

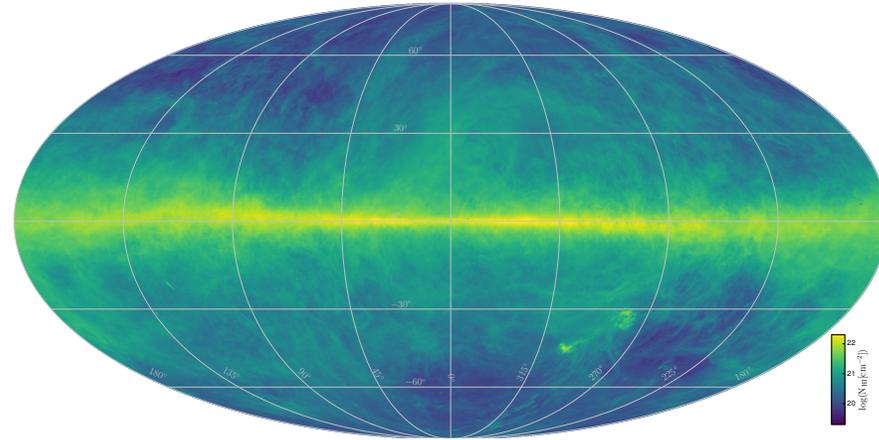
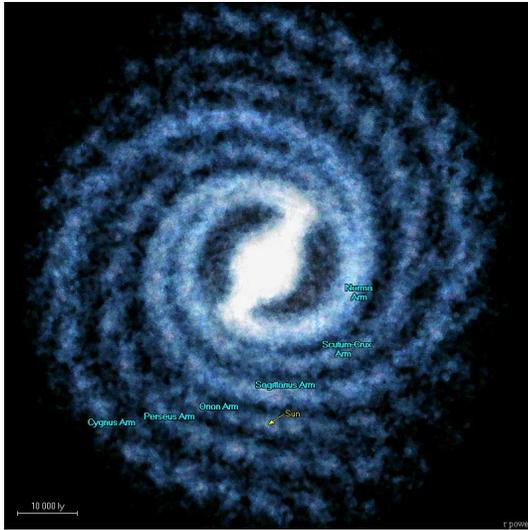
# MQI: Cours 0

## L'atome d'hydrogène

# L'atome d'hydrogène

- C'est l'élément le plus abondant dans l'univers

carte HI4PI de l'hydrogène atomique dans la voie lactée  
 $[H] \approx 1 \text{ atome/cm}^3$  dans le milieu interstellaire



- C'est l'élément le plus simple : un électron lié à un proton  
Ce qui permet d'avoir des solutions exactes des équations  
Les mesures réalisées avec une précision toujours accrue  
fournissent des tests **quantitatifs** pour la théorie quantique

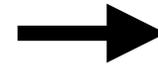


# Quelques applications pratiques

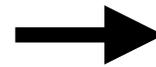
résonance magnétique  
avec des jets moléculaires



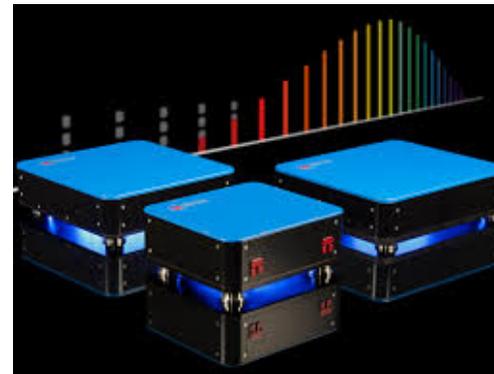
spectroscopie et imagerie par  
résonance magnétique



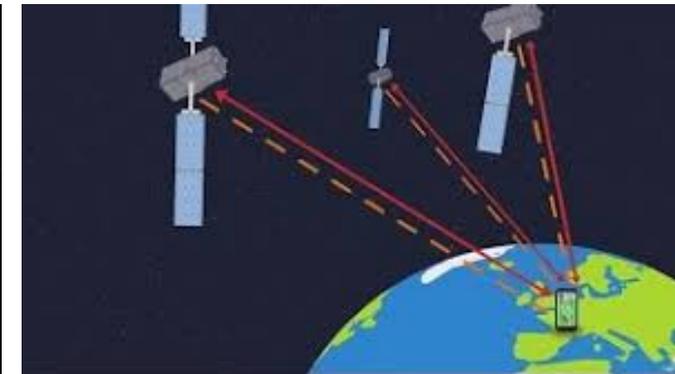
maser à hydrogène



laser à peigne de  
fréquence



localisation GPS



➔ instruments utilisés pour la recherche fondamentale

**Rappels**

# Le problème à deux corps en MQ (1)

## Centre de masse, particule réduite en MQ

- **Changement de variable:**  $(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \mapsto \left( \vec{x}_G = \frac{m_1\vec{x}_1 + m_2\vec{x}_2}{m_1 + m_2}, \vec{r} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2 \right)$

