

M. Léon Brillouin

La mécanique ondulatoire de Schrödinger;  
 une méthode générale de résolution par approximations  
 successives. (Comptes Rendu 183 p.24. 1926)

de la distance à la particule; par suite, en M, le quotient de f par  $\frac{\partial f}{\partial n}$  est nul. Il en résulte, par (4) et (6), que la vitesse d'une quantum en un point M est

$$(7) \quad U = c^2 \left( \frac{\partial \phi}{\partial n} \right) M$$

La phase  $\phi$  joue le rôle d'un potentiel potentiel des vitesses.

Considérons un tube infiniment délié de trajectoires dont  $\sigma$  désigne la section. Le flux des corpuscules lumineux devant être conservatif, on doit avoir tout le long du tube

$$(8) \quad \rho U \sigma = \text{const.},$$

$\rho$  désignant la densité en volume des corpuscules. En posant la dérivée logarithmique, on trouve

$$(9) \quad \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dn} + \frac{1}{U} \frac{dU}{dn} + \frac{1}{\sigma} \frac{d\sigma}{dn} = 0$$

D'après un théorème connu<sup>(4)</sup>, le dernier terme est égal au double de la courbure moyenne de la surface  $\phi = \text{const.}$  au point considéré, quantité qui a pour expression

$$(10) \quad \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} = \frac{\Delta \phi}{\frac{\partial \phi}{\partial n}}$$

Grâce à (10) et à (9), l'équation (9) prend la forme

$$(11) \quad \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dn} = - \frac{\Delta \phi}{\frac{\partial \phi}{\partial n}}$$

En comparant avec (5), on trouve

$$(12) \quad \rho = \text{const. } a^2.$$

La densité des quanta de lumière est proportionnelle à l'intensité de la théorie classique. Les phénomènes d'interférence et de diffraction sont donc bien explicables à l'aide de la conception corpusculaire de la lumière.

<sup>(4)</sup> Poincaré, Capillarité, p. 51.

1. Schrödinger, développant les idées de L. de Broglie, a précisé récemment les grands traits d'une mécanique atomique ondulatoire. Soit un système atomique, dont l'énergie potentielle est  $V(q^1, \dots, q^n)$ , tandis que l'énergie cinétique  $T$  a pour expression

$$(1) \quad 2T = \sum_{k,l} m^{kl} \dot{q}^k \dot{q}^l = \sum_{k,l} m^{kl} p_k p_l$$

Les  $m^{kl}$  sont des fonctions des coordonnées  $q^k, \dots$ , et nous appellerons  $m$  le déterminant des  $m^{kl}$ . L'équation classique de Hamilton s'écrit

$$(2) \quad \sum_{k,l} m^{kl} \frac{\partial W_0}{\partial q^k} \frac{\partial W_0}{\partial q^l} + 2(V - E) = 0$$

$E$  représentant la constante de l'énergie. Schrödinger aboutit à l'équation générale suivante;

$$(3) \quad m^{\frac{1}{2}} \sum_{k,l} \frac{\partial}{\partial q^k} \left\{ m^{-\frac{1}{2}} m^{kl} \frac{\partial \psi}{\partial q^l} \right\} - \frac{\hbar^2}{2m} (V - E) \psi = 0,$$

où  $\hbar$  est la constante de Planck. Les niveaux d'énergie quantifiés  $E$  sont les valeurs propres de cette équation, c'est-à-dire celles pour lesquelles on peut trouver une fonction  $\psi$  continue, finie et uniforme dans toute l'extension en phase  $q$ .

2. Je veux montrer que l'équation (3) peut être résolue par approximations successives, la première approximation redonnant l'ancienne mécanique quantique. Je pose

$$(4) \quad \psi = e^{\frac{i}{\hbar} W};$$

l'équation (3) donne alors

$$(5) \quad \sum_{k,l} m^{kl} \frac{\partial W}{\partial q^k} \frac{\partial W}{\partial q^l} + 2(V - E) = -\frac{\hbar}{2\pi i} m^{\frac{1}{2}} \sum_{k,l} \frac{\partial}{\partial q^k} \left\{ m^{-\frac{1}{2}} m^{kl} \frac{\partial W}{\partial q^l} \right\}$$

Cette équation diffère de celle de Hamilton (2) par l'adjonction du second membre, lequel est très petit d'après la valeur de  $\hbar$ . Pour que la fonction  $\psi$  n'ait, en chaque point, qu'une détermination, alors que  $W$  est une fonction multiforme, il faut que  $W$  soit tel que ses résidus  $\Gamma_k$  soient des multiples entiers de  $\hbar$ .

