26/11/15
Uwe Franz

Évolution du modèle de l'atome, ~~puzzle~~ énigme de Sommerfeld.

Modèle de Bohr (1913)

"l'atome s'est dissous" : Heisenberg – Schrödinger – champs quantique :
du modèle planétaire à ??

vieille mécanique quantique

1900 Planck
1905 Einstein
1913 Bohr
1909? 19?? Rutherford : bombardement de feuille d'or.
Rydberg : spectre de l'hydrogène.
Thompson : modèle des raisins secs, du cake.
1915–1916 : Sommerfeld : radiation d'ondes freinées sur une plaque métallique
"Bremsstrahlung"

Sommerfeld en continu en contact avec Paschen. Est une ligne ne "colle pas" dans le spectre de l'hydrogène, provient-elle d'hélium ionisé ?

nouvelle mécanique quantique

1925 Heisenberg
1926 Schrödinger
1927/28 Dirac – Gordon, Darwin retrouvent la formule de Sommerfeld
Uhlenbeck Batzmich

Il y a une énigme : comment Sommerfeld avait-il produit la bonne formule sans avoir la mécanique quantique moderne à disposition

Lire : L. Biedenharn (1983), The "Sommerfeld ~~puzzle~~" revisited and resolved, Foundations of physics 13 n°1, p13

1947–48 : Schwinger, Feynman, Tomonaga, Bethe : QFT (théorie q. des champs)
QED (électrodynamique q.)

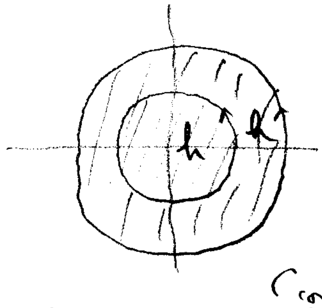
Duru, Kleinert (1979) : Solution de l'intégrale des chemins pour H.

Félix Nendzig, The q. theory of the hydrogen atom.

Revenons à Bohr-Sommerfeld et leur quantification.

On découpe l'espace des phases en morceaux de volume h, la cste de Planck ex : une particule qui subit une force centrale :

→ on cherche des orbites sphériques γ_n telles que γ_0 est un point et telle que le volume entre γ_n et γ_{n+1} est égal à h.



ce qu'on quantifie, c'est l'action = énergie × déplacement

Résolvons le pb de Kepler :

$L = T - V$ le lagrangien

$q_1, \dots, q_d$ les coordonnées,

$p_1, \dots, p_d$: $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$

On veut que $\oint_{\gamma_n} p_i\, dq_i = n_i h$ pour $i = 1, \dots, d$ (comme ds le intégrale de chemin de Feynman)

Pb : ce n'est pas canonique : cela dépend des coordonnées.

(Schwarzschild propose un choix canonique)

Orbite = 1 pt : pb : cela tomberait ds le noyau.

- la procédure suppose des orbites périodiques ; on ne peut concevoir des électrons libres.

. Succès de la physique : on commence par des exemples où tout va bien

. En mécanique, pareil.

Heisenberg-Pauli : groupe de symétrie O_4 pour l'atome hydrogène

cf. Guichardet Le problème de Kepler (2010, presses de l'X)

$T = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 = \frac{1}{2} m (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2)$ en coordonnées polaires.

(la structure fine du spectre échappe à la vieille m.q.)

$V = -\frac{e^2}{r}$

φ n'apparaît pas dans L et donc $p_\varphi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = m r^2 \dot{\varphi}$ = moment angulaire = cst.

