Chapitre 4 - Les "onia"

Nous allons maintenant étudier quelques systèmes très simples, formés de deux particules en interaction. L'exemple le plus connu est l'atome d'hydrogène, formé d'un proton et d'un électron liés par l'interaction électromagnétique. Mais le noyau de l'atome peut aussi être un deuton (proton + neutron) ou un triton (proton + 2 neutrons). Du point de vue de la physique atomique il s'agit encore là de problèmes à deux corps. On a coutume de dire:

- protium pour état lié proton-électron.
- deutérium pour état lié deuton-électron.
- tritium pour état lié triton-électron.

De même nous considérerons les *atomes hydrogénoides*, mal nommés puisqu'en fait ce sont des ions: He^+, Li^{++}, Be^{+++}, etc. Comme l'atome d'hydrogène ils sont constitués d'un noyau et d'un électron. On observe aussi des états liés formés seulement de leptons:

- positronium pour état lié positron-électron (e^+-e^-)
- muonium pour état lié muon-électron (μ^+-e^-)
- anti-muonium (μ^--e^+), anti-particule du muonium

Là encore c'est l'interaction électromagnétique qui est responsable de la liaison. La physique des particules nous fournit d'autres exemples:

- charmonium pour l'état lié c-$\bar{c}$
- bottonium pour l'état lié b-$\bar{b}$
- toponium pour l'état lié t-$\bar{t}$

Ici c'est l'interaction forte entre quarks qui est responsable de la liaison. Et le potentiel contient un terme de confinement, c'est à dire qu'il augmente indéfiniment avec la distance. Il existe pourtant de profondes analogies entre les "onia" de l'Electrodynamique Quantique et ceux de la Chromodynamique Quantique. Dans ce qui suit nous allons passer en revue l'ancienne théorie de Bohr-Sommerfeld. Outre l'intérêt historique cette théorie permet d'arriver sans peine à plusieurs résultats parfaitement corrects, d'illustrer plusieurs concepts très fondamentaux et de préciser les ordres de grandeur.

1 Théorie de Bohr - Orbites circulaires

Cette théorie se fonde sur la mécanique classique. Elle considère l'atome d'hydrogène comme un système planétaire, un électron tournant autour du noyau (ici un proton). En première approximation l'interaction électromagnétique est décrite par le potentiel électrostatique

$$V(r) = -\kappa \frac{Ze^2}{r}$$

On suppose ici le proton absolument fixe dans le système du laboratoire, ce qui revient à lui donner une masse infinie (approximation assez bonne puisque la masse du proton est environ 2000 fois celle de l'électron). Considérons maintenant des orbites circulaires, ce qui est évidemment une restriction arbitraire du problème. La force $\vec{F}$ qui s'exerce sur l'électron est radiale, centripète, et de module

$$|\vec{F}| = \kappa \frac{Ze^2}{r^2}$$

L'accélération est également radiale, centripète et de module

$$|\gamma| = \frac{mv^2}{r}$$

La relation fondamentale de la dynamique newtonienne $\vec{F} = m\gamma$ donne:

$$\kappa \frac{Ze^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r}$$

soit

$$\kappa \frac{Ze^2}{r} = mv^2$$

L'énergie totale de l'atome est l'énergie cinétique de l'électron (puisque le proton est fixe) plus l'énergie potentielle électron-proton:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \kappa \frac{Z^2}{r} = -\frac{1}{2}mv^2 = -\frac{1}{2}\frac{Ze^2}{r}$$

