Simulation Atome hydrogène

Nima Parree

February 2026

1 Équation de Schrödinger

L'équation stationnaire de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r,\theta,\phi) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\psi(r,\theta,\phi) = E\psi(r,\theta,\phi) \tag{1}$$

On remarque que le potentiel

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

dépend seulement de r, le système est donc sphériquement symétrique. On peut alors factoriser ψ en un produit de deux fonctions R et Y tel que :

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y(\theta,\phi) \tag{2}$$

1.1 Résolution

On applique Laplace à ψ :

$$\nabla^2\psi = Y(\theta,\phi)\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{R(r)}{r^2}(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}) \tag{3}$$

Or en mécanique quantique, l'opérateur du moment angulaire au carré :

$$\hat{L}^2 Y = -\hbar^2(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}) \tag{4}$$

Et $\hat{L}^2 = l(l+1)\hbar^2$, donc :

$$\nabla^2\psi = Y(\theta,\phi)\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{R(r)l(l+1)\hbar^2}{r^2(-\hbar^2)}\right] \tag{5}$$

On applique à (1) :

$$(1) \leftrightarrow ER(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\left(2r\frac{dR(r)}{dr} + r^2\frac{d^2R(r)}{dr^2}\right) + \frac{R(r)l(l+1)\hbar^2}{r^2(-\hbar^2)}\right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}R(r) \tag{6}$$

Étape 1 : Réécriture de l'équation

On isole les dérivées :

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}R + \frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E\right)R = 0 \tag{7}$$

Étape 2 : Analyse des limites

Pour $r \to \infty$: Le potentiel devient négligeable :

$$R'' = -\frac{2mE}{\hbar^2}R$$

Comme $E < 0$:

$$R(r) = e^{-kr}, k = \sqrt{-2mE}/\hbar > 0$$

Pour $r \to 0$: On garde les termes dominant :

$$r^2R'' + 2rR' - l(l+1)R = 0 \tag{8}$$

On remarque une équation d'Euler, on cherche une solution de la forme $R = r^n$:

— $R' = nr^{n-1}$

— $R'' = n(n-1)r^{n-2}$

Donc :

$$r^2 \cdot n(n-1)r^{n-2} + 2r \cdot nr^{n-1} - \ell(\ell+1)r^n = 0 \tag{9}$$

$$n(n-1)r^n + 2nr^n - \ell(\ell+1)r^n = 0 \tag{10}$$

$$n^2 + n - \ell(\ell+1) = 0 \tag{11}$$

C'est une équation du second degré, résolvable sur R : $n = l$ ou $n = -l-1$ or pour $n = -(l+1)$ si $r \to 0$, R diverge. Donc $R = r^n$

Étape 3 : Forme générale de la solution

On écrit donc :

$$R(r) = r^l e^{-kr} f(r) \tag{12}$$

où $f(r)$ est une fonction polynomiale à déterminer.

Étape 4 : f(r)

En remplaçant $R(r) = r^l e^{-kr} f(r)$ dans l'équation, On obtient une équation qui est resolvable avec les polynôme de Laguerre associée, Et l'énergie se

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2 n^2}, \quad n \text{ étant la couche} \tag{13}$$

Étape 5 : Solution finale

La solution radiale (normalisée) est :

$$R_{n,l}(r) = \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l e^{-r/(na_0)} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) \tag{14}$$

où :
- a0 est le rayon de Bohr,
- L_{n-l-1}^{2l+1} sont les polynômes de Laguerre associés.

Solution complète de la fonction d'onde de l'atome d'hydrogène

Après avoir resolu pour $R_{n,l}(r)$, on obtient la fonction d'onde en combinant la partie radiale et la partie angulaire :

$$\psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi) = R_{n,l}(r)\, Y_l^m(\theta,\phi) \tag{15}$$

Les harmoniques sphériques

La partie angulaire $Y_l^m(\theta,\phi)$ est donnée par les harmoniques sphériques :

$$Y_l^m(\theta,\phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\, P_l^m(\cos\theta)\, e^{im\phi} \tag{16}$$

où :
- l est le nombre quantique angulaire
- m est la projection du moment angulaire su un axe
- $P_l^m(x)$ sont les polynômes de Legendre associés.

Densité de probabilité

La densité de probabilité de trouver l'électron en (r, θ, ϕ) est :

$$P(r, \theta, \phi) = |\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)|^2 \tag{17}$$

C'est la valeur qu'on utilisera pour générer les probables positions de l'elctrons dans l'espace 3D sur python.