

[Retour à l'applet](#)

Atome d'hydrogène

L'équation de Schrödinger de l'atome d'hydrogène s'écrit en coordonnées polaires sous la forme :

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2 \operatorname{tg} \theta} \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] = 0 \quad (1)$$

La fonction d'onde ne doit jamais être infinie et à grande distance du noyau elle doit être nulle. Pour résoudre cette équation, on utilise la méthode de séparation des variables. On pose :

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi) \quad (2)$$

En effectuant ce changement de variables et après division par $R \cdot \Theta \cdot \Phi$, il vient :

$$\frac{R''}{R} + \frac{2}{r} \frac{R'}{R} + \frac{1}{r^2} \frac{\Theta''}{\Theta} + \frac{1}{r^2 \operatorname{tg} \theta} \frac{\Theta'}{\Theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\Phi''}{\Phi} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] = 0 \quad (3)$$

L'étude de cette équation montre que pour obtenir un second membre nul il faut que :

$$\frac{\Phi''}{\Phi} = -m^2 \quad \text{et} \quad \frac{\Theta''}{\Theta} + \frac{1}{\operatorname{tg} \theta} \frac{\Theta'}{\Theta} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} = -\ell(\ell+1)$$

Comme la valeur de la fonction d'onde doit être la même si φ augmente de 2π il faut que m soit un nombre entier.

L'équation (3) devient :

$$\frac{R''}{R} + \frac{2}{r} \frac{R'}{R} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] = 0 \quad (4)$$

C'est la partie radiale dont l'intégration conduit aux polynômes de Laguerre. Il est aussi possible de calculer numériquement cette fonction. Au lieu d'étudier $R(r)$, on étudie le produit $r \cdot R(r)$ dont le carré est proportionnel à la probabilité de présence radiale.

La forme sans dimensions de l'équation devient :

$$\frac{d^2(r \cdot R)}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} (r \cdot R) + \frac{2}{r} (r \cdot R) - E \cdot (r \cdot R) = 0$$

Cette équation contenant des termes en $1/r$ ne peut être intégrée numériquement pour r voisin de zéro. Comme les polynômes de Laguerre contiennent un terme en r^1 , on fait un ultime changement de variable en posant $R = r^1 \rho$

Pour calculer numériquement le produit $r \cdot R$, il faut intégrer numériquement l'équation :

$$\frac{d^2 \rho}{dr^2} = -E \rho - 2 \frac{\rho + (\ell+1)}{r} \frac{d\rho}{dr}$$

[Retour à l'applet](#)