Tel quel, ce modèle n'a aucune valeur. D'abord, il n'est pas quantifié, toutes les orbites autour du proton (toutes les valeurs de r) sont possibles; on ne voit pas comment il sera possible de rendre compte du spectre optique de l'hydrogène, qui contient seulement des raies discrètes. Il y a plus grave: puisque l'électron est chargé et accéléré (accélération centripète) il doit, conformément aux lois de l'électromagnétisme, rayonner de l'énergie sous forme de photons, comme le fait une antenne de radio. Si l'électron rayonne il voit son énergie diminuer donc il va progressivement se rapprocher du proton pour finalement tomber sur lui. L'atome n'est pas stable. C'est le physicien danois Niels Bohr qui apporta une solution au problème. Bohr fait l'hypothèse qu'il existe autour du noyau certaines orbites stables sur lesquelles l'électron peut circuler sans émettre de rayonnement. Ceci est en contradiction flagrante avec les lois de l'électromagnétisme et la théorie de Bohr ne peut avoir qu'un caractère provisoire, même si ses résultats sont en accord, de façon spectaculaire, avec l'expérience. On sait aujourd'hui comment la mécanique quantique de Schrödinger retrouve les résultats de Bohr de fAçon parfaitement cohérente, mais au prix d'une profonde révision de nos concepts d'objet et de mouvement en microphysique. Il reste maintenant à énoncer les règles qui vont permettre de choisir les orbites stables de Bohr parmi le continuum d'orbites permises par la mécanique classique. Ces règles sont connues sous le nom de *conditions de quanta.* Il y a plusieurs façons d'y arriver et pour des raisons de simplicité nous nous écarterons de l'évolution historique:

1. une première méthode consiste à rechercher, dans l'esprit de la théorie des ondes, les conditions pour l'établissement d'ondes stationnaires. A l'électron est associée une onde de *de Broglie*, la longueur d'onde étant donnée par $\lambda = h/p$, avec $p = mv$ en mécanique newtonienne. On posera alors que la circonférence de l'orbite contient un nombre entier de longueurs d'onde. Ceci donne:

$$2\pi r = n \frac{h}{mv}$$

avec n entier, d'où $mvr = nh$. Ce n'est pas la méthode utilisée par Bohr puisque de Broglie est venu après lui.

2. dans une autre méthode on considère le moment angulaire orbital $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$. Dans le cas d'une trajectoire circulaire le module de $\vec{L}$ est donné par $L = rp = mvr$. Postulons que L est quantifié, et que les seules valeurs possibles sont des multiples de h. On arrive à $mvr = nh$ (on peut vérifier facilement qu'un moment angulaire a bien la dimension d'une *action*, soit énergie $\times$ temps).

Combinons la condition de quanta $mvr = nh$ avec le résultat établi plus haut $\kappa Ze^2 = mv^2/r$. On en déduit:

$$v_n = \frac{1}{n}\frac{\kappa Ze^2}{h}$$

d'où

$$\frac{v_n}{c} = \frac{1}{n}Z\alpha$$

on a introduit une constante $\alpha = \kappa e^2/hc$. C'est la *constante de stucture fine*. Indépendante du système d'unité choisi, sa valeur est environ $1/137$. Elle a été ainsi nommée pour des raisons historiques. Il est préférable de la considérer comme la constante fondamentale qui caractérise la force des interactions électromagnétiques. Retenons pour l'instant que $\alpha << 1$. Le rapport v/c de la vitesse de l'électron à la constante c ne peut donc prendre que des valeurs $(v/c)_n = Z\alpha/n$. Pour $Z = 1$ (atome d'hydrogène) on trouve que v/c est beaucoup plus petit que 1, ce qui nous permet de supposer que l'utilisation de la mécanique newtonienne constitue une bonne approximation. Par contre, pour les atomes lourds (faisons par exemple $Z = 100$) il faudra obligatoirement utiliser une théorie relativiste.

Le rayon de l'orbite va aussi être quantifié. On trouve facilement:

$$r_n = \frac{1}{Z\alpha}\lambda_C n^2$$

avec

$$\lambda_C = \frac{h}{mc}$$

La quantité λ_C est la *longueur d'onde de Compton* de l'électron.

