

**Etats stationnaires en symétrie sphérique
d'une famille d'équations de Schroedinger
non linéaires.**

Daniel Fargue

Ecole des Mines
60 bd St Michel
75272 Paris cedex 06

RESUME. Le modèle d'électron étendu de F.Fer [1] conduit à une équation de Schroedinger non linéaire avec champ électrique interne, qui comprend aussi un potentiel de cohésion. On considère le cas où il est de la forme $G(\psi^2)$ et on étudie le problème des états stationnaires à symétrie sphérique d'un tel électron dans un champ coulombien attractif. On montre que pour certaines fonctions G , il est possible de retrouver presque exactement les fonctions propres du problème linéaire correspondant.

1 L'électron étendu de F. Fer.

En 1964 et 1966, F. Fer publiait une série d'études [1] sur les états liés d'un modèle d'électron étendu, qui sont caractéristiques d'une ligne de pensée principalement représentée par de Broglie et son école. En effet il s'agit d'un essai de description "par figures et par mouvements", dans l'espace physique, des états stationnaires de l'atome, et surtout des mouvements transitoires entre ces états, qui, on le sait, échappent à la microphysique sous sa forme actuelle.

Une étude préalable [2] avait montré qu'une dynamique non linéaire pouvait, au moins en principe, rendre compte de la semi-stabilité des mouvements stationnaires. Tout en prolongeant ces résultats, la démarche adoptée dans ces articles s'en distingue cependant par l'accent mis sur le rôle

fondamental de l'électromagnétisme (classique, décrit par les équations de Maxwell), et en particulier du retard de propagation du rayonnement électromagnétique. Nous allons ici essayer d'en préciser quelques aspects.

Rappelons les grandes lignes de cette théorie, d'après les premiers articles et le livre qui a suivi [3]. Il s'agit tout d'abord d'un modèle d'électron étendu. En effet une description ponctuelle de l'électron est incompatible avec l'électromagnétisme classique, on le voit déjà avec les difficultés suscitées par l'équation de Lorentz-Abraham, mais c'est encore plus net avec la théorie de Bohr qui supprime arbitrairement le rayonnement électromagnétique dans le cas des états stationnaires. Il faut donc se tourner vers une description continue, en considérant l'onde ψ de Schroedinger comme liée à un fluide (Madelung [4]) ou comme l'onde matérielle de de Broglie [5]. Mais une difficulté surgit dès qu'on veut tenir compte du champ électromagnétique créé par l'électron: les états stationnaires correspondants ne sont pas conformes à l'expérience comme l'avait tout de suite remarqué Schroedinger [6]. F. Fer a donc été amené à introduire une action supplémentaire, une cohésion un peu analogue aux forces de Poincaré [7]. Elle est là pour compenser la tendance à l'éclatement due aux forces électrostatiques internes et au potentiel quantique et est propre à l'électron, créée par lui et agissant sur lui. Dans une première approche, le potentiel correspondant est supposé dépendre d'une loi de distance et avoir pour source la densité de masse de l'électron.

F. Fer a alors montré [1], par une méthode de perturbation au premier ordre, les résultats suivants, dans le cas où le potentiel de cohésion et le potentiel coulombien se compensent presque exactement.

- Les équations d'évolution correspondantes, comportant l'équation d'onde avec potentiels internes et les équations de Maxwell, admettent des états stationnaires quantifiés.
- Ces états sont, à l'exception du fondamental, semi-stables, c'est-à-dire stables pour les perturbations qui accroissent l'énergie, et instables sinon. Ce comportement remarquable est dû à l'action retardée du champ électromagnétique.
- On retrouve la loi de Bohr en ce sens que le mouvement transitoire entre deux états stationnaires 1 et 2 est un mouvement oscillant à une fréquence ν telle que $h\nu = F_1 - F_2$ si F_1 et F_2 sont les paramètres de quantification des états stationnaires concernés.

Ce modèle permet enfin une interprétation très intéressante du principe de complémentarité: dans les états liés, l'électron serait étendu aux dimensions atomiques ($\approx 1\text{Å}$), et dans le cas d'un mouvement libre, la cohésion (et à notre avis le spin) serait suffisamment forte pour amener une condensation quasi-ponctuelle ($\approx 10^{-5}\text{Å}$ au moins).

