

# Atome d'hélium classique

ORODEL Olivia

UFR de Physique, Université Paris-Cité, Paris, France

(Dated: 13 mai 2025)

Cette étude explore la dynamique classique de l'atome d'hélium en tant que système à trois corps soumis aux interactions coulombiennes. À l'aide d'une intégration numérique des équations du mouvement via la méthode *odeint*, nous analysons l'évolution temporelle des électrons en fonction des conditions initiales. L'approche adoptée met en évidence plusieurs régimes de trajectoires, allant d'orbites stables à des comportements chaotiques. En comparant nos résultats aux travaux de Yamamoto et Kaneko (*Phys. Rev. Lett.*, 1993), nous quantifions l'influence des paramètres initiaux sur la stabilité du système et discutons les limites inhérentes à la modélisation classique. L'analyse des trajectoires obtenues permet d'identifier les mécanismes responsables de la transition vers le chaos et d'évaluer la robustesse du modèle face aux incertitudes numériques.

## I. INTRODUCTION

L'atome d'hélium classique constitue un exemple de système à trois corps, où deux électrons en interaction coulombienne évoluent autour d'un noyau central fixe. Contrairement à l'atome d'hydrogène, qui admet une solution analytique en mécanique quantique, l'atome d'hélium ne peut être résolu exactement, même dans une approche classique. En effet, la dynamique des électrons est gouvernée par un couplage non linéaire entre l'attraction exercée par le noyau et la répulsion mutuelle entre les électrons, ce qui empêche toute intégrabilité du système. Cette complexité se traduit par une forte sensibilité aux conditions initiales, menant à des comportements variés allant d'orbites stables à des trajectoires chaotiques.

L'étude des systèmes à trois corps est importante en physique, notamment pour comprendre les dynamiques complexes et la transition vers le chaos dans des contextes allant de la mécanique céleste aux interactions atomiques. Dans le cas de l'atome d'hélium, la compétition entre les forces en présence peut conduire à des orbites bornées, où les électrons adoptent des trajectoires récurrentes autour du noyau, ou à un phénomène d'auto-ionisation, caractérisé par l'éjection d'un électron lorsque l'interaction mutuelle entre les électrons devient prédominante sur l'attraction nucléaire.

Dans cette étude, nous analysons numériquement l'évolution temporelle des trajectoires électroniques en intégrant les équations du mouvement à l'aide de la méthode *odeint*. En faisant varier les conditions initiales, nous identifions différents régimes dynamiques et comparons nos résultats aux travaux de Yamamoto et Kaneko (*Phys. Rev. Lett.*, 1993), qui ont mis en évidence des transitions entre orbites quasi périodiques et trajectoires chaotiques.

L'objectif est d'étudier la stabilité des trajectoires électroniques et d'évaluer l'impact des paramètres initiaux sur l'évolution du système. L'approche adoptée

permet d'isoler les mécanismes responsables de la dispersion rapide des électrons et d'interpréter ces comportements dans le cadre d'un modèle classique.

## II. MODÉLISATION ET THÉORIE

### A. Formalisation du problème

L'atome d'hélium classique est un système à trois corps constitué d'un noyau de charge  $+2e$  et de deux électrons de charge  $-e$ , interagissant via des forces coulombiennes. Le noyau étant beaucoup plus massif que les électrons, nous supposons qu'il reste fixe dans l'espace, ce qui simplifie le problème en réduisant le nombre de degrés de liberté.

La dynamique du système est décrite par la seconde loi de Newton appliquée aux deux électrons et au noyau, avec des forces dérivées du potentiel électrostatique. En notant  $r_0$  la position du noyau et  $r_1, r_2$  celles des deux électrons, les équations du mouvement sont données par :

$$M\ddot{r}_0 = \frac{2e^2}{r_{10}^3}(r_1 - r_0) + \frac{2e^2}{r_{20}^3}(r_2 - r_0) \quad (1)$$

$$\ddot{r}_1 = -\frac{2e^2}{r_{10}^3}(r_1 - r_0) + \frac{e^2}{r_{12}^3}(r_1 - r_2) \quad (2)$$

$$\ddot{r}_2 = -\frac{2e^2}{r_{20}^3}(r_2 - r_0) - \frac{e^2}{r_{12}^3}(r_1 - r_2) \quad (3)$$

où  $M = 8000$  est le rapport entre la masse du noyau et celle de l'électron et  $e = 1$  est la charge de l'électron normalisée.