Finalement, il y a aussi quantification de l'énergie. A partir de

$$E = -\frac{1}{2}mc^2\left(\frac{v}{c}\right)^2$$

on trouve:

$$E_n = -\frac{1}{2}(mc^2)(Z\alpha)^2\frac{1}{n^2}$$

En résumé, on a, pour l'orbite n:

$$\frac{v_n}{c} = \frac{Z\alpha}{n} \qquad \frac{r_n}{\lambda_C} = \frac{1}{Z\alpha}n^2 \qquad \frac{E_n}{mc^2} = -\frac{1}{2}(Z\alpha)^2\frac{1}{n^2}$$

Bien que reposant sur des bases théoriques intenables le modèle de Bohr donne correctement les énergies quantifiées de l'atome d'hydrogène (aussi bien que la mécanique quantique de Schrödinger). Les raies spectrales correspondent à des fréquences données par:

$$h\nu_{nm} = E_n - E_m$$

Si l'on observe le spectre avec un appareil de haute résolution on voit que la plupart des raies prévues comme plus haut se séparent en plusieurs composantes. C'est la *structure fine*. Il faut faire appel à la mécanique quantique relativiste de Dirac pour l'expliquer. A ce stade, faisons plusieurs remarques sur les ordres de grandeur:

1. la vitesse. On a déjà vu que pour les atomes légers la vitesse de l'électron est beaucoup plus petite que c. Ce n'est plus vrai pour les atomes lourds.

2. le rayon de l'orbite. Il peut s'exprimer en prenant pour unité la longueur d'onde Compton. Pour l'électron, $\lambda_C \sim 10^{-13}$ mètre. A cause du facteur $1/\alpha \sim 137$ le rayon de l'atome est beaucoup plus grand que la longueur d'onde Compton de l'électron (cette derniére donne une mesure de l'encombrement de l'espace), l'atome est donc surtout rempli par du vide. D'autre part, le rayon de l'orbire est inversement proportionnel à Z. Pour un noyau lourd les orbites sont donc beaucoup plus serrées autour du noyau que pour un noyau léger, ce qui fait qu'un atome d'uranium n'est pas plus gros qu'un atome d'hydrogène. Considérons enfin un atome muonique, dans lequel un électron a été remplacé par un muon. Puisque la masse de ce dernier est environ 200 fois la masse de l'électron, une orbite muonique a un rayon 200 fois plus petit qu'une orbite électronique. Il y a donc beaucoup d'orbites muoniques contenues à l'intérieur de la première orbite électronique. D'autre part, lorsque certaines conditions sont remplies (conséquence de la conservation de l'énergie) un noyau peut capturer un électron orbital, par exemple:

   $$^{7}Be + e^- \rightarrow \ ^{7}Li + \nu_e$$

   Cette réaction se produit par interaction faible. Sa probabilité est proportionnelle à la valeur de la probabilité de présence de l'électron dans le volume du noyau. Elle varie d'une couche électronique à l'autre, la plus grande probabilité étant pour la couche la plus proche du noyau (couche K). Le même processus est possible pour un muon, par exemple:

   $$^{12}C + \mu^- \rightarrow \ ^{12}B + \nu_\mu$$

   La capture des muons par les noyaux a été beaucoup étudiée. Lorsqu'un muon négatif pénètre dans la matière il perd progressivement son énergie cinétique et finit par se mettre en orbite autour d'un noyau (avec une assez grande valeur de n). Comme les orbites plus basses ne sont pas occupées par d'autres muons, le muon subit des transitions en cascade, avec émission de photons, et finit par se retrouver sur l'orbite muonique la plus proche du noyau. Il va alors y avoir compétition entre deux phénomènes:

   (a) sa désintégration propre, suivant:

   $$\mu^- \rightarrow e^- \overline{\nu}_e \nu_\mu$$

   avec une vie moyenne de 2.2 μ s.

(b) sa capture par le noyau, dont la probabilité varie de façon très rapide avec Z (comme $(Ze)^4$ suivant l'équation de Schrödinger).

On appelle *rapport d'embranchement* le rapport de deux probabilités pour deux processus différents. Le rapport d'embranchement capture/désintégration est environ 10^{-4} pour l'hydrogène, de l'ordre de 1 pour $Z = 10$ et tend vers l'infini pour les noyaux très lourds. En fait, pour le plomb on peut montrer que le rayon de l'orbite K muonique est plus petit que le rayon du noyau, ce qui rend la capture du muon à peu près certaine.

