Séminaire L. de Broglie.
Théories physiques

M. Rot

Les états stationnaires et la théorie de la double solution

Séminaire L. de Broglie. Théories physiques, tome 26 (1956-1957), exp. n° 2, p. 1-9
<http://www.numdam.org/item?id=SLDB_1956-1957__26__A2_0>

Faculté des Sciences de Paris
-:-:-:-

Séminaire de THÉORIES PHYSIQUES
(Séminaire Louis de BROGLIE)
Année 1956/57
-:-:-:-

Exposé n° 2

LES ÉTATS STATIONNAIRES ET LA THÉORIE DE LA DOUBLE SOLUTION

(Exposé de M. ROT, le 20.11.1956)

Le but de cet exposé est de montrer, en suivant une méthode proposée par Mr Louis de Broglie, comment on peut construire une onde singulière u représentant un corpuscule immobile dans une enceinte, dans le cas où l'équation de Schrödinger est résoluble par séparation des variables. Cette méthode permet en outre d'écarter une difficulté résultant d'une formule de Rayleigh et de justifier la décomposition de l'onde u en sa partie singulière u_0 et en sa partie régulière v proportionnelle à l'onde de probabilité [1].

D'après la Mécanique ondulatoire les états stationnaires sont représentés par une fonction d'onde ψ solution de l'équation de Schrödinger qui, dans un système de coordonnées curvilignes orthogonales pour lequel l'élément d'arc est

$$ds^2 = \sum_{i=1}^{3} e_i(x_1 , x_2 , x_3) \, dx_i^2$$

s'écrit :

$$\Delta \psi = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{e} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{e}{e_i} \frac{\partial \psi}{\partial x_i}\right) = - \frac{8\pi^2 mE}{h^2} \psi = - k$$

où on a posé $e = \sqrt{e_1 e_2 e_3}$.

Si on cherche la solution sous la forme $\psi = X_1(x_1)X_2(x_2)X_3(x_3)$ on aura [2]

$$(1) \qquad \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{e} \frac{\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{e}{e_i} X_i'\right)}{X_i} + k = 0$$

Pour que cette équation soit séparable il faut que $\frac{e}{e_i} = f_i(x_i)g_i(x_j,x_k)$ $(k , j \neq i)$. Posons $k = k^{(1)}$; comme une solution de (1) doit contenir outre k deux constantes de séparation $k^{(2)}$ et $k^{(3)}$, (1) doit être une identité en $k^{(j)}$ donc, si $\Phi_{ji} = \frac{\partial}{\partial k^{(j)}} \left[\frac{\frac{d}{dx_i}(f_i X_i')}{X_i}\right]$,

$$\sum_{i=1}^{3} \phi_{ji} \frac{g_i}{e} + \delta_{j1} = 0$$

soit $\frac{g_i}{e} = - \frac{\phi^{i1}}{\phi}$ où ϕ^{i1} est le cofacteur de ϕ_{1i} dans le dévelop-pement du déterminant ϕ des ϕ_{ji} .

ϕ^{i1} et g_i ne dépendant pas de x_i $\frac{\phi}{e}$ doit être une constante que nous pouvons toujours prendre égale à 1 . Si on pose alors $S_{ji}(x_i) = - \frac{\phi_{ji}(x_i)}{f_i(x_i)}$ on aura avec des notations évidentes :

$$(2) \qquad \frac{1}{e_i} = \frac{g_i f_i}{e} = \frac{S^{i1}}{S} \quad ; \quad \frac{S}{e} = \frac{1}{f_1 \cdot f_2 \cdot f_3}$$

Pour voir que ces conditions sont aussi suffisantes reportons les dans (1) :

$$\sum_{i=1}^{3} \frac{S^{i1}}{S} \frac{(f_i X_1')'}{f_i X_2} + k \equiv \sum_{i=1}^{3} \frac{S^{i1}}{S} \left[\frac{(f_i X_i')'}{f_i X_i} + k^{(1)} S_{1i}\right] = 0$$

qui peut s'interpréter en disant que le vecteur de composante $\left[\frac{(f_i X_i')'}{f_i X_i} + k^{(1)} S_{1i}\right]$ est orthogonal au vecteur de composantes $\frac{S^{i1}}{S}$, donc est une combinaison linéaire des deux vecteurs de composantes S_{2i} et S_{3i} :

$$(3) \qquad \frac{1}{f_i} \frac{d}{dx_i} \left(f_i \frac{dX_i}{dx_i}\right) + \sum_{j=1}^{3} k^{(j)} S_{ji} X_i = 0$$

Telles sont les équations vérifiées par $X_i(x_i)$. Les conditions aux limites seront elles-aussi séparables si les limites de l'enceinte coïncident avec une ou plusieurs surfaces ou portions de surfaces de coordonnées. Eisenhart [3] a montré que seuls onze systèmes de coordonnées satisfont aux conditions (2), les surfaces de coordonnées étant des quadriques dégénérées ou non.

