Une remarque relative à la mécanique corpusculaire.

par F. J. DE WISNIEWSKI (Lazin-Pologne).

Dans la note suivante l'auteur tâche de démontrer qu'on peut bâtir un système de mécanique corpusculaire qui, au point de vue quantique, contient les résultats de la mécanique classique et de la mécanique ondulatoire comme cas particuliers.

On peut démontrer que la fonction φ qui rend extremum l'intégrale

$$I = \iiint \left\{ \frac{h^2}{8\pi^2 m} \left[\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z}\right)^2 \right] + \right.$$
$$\left. + \varphi\left(M_x \frac{\partial \varphi}{\partial x} + M_y \frac{\partial y}{\partial \varphi} + M_z \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) + (U - h_0)\varphi^2 \right\} d\tau$$

est une solution de l'equation de SCHRÖDINGER:

$$\nabla^2 \varphi - \frac{8\pi^2 m}{h^2}(h_0 - U)\varphi = 0$$

si les fonctions M_x, M_y, M_z satisfont à la relation:

$$\frac{\partial M_x}{\partial x} + \frac{\partial M_y}{\partial y} + \frac{\partial M_z}{\partial z} = 0.$$

On a en effet:

$$\delta I = \iiint \left\{ \frac{h^2}{4\pi^2 m} \left[\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right) \frac{\partial \delta\varphi}{\partial x} + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y}\right) \frac{\partial \delta\varphi}{\partial y} + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z}\right) \frac{\partial \delta\varphi}{\partial z} \right] + \right.$$
$$+ \delta\varphi \left[M_x \frac{\partial \varphi}{\partial x} + M_y \frac{\partial \varphi}{\partial y} + M_z \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right] +$$
$$\left. + \varphi \left[M_x \frac{\partial \delta\varphi}{\partial x} + M_y \frac{\partial \delta\varphi}{\partial y} + M_z \frac{\partial \delta\varphi}{\partial z} \right] + 2(U - h_0)\varphi\delta\varphi \right\} d\tau.$$

En tenant compte des relations:

$$\varphi M_s \frac{\partial \varphi}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial s}(\varphi M_s \delta\varphi) - M_s \frac{\partial \varphi}{\partial s}\delta\varphi - \varphi \frac{\partial M_s}{\partial s}\delta\varphi$$
$$\frac{\partial \varphi}{\partial s}\frac{\partial \delta\varphi}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial s}\left(\frac{\partial \varphi}{\partial s}\delta\varphi\right) - \delta\varphi \frac{\partial^2 \varphi}{\partial s^2}$$

et en remplaçant les intégrales de volume par les intégrales de surface, on trouve:

$$\delta I = \iint \left\{ \frac{h^2}{4\pi^2 m} \partial n + M_n \varphi \right\} \delta\varphi d\sigma - \iiint \left\{ \frac{h^2}{4\pi^2 m} \nabla^2\varphi + 2\left(h_0 + \frac{1}{2} \operatorname{div} M - U\right)\varphi \right\} \delta\varphi d\tau.$$

On pourra satisfaire la condition:

$$\delta I = 0$$

pour des valeurs arbitraires de $\delta\varphi$ si l'on admet qu'en chaque point de l'espace a lieu l'équation:

$$\text{(a)} \qquad \frac{h^2}{8\pi^2 m} \cdot \nabla^2\varphi + \left(h_0 + \frac{1}{2} \operatorname{div} M - U\right)\varphi = 0$$

et qu'en chaque point de la surface environante a lieu la relation:

$$\text{(b)} \qquad \frac{h^2}{4\pi^2 m} \frac{\partial\varphi}{\partial n} + M_n\varphi = 0.$$

L'équation (a) est identique à l'équation de SCHRÔDINGER si l'on pose:

$$\text{(c)} \qquad \operatorname{div} M = 0.$$

Donc, si la relation (c) est remplie, toute fonction qui rend l'intégrale I extremum est une solution de l'équation de SCHRÖDINGER.

On obtient l'équation fondamentale de la mécanique ondulatoire quand on exprime que l'intégrale:

$$\iiint \left\{ H\left(\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial x};\ \frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial y};\ \frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial z},\ x,\ y,\ z\right) - h_0 \right\} \varphi^2 d\tau$$

a une valeur extremale.

Par H on désigne ici la fonction de HAMILTON et par φ une fonction qui est reliée à la fonction S de JACOBI par la relation:

$$S = \frac{h}{2\pi} \log \varphi$$

h_0 désigne la constante d'énergie.