3. l'énergie. Pour l'électron sur la couche K de l'hydrogène, on trouve 13.7 eV. C'est l'*énergie d'ionisation*, c'est à dire l'énergie qu'il faut fournir pour séparer l'électron du proton et l'envoyer à l'infini. Pour des atomes plus lourds on aura des énergies plus grandes. Les énergies quantifiées des atomes sont déterminées en mesurant les fréquences des transitions électromagnétiques entre couches électroniques. Pour les atomes lourds les énergies des couches internes sont de l'ordre d'une centaine de KeV et les transitions électromagnétiques correspondantes se situent dans le domaine des rayons X. Avec les atomes muoniques les énergies sont 200 fois plus élevées (puisque proportionnelles à la masse m) et on observera pratiquement toujours des rayons X, dits *rayons X muoniques*.

2 Correction d'entrainement du noyau. Masse réduite

Dans ce qui précède nous avons supposé le noyau absolument immobile dans le système du laboratoire, ce qui ne peut être rigoureusement vrai que si la masse du noyau est infinie. Comme les mesures spectroscopiques sont extrêmement précises il convient de procéder à un traitement plus rigoureux. En réalité quand on dit que l'atome est au repos dans le système du laboratoire on veut dire que c'est son *centre de gravité* qui est au repos. Un déplacement éventuel du centre de gravité ne nous intéresse pas en général, ce que nous voulons comprendre, c'est le *mouvement relatif* des constituants de l'atome. Reprenons les calculs en utilisant cette fois le formalisme hamiltonien de la mécanique newtonienne. On a:

$$H = T + V = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(r_{12})$$

On a introduit les énergies cinétiques du noyau (particule 1) et de l'électron (particule 2) et l'énergie potentielle, fonction seulement de la distance des deux particules. Désignons les positions absolues des deux particules dans le laboratoire par les vecteurs $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$. Soit $\vec{r}$ le vecteur associé au centre de gravité et $\vec{r}_{12}$ le vecteur qui décrit la position relative des particules:

$$\vec{R} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2} \qquad \text{et} \qquad \vec{r} = \vec{r}_{12} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$$

Désignons la masse totale du système par $M = m_1 + m_2$. Dérivons par rapport au temps:

$$M\frac{d\vec{R}}{dt} = m_1\frac{d\vec{r}_1}{dt} + m_2\frac{d\vec{r}_2}{dt} \qquad\qquad \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{d\vec{r}_2}{dt} - \frac{d\vec{r}_1}{dt}$$

On en déduit:

$$\frac{d\vec{r}_1}{dt} = \frac{d\vec{R}}{dt} - \frac{m_2}{M}\frac{d\vec{r}}{dt}$$

et

$$\frac{d\vec{r}_2}{dt} = \frac{d\vec{R}}{dt} + \frac{m_1}{M}\frac{d\vec{r}}{dt}$$

L'énergie cinétique s'écrit maintenant, en fonction des variables $\vec{R}$ et $\vec{r}$:

$$T = \frac{1}{2}m_1\left(\frac{d\vec{r}_1}{dt}\right)^2 + \frac{1}{2}m_2\left(\frac{d\vec{r}_2}{dt}\right)^2 = \frac{1}{2}M\left(\frac{d\vec{R}}{dt}\right)^2 + \frac{1}{2}\mu\left(\frac{d\vec{r}}{dt}\right)^2$$

avec

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

Le nouvel hamitonien:

$$H = \frac{1}{2}M\left(\frac{d\vec{R}}{dt}\right)^2 + \frac{1}{2}\mu\left(\frac{d\vec{r}}{dt}\right)^2 + V(r)$$

présente un avantage considérable. Les variables sont *séparées.* Le premier terme décrit le mouvement du centre de gravité, particule libre (elle n'est pas soumise à un potentiel) de mouvement rectiligne et uniforme, de vitesse $\vec{v} = d\vec{R}/dt$, sans intérêt. On peut, en effet, choisir un système de référence dans lequel $\vec{v} = 0$. Le reste de l'expression décrit le mouvement relatif comme celui d'une particule fictive de masse μ soumise à un potentiel $V(r)$ centré sur le centre de gravité. La masse μ est baptisée *masse réduite.* Elle satisfait à la relation:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$$