En utilisant soit les conditions aux limites relatives à x_2 et x_3 , soit le fait que X_2 et X_3 doivent être finies et uniformes, on trouve que $k^{(2)}$ et $k^{(3)}$ ne peuvent prendre qu'une suite de valeurs discrètes $k^{(2)}_{m,n}$ et $k^{(3)}_{m,n}$ (pouvant dépendre de k) auxquelles correspondent les fonctions $X^{(m,n)}_{(2)}$ et $X^{(m,n)}_{3}$ qui, comme on peut s'en assurer vérifient la relation d'orthogonalité :

$$(4) \qquad \iint X_2^{(m,n)} X_3^{(m,n)} X_2^{(pq)} X_3^{(pq)} S^{11} f_2 f_3 \, dx_2 \, dx_3 = \delta_{mp} \; \delta_{nq}$$

Il reste alors à résoudre l'équation

$$(5) \qquad \frac{1}{f_1} \frac{d}{dx_1} \left(f_1 \frac{dX}{dx_1}\right) + \left(k \, S_{11} + k_{mn}^{(2)} \, S_{21} + k_{mn}^{(3)} \, S_{31}\right) X = 0$$

Désignons par $X_1^{(m,n)}$ et $Y_1^{(m,n)}$ deux solutions linéairement indépendantes de cette équation. Deux éventualités peuvent se présenter :

a) L'une de ces solutions, soit Y_1, est singulière pour $x_1 = b$ à l'intérieur de l'enceinte, ce qui correspond à $f_1(b) = 0$. Alors le problème ne comporte qu'une seule condition aux limites que nous pouvons écrire $X_1^{(m,n)}(k,a) = 0$.

b) Les deux solutions sont régulières à l'intérieur de l'enceinte. Le problème doit comporter deux conditions aux limites pour $x_1 = a$ et $x_1 = b$.

Mais nous pouvons choisir l'une des deux solutions pour que l'une des conditions soit toujours vérifiée, par exemple $X_1^{(m,n)}(k,b) = 0$, de sorte qu'ici encore il reste la seule équation

$$X_1^{(m,n)} \; (k,a) = 0$$

pour déterminer k. Soit $k_{\ell,m,n}$ les racines de cette équation. On peut vérifier que dans les deux cas

$$(6) \qquad \int_b^a X_1^{(m,n)}(k_{\ell,m,n}, x_1) X_1^{(m,n)}(k_{p,m,n}, x_1) S_{11} f_1 dx_1 = \delta_{\ell p}$$

Finalement on a pour l'onde de probabilité :

$$\psi^{(\ell,m,n)} = X_1^{(m,n)}(k_{\ell,m,n}, x_1) X_2^{(m,n)}(x_2) X_3^{(m,n)}(x_3)$$

avec la condition

$$\int_{\text{enceinte}} \psi^{(\ell,m,n)} \quad \psi^{(pqr)} \; e \; dx_1 dx_2 dx_3 = \delta^{\ell p} \delta^{mq} \delta^{nr}$$

D'après la Théorie de la double solution la réalité physique est représentée par une onde u obéissant à une équation non linéaire. Cependant les termes non linéaires ne se font sentir que dans une très petite région représentant le corpuscule au sens strict où u prend des valeurs très élevées. En première approximation on peut admettre la validité de l'équation de Schrödinger et remplacer la région "singulière" par un point singulier où u devient infinie. Si on suppose que la structure interne du corpuscule possède la symétrie sphérique, u vérifiera cette approximation :

$$(7) \qquad \Delta u + ku = \varepsilon \frac{\delta(x_1-x_1^0)\ \delta(x_2-x_2^0)\ \delta(x_3-x_3^0)}{e}$$

le second membre traduisant l'existence de la singularité au point x_i^0.
Nous en cherchons une solution sous la forme

$$u(k,x_i,x_i^0) = \sum_{m,n} X^{(m,n)}(k,x_1,x_1^0) Z^{(m,n)}(x_2^0,x_3^0) X_2^{(m,n)}(x_2) X_3^{(m,n)}(x_3)$$

