

Chapitre 5

Mouvement dans un potentiel central : Atome d'hydrogène

Nous commençons la discussion en passant en revue l'équation de Schrödinger pour un seul électron soumis à un potentiel central $V(r)$. Dans un premier temps, nous établissons l'équation de Schrödinger qui régit la fonction d'onde radiale. Ensuite, nous déterminons les solutions analytiques de l'équation radiale de Schrödinger dans le cas particulier d'un potentiel de Coulomb.

5.1 Potentiel central

Dans cette section nous étudierons l'interaction d'une particule non relativiste de masse m et d'énergie E avec des potentiels dits centraux, $V(\vec{r}) = V(r)$, où $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$ est la distance radiale à l'origine. Il est plus pratique de travailler en coordonnées sphériques (r, θ, ϕ) .

La dynamique de la particule est gouvernée par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (5.1)$$

où H est l'hamiltonien de la particule

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(\vec{R}) \quad (5.2)$$

L'opérateur impulsion $\vec{P} = -i\hbar \nabla_r = (-i\hbar \partial_x, -i\hbar \partial_y, -i\hbar \partial_z)$, L'hamiltonien peut s'écrire sous la forme :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 + V(\vec{R}) \quad (5.3)$$

où $\nabla_r^2 = -\hbar^2(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2)$, en utilisant les coordonnées sphériques, on peut réécrire 5.3 :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \left(\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + V(R). \quad (5.4)$$

$$\begin{aligned}
H &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{2mr^2} + V(R), \\
|\vec{L}|^2 &= -\hbar^2 \left\{ -\frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \phi} \right)^2 - \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right\}. \\
H\psi(\vec{r}) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{2mr^2} + V(R) \right) \psi(\vec{r})
\end{aligned} \tag{5.5}$$

Le potentiel $V(\vec{r}) = V(r)$ est une fonction de r , et indépendant de θ et ϕ , de plus les observables L_z et $|\vec{L}|^2$ commutent avec H par conséquent les états propres de H sont aussi états propres de L_z et L^2 et seront indexés par m et ℓ ,

$$\Psi(\vec{r}) = R_\ell(r) Y_{\ell,m}(\theta, \phi). \tag{5.6}$$

où les fonctions $Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$ normalisées sont les harmoniques sphériques données par (3.123) du chapitre 3 et qui vérifient l'équation :

$$L^2 Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = \hbar^2 \ell(\ell + 1) Y_{\ell,m}(\theta, \phi) \tag{5.7}$$

En substituant (5.6) dans l'équation (5.5), on obtient :

$$\begin{aligned}
H(R_\ell(r) Y_{\ell,m}(\theta, \phi)) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{2mr^2} + V(R) \right) R_\ell(r) (Y_{\ell,m}(\theta, \phi)) \\
E(R_\ell(r) Y_{\ell,m}(\theta, \phi)) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2mr^2} + V(r) \right) (R_\ell(r) Y_{\ell,m}(\theta, \phi))
\end{aligned}$$

En divisant par $Y_{\ell,m}$ pour obtenir :

$$ER_\ell(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) R_\ell(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2mr^2} R_\ell(r) + V(r) R_\ell(r) \tag{5.8}$$

Comme nous l'avons vu dans le chapitre 3, la fonction radiale $R_\ell(r)$ dépend du nombre quantique ℓ et ne dépend pas de m . $R_\ell(r)$ est une fonction de carré sommable et dépend aussi du nombre quantique principal n , il en est de même pour les énergies E qu'on les notera $E_{n,\ell}$.

on obtient donc une équation différentielle de second ordre :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R_{n,\ell}(r) + V(r)R_{n,\ell}(r) = ER_{n,\ell}(r) \quad (5.9)$$

Pour une valeur fixée de ℓ , l'énergie E est dégénérée $2\ell + 1$ fois.

Il est souvent utile d'introduire une fonction

$$u_{n,\ell}(r) = rR_{n,\ell}(r) \quad (5.10)$$

après substitution dans (5.9), on montre que $u_{n,\ell}(r)$ satisfait l'équation différentielle suivante :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_{n,\ell}(r)}{dr^2} + \left[\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r) \right] u_{n,\ell}(r) = E_{n,\ell} u_{n,\ell}(r) \quad (5.11)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_{n,\ell}(r)}{dr^2} + V_{eff} u_{n,\ell}(r) = E_{n,\ell} u_{n,\ell}(r) \quad (5.12)$$

avec $V_{eff} = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r)$ est un potentiel effectif dont le premier terme est appelé **barrière de potentiel centrifuge**.

5.1.1 Sphère de potentiel infini

Considérons une sphère de rayon a :

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{pour } 0 \leq r \leq a \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (5.13)$$

En utilisant l'équation (5.9) on peut montrer que la fonction d'onde radiale satisfait :

$$\frac{d^2 R_{n,\ell}(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{n,\ell}(r)}{dr} + \left(k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) R_{n,\ell}(r) = 0 \quad (5.14)$$

avec $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ dans la région $0 \leq r \leq a$.