- Alors (petit calcul de changement de dérivées partielles ):

$$\vec{\nabla}_{\vec{x}_G} = \vec{\nabla}_1 + \vec{\nabla}_2 \quad \text{et} \quad \vec{\nabla}_{\vec{r}} = \frac{m_2\vec{\nabla}_1 - m_1\vec{\nabla}_2}{m_1 + m_2}$$

- Donc en termes d'opérateurs on trouve:

$$-i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{x}_G} = \vec{P}_1 + \vec{P}_2 \quad \text{et} \quad -i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{r}} = \frac{m_2\vec{P}_1 - m_1\vec{P}_2}{m_1 + m_2}$$

- On retrouve formellement les expressions de l'impulsion du centre de masse et de la particule « réduite » => on peut définir de « nouvelles observables » qui reproduisent les propriétés de la Mécanique Classique (voir diapo suivante).

# Le problème à deux corps en MQ (2)

## Changement d'observables

- On définit les deux « nouvelles observables de position »  $\vec{Q}_G$  et  $\vec{Q}_{red}$  par:

$$\vec{Q}_G = \frac{m_1 \vec{Q}_1 + m_2 \vec{Q}_2}{m_1 + m_2} \quad \text{et} \quad \vec{Q}_{red} = \vec{Q}_1 - \vec{Q}_2$$

$$\vec{Q}_G \psi(\vec{x}_G, \vec{r}) = \vec{x}_G \psi(\vec{x}_G, \vec{r}) \quad \text{et} \quad \vec{Q}_{red} \psi(\vec{x}_G, \vec{r}) = \vec{r} \psi(\vec{x}_G, \vec{r})$$

- Et on définit les « observables conjuguées » (impulsions) par:

$$\vec{P}_G = \vec{P}_1 + \vec{P}_2 \quad \text{et} \quad \vec{P}_{red} = \frac{m_2 \vec{P}_1 - m_1 \vec{P}_2}{m_1 + m_2}$$

$$\vec{P}_G \psi(\vec{x}_G, \vec{r}) = -i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{x}_G} \psi(\vec{x}_G, \vec{r}) \quad \text{et} \quad \vec{P}_{red} \psi(\vec{x}_G, \vec{r}) = -i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{r}} \psi(\vec{x}_G, \vec{r})$$

- On montre alors (calcul purement algébrique comme dans le cas classique):

$$\frac{1}{2m_1} \vec{P}_1^2 + \frac{1}{2m_2} \vec{P}_2^2 = \frac{1}{2M} \vec{P}_G^2 + \frac{1}{2\mu} \vec{P}_{red}^2$$

$$\text{Avec } M = m_1 + m_2 \text{ et } \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

# Le problème à deux corps en MQ (3)

## Conclusion

- On peut effectuer en MQ un changement d'observables similaire à celui de Mécanique Classique:

$$(\vec{Q}_1, \vec{Q}_2, \vec{P}_1, \vec{P}_2) \mapsto (\vec{Q}_G, \vec{Q}_{red}, \vec{P}_G, \vec{P}_{red})$$

- On obtient une forme « séparée » du Hamiltonien (comme en Mécanique Classique):

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_1} \vec{P}_1^2 + \frac{1}{2m_2} \vec{P}_2^2 + V(\vec{Q}_1 - \vec{Q}_2) = \frac{1}{2M} \vec{P}_G^2 + \frac{1}{2\mu} \vec{P}_{red}^2 + V(\vec{Q}_{red})$$

- Comme les variables du centre de masse **commutent** avec celles de la particule réduite on a:

$$\left[ \begin{array}{l} \hat{H} = \hat{H}_G + \hat{H}_{red} \\ \hat{H}_G = \frac{1}{2M} \vec{P}_G^2 \quad \text{et} \quad \hat{H}_{red} = \frac{1}{2\mu} \vec{P}_r^2 + V(\vec{Q}_{red}) \\ [\hat{H}_G, \hat{H}_{red}] = 0 \end{array} \right. \quad \downarrow$$