Ces équations montrent que la dynamique des électrons est fortement couplée, ce qui rend le système non intégrable et nécessite une résolution numérique.

## B. Dynamique du système

Selon les conditions initiales, le système peut évoluer selon différents régimes :

- Orbites bornées : les électrons restent confinés autour du noyau, formant des trajectoires régulières et quasi-périodiques
- Auto-ionisation : l'un des électrons acquiert suffisamment d'énergie pour s'éloigner indéfiniment du noyau.
- Dynamique chaotique : le mouvement devient imprévisible, les trajectoires des électrons étant extrêmement sensibles aux conditions initiales.

L'objectif est d'analyser ces régimes en fonction des paramètres initiaux et de comparer les résultats à ceux connus ([1]).

## C. Réduction du système

Pour simplifier l'intégration numérique, nous travaillons avec des unités adimensionnées :

- Masse de l'électron comme unité de masse :  $m_e = 1$
- Normalisation de la constante de Coulomb :  $ke^2 = 1$
- Unité de longueur correspondant à une distance initiale typique :  $r_0 = 1$

Cette normalisation permet d'éliminer les constantes physiques des équations et d'améliorer la stabilité numérique des simulations.

## III. MÉTHODES NUMÉRIQUES

Les équations établies précédemment ne pouvant être résolues analytiquement, nous devons les intégrer numériquement pour analyser les trajectoires électroniques.

### A. Choix de l'algorithme d'intégration

La résolution des équations du mouvement repose sur l'intégration numérique d'un système d'équations différentielles couplées. Étant donné la complexité du problème, nous avons choisi d'utiliser la méthode *odeint* de la bibliothèque SciPy, qui repose sur un solveur de type LSODA.

Cette méthode présente plusieurs avantages :

- Adaptativité du pas de temps : elle ajuste dynamiquement la taille du pas en fonction de la variation des dérivées, ce qui permet une meilleure précision sans nécessiter un pas trop fin a priori.
- Robustesse pour les systèmes raides : LSODA bascule automatiquement entre une méthode explicite

et une méthode implicite en fonction du comportement du système, assurant une meilleure stabilité numérique.

- Gestion efficace des erreurs numériques : elle contrôle l'erreur locale à chaque itération, limitant ainsi l'accumulation des erreurs d'arrondi

## B. Réformulation du système d'équations

Les équations du mouvement sont de la forme :

$$\ddot{r}_i = \sum_{j \neq i} e_i e_j \frac{r_j - r_i}{|r_j - r_i|^3} \quad (4)$$

Pour pouvoir être résolues par *odeint*, elles doivent être transformées en un système d'équations du premier ordre en introduisant les vitesses  $\frac{dr_i}{dt} = v_i$

Le système devient alors un système d'équations différentielles de dimension 12 (6 équations pour les positions et 6 pour les vitesses des deux électrons en 2D). Dans l'implémentation numérique, ces équations sont intégrées sous forme vectorielle avec un vecteur d'état contenant successivement les positions et vitesses des électrons.

L'intégration est effectuée sur un intervalle de temps choisi, en fixant des conditions initiales spécifiques aux positions et vitesses des électrons.

## C. Validation du modèle

Avant d'explorer les régimes dynamiques du système, il est nécessaire de vérifier que l'intégration numérique respecte les lois fondamentales de la mécanique classique. Nous vérifions la conservation des quantités suivantes :

*a. Énergie mécanique totale* : L'énergie mécanique du système doit rester constante au cours du temps, à l'exception des erreurs numériques d'ordre négligeable :

$$E = E_{cin} + E_{int} \quad (5)$$

où :

$$E_{cin} = \frac{1}{2} M |v_0|^2 + \frac{1}{2} m (|v_1|^2 + |v_2|^2) \quad (6)$$

$$E_{int} = -\frac{2e^2}{r_{10}} - \frac{2e^2}{r_{20}} - \frac{2e^2}{r_{12}} \quad (7)$$

