



**UNIVERSITE MOULOD MAMMERE DE TIZI-OUZOU**

**FACULTE DES SCIENCES**

**LABORATOIRE DE PHYSIQUE ET CHIMIE QUANTIQUE**

## **Rapport de Stage**

**MASTER DE PHYSIQUE**

**Présenté par**

**M. MERHAB Mahiout**

**sur le sujet intitulé :**

**« Calcul des niveaux d'énergie atomiques dans un potentiel de Yukawa par méthode variationnelle. »**

**Travail soutenu le 11 juillet 2016 devant le jury suivant :**

**MEZEGHRANE Abdelaziz      Président**

**BOUKELLAL Ali                      Rapporteur**

**DEGHICHE Djamel                  Examineur**

**Année universitaire: 2015 / 2016**

### **Calcul des niveaux d'énergie atomiques dans un potentiel de Yukawa par méthode variationnelle.**

En mécanique quantique, l'étude de tout système atomique nécessite la détermination des niveaux d'énergie caractérisant chacun un « état du système ». Ces états d'énergie sont accessibles par la résolution de l'équation de Schrödinger. Cependant, en dehors de quelques systèmes simples pour lesquels la résolution de cette équation est possible de manière analytique et exacte, l'usage, dans la majorité des cas, des méthodes numériques et d'approximations s'avère nécessaire.

Le travail réalisé et présenté dans ce présent rapport a pour objectif de calculer les niveaux d'énergie électroniques d'un atome placé dans un potentiel de Yukawa dépendant d'un paramètre  $\lambda$ , par application de la méthode variationnelle. Les fonctions d'onde d'essai, utilisées à cette fin, sont du type Slater dont les exposants orbitaux sont désignés par  $\zeta_{nl}$ .

Par la présente méthode sont déterminés, pour différentes valeurs de  $\lambda$ , les  $\zeta_{nl}$  qui sont injectés dans les fonctions d'onde. En étape préliminaire, une étude relative à l'influence du paramètre  $\lambda$  sur les densités de probabilité radiales a été réalisée. Les calculs ont été effectués par le langage de programmation Mathematica.

Les résultats obtenus dans cette étude sont en bon accord avec ceux acquis par de précédents calculs effectués par d'autres auteurs et selon différentes approches.

### **Calculation of atomic energy levels in a Yukawa potential by variational method.**

In quantum mechanics, the study of any atomic system requires the determination of the energy levels that each of them characterize a "system state". These energy states are obtained by solving the Schrödinger equation. However, except that for some simple cases where the resolution of this equation can be analytically and accurately achieved, we have necessary, to turn to numerical methods and approximate calculations in order to solve it.

The achieved work presented in the present report, is concerned by calculating the electronic energy levels of an atom that the interaction potential is of Yukawa form depending on parameter  $\lambda$ , using the variational method. The trial functions used for the purpose are of Slater type which depends on parameters  $\zeta_{nl}$ .

By applying this present method are determined, for different  $\lambda$  values, the trial parameters  $\zeta_{nl}$  that are injected into the wave functions. In preliminary stage, a study relative to  $\lambda$  influence on the radial probability density is made. The calculations were achieved with the aids of the Mathematica programming language.

The results obtained in this present study are in good agreements, compared to precedent ones acquired by precedent calculations of other authors and with different approaches.