La vitesse relative est

$$\vec{v} = \vec{v}_2 - \vec{v}_1 = \frac{\vec{p}_2}{m_2} - \frac{\vec{p}_1}{m_1}$$

Pour l'atome d'hydrogène $m_1 = m_p$ (masse du proton) et $m_2 = m_e$ (masse de l'électron). Comme $m_p \sim 2000\ m_e$ on a, en première approximation:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_p} + \frac{1}{m_e} \sim \frac{1}{m_e}$$

d'où $\mu \sim m_e$ Il faut cependant toujours utiliser la masse réduite pour comparer aux résultats expérimentaux en physique atomique. Finalement, dans le cas du positronium, on a $\mu = 1/2m_e$, et dans ce cas on ne peut plus parler de "correction".

3 Trajectoires elliptiques

Les trajectoires circulaires constituent une simplification arbitraire du problème. Nous allons traiter le cas général des trajectoires elliptiques mais nous constaterons que cela ne changera rien en ce qui concerne les valeurs quantiques de l'énergie, telles que données par le modèle de Bohr. Nous verrons que cela ne résulte pas d'une coincidence, mais plutôt d'une propriété de symétrie de l'hamiltonien, cette symétrie étant loin d'être évidente a priori. Le calcul des trajectoires elliptiques a été effectué la première fois par Sommerfeld. Nous utiliserons une méthode différente de la sienne. Reprenons l'hamiltonien:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r)$$

avec $\vec{p} = m\vec{v}$.

Nous allons rechercher les constantes du mouvement, c'est à dire les quantités qui se conservent lors de l'évolution du système dans le temps. Rappelons d'abord que H est une constante du mouvement si le potentiel V ne dépend pas explicitement du temps (invariance par translation du temps), ce qui est le cas ici:

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\vec{p}}{\mu} \cdot \frac{d\vec{p}}{dt} + \frac{dv}{d\vec{r}} \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} + \frac{dv}{dt} = \vec{v} \cdot (\frac{d\vec{p}}{dt} + \frac{dv}{d\vec{r}})$$

La relation fondamentale de la dynamique donne:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F} = -\frac{dV}{d\vec{r}}$$

et on a supposé que V ne dépend pas explicitement du temps, soit $\partial V/\partial t = 0$. Il en résulte $dV/dt = 0$ et $H =$ constante du mouvement. Rappelons également que dans le cas d'une force *centrale* (passant par l'origine et donc colinéaire au vecteur $\vec{r}$, soit $\vec{r} \times \vec{F} = 0$, le moment angulaire orbital $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ est une constante du mouvement:

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \frac{d\vec{r}}{dt} \times \vec{p} + \vec{r} \times \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v} \times m\vec{v} + \vec{r} \times \vec{F} = \vec{r} \times \vec{F} = 0$$

La propriété de $\vec{F}$ découle du fait que V ne dépend que de la distance r (invariance par rotation):

$$\vec{F} = -\frac{\partial V}{\partial \vec{r}} = -\frac{\vec{r}}{r}\frac{dV}{dr}$$

On trouve finalement $d\vec{L}/dt = 0$, donc $\vec{L} =$ constante vectorielle du mouvement.

Posons nous maintenant la question: existe-t-il d'autres constantes du mouvement? Si oui, elles aussi reliées à des propriétés d'invariance de l'hamiltonien. La réponse est que c'est souvent le cas, mais il faut alors connaître le groupe d'invariance de H. Ce n'est pas toujours évident. Nous allons aller à la pêche. Examinons par exemple le produit vectoriel $\vec{M} = \vec{L} \times \vec{p}$.

$$\frac{dM}{dt} = \frac{d\vec{L}}{dt} \times \vec{p} + \vec{L} \times \frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{L} \times \frac{d\vec{p}}{dt}$$

puisque $d\vec{L}/dt = 0$.