*b. Moment cinétique :* Le moment cinétique total du système est défini par :

$$L = M(\vec{r}_0 \wedge \vec{v}_0) + m(\vec{r}_1 \wedge \vec{v}_1) + m(\vec{r}_2 \wedge \vec{v}_2) \quad (8)$$

*c. Impulsion :* L'impulsion totale du système est définie par :

$$\vec{P} = M\vec{v}_0 + m(\vec{v}_1 + \vec{v}_2) \quad (9)$$

#### D. Exploration des conditions initiales

L'atome d'hélium classique présente un comportement fortement dépendant des conditions initiales. Pour analyser les différents régimes dynamiques, nous explorons une large gamme de configurations initiales :

- Positions initiales : configuration colinéaire des électrons avec le noyau, configuration triangulaire avec un électron plus proche du noyau.
- Vitesses initiales : distribution aléatoire avec conservation de l'énergie totale initiale, conditions correspondant aux figures de l'article [1].

Les résultats sont analysés en fonction des trajectoires obtenues, en identifiant les orbites bornées, les phénomènes d'auto-ionisation et les configurations chaotiques.

## IV. RÉSULTATS ET ANALYSE

### A. Première intégration

L'intégration numérique des équations du mouvement permet d'obtenir les trajectoires des électrons en interaction coulombienne avec le noyau. Cette première simulation permet d'identifier un régime d'orbite bornée stable et de vérifier la cohérence du modèle numérique.

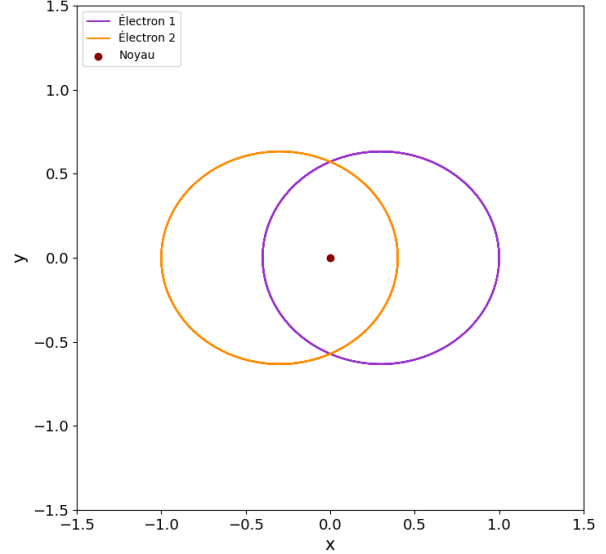


FIGURE 1 – Trajectoires des électrons autour du noyau pour une orbite bornée stable

La Figure 1 représente les trajectoires des électrons dans le plan  $(x, y)$  pour une configuration initiale où les électrons sont disposés symétriquement de part et d'autre du noyau avec des vitesses initiales orthogonales à leur axe de symétrie telles que  $(r_1, v_1) = (1.0, 1.0)$  et  $(r_2, v_2) = (-1.0, -1.0)$ . L'évolution du système montre que les électrons suivent des orbites fermées et régulières, indiquant une dynamique confinée sans auto-ionisation sur l'intervalle temporel considéré.

L'analyse de cette première intégration met en évidence une configuration dans laquelle les électrons adoptent des trajectoires bornées et régulières autour du noyau. Pour les conditions initiales considérées, l'équilibre dynamique entre l'attraction coulombienne exercée par le noyau et la répulsion mutuelle entre les électrons conduit à un régime d'oscillations périodiques. L'absence d'échappement confirme la stabilité orbitale dans un régime non ionisé.

La mise en évidence de ces trajectoires bornées constitue une première validation du modèle et du schéma numérique employé. Toutefois, afin d'évaluer la robustesse de l'intégration et d'assurer l'absence de dérives numériques, l'analyse de la conservation des quantités dynamiques est nécessaire. Cette vérification est réalisée dans la section suivante.

### B. Fiabilité du code et quantité conservée

L'intégration numérique des équations du mouvement doit respecter les lois fondamentales de la mécanique

classique. En l'absence de dissipation ou de forces externes, l'énergie mécanique totale, le moment cinétique et l'impulsion du système doivent rester constants au cours du temps. Toute dérive significative de ces grandeurs traduirait une accumulation d'erreurs numériques ou une instabilité du schéma d'intégration.