- Dans le référentiel du centre de masse (impulsion  $\vec{p}_G$  nulle), il ne reste que:

$$\hat{H}_{red} = \frac{1}{2\mu} \vec{P}_{red}^2 + V(\vec{Q}_{red})$$

# Le potentiel central en MQ (1)

**Le problème**: Résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire pour un Hamiltonien de la forme:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \vec{P}^2 + V(\|\vec{Q}\|)$$

**Remarque**: par le remplacement  $m \mapsto \mu$  (la masse réduite) on résout en même temps le cas du problème à deux corps pour une interaction par potentiel central (comme en Mécanique Classique)

## Les symétries du problème

**A Retenir**

Les quantités  $\vec{P}^2$  et  $V(\|\vec{Q}\|)$  sont invariantes par rotation (aussi bien classiquement que quantiquement), donc le Hamiltonien  $\hat{H}$  est **invariant par rotation**.

On montre que l'invariance par rotation de  $\hat{H}$  est équivalente aux règles de commutation<sup>(\*\*)</sup>:

$$\forall j = 1, 2, 3 \quad [\hat{L}_j, \hat{H}] = 0$$

Où  $\vec{L} = \vec{Q} \wedge \vec{P}$  est l'opérateur de moment cinétique orbital (voir MQI: cours11).

(\*\*) En Mécanique Classique cela correspond à la conservation du moment cinétique.

# Le potentiel central en MQ (2)

**A Retenir**

$$\forall j = 1, 2, 3 \quad [\hat{L}_j, \hat{H}] = 0$$

## Conséquences:

- On déduit d'abord que  $[\vec{L}^2, \hat{H}] = [\hat{L}_z, \hat{H}] = 0$  (où  $\vec{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$  voir cours11).
- **Donc les opérateurs  $\{\hat{H}, \vec{L}^2, \hat{L}_z\}$  possède une base orthonormée commune de vecteurs propres.**
- Or on connaît déjà (voir MQI:cours11) la base orthonormée qui diagonalise  $\{\vec{L}^2, \hat{L}_z\}$ : il s'agit des harmoniques sphériques  $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  (en coordonnées sphériques).
- Il en résulte que seule la dépendance en «  $r$  » des fonctions propres  $\psi(r, \theta, \phi)$  (écrites en coordonnées sphériques) est inconnue.

**Conclusion:** Les fonctions propres de  $\hat{H}$  sont de la forme  $\psi_{\alpha \ell m}(r, \theta, \phi) = R_{\alpha}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$

**A Retenir**

Les fonctions  $R_{\alpha}(r)$  s'appellent les « **fonctions radiales** ».

# Le potentiel central en MQ (3)

## ◆ Rappels cours 0a

$$\Delta \psi = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r \psi) - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \vec{L}^2 \psi$$

→  $\frac{1}{2m} \vec{p}^2 = \frac{1}{2m} \hat{p}_r^2 + \frac{1}{2mr^2} \vec{L}^2$  avec  $\hat{p}_r^2 = -\hbar^2 \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r \cdot)$

## ◆ Equation stationnaire pour $\hat{H}$ avec potentiel central

$$\hat{H}\psi = E \psi \Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(r)\psi = E \psi \Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r \psi) + \frac{1}{2mr^2} \vec{L}^2 \psi + V(r)\psi = E \psi$$

Toute solution est nécessairement de la forme  $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  (diapo précédente) et  $\vec{L}^2 Y_{\ell m} = \hbar^2 \ell(\ell + 1) Y_{\ell m}$  (MQI: cours 11), donc:

→ 
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r R) + \left( \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2m r^2} + V(r) \right) R(r) = E R(r)$$

Equation dite  
« Radiale »

# Le potentiel central (4)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r R_\ell) + \left( \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2m r^2} + V(r) \right) R_\ell(r) = E_\ell R_\ell(r) \quad (I)$$

## Transformation

Si on pose  $u_\ell(r) = r R_\ell(r)$ , alors:

a) On a<sup>(\*\*)</sup>  $\int_0^\infty |u_\ell(r)|^2 dr = \int_0^\infty |R_\ell(r)|^2 r^2 dr < \infty$ , donc  $u_\ell \in L^2(\mathbb{R}^+, dr)$ ,

b)  $u_\ell$  vérifie l'équation:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u_\ell''(r) + \left( \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2m r^2} + V(r) \right) u_\ell(r) = E_\ell u_\ell(r)$$

c) Tout se passe comme si on devait résoudre une éq. de Schrödinger stationnaire 1D sur la demi-droite  $[0, \infty[$ , avec un Hamiltonien  $\hat{H}_\ell$  tel que:

$$\hat{H}_\ell = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V_{eff}(r) \quad \text{avec} \quad V_{eff}(r) = \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2m r^2} + V(r)$$