En reportant dans (7) et en tenant compte de (2), (3) et (4) il vient

$$Z^{(m,n)}(x_2^0,x_3^0) = X_2^{(m,n)}(x_2^0)\ X_3^{(m,n)}(x_3^0)$$

$$(8) \qquad \frac{1}{f_1}\frac{d}{dx_1}\left(f_1 \frac{dX}{dx_1}\right) + \left(k\, S_{11} + k^{(2)}_{m,n} S_{21} + k^{(3)}_{m,n} S_{31}\right)X = \frac{\varepsilon\, \delta(x_1-x_1^0)}{f_1}$$

Soit $\mathcal{W}$ le wronskien des solutions $X_1^{(m,n)}$ et $Y_1^{(m,n)}$ de l'équation (5).
Une solution particulière de (8) sera donnée par

$$C(x_1) X_1^{(m,n)} + D(x_1)\ Y_1^{(m,n)}$$

avec (méthode de la variation des constantes)

$$C' = -\frac{\varepsilon\, Y_1^{(m,n)}\, \delta(x_1-x_1^0)}{\mathcal{W}\cdot f_1} \qquad\qquad D' = \frac{\varepsilon\, X_1^{(m,n)}\, \delta(x_1-x_1^0)}{\mathcal{W}\cdot f_1}$$

dont nous pouvons prendre comme primitive

$$C = -\frac{\varepsilon\, Y_1^{(m,n)}(k,x_1^0)}{\mathcal{W}_0\, f_1(x_1^0)} \qquad D = 0 \qquad \text{si} \quad x_1 \leq x_1^0$$

$$C = 0 \qquad D = \frac{\varepsilon\, X_1^{(m,n)}(k,x_1^0)}{\mathcal{W}_0\, f_1(x_1^0)} \qquad \text{si} \quad x_1 \geq x_1^0$$

$\mathcal{W}_0$ étant la valeur du wronskien au point x_1^0.

Finalement la solution générale de (7) n'admettant qu'une seule singularité dans le cas a) et s'annulant pour $x = b$ dans le cas b) est

$$u(k,x_i,x_1^0)\begin{cases}\displaystyle\sum_{m,n}\left\{-\varepsilon\frac{Y_1^{(m,n)}(k,x_1^0)}{\mathcal{W}_0\ f_1(x_1^0)}Z^{(m,n)}+B_{m,n}\right\}X_1^{(m,n)}(k,x_1)X_2^{(m,n)}(x_2)X_3^{(m,n)}(x_3) & \text{si } x_1\leqslant x_1^0\\ \displaystyle\sum_{m,n}\left\{\varepsilon\frac{X_1^{(m,n)}(k,x_1^0)}{\mathcal{W}_0\ f_1(x_1^0)}Z^{(m,n)}Y_1^{(m,n)}+B_{m,n}X_1^{(m,n)}(k,x_1)\right\}X_2^{(m,n)}(x_2)\,X_3^{(m,n)}(x_3) & \text{si } x_1\geqslant x_1^0\end{cases}$$

les $B_{m,n}$ étant des constantes qui resteraient arbitraires si l'équation de Schrödinger était exacte, mais qui sont bien déterminées par la forme de l'onde u si on admet que (7) n'est qu'une approximation de la véritable équation d'onde non linéaire.

Si nous posons alors

$$(9)\qquad B_{m,n}=A_{m,n}\,\frac{X_1^{(m,n)}(k,x_1^0)\ Z^{(m,n)}}{\mathcal{W}_0\cdot f_1(x_1^0)}$$

nous n'avons plus à satisfaire que l'unique condition aux limites

$$(10)\qquad \frac{X_1^{(m,n)}(k,a)}{Y_1^{(m,n)}(k,a)}=-\frac{\varepsilon}{A_{m,n}}$$

qui fournit les valeurs propre $k'_{\ell,m,n}$.