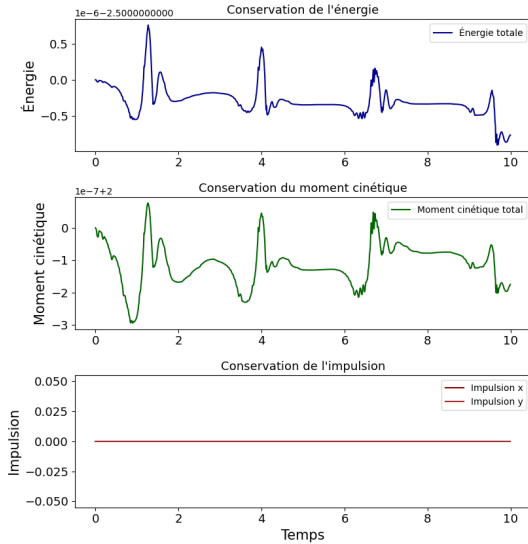


FIGURE 2 – Évolution de l'énergie mécanique, du moment cinétique et de l'impulsion au cours du temps

La Figure 2 présente l'évolution de ces trois quantités au cours du temps. L'analyse des courbes montre que l'énergie mécanique totale et le moment cinétique présentent de faibles fluctuations, de l'ordre de  $10^{-6}$  à  $10^{-7}$ , qui restent négligeables au regard de l'échelle du problème. Ces variations, dues à la précision du solveur et aux erreurs d'arrondi, restent compatibles avec la stabilité du modèle.

Contrairement aux deux autres quantités, l'impulsion totale du système reste parfaitement constante sur toute la durée de la simulation. Ce résultat valide la cohérence de l'implémentation des forces coulombiennes et l'absence de dérives numériques dans le calcul des accélérations.

L'ensemble de ces observations atteste de la fiabilité du schéma numérique employé. Les fluctuations observées restent d'un ordre de grandeur compatible avec la précision attendue de la méthode *odeint*, garantissant ainsi la robustesse des trajectoires obtenues et la pertinence des résultats présentés dans la suite de l'étude.

## C. Trajectoires "classiques"

L'analyse des trajectoires électroniques permet d'identifier les régimes dynamiques accessibles à l'atome d'hélium classique en fonction des conditions initiales. Deux types de comportements principaux émergent : des orbites bornées, où les électrons restent confinés autour du noyau, et des trajectoires d'auto-ionisation, caractérisées par l'échappement d'un électron sous l'effet des interactions coulombiennes.

### 1. Orbites bornées

Dans certaines conditions initiales, les électrons adoptent des trajectoires confinées autour du noyau, caractérisant un régime d'orbites bornées. La Figure 3 (animation) illustre un exemple de trajectoire stable obtenue lors de l'intégration numérique avec la configuration initiale  $(r_1, v_1) = (1.0, 0.8)$  et  $(r_2, v_2) = (-1.0, -0.8)$ . L'évolution des électrons montre qu'ils oscillent de manière régulière sans que l'un d'eux ne s'échappe du système.

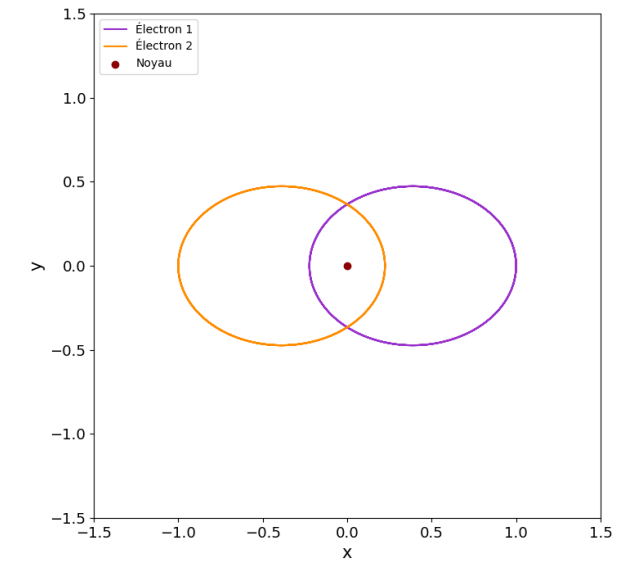


FIGURE 3 – Exemple d'orbite bornée des électrons

Ce comportement traduit un équilibre dynamique entre l'attraction coulombienne exercée par le noyau et la répulsion mutuelle entre les électrons. Lorsque les conditions initiales sont adaptées, l'énergie du système ne permet pas à l'un des électrons d'atteindre la vitesse de libération, maintenant ainsi une configuration stable.

