Approches semi-classiques en mécanique quantique

Loris Delafosse

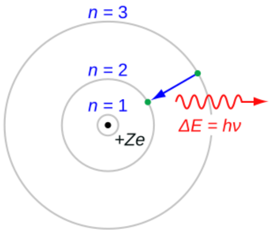
Geometry for Quantum Science Group
Quantum Science and Nanomaterials Interdisciplinary Thematic Institute
University of Strasbourg

3 juin 2024

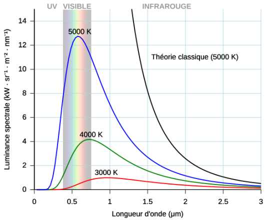
Sommaire

La fin du monde classique

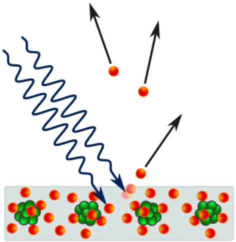
- Série de Balmer
- Rayonnement du corps noir
- Effet photoélectrique



(a) JabberWork, File :Bohr atom model.svg



(b) Darth Kule, File :Black body-fr.svg



(c) Ponor, File :Photoelectric effect in a solid - diagram.svg

Source : wikimedia commons

Variables action-angle et invariants adiabatiques

Systèmes quasipériodiques : pour une coordonnée généralisée q_k, l'impulsion conjuguée p_k est une fonction *périodique* de la seule coordonnée q_k $\Rightarrow$ *variable d'action*

$$J_k = \frac{1}{2\pi} \oint p_k \, \mathrm{d}q_k \tag{1}$$

J_k est alors une impulsion généralisée du système, de coordonnée conjuguée θ_k (*variable d'angle*)

$$\dot{\theta}_k = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial J_k} \tag{2}$$

J_k est un invariant adiabatique du système

L'aube du monde quantique

Les *nombres quantiques* : invariants adiabatiques des systèmes quantifiés (et non des valeurs propres, les opérateurs n'ont pas encore été introduits dans la théorie !)

Règle de Bohr-Sommerfeld

Soit q_k une coordonnée quasipériodique d'impulsion conjuguée p_k. Alors il existe un nombre quantique n_k tel que :

$$\oint p_k \, \mathrm{d}q_k = n_k h \tag{3}$$

où h est la constante de Planck (quantum d'action).

Sommaire

L'atome d'hydrogène

Modèle de Bohr

Orbites circulaires (1 coordonnée généralisée θ)

$$\oint L \, \mathrm{d}\theta = nh \quad \Rightarrow \quad L = n\hbar \tag{4}$$

$$E_n = -\frac{e^4 m}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2} \tag{5}$$

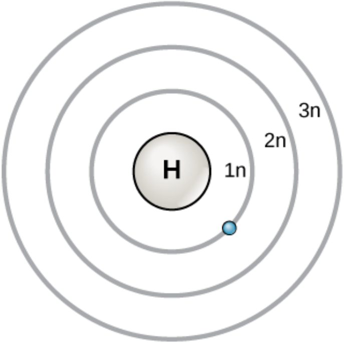
Modèle de Bohr-Sommerfeld

Orbites elliptiques (3 coordonnées généralisées r, θ, φ)

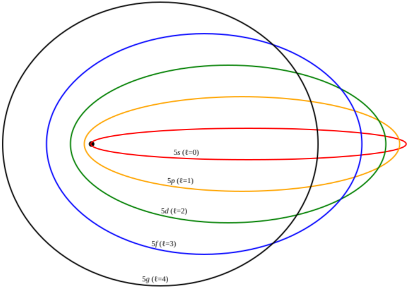
$$\oint m\dot{r} \, \mathrm{d}r = kh \quad ; \oint L \, \mathrm{d}\theta = lh \quad ; \oint L_z \, \mathrm{d}\varphi = mh \tag{6}$$

$$E_n = -\frac{e^4 m}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2} \qquad \text{avec } n = l + k \tag{7}$$

L'atome d'hydrogène



(a) Modèle de Bohr



(b) Modèle de Bohr-Sommerfeld

(a)

https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_(Physical_and_Theoretical_Chemistry)/Electronic_Structure_of_Atoms_and_Molecules/Bohr_Diagrams_of_Atoms_and_Ions

Les quanta comme vision statistique du monde

Interprétation de la règle de Bohr-Sommerfeld : découpage de l'espace des phases en cellules élémentaires d'aire h