Comme la région singulière doit être extrêmement petite ε est lui-même très petit donc ces nouvelles valeurs propres diffèrent très peu des anciennes. Les fonctions d'ondes singulières quantifiées sont alors

$$u^{(\ell\, mn)}(x_i, x_i^0) = \begin{cases} \displaystyle\sum_{m,n} - \varepsilon \frac{Z^{(m,n)}}{\mathcal{W}_0 . f_1(x_1^0)} \Big\{ Y_1^{(m,n)}(k'\ell_{mn}, x_1^0) + \\ \displaystyle + \frac{Y_1^{(m,n)}(k\ell_{mn}, a)}{X_1^{(m,n)}(k\ell_{mn}, a)} X_1^{(m,n)}(k\ell_{mn}, x_1^0) \Big\} X_1^{(m,n)}(k\ell_{mn}, x_1) X_2^{(m,n)}(x_2) \\ X_3^{(m,n)}(x_3) \qquad \text{si } x_1 \leqslant x_1^0 \\ \\ \displaystyle\sum_{m,n} \varepsilon \frac{Z^{(m,n)}}{\mathcal{W}_0 f_1(x_1^0)} X_1^{(m,n)}(k'\ell_{mn}, x_1^0) \Big\{ Y_1^{(m,n)}(k\ell_{mn}, x_1) - \\ \displaystyle - \frac{Y_1^{(m,n)}(k'\ell_{mn}, a)}{X_1^{(m,n)}(k'\ell_{mn}, a)} X_1^{(mn)}(k'\ell_{mn}, x_1) \Big\} X_2^{(mn)}(x_2) X_3^{(mn)}(x_3) \\ \qquad \text{si } x_1 \geqslant x_1^0 \end{cases}$$

On voit aisément que cette expression, considérée comme fonction de $k\ell_{mn}$, n'admet que les seuls poles simples [4] $k_{\ell mn}$ de sorte que

$$u^{(\ell, m,n)} = \sum_{p,m,n} - \varepsilon \frac{\psi^{(p,m,n)}(x_i^0)\ \psi^{(p,m,n)}(x_i)}{k\ell_{mn} - k_{pmn}} \ \frac{Y_1^{(m,n)}(k_{mn}, a)}{\mathcal{W}_0 f_1(x_1^0)\ \frac{\partial X_1^{(mn)}}{\partial k}(k\ell_{mn}, a)}$$

Or en dérivant (5) par rapport à k on a

$$\frac{d}{dx_1} \Big\{ f_1 \Big[\frac{dX}{dx} \frac{\partial X}{\partial k} - X \frac{d}{dx} \Big(\frac{\partial X}{\partial k}\Big) \Big] \Big\} = S_{11}\ f_1\ X^2$$

d'où, en tenant compte de (6) et du choix de X_1 dans les deux cas a) et b) ainsi que la relation

$$\mathcal{W} . f_1 = \text{Cte} = \mathcal{W}_a . f_1(a) = - Y_1^{(mn)}(k\ell_{mn}, a) \frac{dX_1^{(m,n)}}{dx_1}(k\ell_{mn}, a)\ f_1(a) :$$

$$(11) \qquad \frac{Y_1^{(m,n)}(k\ell_{mn}, a)}{\mathcal{W}_0 f_1(x_1^0)\ \frac{\partial X_1^{(mn)}}{\partial k}(k\ell_{mn}, a)} = -1$$

On retrouve donc l'expression bien connue de Rayleigh et Sommerfeld :

$$u^{(\ell,m,n)}(x_i,x_i^0) = \sum_{p,m,n} \varepsilon \frac{\psi^{(\ell mn)}(x_i^0)\ \psi^{(pmn)}(x_1)}{k'_{\ell mn} - k_{pmn}}$$

Pour mettre en évidence la décomposition $u \simeq u_0 + v$ isolons le terme correspondant à $p = \ell$. Comme

$$X_1^{(mn)}(k'_{\ell mn},a) \simeq (k'_{\ell mn} - k_{\ell mn}) \frac{\partial X_1^{(mn)}}{\partial k}(k_{\ell mn},a)$$

$$Y_1^{(mn)}(k'_{\ell mn},a) \simeq Y_1^{(mn)}(k_{\ell mn},a)$$

il vient en tenant compte de (9), (10) et (11)

$$(12) \qquad u^{(\ell,m,n)}(x_i,x_i^0) \simeq \sum_{p\neq \ell,m,n} \frac{\psi^{(pmn)}(x_i^0)\ \psi^{(pmn)}(x_1)}{k'_{\ell mn} - k_{pmn}} + B_{mn}\, \psi^{(\ell mn)}(x_i)$$

ce qui constitue le résultat annoncé.