Si on fait le changement d'échelle $z = kr$, l'équation différentielle (5.25) peut s'écrire :

$$\frac{d^2 R_{n,\ell}(z)}{dz^2} + \frac{2}{z} \frac{dR_{n,\ell}(z)}{dz} + \left[1 - \frac{\ell(\ell+1)}{z^2} \right] R_{n,\ell}(z) = 0. \quad (5.15)$$

Les deux solutions indépendantes de cette équation sont appelées les fonction de Bessel sphériques et sont données par :

$$j_\ell(z) = z^\ell \left(-\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^\ell \left(\frac{\sin z}{z} \right), \quad (5.16)$$

$$y_\ell(z) = -z^\ell \left(-\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^\ell \left(\frac{\cos z}{z} \right). \quad (5.17)$$

Les premières fonctions de Bessel sont données comme suit :

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z} \quad (5.18)$$

$$j_1(z) = \frac{\sin z}{z^2} - \frac{\cos z}{z} \quad (5.19)$$

$$y_0(z) = -\frac{\cos z}{z} \quad (5.20)$$

$$y_1(z) = -\frac{\cos z}{z^2} - \frac{\sin z}{z} \quad (5.21)$$

$$(5.22)$$

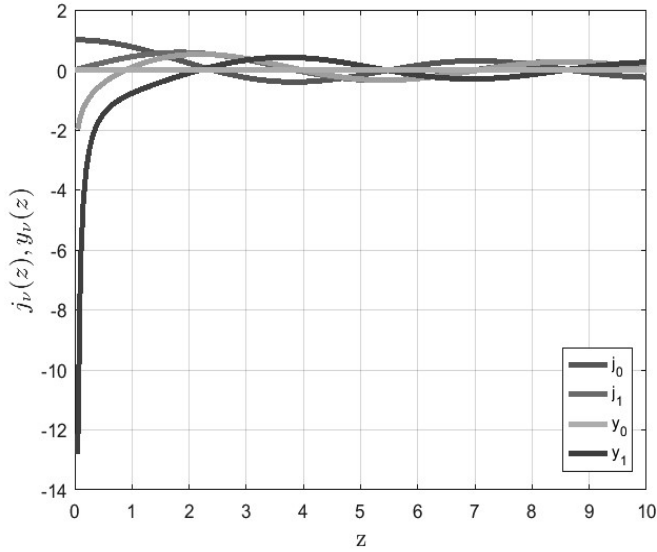


FIGURE 9 – Les premières fonction de Bessel

Les solutions représentées graphiquement dans la figure (9) montrent que les fonctions sphériques de Bessel oscillent en fonction de z . Par ailleurs, les fonctions y_ℓ ne sont pas physique au point $z = 0$ car elles ne sont pas de carré sommable. Par conséquent, les fonctions d'ondes radiales $R_{n,\ell}$ sont proportionnelles aux fonctions de Bessel j_ℓ .

Dans le but de satisfaire les conditions aux bords : $R_{n,\ell}(z = a) = R_{n,\ell}(z = 0) = 0$, ce ci implique que les fonctions de Bessel s'annulent aux points $z_{n,\ell} = ka$ ainsi les énergies permises sont :

$$E_{n,\ell} = z_{n,\ell}^2 \frac{\hbar^2}{2ma^2} \quad (5.23)$$

Nous sommes maintenant en mesure d'interpréter les trois nombres quantiques n , l et m qui déterminent la forme de la fonction d'onde spécifiée dans l'Eq. (5.6).

Comme nous l'avons vu dans le chapitre 3 :

- le nombre quantique azimutal \mathbf{m} détermine le nombre de nœuds dans la fonction d'onde lorsque l'angle azimutal ϕ varie entre 0 et 2π . Ainsi, $\mathbf{m}=0$ correspond à aucun nœud, $\mathbf{m}=1$ à un seul nœud, $\mathbf{m}=2$ à deux nœuds, etc.
- le nombre quantique polaire ℓ détermine le nombre de nœuds dans la fonction d'onde car l'angle polaire θ varie entre 0 et π . Encore une fois, $\ell = 0$ correspond à aucun nœud, $\ell = 1$ à un seul nœud, etc.
- le nombre quantique radial \mathbf{n} détermine le nombre de nœuds dans la fonction d'onde lorsque la variable radiale r varie entre 0 et a (sans compter les nœuds à $r = 0$ ou $r = a$). Ainsi, $\mathbf{n}=1$ correspond à aucun nœud, $\mathbf{n}=2$ à un seul nœud, $\mathbf{n}=3$ à deux nœuds, etc.

Dans le cas d'un puits de potentiel infini, n doit être un **entier positif**, ℓ doit être un **entier non négatif** et m doit être un entier compris entre $-\ell$ et ℓ .

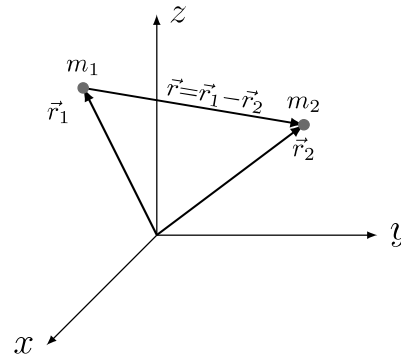
En résumé, les fonctions d'onde (5.6) s'écrivent en fonction de ℓ et m :

$$\Psi(\vec{r}) = j_{n,\ell}(kr)Y_{\ell}^m(\theta, \varphi). \quad (5.24)$$

5.1.2 Système de deux particules en interaction

5.1.2.1 Hamiltonien du système

On considère un système physique isolé composé de deux particules de masse m_1 et m_2 respectivement, supposons que l'interaction entre les particules ne dépende que de leur distance relative $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ où \vec{r}_1 et \vec{r}_2 sont les vecteurs position respectifs des deux particules dans un référentiel d'inertie d'origine O .



Si on note par $V(r)$ l'énergie d'interaction des deux particules, l'hamiltonien du système dans le référentiel du

centre de masse s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(r) \quad (5.25)$$

où $\nabla_1^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2}$ et $\nabla_2^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2}$ sont respectivement les laplaciens de chaque particule.

Soit G le centre de masse du système dont la position est définie par :

$$\vec{r}_G = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2} \quad (5.26)$$

Notons respectivement x_G, y_G, z_G et x, y, z les coordonnées de \vec{r}_G et \vec{r} .