Les caractéristiques qualitatives d'un tel modèle sont donc bonnes, mais pour aller plus loin, et tenter des comparaisons quantitatives, il faut préciser l'allure du potentiel de cohésion. C'est le sujet de la présente étude.

Nous nous écarterons ici un peu des hypothèses faites sur le potentiel de cohésion dans les travaux précédents. La propriété qu'il aurait de compenser presque exactement le potentiel électrostatique interne nous paraît en effet moins importante que l'exigence suivante. Pour que le potentiel de cohésion, s'il existe, soit passé inaperçu même dans des collisions entre électrons, il faut qu'il soit très différent du potentiel coulombien dans les cas où l'électron est condensé, et qu'il ne "sorte" pratiquement pas du domaine occupé par l'électron. Ceci nous amène à le supposer à très courte portée.

Nous avons montré, dans ce journal [8], qu'un potentiel de ce type pouvait être généralement développé en une somme de termes parmi lesquels apparaissait un terme du type potentiel quantique et un autre en ψ^2 correspondant à l'équation de Schroedinger cubique. En généralisant, ceci nous amène à étudier des potentiels du type $G(\psi^2)$. Ils ont d'ailleurs déjà souvent été invoqués [9,10,11,12,13], dans différentes tentatives de description des particules élémentaires. Mais les solutions ainsi cherchées portent presque toujours sur des états non liés, et font rarement intervenir les potentiels électromagnétiques internes (à l'exception de [11]). Le but poursuivi ici est de déterminer des formes de $G(\psi^2)$ telles que les équations d'onde correspondant au mouvement dans un potentiel coulombien attractif (à symétrie sphérique, états "s") admettent des solutions stationnaires suffisamment proches des solutions habituelles de l'équation linéaire. Aussi étonnant que cela puisse paraître nous verrons que cela est possible bien que la compensation quasi-exacte du potentiel électrostatique interne ne soit plus du tout assurée. Ceci nous semble constituer un nouveau pas vers une réconciliation de l'électromagnétisme classique et de la mécanique ondulatoire.

1.1 Coordonnées réduites. Equation de Schroedinger ordinaire.

Avec les notations habituelles, l'équation de Schroedinger stationnaire qui décrit l'état d'un électron autour d'un noyau de charge $-Ze$ ($e < 0$, charge électronique) s'écrit:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r \Phi - e \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r} \Phi - E \Phi = 0 \quad (1)$$

en unités S.I. Pour la commodité des calculs numériques, nous nous servons des coordonnées réduites suivantes

$$\xi = \frac{2}{a_0} \vec{r} \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{m} \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad (2)$$

Nous utiliserons comme unité d'énergie la quantité

$$\eta = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{2m}{\hbar^2} = 8,71 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 55 \text{ eV} \quad (3)$$

Le potentiel électrique créé par le noyau est V tel que

$$eV = \frac{-e^2 Z}{4\pi\epsilon_0 r} = -\eta \frac{Z}{\xi} \quad (4)$$

La fonction d'onde réduite ψ sera liée à Φ par

$$\Phi = \left(\frac{8}{a_0^3} \right)^{1/2} \psi \quad (5)$$

de sorte que

$$\int |\psi|^2 d^3\xi = \int |\Phi|^2 d^3r = 1$$

Cette condition de normalisation doit être imposée a priori. En effet, on sait que si elle est vraie à l'instant initial, les équations d'évolution font qu'elle le reste à tout instant. Dans la recherche *directe* des états stationnaires, qui ne sont en fait que l'aboutissement d'évolutions réelles, elle doit donc être vérifiée, mais ne pouvant l'être automatiquement, il faut l'ajouter aux équations.

L'équation de Schroedinger (1) s'écrit alors

$$\Delta\psi + \frac{Z}{\xi} \psi - \lambda\psi = 0 \quad (6)$$

où le laplacien Δ est pris en variables réduites ξ , et la valeur propre λ vaut

$$\lambda = -E / \eta \quad (7)$$

On peut déduire cette équation du principe variationnel suivant:

$$\delta H = 0 \text{ pour } \psi \text{ telle que } \int |\psi|^2 d^3\xi = 1 \quad (8)$$

en ayant pris comme hamiltonien en coordonnées réduites:

$$H = \int |\nabla_\xi \psi|^2 - \frac{Z}{\xi} |\psi|^2 d^3\xi \quad (9)$$

Sa valeur en unités SI serait ηH .