On peut aussi suivre la route inverse et poser comme fonction de HAMILTON d'une mécanique corpusculaire généralisée une fonction H telle que l'intégrale:

$$\iiint \{ H - h_0 \} \varphi^2 d\tau$$

admette comme condition d'extremum l'équation de SCHRÖDINGER.

D' après le theorème démontré plus haut, il suit que l' expression:

$$\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{1}{\varphi^2}\left[\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right)^3+\left(\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right)^2\right]+\frac{1}{\varphi}\left(M_x\frac{\partial\varphi}{\partial x}+M_y\frac{\partial\varphi}{\partial y}+M_z\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right)+U$$

peut être considérée comme fonction de HAMILTON d' une mécanique corpusculaire généralisée.

Quand on remplace φ par S, on trouve pour la fonction H de HAMILTON l' expression:

$$H=\frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial S}{\partial z}\right)^2\right]+M_x\frac{\partial S}{\partial x}+M_y\frac{\partial S}{\partial y}+M_z\frac{\partial S}{\partial z}+U$$

où M_x, M_y, M_z doivent satisfaire la condition:

$$\frac{\partial M_x}{\partial x}+\frac{\partial M_y}{\partial y}+\frac{\partial M_z}{\partial z}=0.$$

En désignant par p la quantité du mouvement de la masse m et en posant:

$$p=\nabla S$$

on obtient pour la fonction H de HAMILTON l' expression suivante:

$$H=\frac{1}{2m}(p_x^2+p_y^2+p_z^2(+\frac{2\pi}{h}(M_xp_x+M_yp_y+M_zp_z)+U.$$

On deduit les équations du mouvement de la masse m en appliquant les équations de HAMILTON:

$$\frac{dq}{dt}=\frac{\partial H}{\partial p};\quad\frac{dp}{dt}=-\frac{\partial H}{\partial q}.$$

On trouve ainsi:

$$\frac{dp_x}{dt}=-\frac{2\pi}{h}\left(p_x\frac{\partial M_x}{\partial x}+p_y\frac{\partial M_y}{\partial x}+p_z\frac{\partial M_z}{\partial x}\right)-\frac{\partial U}{\partial x}$$

$$p_x=m\frac{dx}{dt}-\frac{2\pi}{h}mM_x$$

et quatre équations analogues pour p_y et p_z.

En éliminant p_x, p_y, p_z, on obtient les trois équations du mouvement du corpuscule de masse m:

$$mx''=\frac{2\pi m}{h}\left[y'\left(\frac{\partial M_x}{\partial y}-\frac{\partial M_y}{\partial x}\right)-z'\left(\frac{\partial M_z}{\partial x}-\frac{\partial M_x}{\partial z}\right)\right]+\frac{2\pi^2 m}{h^2}\frac{\partial M^2}{\partial x}-\frac{\partial U}{\partial x}$$

$$my''=\frac{2\pi m}{h}\left[z'\left(\frac{\partial M_x}{\partial z}-\frac{\partial M_z}{\partial x}\right)-x'\left(\frac{\partial M_x}{\partial y}-\frac{\partial M_y}{\partial x}\right)\right]+\frac{2\pi^2 m}{h^2}\frac{\partial M^2}{\partial y}-\frac{\partial U}{\partial y}$$

$$mz''=\frac{2\pi m}{h}\left[x'\left(\frac{\partial M_z}{\partial x}-\frac{\partial M_x}{\partial z}\right)-y'\left(\frac{\partial M_x}{\partial z}-\frac{\partial M_z}{\partial x}\right)\right]+\frac{2\pi^2 m}{h^2}\frac{\partial M^2}{\partial z}-\frac{\partial U}{\partial z}.$$

Pour l'expression de l'énergie totale du corpuscule on trouve:

$$h_0 = \frac{m}{2}(x'^2 + y'^2 + z'^2) - \frac{2\pi^2 m}{h^2} M^2 + U$$

ou bien, en remplaçant les composantes de la vitesse par les composantes de la quantité de mouvement, on a pour h_0 l'expression:

$$h_0 = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \frac{2\pi}{h}(M_x p_x + M_y p_y + M_z p_z) + U.$$

Dans ce qui suit, nous allons passer aux applications, et précisement on va traiter: 1°) l'oscillateur linéaire; 2°) le rotateur; 3°) le mouvement elliptique.