En combinant les composantes de \vec{r} avec la relation (5.26), on obtient :

$$\vec{r}_1 = \vec{r}_G + \frac{m_2}{M}\vec{r} \quad (5.27)$$

$$\vec{r}_2 = \vec{r}_G - \frac{m_1}{M}\vec{r} \quad (5.28)$$

avec $M = m_1 + m_2$.

En utilisant la règle de dérivation des fonctions composées :

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial x_G}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x_G} + \frac{\partial x}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{m_1}{M} \frac{\partial}{\partial x_G} + \frac{\partial}{\partial x} \quad (5.29)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{\partial x_G}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial x_G} + \frac{\partial x}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{m_2}{M} \frac{\partial}{\partial x_G} - \frac{\partial}{\partial x} \quad (5.30)$$

de même pour les autres dérivées partielles $\frac{\partial}{\partial y_1}$ et $\frac{\partial}{\partial z_1}$.

L'hamiltonien (5.25) se réécrit en fonction des nouvelles variables comme suit

$$\begin{aligned}
H = & - \frac{\hbar^2}{2m_1} \left(\frac{m_1}{M} \frac{\partial}{\partial x_G} + \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{m_1}{M} \frac{\partial}{\partial x_G} + \frac{\partial}{\partial x} \right) \\
& - \frac{\hbar^2}{2m_1} \left(\frac{m_1}{M} \frac{\partial}{\partial y_G} + \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(\frac{m_1}{M} \frac{\partial}{\partial y_G} + \frac{\partial}{\partial y} \right) \\
& - \frac{\hbar^2}{2m_1} \left(\frac{m_1}{M} \frac{\partial}{\partial z_G} + \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(\frac{m_1}{M} \frac{\partial}{\partial z_G} + \frac{\partial}{\partial z} \right) \\
& - \frac{\hbar^2}{2m_2} \left(\frac{m_2}{M} \frac{\partial}{\partial x_G} - \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{m_2}{M} \frac{\partial}{\partial x_G} - \frac{\partial}{\partial x} \right) \\
& - \frac{\hbar^2}{2m_2} \left(\frac{m_2}{M} \frac{\partial}{\partial y_G} - \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(\frac{m_2}{M} \frac{\partial}{\partial y_G} - \frac{\partial}{\partial y} \right) \\
& - \frac{\hbar^2}{2m_2} \left(\frac{m_2}{M} \frac{\partial}{\partial z_G} - \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(\frac{m_2}{M} \frac{\partial}{\partial z_G} - \frac{\partial}{\partial z} \right) \\
& + V(x, y, z)
\end{aligned}$$

les termes proportionnels aux dérivées croisées $\frac{\partial^2}{\partial x \partial x_G}$ seront éliminés entre eux et l'hamiltonien du système s'écrit sous sa forme simplifiée :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_G^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + V(x, y, z) \quad (5.31)$$

$$= H_G + H_r \quad (5.32)$$

avec $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ est la masse réduite du système des deux particules, $\nabla_G^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_G^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_G^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_G^2}$ et $\nabla_r^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

- $H_G = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x_G^2}$ est l'hamiltonien du centre de masse dans le référentiel d'inertie, il décrit le mouvement du centre de masse.
- $H_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, y, z)$ est l'hamiltonien du système des deux particules dans le référentiel du centre de masse, il décrit le mouvement relatif du système de masse réduite μ

5.1.2.2 Fonctions et valeurs propres de H

$\{H, H_G, H_r\}$ constitue un E.C.O.C. et les trois observables possèdent un système de vecteurs propres commun. Pour un ket $|\psi\rangle$ donné on a :

$$H |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle, \quad (5.33)$$

$$H_r |\Psi\rangle = E_r |\Psi\rangle, \quad (5.34)$$

$$H_G |\Psi\rangle = E_G |\Psi\rangle \quad (5.35)$$

ce qui implique que l'énergie totale du système $E = E_G + E_r$.

Dans ce cas on peut considérer que l'espace des états \mathcal{E} du système est le produit tensoriel d'un espace \mathcal{E}_G décrivant le mouvement du centre de masse et d'un espace \mathcal{E}_r décrivant le mouvement relatif des deux particules :

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_G \otimes \mathcal{E}_r$$

On peut ainsi écrire un état quelconque $|\psi\rangle$ de \mathcal{E} comme étant un produit tensoriel d'un état $|\chi_G\rangle \in \mathcal{E}_G$ et d'un état $|\psi_r\rangle \in \mathcal{E}_r$:

$$|\Psi\rangle = |\chi_G\rangle \otimes |\psi_r\rangle$$

. Les hamiltoniens H_G et H_r agissent comme des prolongement des opérateurs sur l'espace des états \mathcal{E} voir (section 1.5.4 du chapitre 1) :

$$H_G |\chi_G\rangle = E_G |\chi_G\rangle \quad H_r |\psi_r\rangle = E_r |\psi_r\rangle \quad (5.36)$$

On peut projeter respectivement ces relations dans les représentations $|\vec{r}_G\rangle$ et $|\vec{r}\rangle$ pour trouver les fonctions d'ondes :

$$\langle \vec{r}_G | H_G | \chi_G \rangle = H_G \chi_G(\vec{r}_G) = E_G \chi_G(\vec{r}_G) \quad (5.37)$$

$$\langle \vec{r} | H_r | \psi_r \rangle = H_r \psi_r(\vec{r}) = E_r \psi_r(\vec{r}) \quad (5.38)$$

En remplaçant dans ces équations les hamiltoniens H_G et H_r par leurs formes explicites, on obtient les deux relations suivantes :