(\*\*) Pour des états confinés

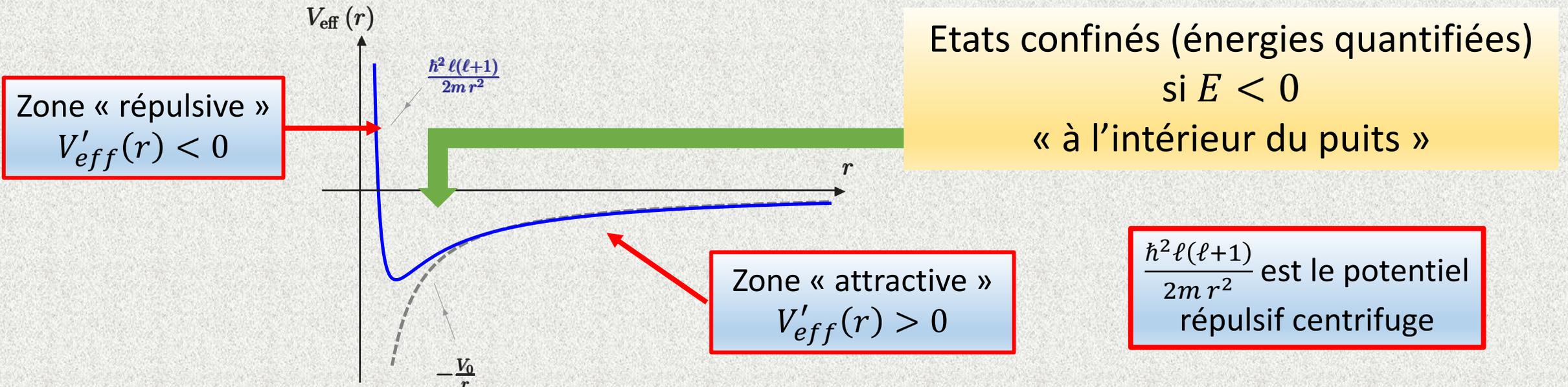
# Le potentiel central (5)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u_\ell''(r) + V_{eff}(r) u_\ell(r) = E_\ell u_\ell(r)$$

$$V_{eff}(r) = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m r^2} + V(r) \text{ et } r \in \mathbb{R}^+$$

## Le potentiel effectif

**Exemple:** Si on prend pour  $V(r)$  le cas d'un **potentiel coulombien attractif**, soit  $V(r) = -V_0/r$  avec  $V_0 > 0$ , on a la figure ci-dessous ( $\ell \neq 0$ ):



# Le potentiel central (6)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u_\ell''(r) + V_{eff}(r) u_\ell(r) = E_\ell u_\ell(r)$$

$$V_{eff}(r) = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m r^2} + V(r) \text{ et } r \in \mathbb{R}^+$$

## La méthode de résolution du problème

Même méthode que pour l'éq. de Schrödinger 1D habituelle en considérant que la contrainte  $r \geq 0$  est assimilable à un mur de potentiel infini:

- Il faut imposer  $u_\ell(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$  (pas de contrainte sur la dérivée)
- Il faut imposer que  $u_\ell(r)$  ne diverge pas à l'infini.

Théorème (important pour l'étude des dégénérescences et des ECOC): on montre que le

spectre de  $\hat{H}_\ell = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V_{eff}(r)$  n'est jamais dégénéré (pour chaque valeur propre  $E_\ell$  de l'éq.  $\hat{H}_\ell u_\ell = E_\ell u_\ell$  il n'y a qu'une seule fonction propre  $u_\ell$ ).

# L'Atome d'Hydrogène en MQ (non-relativiste)

# Introduction (1)

## Atome d'hydrogène: système proton-électron en interaction électrostatique

◆ Les masses du proton et de l'électron sont telles que  $m_p \cong 1850 m_e \Rightarrow$  La masse réduite  $\mu$  est telle que  $\frac{m_e}{\mu} \cong 1 + \frac{1}{1850} \cong 1$ . En première approximation on peut identifier le centre de masse et la position du proton, puis on peut prendre le proton comme origine.