1. L'oscillateur linéaire.

Dans le cas de l'oscillateur linéaire qui oscille dans la direction de l'axe des x, la condition (c) prend la forme simple:

$$\frac{\partial M}{\partial x} = 0$$

d'où l'on tire que:

$$M = \text{cost.}$$

En tirant p de l'expression de l'énergie totale de l'oscillateur

$$2mh_0 = p^2 + \frac{4\pi}{h} mMp + U$$

où

$$U = 2\pi^2 m\nu^2 x^2,$$

et en appliquant la condition de SOMMERFELD-WILSON, on trouve:

$$n \cdot h = \oint p dx = -\frac{2\pi}{h} \cdot m \cdot M \oint dx \pm 2\pi m\nu \oint dx \sqrt{\frac{2mh^2 \cdot h_1 + 4\pi^2 m^2 M^2}{4\pi^2 m^2 h^2 \nu^2} - x^2}.$$

En effectuant les calculs indiqués, on a:

$$h_0 = n \cdot h\nu - \frac{2\pi^2}{h^2} m \cdot M^2.$$

On obtient de cette manière une expression de l'énergie d'un oscillateur linéaire qui contient comme cas particulier les expressions auxquelles conduisent la mécanique classique et la mécanique ondulatoire.

Si l'on pose $M = 0$, on trouve la formule donnée par la mécanique classique, et si l'on pose:

$$M = \frac{h}{2\pi}\sqrt{\frac{h\nu}{m}}$$

on trouve la formule:

$$h_0 = h\nu \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

en accord avec la mécanique ondulatoire.

2. **Le rotateur.**

Supposons que le rotateur soit constitué par deux masses m_1 et m_2 à distance γ l'une de l'autre, et en rotation autour de leur centre de gravité.

Soit (x, y) le plan de rotation. Les distances des masses de leur centre de gravité seront désignées par γ_1 et γ_2.

Chacune de ces masses doit remplir la condition:

$$\frac{\partial M_{ix}}{\partial x} + \frac{\partial M_{iy}}{\partial y} = 0 \qquad (i = 1,\ 2)$$

qui s'écrit en coordonnées polaires comme il suit:

$$\frac{\partial}{\partial \gamma_i}[M_{ix}\cos\vartheta_i + M_{iy}\sin\vartheta_i] + \frac{1}{\gamma_i}[M_{ix}\cos\vartheta_i + M_{iy}\sin\vartheta_i] +$$
$$+ \frac{1}{\gamma_i}\frac{\partial}{\partial\vartheta_i}[M_{iy}\cos\vartheta_i - M_{ix}\sin\vartheta_i] = 0$$

où

$$x_i = \gamma_i\cos\vartheta_i; \quad y_i = \gamma_i\sin\vartheta_i.$$

On peut satisfaire à cette condition en posant:

$$M_{i\gamma} = M_{ix}\cos\vartheta_i + M_{iy}\sin\vartheta_i = 0$$
$$M_{i\vartheta} = M_{iy}\cos\vartheta_i - M_{ix}\sin\vartheta_i = \alpha\cdot\gamma_i.$$

Pour M_i on obtient alors:

$$M_i^2 = M_{i\gamma}^2 + M_{i\vartheta}^2 = \alpha^2\cdot\gamma_i^2.$$

L'energie totale h_0 du rotateur s'écrit alors, en posant

$$m_1\gamma_1^2 + m_2\gamma_2^2 = I; \quad \vartheta_1' = \vartheta_2' = \vartheta',$$
$$h_0 = \frac{1}{2}I\cdot\vartheta'^2 - \frac{2\pi^2}{h^2}\cdot\alpha^2\cdot I.$$

Pour la quantité de mouvement $p\vartheta$, on obtient l'expression

$$p\vartheta = I\cdot\vartheta' + \frac{2\pi}{h}\alpha I.$$

Les équations du mouvement de la masse m_i s'écrivent:

$$m_i x_i'' = \frac{2\pi m_i}{h} y_i' \left(\frac{\partial M_{ix}}{\partial y_i} - \frac{\partial M_{iy}}{\partial x_i}\right) + \frac{2\pi^2 m_i}{h}\frac{\partial M_i^2}{\partial x_i}$$

$$m_i y_i'' = -\frac{2\pi m_i}{h} x_i' \left(\frac{\partial M_{ix}}{\partial y_i} - \frac{\partial M_{iy}}{\partial x_i}\right) + \frac{2\pi^2 m_i}{h}\frac{\partial M_i^2}{\partial y_i}.$$