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_G^2 \chi_G(\vec{r}_G) = E_G \chi_G(\vec{r}_G) \quad (5.39)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 \psi_r(\vec{r}) + V(r) \psi_r(\vec{r}) = E_r \psi_r(\vec{r}) \quad (5.40)$$

- La fonction $\chi_G(\vec{r}_G)$ décrit le mouvement du centre de masse en tant que mouvement libre d'une particule de masse totale M . L'équation (5.39) est l'équation de Schrödinger décrivant ce mouvement avec E_G est l'énergie de translation du système des deux particules
- La fonction d'onde $\psi(\vec{r})$ décrit le mouvement relatif du système particules comme étant un mouvement d'une particule fictive de masse μ soumise à un potentiel $V(r)$. L'équation (5.40) est l'équation de Schrödinger de ces mouvements relatifs et E_r est l'énergie du système résultant de l'interaction des deux particules.

5.2 Atome d'hydrogène

Dans cette section, nous considérons un problème réel à deux corps soumis à un potentiel central électrostatique, c'est le cas par exemple de l'atome de l'hydrogène. On note respectivement m_p et m_e la masse du proton et celle de l'électron, on a : $m_p = 1836,1527 m_e$. l'électron et le proton, interagissent via un potentiel Coulombien.

$$V(r) = -k \frac{e^2}{r}, \quad \text{avec } k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \quad (5.41)$$

D'après la section précédente le problème du mouvement de deux particules en interaction peut se ramener à celui d'une particule fictive, de masse réduite $\mu = \frac{m_p m_e}{m_p + m_e}$, autour du centre de masse. Comme la masse du proton

est supérieure à celle de l'électron :

$$\mu = \frac{m_p m_e}{m_p + m_e} = \frac{m_p m_e}{m_p (1 + \frac{m_e}{m_p})} \approx m_e \quad (5.42)$$

Ce qui signifie que le centre de masse du système est presque confondu avec la position du proton(le noyau est supposé fixe et permet d'identifier l'origine de notre référentiel avec la position du proton) et que la particule fictive s'identifie à l'électron. La distance r qui apparaît dans l'expression du potentiel de Coulomb est la distance entre l'électron et le proton.

L'équation de Schrödinger qui décrit le mouvement relatif du système réduit (particule fictive de masse réduite μ) est donnée par (5.40) :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 \psi_r(\vec{r}) - k \frac{e^2}{r} \psi_r(\vec{r}) = E_r \psi_r(\vec{r}) \quad (5.43)$$

Pour alléger la notation, on peut omettre l'indice r et on note ($\nabla_r^2 := \nabla^2$ et $E_r := E$). où $\psi(\vec{r})$ et ∇^2 sont exprimés dans le système des coordonnées sphériques (r, θ, ϕ) :

$$\psi(\vec{r}) = \psi(r, \theta, \phi)$$

et

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \phi} \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \phi} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \quad (5.44)$$

La méthode des séparations des variables permet d'écrire $\psi(\vec{r})$ comme produit d'une harmonique sphérique $Y(\theta, \phi)$ et une partie radiale $R(r)$:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y_{\ell, m}(\theta, \phi). \quad (5.45)$$

En substituant cette expression dans l'équation (5.43) et en suivant le formalisme de la section (5.1) de ce chapitre, l'harmonique sphérique $Y_{\ell, m}(\theta, \phi)$ peut s'écrire :

$$Y_{\ell, m}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell + 1}{2} \cdot \frac{(\ell - |m|!)}{(\ell + |m|)!}} P_{\ell}^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (5.46)$$

avec ℓ et m sont des nombres quantiques qui vérifient :

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$$

et $P_\ell^m(\xi)$ est le polynôme de Legendre :

$$P_\ell^m(\xi) = (1 - \xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d\xi^{|m|}} P_\ell(\xi). \quad (5.47)$$

où $P_\ell(\xi)$ satisfait l'équation différentielle de Legendre :

$$\frac{d}{d\xi} \left[(1 - \xi^2) \frac{dP_\ell(\xi)}{d\xi} \right] + \ell(\ell + 1) P_\ell(\xi) = 0. \quad (5.48)$$

La fonction radiale vérifie l'équation différentielle :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)R(r)}{r^2} \right] - k \frac{e^2}{r} R(r) = E R(r). \quad (5.49)$$

5.2.1 Solution de l'équation radiale

la détermination des fonctions radiales revient à résoudre l'équation (5.49), pour ce faire nous allons utiliser les résultats la section (5.1 de ce chapitre) en partant de l'équation radiale(5.11) :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left[\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} - k \frac{e^2}{r} \right] u(r) = E u(r) \quad (5.50)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + V_{eff} u(r) = E u(r) \quad (5.51)$$

avec $V_{eff} = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} - k \frac{e^2}{r}$ est un potentiel effectif dont le premier terme est appelé barrière de potentiel centrifuge créée par le moment angulaire $\hbar \sqrt{\ell(\ell+1)}$, elle repousse l'électron du noyau.

Pour alléger l'écriture des formules nous introduisons des unités caractéristiques de la physique atomique à savoir le rayon de Bohr a_0 et l'énergie de Rydberg E_I :

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{ke^2m_e} = 52.9 \times 10^{-12}m. \quad (5.52)$$

$$E_I = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} = k \frac{e^2}{2a_0} = 13.6eV \quad (5.53)$$

Pour résoudre l'équation (5.50) on utilisera la variables ρ sans dimension :

$$\rho = \gamma r \quad (5.54)$$

$$\text{avec } \gamma = 2\sqrt{\frac{-2\mu E}{\hbar^2}} \quad (5.55)$$

et on pose

$$\lambda = \frac{ke^2}{\hbar} \sqrt{\frac{\mu}{-2E}} \quad (5.56)$$

Effectuons les changements de variables dans l'équation (5.50)

$$\frac{d^2}{d\rho^2}u - \left(\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} - \frac{\lambda}{\rho} + \frac{1}{4} \right) u = 0 \quad (5.57)$$

5.2.1.1 Solution asymptotique

La solution asymptotique de l'équation radiale est la solution de (5.57) lorsque le paramètre $\rho \rightarrow \infty$ et $\rho \rightarrow 0$.