## 2. Auto-ionisation

À l'inverse, certaines configurations initiales conduisent à l'auto-ionisation, processus dans lequel un électron acquiert une énergie suffisante pour s'éloigner indéfiniment du noyau, ici les conditions sont  $(r_1, v_1) = (1.5, 0.8)$  et  $(r_2, v_2) = (-1.5, -0.8)$ . La Figure 4 (animation) illustre une trajectoire typique où un des électrons est éjecté tandis que le second reste confiné.

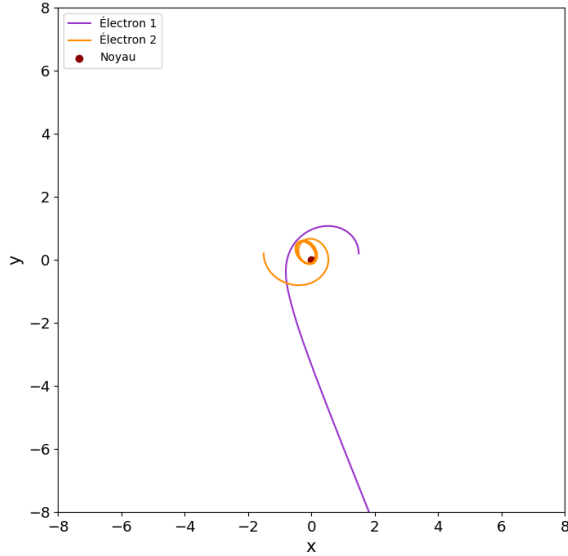


FIGURE 4 – Exemple d'une trajectoire illustrant le phénomène d'auto-ionisation

Ce phénomène résulte principalement du transfert d'énergie entre les électrons au cours de leur interaction mutuelle. Lorsque l'un des électrons subit une accélération suffisante sous l'effet des forces coulombiennes, il dépasse l'énergie de liaison et quitte le système. La dynamique du second électron peut alors être fortement perturbée, adoptant une trajectoire modifiée en réponse à la perte du couplage avec son partenaire initial.

L'analyse de ces deux régimes met en évidence la sensibilité du système aux conditions initiales. L'étude de trajectoires spécifiques, telles que le tressage torique et l'anneau torique inversé, permettra d'explorer plus en détail ces dynamiques particulières et sera abordée dans la section suivante.

### D. Trajectoires spécifiques

L'étude des trajectoires met en évidence des régimes dynamiques remarquables lorsque les conditions initiales

des électrons sont soigneusement choisies. Parmi ces configurations particulières, trois trajectoires distinctes ont été observées et correspondent aux résultats décrits dans les travaux de Yamamoto et Kaneko [1] :

- Le tressage torique des électrons (braiding motion), où les électrons alternent régulièrement leur position dans un mouvement entrelacé.
- L'anneau torique inversé, caractérisé par une rotation stable des électrons autour du noyau avec une inversion périodique de leur mouvement relatif.
- Le tore semi-circulaire, configuration dans laquelle les électrons décrivent une trajectoire confinée dans le plan.

Ces configurations sont associées à des régimes dynamiques non triviaux où l'interaction coulombienne entre les électrons joue un rôle fondamental dans la stabilisation de leurs trajectoires.

#### 1. Tressage torique des électrons

Le tressage torique est une trajectoire où les électrons exécutent un mouvement alterné et symétrique autour du noyau, échangeant continuellement leur position. Cette stabilité résulte du même mécanisme d'équilibre décrit précédemment.