◆ L'interaction entre le proton et l'électron est caractérisée par l'énergie potentielle  $V(r)$ :

$$V(r) = -\frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

◆ Cette énergie est caractérisée par la « constante de couplage de l'électromagnétisme » «  $e$  » définie par:

$$e \stackrel{\text{def}}{=} \frac{|q_e|}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}} \text{ et } e^2 = 1.4399644(1) \text{ eV} \cdot \text{nm}$$

# Introduction (2)

## La constante de structure fine

### ◆ Définition

A partir de  $e^2$ ,  $\hbar$  et  $c$  (la vitesse de la lumière dans le vide), on peut construire une **constante non-dimensionnée**  $\alpha$  appelée « constante de structure fine ». Cette constante « **absolue** » caractérise « **l'intensité** » de l'interaction électromagnétique:

$$\alpha \stackrel{\text{def}}{=} \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137.035999206(11)}$$

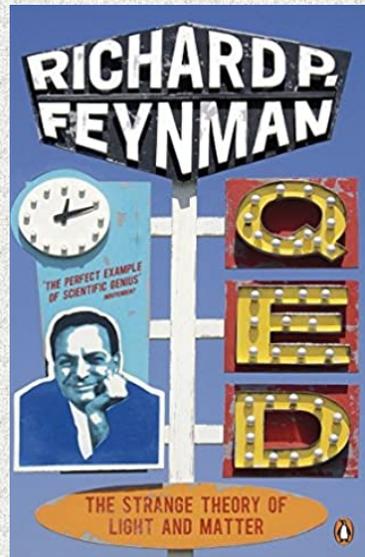
Le fait que numériquement  $\alpha \ll 1$  indique que (y compris en relativité) l'interaction électromagnétique agit dans un régime de « couplage dit faible ».

◆ Remarque importante: La constante  $\alpha$  est fondamentalement « d'essence » relativiste car elle fait intervenir la vitesse de la lumière. Mais par combinaison de  $\alpha$ , de  $c$  et d'autres constantes on peut par « analyse dimensionnelle » définir « facilement » des unités de longueur, d'énergie et de temps qui sont elles indépendantes de  $c$ : ces quantités sont les unités « naturelles » atomiques (non-relativistes) => diapo suivante.

# Introduction (3)

Une grande partie de la physique atomique et de la théorie de « l'interaction matière-rayonnement » est basée sur le fait que  $\alpha \ll 1$ .

Peut-on comprendre pourquoi  $\alpha^{-1} \cong 137$ ? NON (pour le moment)



**R. Feynman** : « It has been a mystery ever since it was discovered more than fifty years ago, and all good theoretical physicists put this number up on their wall and worry about it. »

# Unités atomiques

◆ **Unité atomique de longueur**: La quantité  $\lambda_C = \frac{\hbar}{m_e c} = 3.861592673 \times 10^{-4}$  nm est une longueur (relativiste) caractéristique de l'électron appelée « longueur d'onde Compton de l'électron ». La quantité  $a_B = \frac{\lambda_C}{\alpha}$  ne fait pas intervenir la vitesse de la lumière, c'est **l'unité atomique de longueur** appelée « **Rayon de Bohr** »:

$$a_B \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\lambda_C}{\alpha} = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = 5.291772108(18) \times 10^{-2} \text{ nm}$$

◆ **Unité atomique d'énergie**: La quantité  $m_e c^2 = 510.9989192$  Kev est l'énergie de masse (relativiste) de l'électron, la quantité  $R_H = \frac{1}{2} \alpha^2 m_e c^2$  ne fait pas intervenir la vitesse de la lumière, c'est **l'unité atomique d'énergie** que l'on appelle « **le Rydberg** »:

$$R_H \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \alpha^2 m_e c^2 = \frac{m_e e^4}{2 \hbar^2} = \frac{e^2}{2 a_B} = 13.6056923(12) \text{ eV}$$

◆ **Unité atomique de temps**: La quantité  $\tau \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\hbar}{R_H} \cong 4.84 \times 10^{-17}$  s donne l'unité de temps.