— A la limite $\rho \rightarrow \infty$: l'équation (5.57) se réduit à :

$$\frac{d^2}{d\rho^2}u(\rho) - \frac{1}{4}u(\rho) = 0 \quad (5.58)$$

La solution générale de cette équation est donnée par :

$$u(\rho) = Ae^{\frac{-\rho}{2}} + Be^{\frac{\rho}{2}} \quad (5.59)$$

Le deuxième terme n'a pas de signification physique car $u(\rho)$ est une fonction d'onde normée donc $B = 0$ et la solution prend la forme :

$$u(\rho) = Ae^{-\frac{\rho}{2}} \quad (5.60)$$

— A la limite $\rho \rightarrow 0$: l'équation (5.57) se réduit à :

$$\frac{d^2}{d\rho^2}u(\rho) - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}u(\rho) = 0 \quad (5.61)$$

on remarque que cette équation différentielle admet deux solutions indépendantes : $u_1(\rho) = A\rho^{\ell+1}$ et $u_2(\rho) = B\rho^{-\ell}$, or la deuxième n'est pas acceptée physiquement quand $\rho \rightarrow 0$, donc la solution est :

$$u(\rho) = C\rho^{\ell+1} \quad (5.62)$$

5.2.1.2 Solution exacte

En conséquence on est amené à chercher une solution exacte de l'équation radiale (5.57) sous la forme :

$$u(\rho) = \rho^{\ell+1}e^{-\frac{\rho}{2}}F(\rho) \quad (5.63)$$

où $F(\rho)$ est une fonction inconnue qu'il faut déterminer.

comme :

$$u'(\rho) = (\ell+1)\rho^\ell e^{-\frac{\rho}{2}}F(\rho) - \frac{1}{2}\rho^{\ell+1}e^{-\frac{\rho}{2}}F(\rho) + \rho^{\ell+1}e^{-\frac{\rho}{2}}F'(\rho) \quad (5.64)$$

$$u''(\rho) = \left[F''(\rho) + \left(\frac{2(\ell+1)}{\rho} - 1 \right) F'(\rho) + \left(\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} - \frac{\ell+1}{\rho} + \frac{1}{4} \right) F(\rho) \right] \rho^{\ell+1}e^{-\frac{\rho}{2}} \quad (5.65)$$

En injectant cette expression dans l'équation (5.57), on obtient :

$$F''(\rho) + \left(\frac{2(\ell+1)}{\rho} - 1 \right) F'(\rho) + \left(\frac{\lambda}{\rho} - \frac{\ell+1}{\rho} \right) F(\rho) = 0 \quad (5.66)$$

$$\rho F''(\rho) + (2\ell+2-\rho) F'(\rho) + (\lambda-\ell-1) F(\rho) = 0 \quad (5.67)$$

Pour résoudre cette équation différentielle nous utilisons l'approche de Frobenius qui consiste à rechercher des solutions sous forme de séries. Pour cela, on considère :

$$F(\rho) = \sum_{p=0}^{\infty} c_p \rho^p \quad (5.68)$$

En dérivant terme à terme

$$F'(\rho) = \sum_{p=0}^{\infty} p c_p \rho^{p-1}, F''(\rho) = \sum_{p=0}^{\infty} p(p-1) c_p \rho^{p-2} \quad (5.69)$$

qui permet d'écrire :

$$\rho F''(\rho) = \sum_{p=0}^{\infty} p(p-1) c_p \rho^{p-1} \quad (5.70)$$

$$= 0 + 0 + \sum_{p=2}^{\infty} p(p-1) c_p \rho^{p-1} \quad (5.71)$$

en changeant les indices de sommation : $p-1 \rightarrow p$

$$\rho F''(\rho) = \sum_{p=0}^{\infty} p(p+1) c_{p+1} \rho^p \quad (5.72)$$

$$(5.73)$$

de la même manière on peut écrire :

$$(2\ell + 2)F'(\rho) = (2\ell + 2) \sum_{p=0}^{\infty} p c_p \rho^{p-1} \quad (5.74)$$

$$= 0 + (2\ell + 2) \sum_{p=1}^{\infty} p c_p \rho^{p-1} \quad (5.75)$$

$$= (2\ell + 2) \sum_{p=0}^{\infty} (p + 1) c_{p+1} \rho^p \quad (5.76)$$

En substituant dans (5.67), on trouve

$$\sum_{p=0}^{\infty} [(p(p + 1) + 2(p + 1)(\ell + 1)) c_{p+1} - (p - \lambda + \ell + 1) c_p] \rho^p = 0 \quad (5.77)$$

alors le coefficient de ρ^p est égale à zéro :

$$(p(p + 1) + 2(p + 1)(\ell + 1)) c_{p+1} - (p - \lambda + \ell + 1) c_p, \quad \forall p > 1 \quad (5.78)$$

qui permet d'obtenir la relation de récurrence suivante :

$$\frac{c_{p+1}}{c_p} = \frac{-\lambda + p + \ell + 1}{(p + 1)(2\ell + p + 2)} \quad (5.79)$$