1.2 Introduction des actions internes.

Comme nous l'avons dit plus haut, nous pensons, suivant en cela F. Fer, qu'il faut introduire deux types d'actions supplémentaires outre celle qu'exerce le noyau sur l'électron: l'action des champs électromagnétiques "internes", créés par l'électron, et une contrainte de cohésion, capable de l'équilibrer, au moins dans les états stationnaires.

Nous nous occuperons ici uniquement des états stationnaires avec potentiel vecteur nul. Seul subsiste alors le potentiel coulombien interne, U . Il est nécessaire de supposer que la source en est la densité de charge électronique $e|\Phi|^2$, si bien qu'on a:

$$-\epsilon_0 \Delta U = e |\Phi|^2 \quad (10)$$

Si on pose, comme pour V , et en tenant compte de la valeur négative de la charge, e , de l'électron

$$e U = \eta u \quad (11)$$

on obtient l'équation en u :

$$\Delta u + 4\pi |\psi|^2 = 0 \quad (12)$$

en coordonnées réduites.

En ce qui concerne les contraintes de cohésion, nous supposons qu'elles dérivent, en coordonnées réduites, d'un potentiel $g(|\psi|^2)$, lui même lié à une densité d'énergie réduite f telle que

$$g = f' \quad (13)$$

L'équation d'onde ainsi modifiée s'écrit en coordonnées réduites

$$\Delta_{\xi}\psi + \frac{Z}{\xi}\psi - u\psi - g\psi - \lambda\psi = 0 \quad (14)$$

et en unités ordinaires

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r\Phi + eV\Phi + eU\Phi + \eta g\Phi = E\Phi$$

Le potentiel de cohésion G , de mêmes dimensions que eU est donc:

$$G = \eta g = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{2m}{\hbar^2} g \left(\frac{|\Phi|^2 a_0^3}{8}\right) \quad (15)$$

Si on considère ψ et u (ou Φ et U) comme des champs indépendants, les équations (14) et (12) se déduisent du principe variationnel

$$\delta H = 0 \quad (16)$$

pour ψ tel que

$$\int |\psi|^2 d^3\xi = 1$$

et u tendant vers 0 à l'infini. L'hamiltonien H a comme expression

$$H = \int |\nabla_{\xi}\psi|^2 - \frac{Z}{\xi}|\psi|^2 + u|\psi|^2 + f(|\psi|^2) - \frac{1}{8\pi}(\nabla_{\xi}u)^2 d^3\xi \quad (17)$$

En unités ordinaires, on a un hamiltonien

$$\eta H = \int \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\Phi|^2 + e(u+V)|\Phi|^2 + \eta f\left(\frac{|\Phi|^2 a_0^3}{8}\right) - \frac{\epsilon_0}{2}(\nabla U)^2 d^3r \quad (18)$$

En combinant les deux termes faisant intervenir U et en tenant compte de (10), on obtient la valeur W de H

$$W = \int |\nabla_{\xi}\psi|^2 - \frac{Z}{\xi}|\psi|^2 + \frac{1}{2}u|\psi|^2 + f(|\psi|^2) d^3\xi \quad (19)$$

Enfin, en tenant compte de l'équation d'onde (14), on peut relier W à λ , ce qui donne, compte tenu de la normalisation de ψ :

$$W = -\lambda - \int \frac{1}{2}u|\psi|^2 + g(|\psi|^2) - f(|\psi|^2) d^3\xi \quad (20)$$

2 Etats stationnaires dans le cas à symétrie sphérique.

2.1 Equation différentielle.

Nous nous intéresserons dans ce qui suit au cas le plus simple où ψ et u sont à symétrie sphérique. Appelant ξ le module de $\vec{\xi}$, on peut se contenter de chercher les solutions ψ réelles de l'équation d'onde

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \frac{2}{\xi}\frac{d\psi}{d\xi} + \frac{Z}{\xi}\psi - u\psi - g\psi - \lambda\psi = 0 \quad (21)$$

qui décrit les états "s" de l'atome.