# Eq. stationnaire dans le référentiel du centre de masse (1)

$$\hat{H}\psi = E\psi \Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\psi - \frac{e^2}{r}\psi = E\psi \Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2\mu r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi) + \frac{1}{2\mu r^2}\vec{L}^2\psi - \frac{e^2}{r}\psi = E\psi$$

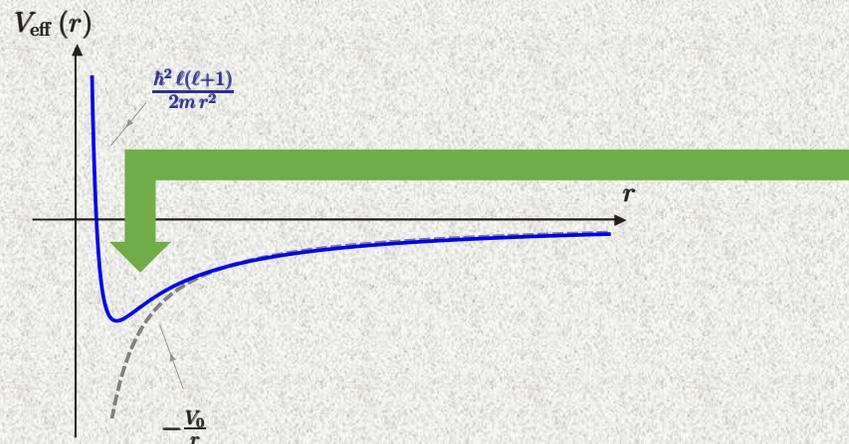
Toute solution est nécessairement de la forme  $\psi_{\alpha\ell m}(r, \theta, \phi) = R_{\alpha\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  donc:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(rR_{\alpha\ell}) + \left(\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r}\right)R_{\alpha\ell}(r) = E_{\alpha\ell}R_{\alpha\ell}(r)$$

On pose  $u_{\alpha\ell}(r) = rR_{\alpha\ell}(r) \Rightarrow$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u_{\alpha\ell}''(r) + V_{eff}(r)u_{\alpha\ell}(r) = E_{\alpha\ell}u_{\alpha\ell}(r)$$

$$V_{eff}(r) = \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} \text{ et } r \in \mathbb{R}^+$$



Etats confinés (énergies quantifiées)

si  $E < 0$

« à l'intérieur du puits »:

L'atome quantique « existe »

# Eq. stationnaire dans le référentiel du centre de masse (2)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} u''_{\alpha\ell}(r) + V_{eff}(r) u_{\alpha\ell}(r) = E_{\alpha\ell} u_{\alpha\ell}(r)$$

$$V_{eff}(r) = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} \text{ et } r \in \mathbb{R}^+, E_{\alpha\ell} < 0$$

On cherche des solutions  $u_{\alpha\ell}(r)$  « confinées » (on dit aussi des « états liés »):  
 $\Rightarrow u_{\alpha\ell}(0) = 0$  et  $\lim_{r \rightarrow \infty} u_{\alpha\ell}(r) = 0$

On définit l'unité de longueur  $a_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ , on peut indexer les solutions  $u_{\alpha\ell}(r)$  par  $\alpha = p \in \mathbb{N}$ :

$$u_{p\ell}(r) = C_{p\ell} \left(\frac{r}{a_0}\right)^{\ell+1} L_p^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{(p+\ell+1)a_0}\right) e^{-\frac{r}{(p+\ell+1)a_0}} \text{ et } E_{p\ell} = -\frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2} \frac{1}{(p+\ell+1)^2}$$

Où les  $L_p^\gamma(z)$  sont les « polynômes de Laguerre » (voir poly pour les détails):

$$L_p^\gamma(z) = \frac{1}{p!} z^{-\gamma} e^z \frac{d^p}{dz^p} (z^{p+\gamma} e^{-z})$$

Exemples:  $L_0^\gamma(z) = 1$ ,  $L_1^\gamma(z) = \gamma + 1 - z$ ,  $L_2^\gamma(z) = \frac{1}{2}(\gamma + 2)(\gamma + 1) - (\gamma + 2)z + \frac{1}{2}z^2$ , ...

Par la normalisation  $\int_0^\infty |u_{p\ell}(r)|^2 dr = 1$  on obtient  $C_{p\ell} = \frac{2^{\ell+1}}{(p+\ell+1)^{\ell+2}} \sqrt{\frac{p!}{(p+2\ell+1)!}} \frac{1}{\sqrt{a_0}}$

# Eq. stationnaire dans le référentiel du centre de masse (3)

$$\text{Dégénérescence des énergies propres } E_{p\ell} = -\frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2} \frac{1}{(p+\ell+1)^2}$$

Les énergies  $E_{p\ell}$  ne dépendent que du seul entier  $n = p + \ell + 1$ . On appelle «  $n$  » le **nombre quantique principal**, et:

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \text{ avec } n \in \mathbb{N}^* \text{ et } \ell = 0, 1 \dots n - 1$$

Le fait que  $E_{p\ell}$  ne dépende que de  $n = p + \ell + 1$  est appelé « dégénérescence accidentelle ».