(6)  $I_k = n_k h$

Partant d'un point de l'extension en phase, avec une valeur  $W$ , et y revenant après un circuit fermé quelconque, on retrouvera une détermination  $W + nh$  qui redonnera la même valeur de  $\psi$ . Ce sont les conditions ordinaires de quantification, interprétées comme des conditions de résonance au sens de L. de Broglie.

3. L'équation (5) peut se résoudre par approximations successives en posant

(7)  $W = W_0 - \frac{h}{2\pi i} W_1 + \dots + \left(\frac{-h}{2\pi i}\right)^n W_n + \dots$

La première approximation est donnée par l'équation classique de Hamilton (2). Les suivantes sont

(8)  $2 \sum_{kl} m^{kl} \frac{\partial W_0}{\partial q^k} \frac{\partial W_0}{\partial q^l} = m^{\frac{1}{2}} \sum_{kl} \frac{\partial}{\partial q^k} \left\{ m^{-\frac{1}{2}} m^{kl} \frac{\partial W_0}{\partial q^l} \right\}$

(9)  $2 \sum_{kl} m^{kl} \frac{\partial W_0}{\partial q^k} \frac{\partial W_n}{\partial q^l} = F(W_0, W_1, \dots, W_{n-1})$

L'expression  $F$  contient les dérivées des fonctions connues par les approximations précédentes.

Nous trouvons donc, comme première approximation, l'équation de Hamilton combinée aux conditions (6), c'est-à-dire l'ancienne mécanique quantique; les approximations ultérieures se comportent que des équations linéaires, et considérées constituent la nouveauté de la mécanique de Schrödinger.

4. Lorsque les variables se séparent dans la fonction de Hamilton, la première approximation se résout par des quadratures portant isolément sur chaque variable; mais les approximations ultérieures établiront un couplage entre ces variables, car on n'y retrouvera pas, en général, la séparation.

Il y a séparation complète, si  $V$  et  $T$  se présentent

comme des sommes de termes portant chacun sur une variable

(10)  $V = \sum_k V_k(q^k)$  et  $2T = \sum_k m^{kk}(q^k) p_k^2$  avec  $m^{kl} = 0$  ( $k \neq l$ )

On a alors

(11)  $m = |m^{kl}| = m^{11} m^{22} \dots m^{kk} \dots m^{nn}$

cherchons une solution de la forme

(12)  $W = \sum_k U_k(q^k)$

et nous obtenons des équations séparées, du type suivant

(13)  $m^{kk} \left( \frac{\partial U_k}{\partial q^k} \right)^2 + 2V_k - 2\alpha_k = -\frac{h}{2\pi i} \sqrt{m^{kk}} \frac{\partial}{\partial q^k} \sqrt{m^{kk}} \frac{\partial U_k}{\partial q^k}$

avec la condition auxiliaire

$\sum_k \alpha_k = E$

Ces équations se résolvent aisément par approximations successives, au moyen de simples quadratures.

La mécanique de Schrödinger admet donc l'ancienne mécanique quantique comme première approximation, mais établit en général des couplages supplémentaires entre les variables.

Ph. De Donder et Fr. H. van den Dungen  
 la quantification déduite de la gravifique einsteinienne.  
 ( — p. 22 )

Reportons-nous à l'équation (9) de la Note<sup>(2)</sup> parue dans ces Comptes rendus et due à l'un des auteurs de celle-ci.

Introduisons la fonction invariante  $F_V$  au moyen de

$$(1) \quad K S_V = \ln F_V \quad (V=1, 2, \dots, N)$$

où  $K$  représente une constante universelle. Cette équation (9) devient alors

$$(2) \quad I_V \equiv \sum_{\varphi} \sum_{\psi} g_{\varphi\psi}^{\varphi\psi} \left( \frac{\delta F_V}{\delta g_{\varphi\psi}} - K \tau_V^{(\psi)} \Phi_{\varphi}^* F_V \right) \left( \frac{\delta F_V}{\delta g_{\varphi\psi}} - K \tau_V^{(\psi)} \Phi_{\psi}^* F_V \right) - (K \tau_V^{(0)}) F_V^2 = 0$$