Lorsque l'un des électrons se rapproche du noyau, il accélère sous l'effet de l'attraction électrostatique, tandis que l'autre, plus éloigné, ralentit. Ce différentiel de vitesse conduit à un croisement des trajectoires : l'électron le plus rapide dépasse son homologue et les rôles s'inversent, instaurant une dynamique périodique et auto-entretenu.

Pour obtenir ce régime, les conditions initiales imposées sont  $(r_1, v_1) = (1.40, 0.86)$  et  $(r_2, v_2) = (-1.0, -1.0)$

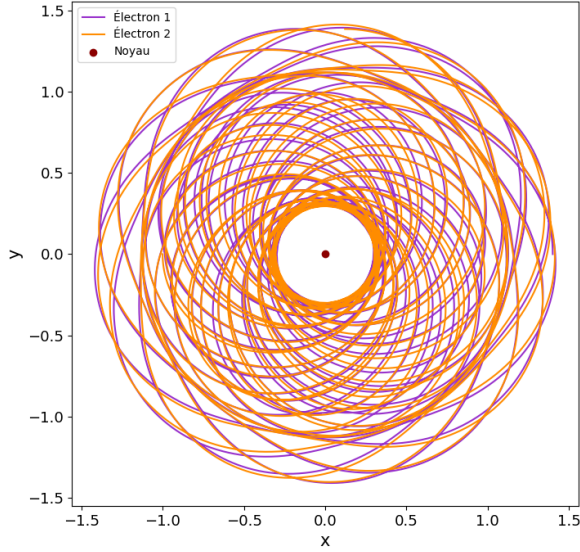


FIGURE 5 – Dynamique des électrons dans le régime de tressage torique

La Figure 5 (animation) illustre cette structure dynamique. On y observe clairement l'enchevêtrement des trajectoires, témoignant d'un échange énergétique constant entre les électrons. Cette configuration stabilise le système et empêche toute dérive chaotique ou auto-ionisation.

Cette structure orbitale constitue une solution quasi stationnaire où l'énergie reste confinée au sein du système. L'alternance régulière des positions et des vitesses assure la préservation de la cohérence du mouvement, maintenant les électrons dans un régime ordonné et stable.

## 2. Anneau torique inversé

L'anneau torique inversé correspond à une autre structure dynamique particulière, où les électrons suivent une trajectoire circulaire autour du noyau tout en inversant périodiquement leur direction relative. Contrairement au tressage torique où les électrons se croisent régulièrement, cette configuration présente une rotation alternée, conservant une symétrie tout au long de l'évolution du système.

Ce régime repose sur une conservation du moment cinétique et un échange d'énergie régulé entre les électrons. Lorsqu'un électron atteint une distance maximale par rapport au noyau, il inverse sa direction, entraînant un effet symétrique sur le second. Cette inversion cyclique maintient les électrons dans une configuration orbitale ordonnée et prévisible.

Les conditions initiales associées à cette dynamique sont  $(r_1, v_1) = (3.00, 0.40)$  et  $(r_2, v_2) = (1.0, 1.0)$ .

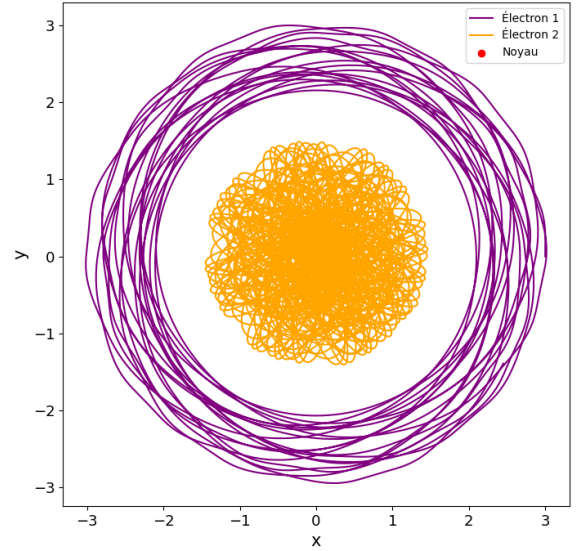


FIGURE 6 – Trajectoire des électrons dans le régime de l'anneau torique inversé.