L'équation (12) qui donne le champ interne se résout aisément et donne

$$u = \frac{4\pi}{\xi} \int_0^{\xi} \psi^2 \xi^2 d\xi + 4\pi \int_{\xi}^{\infty} \psi^2 \xi d\xi \quad (22)$$

pour la solution qui tend vers 0 à l'infini et reste bornée à l'origine.

Ce sont les équations (21) et (22) (avec les conditions ψ normée à 1 et deux fois dérivable sur $(0, \infty)$) qui constituent le problème stationnaire dont nous donnerons des solutions numériques ci-après.

On remarquera que l'ensemble du problème est non linéaire à cause de la présence du potentiel électrique interne et du potentiel de cohésion.

2.2 Existence de solutions, problème variationnel associé.

A notre connaissance il n'existe actuellement pas de théorie mathématique permettant de connaître, au moins en principe, les solutions de ce problème et l'allure du spectre des λ . Les seuls résultats que nous connaissons portent sur deux cas assez différents de celui traité ici.

Il s'agit d'une part de l'oscillateur harmonique à 1 dimension [14], sans potentiel électrostatique interne. Ils montrent que, au moins dans un domaine assez proche du cas linéaire, le spectre subsiste, mais les méthodes employées ne semblent pas pouvoir s'étendre au cas considéré ici.

On sait d'autre part qu'il existe des solutions de type particule libre (solitons) pour un certain nombre d'équations de Schroedinger (ou de Klein-Gordon) non linéaires [15], mais là encore il s'agit le plus souvent de modèles sans champ électromagnétique interne ni a fortiori de cohésion.

Il est néanmoins possible de montrer qu'il existe au moins une solution non nulle au problème précédent en étendant une méthode d'analyse convexe que F. Fer et l'auteur ont déjà utilisée dans l'étude de l'équilibre d'un électron étendu isolé [16]. Il faut pour cela partir du problème variationnel associé aux équations (21), (22): c'est (16), (17) dans le cas à symétrie sphérique en tenant compte du fait que l'équation en u a été résolue par (22). Si on pose

$$s(\xi) = \xi \psi(\xi) \quad (23)$$

l'hamiltonien est alors

$$\begin{aligned} \frac{H}{4\pi} = & \int_0^\infty s'^2 d\xi + \int_0^\infty \int_0^\infty s^2(\xi) K(\xi, \xi') s^2(\xi') d\xi d\xi' \\ & - Z \int_0^\infty \frac{s^2}{\xi} d\xi + \int_0^\infty F\left(\frac{s^2}{\xi^2}\right) \xi^2 d\xi \end{aligned} \quad (24)$$

$K(\xi, \xi')$ est le noyau correspondant au potentiel coulombien (22) et vaut

$$K(\xi, \xi') = 4\pi/\xi \text{ si } \xi' < \xi \text{ et } 4\pi/\xi' \text{ si } \xi' > \xi \quad (25)$$

On montre alors qu'il existe au moins une fonction $s(\xi)$ dérivable telle que H y atteigne son minimum à norme de s donnée, ceci dans les cas où le terme de cohésion F n'est pas trop important de manière à ce que H reste coercive (H tend vers plus l'infini quand la norme de s'^2 tend vers l'infini à norme de s^2 donnée). Nous donnerons des exemples de telles fonctions F plus loin.

Tout ces résultats, qui mériteraient d'être approfondis, incitent à penser que le problème posé ici a un ensemble de solutions discrètes similaire à celui de l'équation linéaire, au moins pour certains types de cohésion. C'est ce qu'indiquent également les résultats numériques qui suivent.

3 Résultats numériques pour différentes formes du potentiel de cohésion.

3.1 Schéma de la méthode numérique.

Pour résoudre les équations (21), (22), il faut imposer des conditions aux limites sur ψ . Nous avons choisi les conditions habituelles

$$\psi \text{ régulière à l'origine, } \psi \rightarrow 0 \text{ à l'infini} \quad (26)$$

auxquelles il faut adjoindre la normalisation de ψ :

$$4\pi \int_0^\infty \psi^2 \xi^2 d\xi = 1 \quad (27)$$

Ces 3 conditions correspondent aux 3 paramètres inconnus a priori: 2 pour l'équation (21) qui est du second ordre, le troisième étant la "valeur propre" λ .