<u>APPLICATION.</u>

Corpuscule situé en $(x_0\ ,\ y_0\ ,\ z_0)$ dans une boîte rectangulaire définie par

$$0 \leqslant x \leqslant a \quad ; \quad o \leqslant y \leqslant b \quad ; \quad o \leqslant z \leqslant c$$

On a immédiatement

$$S = \begin{vmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \quad ; \quad f_1 = f_2 = f_3 = 1$$

Les conditions aux limites sur y et z donnent

$$k_n^{(2)} = \left(\frac{\pi n}{c}\right)^2 \quad ; \quad X_3^{(n)} = \sqrt{\frac{2}{c}}\ \sin \frac{n\pi}{c}\ z$$

$$k_m^{(2)} = \left(\frac{\pi m}{b}\right)^2 \quad ; \quad X_2^{(m)} = \sqrt{\frac{2}{b}}\ \sin \frac{m\pi}{b}\ y$$

X_1 étant déterminé par l'équation

$$X'' + (k - k_{m,n})\, X = 0 \qquad \text{où} \quad k_{m,n} = \pi^2 \left(\frac{m^2}{b^2} + \frac{n^2}{c^2}\right)$$

Nous sommes dans le cas b) de la théorie générale de sorte que, pour n'avoir qu'une condition aux limites, nous utiliserons $X_1 = \sin$

Les valeurs propres sont données par

$$\sin \sqrt{k - k_{m,n}}\, a = 0 \qquad \text{soient } k_{\ell mn} = \pi^2 \left(\frac{\ell^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} + \frac{n^2}{c^2} \right)$$

et les fonctions d'onde sont

$$\psi(\ell, m, n) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin \frac{\ell\pi}{a} x \sin \frac{m\pi}{b} y \sin \frac{n\pi}{c} z$$

quant à l'onde singulière elle est de la forme

$$u = \begin{cases} \sum\limits_{m,n} \left[\dfrac{4\varepsilon}{bc} \dfrac{\cos \sqrt{k-k_{m,n}}\, x_0}{\sqrt{k - k_{m,n}}} \sin \dfrac{m\pi}{b} y_0 \sin \dfrac{n\pi}{c} z_0 + B_{m,n} \right] \\ \qquad \sin \sqrt{k-k_{m,n}}\, x \sin \dfrac{m\pi}{b} y \sin \dfrac{n\pi}{c} z \qquad \text{si} \quad x \leqslant x_0 \\ \sum \left[-\dfrac{4\varepsilon}{bc} \dfrac{\sin \sqrt{k-k_{m,n}}\, x_0}{\sqrt{k - k_{m,n}}} \sin \dfrac{m\pi}{b} y_0 \sin \dfrac{n\pi}{c} z_0 \cos \sqrt{k-k_{m,n}}\, x + \right. \\ \qquad \left. + B_{m,n} \sin \sqrt{k-k_{m,n}}\, x \right] \sin \dfrac{m\pi}{b} y \sin \dfrac{n\pi}{c} z \qquad \text{si} \quad x \geqslant x_0 \end{cases}$$

ε et $B_{m,n}$ étant des constantes bien déterminées les nouvelles valeurs propres $k'_{\ell mn}$ sont données par

$$\frac{\sin \sqrt{k- k_{m,n}}\, a}{\cos \sqrt{k-k_{m,n}}\, a} = - \frac{\varepsilon}{A_{m,n}}$$

où on a posé

$$B_{m,n} = \frac{4}{bc} A_{m,n} \frac{\sin \sqrt{k-k_{m,n}}\, x_0}{\sqrt{k-k_{m,n}}} \sin \frac{m\pi}{b} y_0 \sin \frac{n\pi}{c} z_0 .$$

Un calcul élémentaire fournit alors la décomposition (12) .

BIBLIOGRAPHIE

[1] L. de BROGLIE : Une tentative d'interprétation causale et non linéaire de la Mécanique ondulatoire (Paris, 1956), en particulier chap. 17.

[2] H.P. ROBERTSON : Math. Ann., 98 (1928) p. 749.

[3] L.P. EISENHART : Ann. of Math., 35 (1934) p. 284 ; Phys. Rev., 45 (1934) p. 427.

[4] E. PICARD : Leçons sur quelques problèmes aux limites (Paris, 1930) p. 23.