La Figure 6 (animation) illustre cette dynamique inversée. Cette périodicité marque une différence avec le tressage torique, où les électrons échangent plutôt leur position.

Comme pour le tressage torique, cette trajectoire constitue une solution stable où les forces en présence s'équilibrent de manière dynamique. L'énergie du système demeure confinée, excluant tout scénario d'éjection d'électron.

## 3. Tore semi-circulaire

Le tore semi-circulaire est une configuration dans laquelle les électrons décrivent une trajectoire confinée dans le plan. Contrairement aux deux cas précédents, cette structure présente une asymétrie ; les électrons ne parcourent pas un tore complet autour du noyau, mais se déplacent de manière alternée dans une région limitée, en formant un motif spatial partiellement replié.

Dans cette configuration, la dynamique des électrons reste synchronisée dans une région semi-circulaire, suggérant une oscillation couplée autour d'un axe commun sans passage à travers le noyau. Ce comportement suggère un équilibre dynamique plus contraint, où la symétrie du système est partiellement brisée tout en

conservant une régularité temporelle.

Les conditions initiales correspondantes sont les suivantes :  $r_1 = (1.95, 0.50)$   $v_1 = (0.0, 0.0)$  et  $r_2 = (0.85, 0.50)$   $v_2 = (0.0, 0.0)$ .

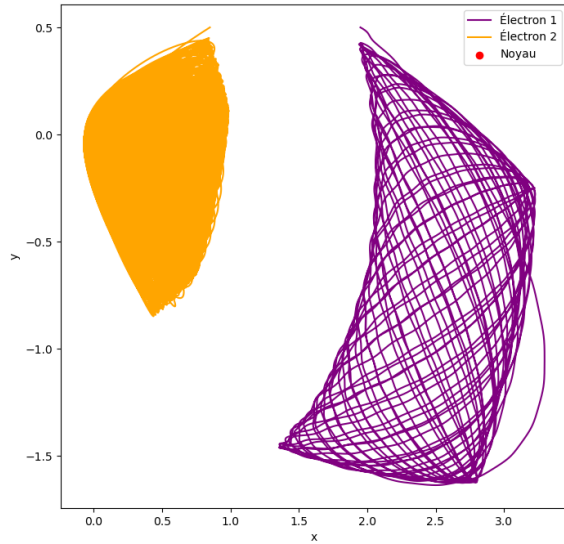


FIGURE 7 – Trajectoire électroniques dans le régime du tore semi-circulaire.

La Figure 7 illustre cette trajectoire. On y observe que les électrons restent confinés dans un même hémipplan, adoptant une dynamique réciproque sans franchissement de trajectoire. L'orbite reste stable sur l'intervalle de temps simulé.

L'observation de ces régimes met en évidence la diversité des trajectoires accessibles dans l'atome d'hélium classique. Ces configurations illustrent comment les interactions coulombiennes, couplées aux conditions initiales, façonnent des structures orbitales spécifiques, dont la stabilité repose sur des mécanismes d'échange énergétique récurrents.

### E. Masse réduite

Jusqu'à présent la masse du noyau était fixée à  $M = 8000$ , dans la limite d'une masse nucléaire très grande devant celle des électrons, le noyau est considéré comme fixe. Afin d'étudier l'effet du mouvement du noyau sur la dynamique du système, les équations du mouvement peuvent être intégrées en lui attribuant une masse réduite  $M = 1$ , comparable à celle des électrons.

Le système présente alors une dynamique plus complexe, en raison de l'instabilité aux interactions à trois

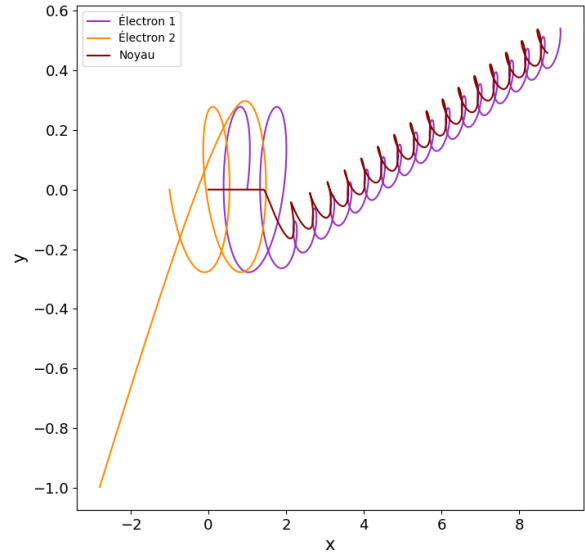


FIGURE 8 – Trajectoire chaotique du système pour une masse réduite du noyau telle que  $M = 1$ .