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = (\vec{r} \times \vec{p})\vec{F} = (\vec{r} \cdot \vec{F})\vec{p} - (\vec{p} \cdot \vec{F})\vec{r}$$

Avec

$$\vec{F} = -\frac{\vec{r}}{r}\frac{\partial V}{\partial r}$$

$$\vec{p}_r = \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{p}$$

et

$$\vec{p}_t = \vec{p} - \vec{p}_r$$

on trouve:

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -r\frac{\partial V}{\partial r}\vec{p} + r\frac{\partial V}{\partial r}\vec{p}_r = -r\frac{\partial V}{\partial r}\vec{p}_t$$

où $\vec{p}_r$ et $\vec{p}_t$ sont respectivement les composantes radiale et transversale de l'impulsion (on rappelle que $p_r = dr/dt$). On a aussi:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\vec{r}}{r}\right) = \frac{1}{r}\frac{d\vec{r}}{dt} - \vec{r}\frac{1}{r^2}\frac{dr}{dt} = \frac{1}{mr}(\vec{p} - \vec{p}_r) = \frac{1}{mr}\vec{p}_t$$

Donc:

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -r\frac{\partial V}{\partial r}mr\frac{d}{dt}\left(\frac{\vec{r}}{r}\right)$$

soit

$$\frac{d\vec{M}}{dt} + mr^2\frac{\partial V}{\partial r}\frac{d}{dt}\left(\frac{\vec{r}}{r}\right) = 0$$

Une simplification importante se produit si $mr^2(\partial V/\partial r)$ est une constante A, ce qui se produit si le potentiel est en $1/r$:

$$V(r) = -\frac{A}{m}\frac{1}{r}$$

que l'on identifie avec

$$V(r) = -\kappa Z e^2 \frac{1}{r}$$

Ce qui donne

$$A = \kappa m Z e^2$$

On trouve alors que:

$$\frac{d}{dt}\left(\vec{M} + A\frac{\vec{r}}{r}\right) = \frac{d}{dt}\left(\vec{L} \times \vec{p} + \kappa m Z e^2 \frac{\vec{r}}{r}\right) = 0$$

Il en résulte que le vecteur:

$$\vec{K} = \vec{L} \times \vec{p} + \kappa m Z e^2 \frac{\vec{r}}{r}$$

est une constante du mouvement $\vec{K}_0$. Cette constante est caractéristique du potentiel en $1/r$. Examinons quelques propriétés de $\vec{K}$.

$$K^2 = (\vec{L} \times \vec{p})^2 + 2\kappa m Z e^2 \frac{\vec{r}}{r} \cdot (\vec{L} \times \vec{p}) + \kappa^2 m^2 Z^2 e^4$$

$$= L^2 p^2 - (\vec{L} \cdot \vec{p})^2 + 2\kappa m Z e^2 \frac{1}{r}\vec{L} \cdot (\vec{p} \times \vec{r}) + \kappa^2 m^2 Z^2 e^4$$

$$= L^2p^2 - 2\kappa m Z e^2 \frac{1}{r} L^2 + \kappa^2 m^2 Z^2 e^4$$

soit finalement:

$$K^2 = 2mL^2\left(\frac{p^2}{2m} - \kappa\frac{Ze^2}{r}\right) + \kappa^2 m^2 Z^2 e^4 = 2mL^2 H + \kappa^2 m^2 Z^2 e^4$$