Principe de Heisenberg

Indétermination sur la valeur des coordonnée et impulsion conjuguées

$$\Delta q_k \Delta p_k \sim h \tag{8}$$

Approximation de Maxwell-Boltzmann

Soit un système décrit par N nombres quantiques

$$\sum_{(n_k)_{1\leq k\leq N}} \longmapsto \int \prod_{k=1}^{N} \frac{\mathrm{d}q_k\,\mathrm{d}p_k}{h} \tag{9}$$

Le modèle de Thomas-Fermi

- Traitement statistique de l'atome
- Modèle le plus simple pour les atomes lourds
- Pas de terme d'échange, pas de structure en couches, pas de corrélations électroniques, pas de formation moléculaire
- Prouve la règle de Klechkowski
- Considère une densité d'electrons plutôt qu'une fonction d'onde : précurseur de la DFT (*Density Functional Theory*)

Onde de matière : chaque particule matérielle est aussi une onde. Quelle relation entre observables de l'onde et observables du corpuscule ?

Identification : orbite de Bohr $\leftrightarrow$ onde stationnaire

$$n\lambda = 2\pi R = 2\pi \frac{n\hbar}{p} \quad \text{car } n\hbar = L = pR \tag{10}$$

$$p = \frac{h}{\lambda} \tag{11}$$

où λ est la longueur d'onde, R le rayon de l'orbite, L le moment cinétique, p l'impulsion, n le nombre quantique principal

Vers une quantification du champ électromagnétique

- Théorie de Maxwell-Lorentz : néglige la nature quantique de la lumière $\qquad E = pc$
- Théorie quantique de Schrödinger : n'est pas Lorentz-covariante, ne rend pas compte des émissions-absorptions $\qquad E = \hbar\omega$

Solution : appliquer une procédure de quantification canonique à l'hamiltonien de Maxwell-Lorentz

$\Rightarrow$ Electrodynamique quantique (QED)

Un modèle de type Bohr-Sommerfeld pour la lumière

La lumière est une superposition d'OPPH (oscillations harmoniques du champ à la pulsation ω) *non couplées*
Supposons un hamiltonien :

$$\mathcal{H}(q,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} \tag{12}$$

pour un mode ω donné. m est un paramètre. Calculons l'intégrale d'action et appliquons la règle BS :

$$\oint p \, \mathrm{d}q = \pi m \omega q_0^2 = 2\pi \frac{E}{\omega} \tag{13}$$

$$\oint p \, \mathrm{d}q = nh \quad \Rightarrow \quad E = n\hbar\omega \tag{14}$$

Sommaire

La règle d'Einstein-Brillouin-Keller

$$E = n\hbar\omega \tag{15}$$

Démontre la relation de Planck-Einstein, mais néglige l'énergie du vide. Il faut tenir compte des *points de rebroussement*

Règle EBK

Soit q_k une coordonnée quasipériodique d'impulsion conjuguée p_k. Alors il existe un nombre quantique n_k tel que :

$$\oint p_k \,\mathrm{d}q_k = \left(n_k + \frac{\mu_k}{4} + \frac{b_k}{2}\right)h \tag{16}$$

où h est la constante de Planck, μ_k le nombre de points de rebroussement et b_k le nombre de réflections.

On a alors $E = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$!

L'approximation de Wentzel-Kramers-Brillouin

Peut-on donner du sens aux concepts de l'ancienne théorie des quanta, maintenant qu'on connait la mécanique quantique ?

Fonction d'onde WKB

$$\Psi(x) = \frac{c_1}{\sqrt{p(x)}} \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^x p(x')\mathrm{d}x'} + \frac{c_2}{\sqrt{p(x)}} \mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}\int_0^x p(x')\mathrm{d}x'} \tag{17}$$

Solution approchée de l'équation de Schrödinger ssi :

$$\left|\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}x}\right| \ll 1 \tag{18}$$

$$\left|\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}x}\right| = \left|\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}p}\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}x}\right| = \frac{h}{p^2}F\frac{m}{p} = \frac{hFm}{p^3} \tag{19}$$

Bibliography

- Landau, L. Lifschitz, E. *Cours de physique théorique I - Mécanique* 3e éd. (1969) Ed. Mir (Moscou)
- Landau, L. Lifschitz, E. *Cours de physique théorique III - Mécanique quantique* 2e éd. (1967) Ed. Mir (Moscou)
- Messiah, A. *Mécanique quantique I* (1995) Dunod
- Klechkovski, V.M. Justification of the Rule for Successive Filling of $(n+l)$ Groups. *J. Exptl. Theoret. Phys.* **14**, 2 pp. 465-466 (1961)
- Cohen-Tannoudji, C. Dupont-Roc, J. Grynberg, G. *Photons et atomes. Introduction à l'électrodynamique quantique* (2001) EDP Sciences/CNRS Ed.