Cette relation permet de déduire tous les coefficients c_p à partir c_0 . Le comportement asymptotique pour les termes de rang élevé est donné par :

$$\frac{c_{p+1}}{c_p} \approx \frac{1}{p} \quad (5.80)$$

ou encore :

$$c_p = \frac{c_0}{p!} \quad (5.81)$$

En remplaçant dans l'équation (5.68) et on obtient

$$\sum_{p=0}^{\infty} c_0 \frac{\rho^p}{p!} \propto e^\rho \quad (5.82)$$

donc l'expression (5.63) s'écrit :

$$u(\rho) \propto \rho^{\ell+1} e^{\frac{\rho}{2}} \quad (5.83)$$

cela signifie que la fonction $u(\rho)$ diverge quand $\rho \rightarrow \infty$ ce qui n'est pas acceptable physiquement, donc il est nécessaire de tronquer la série (5.68) et donc il doit exister une valeur maximale $p_{max} \geq 0$, telle que $c_{p_{max}} \neq 0$ et $c_{p_{max}+1} = 0$ c'est à dire :

$$\frac{c_{p_{max}+1}}{c_{p_{max}}} = \frac{-\lambda + p_{max} + \ell + 1}{(p_{max} + 1)(2\ell + p_{max} + 2)} = 0 \quad (5.84)$$

ou encore :

$$-\lambda + p_{max} + \ell + 1 = 0 \quad (5.85)$$

5.2.1.3 Quantification de l'énergie

Puisque les valeurs de p_{max} et ℓ sont des entiers positifs, le paramètre λ , qu'on notera n , doit prendre des valeurs entières :

$$\lambda = p_{max} + \ell + 1 = n \geq 1 \quad (5.86)$$

on sait que le paramètre λ s'exprime en fonction de l'énergie :

$$\lambda = \frac{ke^2}{\hbar} \sqrt{\frac{\mu}{-2E}} \implies \lambda^2 = -\frac{\mu k^2 e^4}{2\hbar^2 E} = n^2 \quad (5.87)$$

$$\implies E = -\frac{k^2 \mu e^4}{2\hbar^2 n^2} \quad (5.88)$$

ou encore

$$E = -\frac{\mu k^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{ke^2}{2a_0} \frac{1}{n^2} \quad (5.89)$$

$$= -\frac{E_I}{n^2} \quad (5.90)$$

où E_I est l'énergie d'ionisation donnée par (5.53.). On obtient donc un spectre discret de niveaux d'énergie négative qui dépend du n et on écrit :

$$E_n = -\frac{E_I}{n^2} \quad (5.91)$$

le cas $n = 1$, le plus bas niveau, est appelé le niveau fondamental de l'atome d'hydrogène et correspond à l'énergie $E_1 = -E_I = -13.6eV$. Lorsque n augmente indéfiniment, les intervalles entre les différents niveaux se rétrécissent et l'énergie tend vers zéro.



Remarque :

On sait que $p_{max} \geq 0$ donc la condition (5.86) permet d'écrire $n - \ell - 1 \geq 1$ ou encore $\ell < n$:

n	ℓ
1	0
2	0,1
3	0,1,2
...	...
n	0,1,...,n-1

C'est à dire pour une valeur fixe de n on a plusieurs valeurs de ℓ et pour chacune de ces valeurs correspondent $2\ell + 1$ valeurs possibles de m ($-\ell \leq m \leq \ell$). La dégénérescence totale g_n d'un niveau E_n se calcule en faisant la somme de toutes les valeurs possible de ℓ :

$$g_n = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2 \quad (5.92)$$

- Le nombre n est appelé nombre quantique principal et caractérise couche électronique.
- Le nombre ℓ est appelé nombre quantique orbitale et caractérise une sous-couche électronique.
- chaque sous-couche comporte $2\ell + 1$ états distincts caractérisés par le nombre quantique m .

5.2.1.4 Fonctions radiales

La fonctions radiales, solution de l'équation radiales (5.57), sont les fonctions propres correspondant aux énergies E_n et sont données par (5.63) :

$$u(\rho) = \rho^{\ell+1} e^{-\frac{\rho}{2}} F(\rho) \quad (5.93)$$

où $F(\rho)$ est une série infinie qui doit être tronquée pour que les solutions aient une signification physique . Ces fonctions, ne dépendant plus que de n et l , seront dorénavant notées $u_{n,\ell}(\rho)$ et $F_{n,\ell}(\rho)$ et on écrit :

$$u_{n,\ell}(\rho) = \rho^{\ell+1} e^{-\frac{\rho}{2}} F_{n,\ell}(\rho) \quad (5.94)$$

$$= \rho^{\ell+1} e^{-\frac{\rho}{2}} \sum_{i=0}^{n-\ell-1} c_i \rho^i \quad (5.95)$$

le terme polynomiale $\sum_{i=0}^{n-\ell-1} c_i \rho^i$ décrit une famille des polynômes appelés polynômes associés de Laguerre de , souvent, notés par $L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\rho)$

Les fonctions radiales initiales $R(r)$ sont retrouvées en utilisant le changement de variable (5.54) :

$$u_{n,\ell}(r) = (\gamma r)^{\ell+1} e^{-\frac{\gamma r}{2}} \sum_{i=0}^{n-\ell-1} c_i (\gamma r)^i \quad (5.96)$$