D'autre part, le produit scalaire $\vec{L}\cdot\vec{K}$ est nul:

$$\vec{L}\cdot\vec{K} = \vec{L}\cdot(\vec{L}\times\vec{p}) + \kappa m Z e^2 \frac{1}{r}(\vec{L}\cdot\vec{r})$$

les deux termes étant nuls par suite des propriétés du produit scalaire et du produit mixte. Le vecteur $\vec{L}$ est une constante du mouvement que nous désignerons par $\vec{L}_0$. Les vecteurs $\vec{r}$ (position) et $\vec{p}$ (impulsion) sont orthogonaux à $\vec{L}_0$, donc le mouvement se déroule dans un plan perpendiculaire à $\vec{L}_0$. Il est commode de choisir les axes de sorte que les vecteurs constants $\vec{L}_0$ et $\vec{K}_0$ aient les composantes suivantes:

$$\vec{L}_0(0, 0, -L_0) \qquad\qquad \vec{K}_0(-K_0, 0, 0)$$

La relation:

$$\vec{K}_0 = \vec{L}_0 \times \vec{p} + \kappa m Z e^2 \frac{\vec{r}}{r}$$

donne deux équations:

$$-K_0 = -L_0 p_y + \kappa m Z e^2 \frac{x}{r}$$

$$0 = L_0 p_x + \kappa m Z e^2 \frac{y}{r}$$

Multiplions les deux membres de la première par x, les deux membres de la seconde par y, et ajoutons membre à membre:

$$-K_0 x = -L_0(xp_y - yp_x) + \kappa m Z e^2 (x^2 + y^2)\frac{1}{r} = -L_0^2 + \kappa m Z e^2 r$$

Passons en coordonnées polaires avec $x = \rho\cos\omega$, $y = \rho\sin\omega$ et $r = \rho$:

$$-K_0 \rho \cos\omega = -L_0^2 + \kappa m Z e^2 \rho$$

soit finalement:

$$\frac{1}{\rho} = \frac{1}{\rho_0}(1 + e\cos\omega)$$

avec $\rho_0 = L_0^2/\kappa m Z e^2$ et $e = K_0/\kappa m Z e^2$. C'est l'équation d'une conique dont l'excentricité est e. On se rappelle que:

- pour $e < 1$ la conique est une ellipse.
- pour $e = 1$ la conique est une parabole.
- pour $e > 1$ la conique est une hyperbole.

Discutons la nature de la conique en fonction de la physique étudiée. Pour cela nous allons reprendre une équation établie plus haut:

$$K^2 = 2mL^2H + \kappa^2 m^2 Z^2 e^4$$

qui devient:

$$\left(\frac{K_0}{\kappa m Z e^2}\right)^2 = \frac{2mH}{L_0^2}\left(\frac{L_0^2}{\kappa m Z e^2}\right)^2 + 1$$

et avec les définitions de ρ_0 et e:

$$e^2 = 1 + \frac{2mH}{L_0^2}\rho_0^2$$

Dans cette expression H peut être positif ou négatif. Dans le cas de deux particules de même signe, le potentiel est répulsif, et:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{Ze^2}{r} > 0$$

Dans ce cas on a évidemment $e > 1$ et la trajectoire est une hyperbole. Si les deux particules sont de signes contraires:

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}$$

ce qui peut être positif ou négatif suivant les conditions initiales. On pourra donc avoir $e > 1$ (état de diffusion, trajectoire hyperbolique), ou $e < 1$ (état lié, trajectoire elliptique). Le cas limite $e = 1$ (trajectoire parabolique) demanderait un ajustement très particulier des conditions initiales. Etudions maintenant le cas de l'ellipse:

$$\rho = \frac{\rho_0}{1 + e\cos\omega}$$

On a les valeurs particulières suivantes:

$$\begin{array}{ll} \omega = 0 & \rho = \rho_0/(1+e) \\ \omega = \pi & \rho = \rho_0/(1-e) \end{array}$$

