Formule de Weyl pour l'atome d'Hydrogène

Le Hamiltonien classique pour le mouvement de l'électron est

$$H(\vec{x},\vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}, \qquad r = |\vec{x}|$$

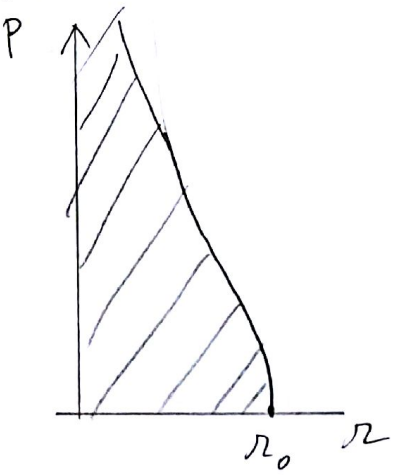
D'après la formule de Weyl, le nombre d'états $\mathcal{N}(E)$ liés d'énergie $E_n < E$, avec $E<0$ donné est approximativement :

$$\mathcal{N}(E) = \frac{\text{Vol}}{(2\pi\hbar)^3}$$

où Vol est le volume de l'espace de phase $(\vec{x},\vec{p}) \in \mathbb{R}^6$ défini par

$$\text{Vol} = \int_{H(\vec{x},\vec{p})\leq E} d^3\vec{x}\, d^3\vec{p}$$

Utilisant les coordonnées sphériques pour $\vec{x}$ et $\vec{p}$, on a



solution 1 : $$\text{Vol} = (4\pi)^2 \int_{p=0}^{+\infty} p^2 \left(\int_{r=0}^{r(p)} r^2\, dr \right) dp$$

avec $$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r(p)}$$

$$\leftrightarrow \quad r(p) = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \Big/ \left(\frac{p^2}{2m} - E \right)$$

alors

$$\text{Vol} = (4\pi)^2 \int_0^\infty p^2 \frac{(r(p))^3}{3}\, dp = \frac{(4\pi)^2 e^6}{3(4\pi\varepsilon_0)^3} \int_0^\infty \frac{p^2}{\left(\frac{p^2}{2m} - E\right)^3}\, dp$$

Scanned by CamScanner

On pose $x^2 = \dfrac{p^2}{2m(-E)}$, $(E<0)$

alors

$$Vol = \frac{(4\pi)^2 e^6 \left(2m(-E)\right)^{3/2}}{3 (4\pi\varepsilon_0)^3 (-E)^3} \underbrace{\int_0^\infty \frac{x^2}{(1+x^2)^3}\, dx}_{\pi/16}$$

$$= \frac{8\pi^3 \hbar^3 R^{3/2}}{3(-E)^{3/2}}$$

donc

$$\boxed{\mathcal{N}(E) = \frac{Vol}{(2\pi)^3 \hbar^3} = \frac{R^{3/2}}{3(-E)^{3/2}}}$$

Solution 2 :

$$Vol = (4\pi)^2 \int_0^{r_0} dr\, r^2 \left(\int_0^{p(r)} p^2\, dp \right)$$

avec $r_0 = \dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 (-E)}$ et $p(r) = \left[2m\left(E + \dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\right]^{1/2}$

alors

$$Vol = (4\pi)^2 \int_0^{r_0} dr\, r^2 \frac{1}{3} \left[2m\left(E + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\right]^{3/2}$$

$$= \frac{(4\pi)^2}{3} \left(2m(-E)\right)^{3/2} \int_0^{r_0} dr\, r^2 \left(\frac{r_0}{r} - 1\right)^{3/2}$$

On pose $x = \dfrac{r}{r_0}$,

$$Vol = \frac{(4\pi)^2}{3} \left(2m(-E)\right)^{3/2} r_0^3 \underbrace{\int_0^1 x^2 \left(\frac{1}{x} - 1\right)^{3/2} dx}_{\pi/16}$$

$$= \frac{8\pi^3 \hbar^3 R^{3/2}}{3(-E)^{3/2}}$$

comme ci-dessus.

Scanned by CamScanner

. D'après le résultat exact,

$$\text{on a } E_n < E < 0 \iff -R\frac{1}{n^2} < E$$

$$\iff n^2 < \frac{R}{(-E)} \iff n < \left(\frac{R}{(-E)}\right)^{1/2}$$

donc $$\mathcal{N}^{\text{exact}}(E) = \sum_{n=1}^{N} n^2 \quad \text{avec} \quad N = \left[\left(\frac{R}{(-E)}\right)^{1/2}\right]$$

↑ partie entière

$$\approx \frac{1}{3}N^3 \quad \text{pour } N \text{ grand}$$

$$\simeq \frac{1}{3}\frac{R^{3/2}}{(-E)^{3/2}}$$

C'est le même résultat (dans la limite $\mathcal{N}$ élevé).

Rem :

- On remarque la simplicité des calcul avec la formule de Weyl, en comparaison du calcul exact du spectre de l'atome H.

- En mécanique classique l'énergie $H(\vec{x}, \vec{p})$ n'est pas bornée inférieurement. Le volume $\text{Vol}(E)$ dans l'espace de phase est cependant fini et ce qui assure la stabilité de l'atome H en mécanique quantique. (nbre fini d'états $\mathcal{N}(E)$, existence d'un état fondamental).

Scanned by CamScanner