En utilisant la notation (5.10), la fonction radiale $R(r)$ s'écrit :

$$R_{n,\ell}(r) = \frac{u_{n,\ell}(r)}{r} = \gamma^{\ell+1} r^\ell e^{-\frac{\gamma r}{2}} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\gamma r) \quad (5.97)$$

avec

$$L_q^p(x) = \quad (5.98)$$

Normalisation de la fonction radiale $R_{n,\ell}(r)$

La fonction radiale normalisée est donnée par

$$R_{n,\ell}(r) = N_{n,\ell} \gamma^{\ell+1} r^\ell e^{-\frac{\gamma r}{2}} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\gamma r) \quad (5.99)$$

où $N_{n,\ell}$ est une constante de normalisation qui dépend de n et ℓ et déterminée par la condition de normalisation suivante :

$$\int_0^\infty |R_{n,\ell}(r)| r^2 dr = 1 \quad (5.100)$$

On a :

$$\int_0^\infty |R_{n,\ell}^2(r)| r^2 dr = \int_0^\infty R_{n,\ell}^*(r) R_{n,\ell}(r) r^2 dr \quad (5.101)$$

$$= |N_{n,\ell}|^2 \int_0^\infty (\gamma r)^{2\ell+2} e^{-\gamma r} \left(L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\gamma r) \right)^2 dr \quad (5.102)$$

$$= \frac{|N_{n,\ell}|^2}{\gamma} \int_0^\infty \rho^{2\ell+2} e^{-\rho} \left(L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\rho) \right)^2 d\rho \quad (5.103)$$

$$= 1. \quad (5.104)$$

On utilise l'intégrale générale associée au polynôme de Laguerre¹ :

$$\int_0^\infty \rho^{p+1} e^{-\rho} \left(L_p^\alpha(\rho) \right)^2 d\rho = (2\alpha + p + 1) \frac{[(\alpha + p)!]^3}{\alpha!} \quad (5.105)$$

1. Voir par exemple M. Abramowitz and I.A. Stegun, Handbook of mathematical functions.

avec $p = 2\ell + 1$ et $\alpha = n - \ell - 1$.

$$\int_0^\infty |R_{n,\ell}^2(r)| r^2 dr = \frac{|N_{n,\ell}|^2}{\gamma} \int_0^\infty \rho^{2\ell+2} e^{-\rho} \left(L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\rho) \right)^2 d\rho \quad (5.106)$$

$$= \frac{|N_{n,\ell}|^2}{\gamma} \frac{2n(\alpha + p)!}{(n - \ell - 1)!} = 1 \quad (5.107)$$

$$\Rightarrow N_{n,\ell} = \sqrt{\gamma \frac{(n - \ell - 1)!}{2n(\ell + n)!}} \quad (5.108)$$

On remplace dans (5.99) et on obtient :

$$R_{n,\ell}(r) = \sqrt{\frac{(n - \ell - 1)!}{2n(\ell + n)!}} \gamma^{\ell+3/2} r^\ell e^{-\frac{\gamma r}{2}} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\gamma r) \quad (5.109)$$

La définition (5.55) du paramètre γ permet d'écrire :

$$\gamma = 2\sqrt{\frac{-2\mu E}{\hbar^2}} = \frac{2}{na_0} \quad (5.110)$$

Finalement, l'expression générale des fonctions radiales est de la forme

$$R_{n,\ell}(r) = \left(\frac{2}{na_0} \right)^{\ell+3/2} \sqrt{\frac{(n - \ell - 1)!}{2n(\ell + n)!}} r^\ell e^{-\frac{r}{na_0}} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(2r/na_0) \quad (5.111)$$

Les expressions des premières fonctions radiales :

n	ℓ	La fonction radiale
1	0	$R_{1,0}(r) = \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} 2e^{-\frac{r}{a_0}}$
2	0	$R_{2,0}(r) = \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \left[2 - \frac{r}{a_0}\right] e^{-\frac{r}{2a_0}}$
2	1	$R_{2,1}(r) = \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$
3	0	$R_{3,0}(r) = \left(\frac{1}{3a_0}\right)^{3/2} 2 \left[1 - \frac{2}{3} \left(\frac{r}{a_0}\right) + \frac{2}{27} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2\right] e^{-\frac{r}{3a_0}}$
3	1	$R_{3,1}(r) = \left(\frac{1}{3a_0}\right)^{3/2} \frac{4\sqrt{2}}{9} \left(\frac{r}{a_0}\right) \left[1 - \frac{1}{6} \left(\frac{r}{a_0}\right)\right] e^{-\frac{r}{3a_0}}$
3	2	$R_{3,2}(r) = \left(\frac{1}{3a_0}\right)^{3/2} \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a_0}}$

5.2.1.5 Fonctions d'onde

Les fonctions d'onde de l'atome d'hydrogène sont le produit des fonctions radiales $R_{n,\ell}(r)$ par les harmoniques sphériques $Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$:

$$\psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,\ell}(r)Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) \quad (5.112)$$

où

$$Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}(-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{2} \cdot \frac{(\ell-|m|!)}{(\ell+|m|)!}} P_{\ell}^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (5.113)$$

et

$$R_{n,\ell}(r) = \left(\frac{2}{na_0}\right)^{\ell+3/2} \sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{2n(\ell+n)!}} r^{\ell} e^{-\frac{r}{na_0}} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(2r/na_0) \quad (5.114)$$

Il est à noter que l'état de l'atome d'hydrogène est défini par les nombres quantiques n , ℓ et m :

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

$$m = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell$$

Les fonctions d'ondes (5.112) des atomes sont également appelées des orbitales atomiques. Souvent on adopte notation spectroscopique pour écrire les orbitales : $\psi_{n,\ell,m} \equiv nO_m$ où O est la lettre associée à l'orbitale selon la valeur de ℓ .

ℓ	0	1	2	3	...
Nom de l'orbitale	s	p	d	f	...