Par un calcul facile, on trouve:

$$m_i(y_i x_i'' - x_i y_i'') = -\frac{d}{dt}(m_i \gamma_i^2 \vartheta') =$$

$$= \frac{2\pi m_i}{h}\left(\frac{\partial M_{ix}}{\partial y_i} - \frac{\partial M_{iy}}{\partial x_i}\right)(x_i x_i' + y_i y_i') + \frac{2\pi^2 m_i}{h}\left(y_i \frac{\partial M_i^2}{\partial x_i} - x_i \frac{\partial M_i^2}{\partial y_i}\right).$$

En tenant compte des relations:

$$M_i^2 = \alpha^2 \gamma_i^2; \quad x_i^2 + y_i^2 = \gamma_i^2 = \text{const.}$$

on obtient:

$$\frac{d}{dt}(m_i \gamma_i^2 \vartheta') = 0; \quad m_i \gamma_i^2 \vartheta' = \text{const.}$$

d'où

$$(m_1 \gamma_1^2 + m_2 \gamma_2^2)\vartheta' = I\vartheta' = \Delta.$$

En appliquant la condition de SOMMERFELD-WILSON, on a

$$n\cdot h = \oint p\vartheta d\vartheta = 2\pi(I\cdot\vartheta') + \frac{4\pi^2}{h}\alpha I$$

d'où

$$I\vartheta = \frac{h}{2\pi}\cdot n - \frac{2\pi}{h}\alpha\cdot I.$$

En introduisant cette expression de $I\vartheta'$ dans l'expression de h_0, on trouve:

$$h_0 = \frac{h^2}{8\pi^2 I^2}\cdot n^2 + \alpha\cdot n.$$

Si l'on pose dans cette formule $\alpha = 0$, on obtient le cas classique, et si l'on pose:

$$\alpha = \frac{h^2}{8\pi^2 I}$$

on a

$$h_0 = \frac{h^2}{8\pi^2 I} n(n+1)$$

conformément à la mécanique ondulatoire.

On voit donc que le résultat obtenu est plus général que ceux qui étaient donnés par la mécanique classique et par la mécanique ondulatoire et qu'il contient ces résultats comme cas particuliers.

3. **Le mouvement elliptique.**

Nous allons traiter le cas du mouvement elliptique d'un électron autour d'un noyau de charge Ze.

On supposera que le mouvement a lieu dans le plan (x, y).

La condition à satisfaire s'écrit en coordonnées polaires:

$$\frac{1}{\gamma}\frac{\partial}{\partial\gamma}\{\gamma\cdot M_\gamma\} + \frac{1}{\gamma}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\{M_\vartheta\} = 0.$$

Elle sera satisfaite si l'on pose:

$$M_\vartheta = f(\gamma); \quad M_\gamma = \frac{b}{\gamma}$$

d'où il suit pour M l'expression:

$$M^2 = M_\vartheta^2 + M_\gamma = f(\gamma)^2 + \frac{b^2}{\gamma^2}$$

Les équations du mouvement de l'électron sont:

$$mx'' = +\frac{2\pi}{h} my'\left(\frac{\partial M_x}{\partial y} - \frac{\partial M_y}{\partial x}\right) + \frac{2\pi^2}{h^2} m \frac{\partial M^2}{\partial x} - \frac{Ze^2}{\gamma^3}\cdot x$$

$$my'' = -\frac{2\pi}{h} mx'\left(\frac{\partial M_x}{\partial y} - \frac{\partial M_y}{\partial x}\right) + \frac{2\pi^2}{h^2} m \frac{\partial M^2}{\partial y} - \frac{Ze^2}{\gamma^3}\cdot y.$$

Au moyen de ces équations, on trouve:

$$m(xy'' - yx'') = \frac{d}{dt}(m\gamma^2\vartheta') = -\frac{2\pi}{h}\cdot m\left(\frac{\partial M_x}{\partial y} - \frac{\partial M_y}{\partial x}\right)\cdot\gamma\cdot\gamma'.$$