Et on veut donc que

$$\boxed{\int_0^{2\pi} p_\varphi\, d\varphi = 2\pi \underset{\underset{2\pi m r^2 \dot{\varphi}}{\parallel}}{p_\varphi} = n_\varphi h}$$

C'est la 1re condition de quantification de Bohr-Sommerfeld

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m \dot{r} \quad \text{et} \quad \boxed{\oint p_r\, dr = \int m \dot{r}\, dr = \int_0^{2\pi} m \dot{r} \frac{dr}{d\varphi} = n_r h}$$

condition de Bohr-Sommerfeld pour l'excentricité

$$\oint p_r\, dr = 2\pi \underbrace{p_\varphi}_{\frac{n_\varphi h}{2\pi}} \left(\frac{1}{\sqrt{1-\varepsilon^2}} - 1 \right)$$

où ε est l'excentricité de l'ellipse.

et donc $1 - \varepsilon^2 = \frac{n_\varphi^2}{(n_\varphi + n_r)^2}$ ou $\varepsilon = \frac{n_r}{n_\varphi + n_r}$.

Uma Frant
26/11/15
3

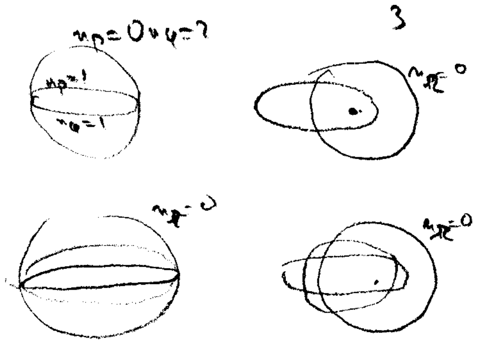
$$E_{n_\varphi, n_\rho} = \frac{2\pi^2 m e^4}{h^2} \cdot \frac{1}{(n_\varphi + n_r)^2}$$

$$a = \frac{h^2}{4\pi^2 m_e^2} (n_\varphi + n_r)^2$$

$$b = \frac{h^2}{4\pi^2 m_e^2} n_\varphi (n_\varphi + n_r)$$

$n_\varphi + n_r = 2$

$n_\varphi + n_r = 3$



(plus n_ρ augmente plus le petit axe devient court)

(cf Sommerfeld, Sitzungsberichte der königlich - bayerischen Akademie der W)
et dans Annalen der Physik

"Kepler relativiste" : les ellipses ont plus d'énergie. l'excentricité fait augmenter l'énergie.

$$L = - m c^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} - U$$

éq. de Lagrange :

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{m c r^2 \dot\varphi}{\sqrt{c - \dot r^2 - r^2 \dot\varphi^2}}\right) = 0$$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{m c \dot r}{\sqrt{c - \dot r^2 - r^2 \dot\varphi}}\right) - \frac{e^2}{r^2} = 0$$

Voici la formule de la fin de l'article de Gordon 1928 :

$$\frac{E}{mc^2} = \left(1 + \frac{\alpha^2}{(n_\rho + \sqrt{n_\varphi^2 - \alpha^2})^2}\right)^{-\frac{1}{2}} \qquad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

est la constante de structure fine de Sommerfeld

Les symétries du pb font que la solution de 1915 et de 1926 coïncident.

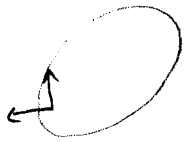
cf. aussi l'oscillateur harmonique.

Pour les atomes de mercure et d'or, les trajectoires relativistes expliquent que l'un est liquide et l'autre jaune.

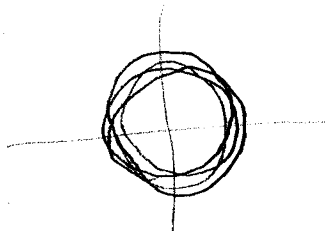
Nelle m.q. on passe de L au hamiltonien $H(p,q)$ et
on exprime que le crochet de Poisson satisfait $\{p_i, q_j\} = \delta_{ij}$
On remplace p_i, q_j par des opérateurs P_j, Q_k lesque $[P_j, Q_k] = i\hbar\delta_{jk}$
$H = H(P,Q)$

cf Thirring

Vecteur de Laplace-Runge-Lenz et symétries O_4 :



et si on perd cette symétrie



il faut changer de repère inertiel pour que l'orbite redevienne périodique.