Par exemple l'état $\psi_{1,0,0}$ est appelé orbitale $1s_0$, l'état $\psi_{2,1,1}$ est appelé orbitale $2p_1, \dots$

n	ℓ	m	Fonction d'onde $\psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi)$	Notation spectroscopique
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{\pi}} (1/a_0)^{3/2} e^{-r/a_0}$	$1s_0$
2	0	0	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}} (1/2a_0)^{3/2} (2 - r/a_0) e^{-r/2a_0}$	$2s_0$
2	1	0	$\frac{1}{\sqrt{\pi}} (1/2a_0)^{5/2} r e^{-r/2a_0} \cos \theta$	$2p_0$
2	1	1	$-\frac{1}{\sqrt{2\pi}} (1/2a_0)^{5/2} r e^{-r/2a_0} \sin \theta e^{i\varphi}$	$2p_1$
2	1	-1	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} (1/a_0)^{5/2} r e^{-r/2a_0} \sin \theta e^{-i\varphi}$	$2p_{-1}$

En générale les orbitales atomiques $\psi_{n,\ell,m}$ ne sont pas réelles sauf pour $m = 0$, le caractère complexe provient de la partie angulaire $Y_{\ell,m}$. on peut ainsi construire des orbitales réelles en superposant les fonctions $\psi_{n,\ell,m}$ et $\psi_{n,\ell,-m}$ une dépendance angulaire simple que l'on peut représenter graphiquement,

5.2.1.6 La fonction de la distribution de la probabilité

La probabilité de trouver l'électron de l'atome d'hydrogène dans un élément de volume $dv = r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi$ autour d'un point de coordonnées (r, θ, φ) est donnée par :

$$|\psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi)|^2 dv = |\psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi \quad (5.115)$$

$$= |R_{n,\ell}(r)|^2 |Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)|^2 r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi \quad (5.116)$$

$$= |R_{n,\ell}(r)|^2 r^2 dr |Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi \quad (5.117)$$

$$= \mathcal{D}_r dr \mathcal{D}_{\theta,\varphi} d\theta d\varphi \quad (5.118)$$

— $\mathcal{D}_r = 4\pi r^2 |R_{n,\ell}(r)|^2$ est la densité de probabilité radiale de trouver l'électron dans la coquille limitée respectivement par les sphères de rayons r et $r + dr$. Elle permet de trouver la distance la plus probable pour localiser

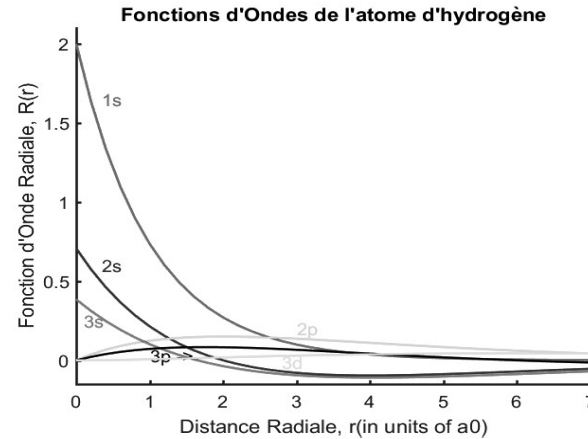
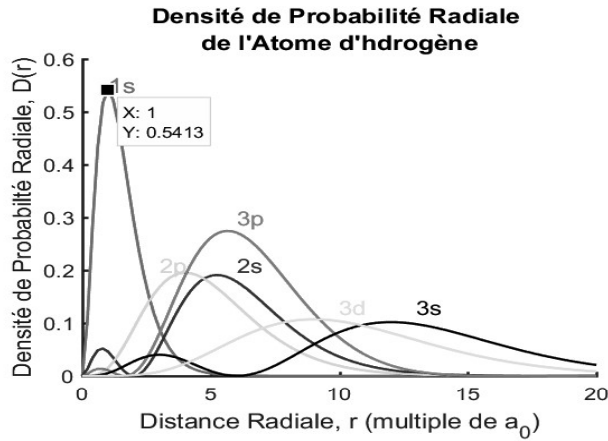
l'électron dans une orbitale atomique.

- $\mathcal{D}_{\theta,\varphi}$ est la densité de probabilité angulaire, elle permet d'accéder aux directions les plus probables pour situer l'électron dans une orbitale atomique.

la probabilité de présence de l'électron dans l'espace situé entre les sphères r et $r + dr$ quelle que soit sa position angulaire est donnée par :

$$d\mathcal{P}_{n,\ell}(r) = r^2 |R_{n,\ell}(r)|^2 dr \underbrace{\int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi}_{=1} \quad (5.119)$$

$$= 4\pi r^2 |R_{n,\ell}(r)|^2 dr \quad (5.120)$$



- La représentation graphique pour 1s montre que la densité de probabilité de présence de l'électron est maximale au point $r = a_0$, et tend vers zéro quand on s'éloigne du noyau.
- La représentation graphique pour 2s montre que la densité de
- la distance la plus probable augmente avec le nombre quantique principale n , par exemple pour l'orbitale 1s, $r_M = a_0$ et pour 2s et 3s les distances les plus probables sont données respectivement par $5.3a_0$ et $13a_0$.

5.2.1.7 Représentation des orbitales atomiques

Les orbitales atomiques sont les fonction d'ondes $\psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi)$ qui correspondent à des états stationnaires de l'atome d'hydrogène.

Lorsque $l = m = 0$, la fonction d'onde $\psi_{n,0,0}(r, \theta, \varphi)$ est une orbitale s . Puisque $Y_{0,0}$ est une constante, l'orbitale s est représentée, pour r fixé, par une sphère centrée sur l'origine et possède donc des valeurs identiques quelle que soit la direction considérée.