Or comme

$$M_x = \frac{b}{\gamma^2} x - f(\gamma)\frac{y}{\gamma}; \quad M_y = \frac{b}{\gamma^2} y + f(\gamma)\frac{x}{\gamma}$$

et

$$\frac{\partial M_x}{\partial y} - \frac{\partial M_y}{\partial x} = -f'(\gamma) - \frac{1}{\gamma} f(\gamma)$$

on trouve que:

$$\frac{d}{dt}(m\gamma^2\vartheta_{,}) = \frac{2\pi}{h} m f'(\gamma)\cdot\gamma\cdot\gamma' + \frac{2\pi}{h} m f(\gamma)\gamma'$$

d'où

$$m\gamma^2\vartheta' = \frac{2\pi}{h} m\cdot\gamma\cdot f(\gamma) + \Delta.$$

En introduisant l'expression de M et de ϑ' dans l'équation de l'énergie, on trouve:

$$h_0 = \frac{m}{2}\gamma'^2 + \frac{\Delta^2}{2m}\frac{1}{\gamma^2} + \frac{2\pi\Delta}{h}\frac{f(\gamma)}{\gamma} - \frac{2\pi^2}{h^2} m \frac{b^2}{\gamma^2} - \frac{Ze^2}{\gamma}$$

d'où

$$m\gamma' = \sqrt{2mh_0 + \frac{2mZe^2}{\gamma} - \left\{\Delta^2 - \frac{4\pi^2}{h^2} m^2 b^2\right\}\frac{1}{\gamma^2} - \frac{4\pi m\Delta}{h}\frac{f(\gamma)}{\gamma}}.$$

Pour les quantités de mouvement p_γ et p_φ:

$$p_\gamma = m\gamma' - \frac{2\pi}{h} m\cdot M_\gamma; \quad p_\vartheta = m\gamma^2\vartheta' - \frac{2\pi}{h} m\cdot M_\vartheta\cdot\gamma$$

on trouve:

$$p_\vartheta = \Delta;$$

$$p_\gamma = -\frac{2\pi}{h} m\frac{b}{\gamma} + \sqrt{2mh_0 + \frac{2mZe^2}{\gamma} - \left\{\Delta^2 - \frac{4\pi^2}{h^2} m^2 b^2\right\}\frac{1}{\gamma^2} - \frac{4\pi m\Delta}{h}\frac{f(\gamma)}{\gamma}}.$$

En appliquant les conditions de SOMMERFELD-WILSON, on trouve:

$$n_\vartheta\cdot h = \oint p_\vartheta d\vartheta = 2\pi\Delta$$

$$n_\gamma\cdot h = \oint p_\gamma d\gamma = -\frac{4\pi^2}{h^2} mbki +$$

$$+\oint d\gamma\sqrt{2mh_0 + \frac{2mZe^2}{\gamma} - \left\{\Delta^2 - \frac{4\pi^2}{h^2} m^2 b^2\right\}\frac{1}{\gamma^2} - \frac{4\pi m\Delta}{h}\frac{f(\gamma)}{\gamma}}$$

car

$$\oint\frac{d\gamma}{\gamma} = \log 1 = 2\pi ki. \qquad (k \text{ — entier})$$

Le résultat d'intégration dépend ici de l'expression de la fonction $f(\gamma)$.

Nous allons traiter le cas pour lequel $f(\gamma) = \alpha/\gamma$. En introduisant cette expression de $f(\gamma)$ et en effectuant l'intégration, on obtient pour h_0:

$$h_0 = -\frac{N\cdot h\cdot Z^2}{[n_\gamma - \varpi\cdot k + \sqrt{n_\vartheta^2 + \varpi^2 + \lambda\cdot n_\vartheta}]^2}$$

où l'on a posé

$$\varpi = -\frac{4\pi^2 mb}{h}\cdot i;\quad \lambda = \frac{8\pi^2}{h^2}\cdot m\cdot\alpha.$$

Pour le défaut quantique σ on a alors:

$$\sigma = -\varpi\cdot k + \sqrt{n\vartheta^2 + \varpi^2 + \lambda\cdot n\vartheta} - n\vartheta.$$

Cette expression du défaut quantique redonne pour $\alpha = 0$ très exactement les défauts quantiques des niveaux S et s du hélium pour les nombres quantiques très grands.

Comme aux termes S et s correspond le nombre $n\vartheta = 1$, on doit avoir pour σ

$$\sigma = -\varpi\cdot k + (\sqrt{1+\varpi^2} - 1),$$

car pour $\alpha = 0$ on a

$$\lambda = 0.$$

Cette expression de σ exprime très exactement les défauts quantiques observées des termes S et s du hélium si l'on pose:

$k = 1$ pour les termes S
$k = 2$ pour les termes s

et

$$\gamma = 0{,}156$$

comme on s'en rend compte par la table ci-dessous

	k	σ (calculée)	σ (observée)
S	1	$-0{,}1440$	$-0{,}144$
s	2	$-0{,}3002$	$-0{,}300.$