**Remarque**: en fait cela n'a rien « d'accidentel », c'est la conséquence d'une symétrie dite dynamique (voir poly).

**Conséquence**: dégénérescence  $g(E_n)$  des énergies  $E_n$ . D'après l'étude du potentiel central, pour chaque énergie  $E_{p\ell}$ , il y a  $2\ell + 1$  états propres dus aux harmoniques  $Y_{\ell m}$ . Mais ici (cas très particulier) les énergies ne dépendent que du « nombre quantique principal  $n$  », d'où:

$$g(E_n) = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2 \text{ (avec le spin de l'électron } g(E_n) = 2n^2)$$

# Eq. stationnaire dans le référentiel du centre de masse (4)

## Résumé des états liés

◆ La convention est de toujours utiliser le « nombre quantique principal  $n$  » comme index.

Les états liés  $\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi)$  et les énergies propres  $E_n$  s'écrivent:

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

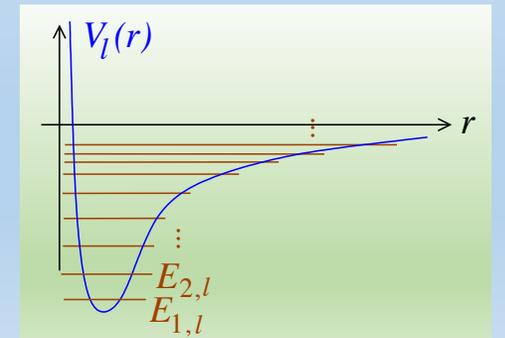
$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

et  $n \in \mathbb{N}^*$ ,  $\ell = 0, \dots, n-1$ ,  $|m| \leq \ell$

$$R_{n\ell}(r) = \frac{2^{\ell+1}}{n^{\ell+2}} \sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{(n+\ell)!}} \frac{1}{a_0^3} \left(\frac{r}{a_0}\right)^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{n a_0}\right) e^{-\frac{r}{n a_0}}$$

$$\text{Avec } a_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = \left(1 + \frac{m_e}{m_p}\right) a_B \cong a_B.$$

◆ Il y a une infinité d'états liés et les énergies (négatives)  $E_n$  convergent vers  $\lim_{n \rightarrow \infty} E_n = 0$  (c'est la limite d'ionisation de l'atome).



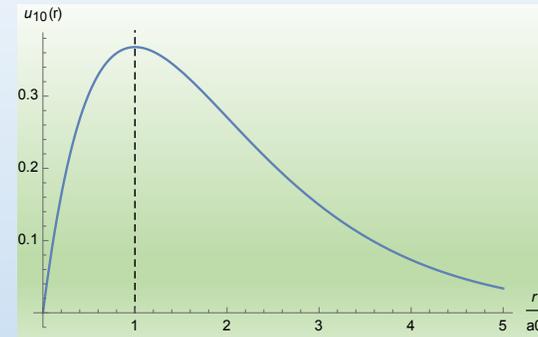
# Eq. stationnaire dans le référentiel du centre de masse (5)

## Remarques

a) **Energies positives**: Il existe aussi des états d'énergie  $E > 0$ , mais ces états sont « des états libres »: l'énergie n'est plus quantifiée et l'électron n'est plus « lié » au proton.

b) **Etat fondamental**:  $\psi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{2}{\sqrt{4\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$

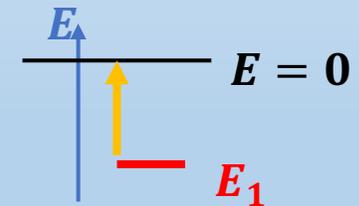
et  $E_1 = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \cong -13.6 \text{ eV}$ ,



c) **Rayon moyen de l'orbite de l'état fondamental**:  $\langle r \rangle_{100} = \frac{3}{2} a_0 = \frac{3}{2} \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$

d) **Rayon moyen pour  $n > 1$** :  $\langle r \rangle_n \propto n^2 a_0$

e) **Energie d'ionisation**:  $E_I = 0 - E_1 = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \cong 13.6 \text{ eV}$  et  $E_n = -\frac{E_I}{n^2}$



