

Jacqueline

LABORATOIRE DE CHIMIE PHYSIQUE (UA 176)
UNIVERSITE PIERRE ET MARIE CURIE
11 RUE PIERRE ET MARIE CURIE 75005 PARIS



Représentations graphiques de la densité électronique de l'atome
d'hydrogène placé dans un champ laser.

Jacqueline Bouvier

Année 1987-1988

Sous la direction de : M^{lle} Valérie Vénard

M^r Alfred Maquet

Table des matières

	pages
Introduction	1
Théorie des perturbations	1
La fonction de Green et la base sturmienne	3
Utilisation des unités atomiques	4
Chapitre 1 Calcul de la fonction d'onde perturbée	5
Paragraphe 1 Expression de la fonction d'onde perturbée	5
Paragraphe 2 Densité électronique spatiale	8
Etablissement du coefficient de normalisation	8
Etablissement du module au carré de la fonction perturbée	9
Programmation de la fonction de densité électronique	9
Chapitre 2 Représentation graphique de densité électronique	10
Choix des paramètres	10
Paragraphe 1 Représentation radiale	11
Paragraphe 2 Représentation polaire	19
Chapitre 3 Calcul du déplacement d'énergie, du moment dipolaire, et de la polarisabilité	25
Paragraphe 1 Calcul du déplacement d'énergie	25
Calcul de la correction au premier ordre	25
Calcul de la correction au deuxième ordre	26
Paragraphe 2 Calcul du moment dipolaire, et de la polarisabilité	27
Paragraphe 3 Résultats	29
Chapitre 4 Représentation de la densité électronique en trois dimensions	30
Conclusion	37
Annexe Calcul de l'intégrale $\langle \Psi_1(t) \Psi_1(t) \rangle$	38
Paragraphe 1 Méthode de Simpson	38
Paragraphe 2 Calcul analytique	39
Paragraphe 3 Comparaison des deux calculs	44
Références	45