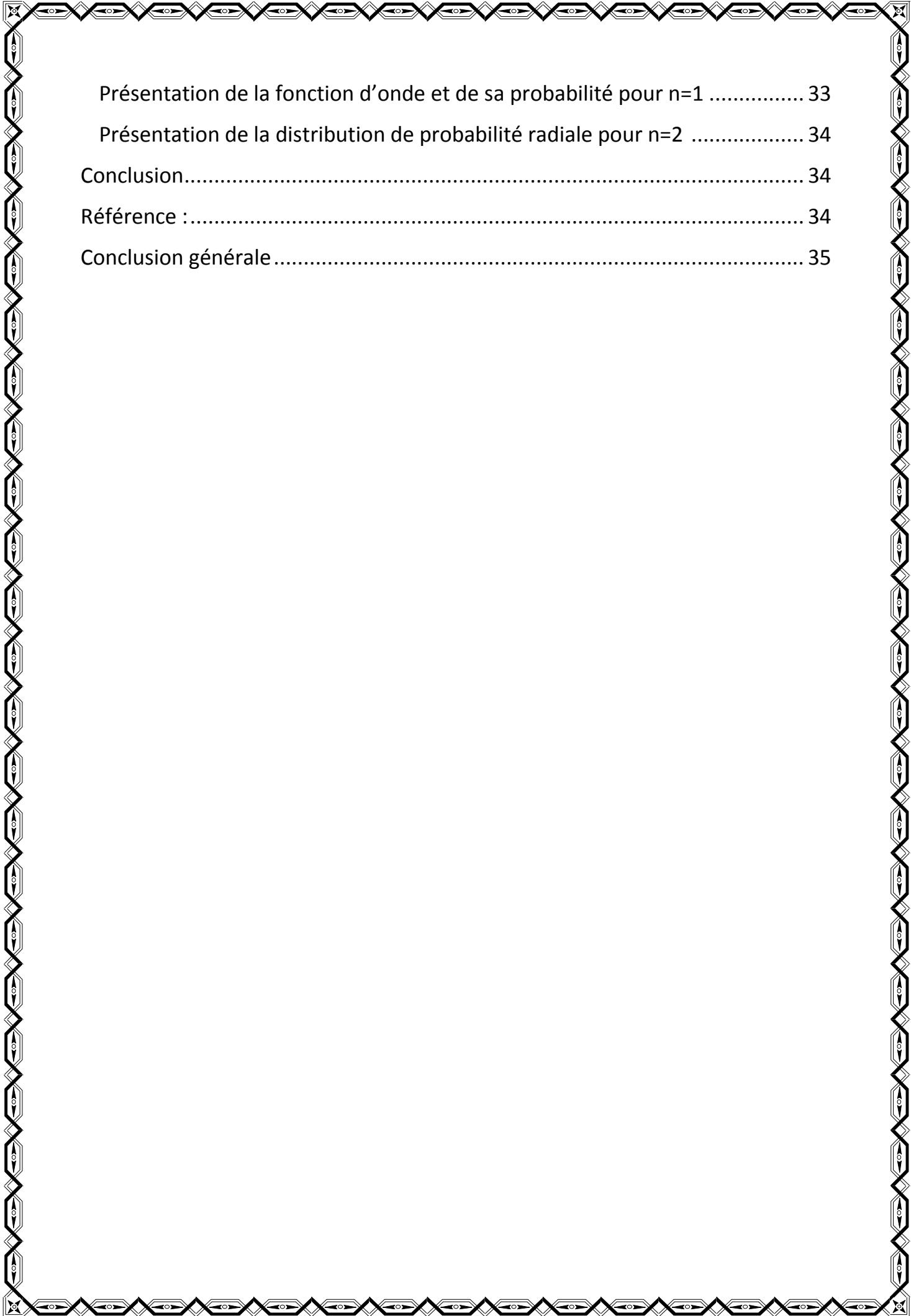
- Niels Bohr, le père de l'atome par Ilarion Pavel ingénieur en chef des mines chercheur au Laboratoire de Physique Théorique Ecole Normale Supérieure
- Um5a\_fsr/ Filière SMC/ S4/ Module 14/ Cours de Spectroscopie/ Chapitre II/ F.GUEDIRA
- © 2006 Alberta Education [www.learnalberta.ca](http://www.learnalberta.ca)
- Cohen Tannoudji
- Particule dans un potentiel centrale : Messiah (C.17), chap. IX ; chap. 16 (1,18)

## Conclusion générale

Ce travail entre dans le cadre de préparation d'un diplôme de de licence LMD option physique son titre intitulé l'étude de l'atome d'hydrogène d'une manière classico-quantique partant d'une modèle plus simple dit modèle de Bohr et arrivant à une étude quantique responsable de nous donner toute les informations possibles sur l'atome d'hydrogène. Alors, nous avons étudié cet atome par l'utilisation des lois de la mécanique Newtonienne toute en se référant à un repère lié au centre de masse des deux particules (électron +proton). Avec l'utilisation des lois d'absorption et d'émission et la loi d'action semi-empirique de Bohr qui postule que l'électron lorsqu'il tourne autour du noyau son mouvement est quantifié nous a donné une expression de l'énergie en fonction du nombre de couches. Enfin, avec l'étude quantique nous avons plus arrivé au sens des expressions vues précédemment en se basant sur la résolution de l'équation de Schrödinger dans un potentiel de type Coulombien. Nous avons écrit des programmes en Fortran en conversant nos équations théoriques à des équations numériques. Nous avons déterminées les densités de probabilités pour  $n=1$  et  $n=2$  respectivement. Nos résultats numériques étaient en bonne accord avec les résultats trouvés par d'autres auteurs. Finalement comprendre la physique des matériaux c'est comprendre l'infiniment petit dit aussi l'atome et l'exemple typique est l'atome d'hydrogène.

## Sommaire

Introduction Générale .....	1
Chapitre I : .....	2
Modèle semi-classique de l'atome d'hydrogène .....	3
Théorie de Bohr .....	3
Spectre de l'atome d'hydrogène .....	4
Absorption .....	5
Emission .....	6
Relation semi empirique de Bohr .....	8
L'étude classique de l'atome d'hydrogène .....	8
Chapitre II : .....	13
Etude quantique .....	13
Etude quantique de l'atome de l'hydrogène .....	14
Résolution de l'équation radiale : .....	19
Quantification de l'énergie. Fonction radiale : .....	22
Discussion des résultats .....	24
Niveaux d'énergie : .....	25
Notation spectroscopie : .....	27
Fonctions d'onde : .....	27
A-Dépendance angulaire : .....	27
B- dépendance radiale : .....	28
Chapitre III : .....	30
Résultat et discussion .....	30
Résultats et discussions .....	31
Méthode d'Euler : .....	31
Organigramme de calcul .....	32
Discussions des résultats .....	33
Présentation de la distribution de probabilité radiale pour $n=1$ .....	33



Présentation de la fonction d'onde et de sa probabilité pour $n=1$ .....	33
Présentation de la distribution de probabilité radiale pour $n=2$ .....	34
Conclusion.....	34
Référence :.....	34
Conclusion générale .....	35