Une remarque sur le potentiel électrostatique interne u : si on avait pris l'équation de Poisson (12) au lieu de sa solution sous forme intégrale (22), il aurait également fallu imposer 2 conditions aux limites sur u qui auraient été

$$u'(0) = 0 \quad u \rightarrow 0 \text{ à l'infini} \quad (28)$$

La première condition provient du fait que le champ électrique doit rester défini même à l'origine, où, à cause de la symétrie sphérique, il ne peut être que nul. Nous avons d'ailleurs aussi effectué les calculs sous cette forme, et ils donnent exactement les mêmes résultats.

La méthode de résolution employée a consisté à passer aux différences finies, après le changement de variable

$$\xi \rightarrow y = \frac{\xi}{1+\xi} \quad (29)$$

qui permet de ramener l'intervalle de variation de $(0, \infty)$ à $(0, 1)$. On voit ensuite facilement, par un développement limité, que la première condition aux limites sur ψ , régularité en 0, s'écrit

$$\psi'(0) + \frac{Z}{2} \psi(0) = 0 \quad (30)$$

La deuxième est simplement, en variable y ,

$$\psi(y=1) = 0 \quad (31)$$

Les intégrales (27) et (22) se transforment aisément.

L'ensemble d'équations ainsi trouvé peut ensuite être résolu par la méthode de Newton. Les résultats ont aussi été vérifiés en intégrant les équations (21) et (12) à partir des données en $y=0$ (ou $\xi=0$) déterminées par la méthode précédente.

3.2 Equation de Schroedinger cubique.

C'est la plus connue des équations de Schroedinger non linéaires, et c'est aussi l'un des tous premiers termes du développement des actions à courte portée. C'est donc l'essai le plus naturel. En variant le coefficient k_1 du potentiel g_1

$$g_1(\psi^2) = k_1 \psi^2 \quad (32)$$

entre -21 et -23, on trouve une compensation étonnante de l'effet du potentiel électrique dans le cas $Z=1$ (atome de H).

En effet, appelons $\psi_1^0, \dots, \psi_n^0, \lambda_1^0, \dots, \lambda_n^0$ les fonctions propres et valeurs propres de l'équation linéaire (u et g nuls). La solution ψ_1 de l'équation cubique est alors telle que

$$\langle \psi_1, \psi_1^0 \rangle > 0,99$$

Il faut néanmoins signaler que la valeur propre λ_1 vaut, dans ce même intervalle de valeurs de k_1

$$\lambda_1 = 0,06 \pm 0,01 \quad (33)$$

Ceci est très loin de λ_1^0 , qui avec les unités réduites vaut 0,25. Nous reviendrons plus loin sur ce problème qui n'est pas aussi grave qu'il y paraît.

C'est une autre propriété qui condamne en fait cette forme simple du potentiel de cohésion. En effet, pour qu'un modèle d'électron ait un intérêt, il faut évidemment que le même potentiel g_1 soit valable dans toutes les situations. Or, si on essaie de faire varier Z , numéro atomique du noyau, dans (21), on constate que dès $Z=1,1$ il n'y a plus accord entre ψ_1 et ψ_1^0 , la valeur de ψ_1 à l'origine étant beaucoup trop élevée.

Pour $Z=1,2$, le calcul numérique diverge, essentiellement à cause d'une trop forte condensation autour de l'origine. Ceci indique que le potentiel (32) de l'équation cubique, qui n'est pas borné quand ψ^2 tend vers l'infini, croît beaucoup trop vite. Ceci recoupe d'ailleurs une propriété analytique que nous avons signalée plus haut (voir 2.2). On peut en effet montrer que l'hamiltonien de l'équation de Schroedinger cubique n'est pas coercif, et c'est justement l'un des cas où notre théorème d'existence est en défaut.