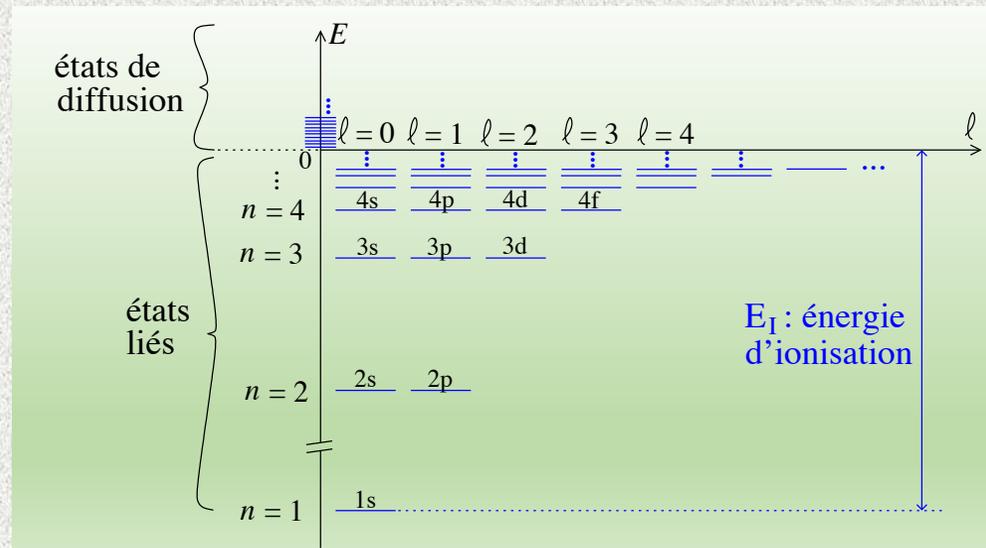
c) **Effet de la masse réduite**:  $E_I = \frac{1}{1 + \frac{m_e}{m_p}} \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} = \frac{R_H}{1 + \frac{m_e}{m_p}} \cong R_H$ .

# Notations spectroscopiques

◆ Les « spectroscopistes » ont introduit une notation spécifique pour écrire les couples  $(n, \ell)$ : on note  $ns, np$ , avec la convention suivante pour les valeurs de  $\ell$ :

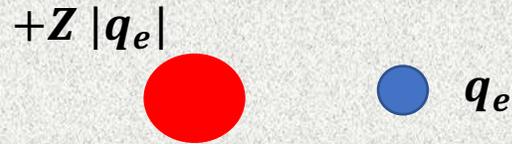
moment $\ell$		notation	nb max d' $e^- : 2(2\ell + 1)$
0	→	s	2
1	→	p	6
2	→	d	10
3	→	f	14
⋮	⋮	⋮	

◆ On obtient ainsi la représentation suivante du spectre de l'atome d'hydrogène:



# Ions hydrogénoïdes

Interaction 1 électron – noyau de charge  $Z |q_e|$



$$V(r) = -\frac{Z e^2}{r}$$

Même calcul que pour  $Z = 1$ :

- Energies propres  $E_n = -Z^2 \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$
- Energie d'ionisation  $E_I(Z) = Z^2 \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \cong 13.6 Z^2 \text{ eV}$
- Rayon moyen des orbites:  $\langle r \rangle_n \propto \frac{n^2}{Z} \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$
- Vitesse moyenne sur l'état fondamental:  $\langle v \rangle_{100} = Z \alpha c \cong \frac{Z}{137} c$

Uranium  $Z = 92$   
 $\langle v \rangle \cong 0,7c$

L'électron n'est plus  
« non-relativiste »

# Atomes exotiques: positronium, muonium

◆ **Positronium**: système positron ( $e^+$ ) – électron ( $e^-$ ).

Le positron ( $e^+$ ) est l'antiparticule de l'électron: même masse  $m_e$ , mais charge opposée  $+|q_e|$

⇒ Effet max. sur la masse réduite  $\mu = \frac{1}{2}m_e$ .

Le positronium est un système dont le spectre d'énergie est de type hydrogénoïde, mais ce système est « métastable »: sa durée de vie est de l'ordre de 100 ns et se termine par une annihilation positron-électron donnant deux photons gamma.

◆ **Muonium**: système antimuon ( $\mu^+$ ) – électron ( $e^-$ ).

L'antimuon ( $\mu^+$ ) est une particule élémentaire (un lepton): masse  $m_\mu = 105.66 \text{ Mev}$ , charge  $+|q_e|$ .

Le muonium est un système dont le spectre d'énergie est aussi de type hydrogénoïde, mais ce système est aussi « métastable »: sa durée de vie est de l'ordre de  $2.2 \mu s$  et se termine par la désintégration de l'antimuon (la mise en évidence du muonium date des années 1960).