Prenons, par rapport à  $F_V$ , la dérivée variationnelle du multiplicateur  $I \sqrt{-g_x}$ ; d'où

$$(3) \quad \frac{\delta (I_V \sqrt{-g_x})}{\delta F_V} \equiv \frac{\partial (I_V \sqrt{-g_x})}{\partial F_V} - \sum_{\varphi=1}^f \frac{\partial}{\partial g_{\varphi\psi}} \left[ \frac{\delta (I_V \sqrt{-g_x})}{\delta \frac{\delta F_V}{\delta g_{\varphi\psi}}} \right]$$

En développant les calculs dans (3), on est amené à poser:

$$(4) \quad \Delta g F_V \equiv \frac{1}{\sqrt{-g_x}} \sum_{\varphi} \sum_{\psi} \frac{\partial}{\partial g_{\varphi\psi}} \left( g_{\varphi\psi}^{\varphi\psi} \sqrt{-g_x} \frac{\delta F_V}{\delta g_{\varphi\psi}} \right);$$

$$(5) \quad D \equiv \frac{1}{\sqrt{-g_x}} \sum_{\varphi} \sum_{\psi} \frac{\partial}{\partial g_{\varphi\psi}} \left( g_{\varphi\psi}^{\varphi\psi} \sqrt{-g_x} \Phi_{\varphi}^* \right);$$

$$(6) \quad E \equiv \sum_{\varphi} \sum_{\psi} g_{\varphi\psi}^{\varphi\psi} \Phi_{\varphi}^* \Phi_{\psi}^*$$

En égalant la dérivée variationnelle (3) à zéro, c'est-à-dire en extrémant

$$\int I_V \sqrt{-g_x} dq_1 \dots dq_f$$

nous obtenons, en utilisant les notations (4), (5) et (6),

$$(7) \quad \Delta g F_V - K \tau_V^{(0)} D F_V - K^2 (E \tau_V^{(0)2} - \tau_V^{(0)}) F_V = 0.$$

Nous pourrions disposer des potentiels  $\Phi_{\psi}^*$  ( $\psi=1, \dots, f$ ) de manière qu'on ait  $D=0$ ; c'est la généralisation de l'équation complémentaire de Maxwell. Ainsi, (7) devient

$$(8) \quad \Delta g F_V + R_V F_V = 0 \quad (V=1, 2, \dots, N)$$

où l'on a écrit

(2) Donder, Appl. de la relativité aux systèmes atomiques et moléculaires  
 ( —, 1926 p. 1380-1382 )

$$R_V \equiv K^2 (\tau_V^{(0)2} - E \tau_V^{(0)})$$

L'équation (8) doit être vérifiée en tout point de l'espace des configurations  $q_1, \dots, q_f$ ; elle peut être remplacée par l'équation intégrale de Fredholm:

$$F_{VP} = \int_q G_{VPM} R_{VM} F_{VM} \delta q_1 \dots \delta q_f,$$

$P$  et  $M$  étant deux points de l'espace  $q$  et  $G_{VPM}$  représentant la fonction de Green correspondante, à un facteur constant près. On a supposé que  $F_V$  est donné sur la surface limitant l'espace  $q$ , ou, si l'espace  $q$  est illimité, que  $F_V$  tend vers zéro comme  $r^{f-1}$  pour  $f > 1$ , ou comme  $\log r$ , pour  $f=1$ ; le symbole  $r$  représente la distance radiale dans l'espace des configurations défini par

$$(85)^2 = \sum_{\varphi} \sum_{\psi} g_{\varphi\psi}^{\varphi\psi} \delta q_{\varphi} \delta q_{\psi}$$

L'équation intégrale (10) peut encore être écrite quand le phénomène est périodique par rapport à certains degrés de liberté.

L'équation intégrale homogène (10) n'admettra de solution  $F_V$  non identiquement nulle que pour une suite de valeurs déterminées et distinctes<sup>(4)</sup> de  $R_V$ . On obtient ainsi la quantification grâce à la gravifique einsteinienne.

Les résultats sont à rapprocher des importantes recherches de M. E. Schrödinger<sup>(5)</sup> concernant la quantification de certains systèmes non relativistes.

(4) Nous supposons ici que le noyau de l'équation (10) ne possède pas de points de indétermination ou de singularités essentielles.