La longueur du grand axe est donc

$$2a = \rho_0\left(\frac{1}{1+e} + \frac{1}{1-e}\right)$$

ou

$$a = \frac{\rho_0}{1-e^2}$$

La distance des foyers est

$$2c = \rho_0\left(\frac{1}{1-e} - \frac{1}{1+e}\right)$$

ou

$$c = \frac{\rho_0 e}{1-e^2}$$

(on rappelle que $e = c/a$). La longueur du petit axe est $2b$, avec

$$b = \sqrt{a^2 - c^2} = \frac{\rho_0}{\sqrt{1 - e^2}}$$

Evaluons maintenant l'énergie. On trouve que:

$$2mL^2H - K^2 = -\kappa^2 m^2 Z^2 e^4$$

ce qui donne l'idée de définir un nouveau vecteur $\vec{A}$ tel que:

$$\vec{K} = \sqrt{-2mH}\ \vec{A}$$

en remarquant que H est négatif pour un état lié dans le puits de potentiel. On a alors:

$$2mH(L^2 + A^2) = -\kappa^2 m^2 Z^2 e^4$$

d'où

$$h = -\frac{1}{2} mc^2 Z^2 \frac{\kappa^2 e^4}{\hbar^2 c^2} \frac{\hbar^2}{L^2 + A^2}$$

Les vecteurs $\vec{L}$ et $\vec{A}$ étant perpendiculaires, la quantité $\sqrt{L^2 + A^2}$ représente la longueur du vecteur $\vec{L} + \vec{A}$ ou celle du vecteur $\vec{L} - \vec{A}$. Imposons alors la condition de quantification $\sqrt{L^2 + A^2} = n\hbar$. On trouve:

$$H = -\frac{1}{2} mc^2 (Z\alpha)^2 \frac{1}{n^2}$$

C'est la formule obtenue précédemment en considérant des orbites circulaires. En fait l'énergie ne dépend que de la quantité $L^2 + A^2$ mais pas de L^2 et A^2 séparément. On a $L^2 + A^2 = (\vec{L} + \vec{A})^2 = (\vec{L} - \vec{A})^2$. Ce qui compte, c'est donc la longueur du vecteur $\vec{L} + \vec{A}$ (ou $\vec{L} - \vec{A}$). Il y a évidemment plusieur façons d'obtenir une même valeur de $L^2 + A^2$ avec des vecteurs $\vec{L}$ et $\vec{A}$ différents. On dit qu'il y a *dégénerescence* pour la valeur de l'énergie (ou que la valeur de l'énergie est dégénérée). Les différentes valeurs de A_0 correspondent à différentes excentricités de l'ellipse. Par exemple, pour $A_0 = 0$, l'ellipse se réduit à un cercle ($A_0 = 0$ entraine $K_0 = 0$ et $e = 0$). Pour $L_0 = 0$ on a $K_0^2 = \kappa^2 m^2 Z^2 e^4$, d'où $K_0 = \kappa m Z e^2$, d'où $e = 1$. L'ellipse se réduit à une droite d'équation $\rho(1 + \cos\omega) = 0$. On a donc $\rho = 0$ sauf pour $\omega = \pi$. Toutes ces trajectoires correspondent à la même valeur de l'énergie. Comme L_0 est aussi quantifié on a un nombre fini d'orbites, pour une valeur fixée de $\vec{L}_0 + \vec{A}_0$ et des valeurs quantifiées de L_0. Remarquons que le cas $L_0 = 0$ (trajectoire réduite à une droite) doit être éliminé quelque peu arbitrairement. On peut évidemment dire que la trajectoire correspondante est inacceptable car l'électron aurait à pénétrer dans le noyau, qui se trouve sur son chemin. C'est une des faiblesses de la théorie classique. En mécanique quantique cette difficulté n'apparaît pas.

À quoi faut-il attribuer la dégénérescence observée, qui se manifeste par plusieurs ellipses pour une même énergie? Nous connaissons bien la dégénérescence associée à la constante de mouvement vec L_0. L'énergie ne dépend pas de l'orientation du vecteur vec L_0. Ceci résulte de l'invariance par rotation. On peut en fait montrer que l'hamiltonien de l'atome d'hydrogène possède une invariance plus large que l'invariance par rotation. Il s'agit de l'invariance dans un groupe $SO(4)$. Ici la quatrième dimension n'a rien à voir avec le temps. Nous explorerons cette question à titre de problème.