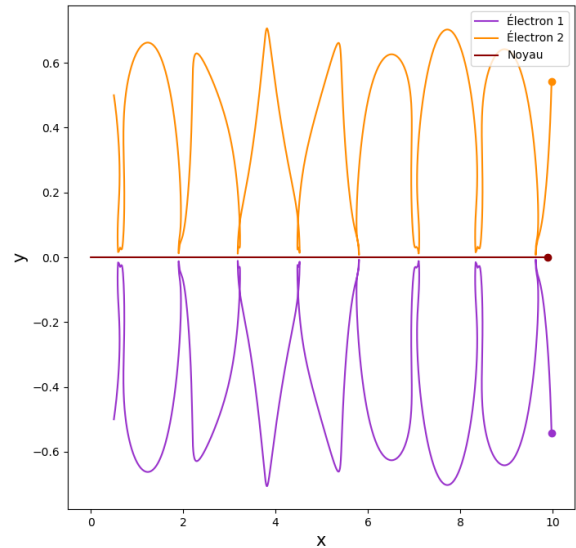


FIGURE 9 – Trajectoire symétrique du système pour une masse réduite du noyau telle que  $M = 1$ .

corps en gravitation ou électrostatique. Pour la plupart des configurations initiales, cette instabilité conduit à un comportement chaotique, se traduisant par une auto-ionisation rapide ou un échange d'énergie non borné entre les particules. La Figure 8 (animation) est une illustration d'un comportement chaotique pour des conditions initiales données.

Cependant, certaines configurations initiales



symétriques permettent d'observer un comportement stable sur un certain temps d'intégration. La Figure 9 (animation) illustre ce cas où les deux électrons évoluent de manière périodique tout en maintenant une structure spatiale régulière, malgré les oscillations du noyau autour de sa position moyenne. Ici les conditions initiales sont  $r_0 = (0.0, 0.0)$   $v_0 = (0.9, 0.0)$  et  $r_1 = (0.5, -0.5)$   $v_1 = (1.0, 1.0)$  et  $r_2 = (0.5, 0.5)$   $v_2 = (1.0, -1.0)$ . Cette configuration permet de mettre en évidence l'importance des symétries initiales dans la stabilité du système à trois corps, même en présence d'un noyau mobile.

## V. CONCLUSION

Les résultats obtenus illustrent la variété dynamique du modèle classique de l'atome d'hélium. La dépendance aux conditions initiales conduit à une diversité de régimes, allant de trajectoires bornées stables à des dynamiques chaotiques ou auto-ionisantes. Ces comportements traduisent l'instabilité caractéristique des systèmes à trois corps en interaction coulombienne.

Trois régimes remarquables, le tressage torique, l'anneau torique inversé et le tore semi-circulaire mettent en évidence des trajectoires régulières et stabilisées

par des échanges d'énergie périodiques. Ces structures témoignent de l'importance des symétries initiales dans la régulation du système.

L'introduction d'un noyau mobile de masse réduite  $M = 1$  accentue l'instabilité globale, tout en permettant l'émergence de configurations stables dans certains cas symétriques. Cette observation confirme la solidité de certaines structures dynamiques malgré la complexité du couplage.

Enfin, la conservation des invariants mécaniques valide la cohérence numérique des trajectoires simulées. L'ensemble de ces résultats est en accord avec l'article de Yamamoto et Kaneko, et illustrent l'intérêt d'une modélisation classique pour explorer la transition vers le chaos dans les systèmes atomiques.

## Références

- [1] T.Yamamoto, et K.Kaneko, Helium Atom as a Classical Three-Body Problem, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 70, 1928, **1993**
- [2] Animation Matplotlib : [Matplotlib Animation Tutorial](#) & [Pyplot animation](#)