Physique atomique Cours

Doc 3 Exemples de Fonctions Radiales solution de l'équation radiale

Préambule: En notation spectroscopique, les différentes valeurs de l (valeurs numériques: 0, 1, 2, 3, ...) sont plutôt indiquées par des lettres selon la correspondance suivante:

$l=0$	se note	s	qui vient de	"sharp"
$l=1$	" "	p	" "	"	"principal"
$l=2$	" "	d	" "	"	"diffuse"
$l=3$	" "	f	" "	"	"fundamental"
$l=4$	" "	g			

et ainsi de suite, par ordre alphabétique

Exemple de fonctions radiales

Nous avons vu précédemment que les fonctions radiales ne dépendent que de n et l. Elles sont notées $R_{n,l}(r)$. Ce sont des fonctions à variables réelles.

Etant donné que les fonctions propres $\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi)$ sont normées, càd, $\iiint_{r\,\theta\,\varphi} |\Psi(r,\theta,\varphi)|^2 dv = 1$ avec dv le volume élémentaire égal à: $dv = r^2 \sin\theta \, dr d\theta d\varphi$. Les parties radiale $R_{n,l}(r)$ et angulaire $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ sont normalisées séparément, c'estàdire, $\int_0^\infty R^2 r^2 dr = 1$

$$\int_{\theta,\varphi} |Y(\theta,\varphi)|^2 \sin\theta \, d\theta d\varphi = 1$$

Nous donnons, à titre d'exemple, les fonctions radiales suivantes selon les différentes valeurs de n et l :

– $n = 1$, $l = 0$ noté état 1s $R_{1,0}(r) = 2a_0^{-3/2} e^{-r/a_0}$

avec $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ avec $\begin{cases} \hbar = \frac{h}{2\pi} \\ \mu \text{ la masse réduite} \\ \mu = \frac{m_p \times m_e}{m_p + m_e} \\ \text{et } e^2 \equiv \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \times e^2 \end{cases}$

la valeur, notée ici a_0, est très proche de celle du rayon de Bohr $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$. Nous avons conservé la même notation de ces 2 grandeurs très peu différente. $R_{1,0}(r)$ est une solution de l'équation différentielle notée en page 3 du document précédent (Doc. 2).

– $n = 2$, $l = 0$ noté état 2s

$$R_{2,0}(r) = 2(2a_0)^{-3/2}\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

– $n = 2$, $l = 1$ noté état 2p $R_{2,1}(r) = (2a_0)^{-\frac{3}{2}} \frac{r}{a_0\sqrt{3}} e^{-\frac{r}{2a_0}}$

L'expression générale des fonctions radiales est de la forme :

$$R_{n,l}(r) = -\frac{2a_0^{-3/2}}{n^2} \times \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}} \times \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l e^{-\frac{r}{na_0}} \times \mathbb{L}_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$$

où $\mathbb{L}_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$ sont les polynômes de Laguerre généralisés

avec $\mathbb{L}_n^k(x) = \frac{n!}{(n-k)!} e^x \frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x} x^{n-k}\right)$

Suite dans Doc 4