3.3 Potentiels de cohésion du type arctg.

Les résultats précédents incitent donc à essayer des potentiels dont la forme au voisinage de l'origine est à peu près $k_1 \psi^2$, mais qui restent bornés quand ψ^2 tend vers l'infini. Nous avons essayé trois formes, pour lesquelles les valeurs suivantes donnent des résultats acceptables:

$$g_2 = \frac{-27 \psi^2}{1 + 20\psi^2} \quad (34)$$

$$g_3 = -0,6 \operatorname{arctg} 40\psi^2 \quad (35)$$

$$g_4 = -0,6 \operatorname{th} 40\psi^2 \quad (36)$$

Les coefficients sont déterminés à 10 % près, et les résultats presque identiques, à la précision de nos calculs. Les trois courbes donnant les g en fonction de ψ sont très proches dans le domaine de valeurs de ψ qui est le plus sensible, c'est-à-dire entre 0 et 0,2, comme on peut le voir sur la figure 1.

A titre d'exemple nous donnerons les résultats pour la forme (35) en arctg. La fonction ψ_1 de l'équation d'onde avec $Z=1$, qui n'a pas de zéro est telle que

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 0,058 & \langle \psi_1, \psi_2^0 \rangle &= -0,0106 \\ \langle \psi_1, \psi_1^0 \rangle &= 0,993 & \langle \psi_1, \psi_3^0 \rangle &= -0,019 \end{aligned} \quad (37)$$

Cette fonction est tracée sur la figure 2, ainsi que la fonction ψ_1^0 solution de l'équation linéaire.

Mais le résultat qui nous semble le plus remarquable est que l'introduction d'un seul paramètre dans le potentiel de cohésion g_3 permet d'aussi bons résultats (et même plutôt meilleurs) quand Z augmente. Par exemple, on a

$$\begin{aligned} Z = 2 & \quad \langle \psi_1, \psi_1^0 \rangle = 0,998 & \lambda_1 &= 0,79 \\ Z = 4 & \quad \langle \psi_1, \psi_1^0 \rangle = 0,999 & \lambda_1 &= 3,5 \end{aligned} \quad (38)$$

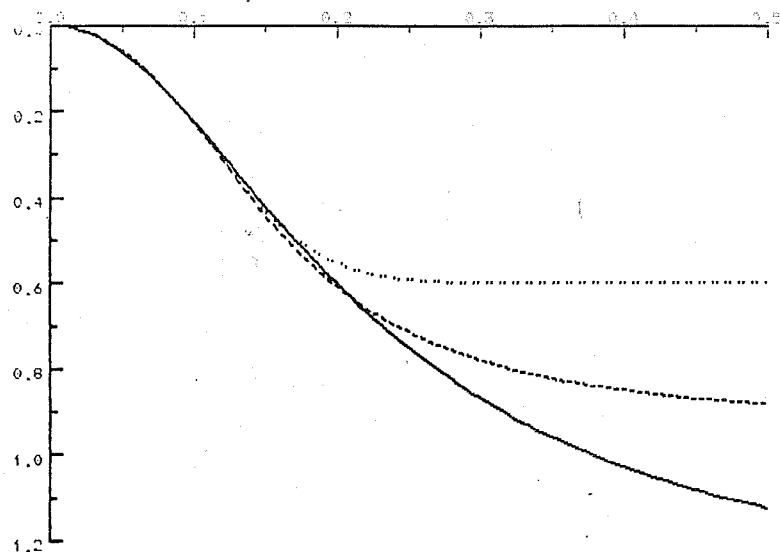


Fig. 1. Forme des potentiels de cohésion en fonction de ψ ; g_2 en trait plein, g_3 en tirets, g_4 en pointillés.

Quant au potentiel électrostatique créé, il est dans tous les cas pratiquement indiscernable de celui qui est calculé à partir de la solution linéaire, comme on le voit sur la figure 3.

On peut également comparer les facteurs de diffusion atomiques pour les rayons X qui sont d'ailleurs simplement les transformées de Fourier de ψ_1 et ψ_1^0 ; comme on s'en doute, on trouve un très bon accord. Mais la signification physique d'un tel résultat est plus contestable dans la mesure où la formule employée résulte justement d'un calcul d'électromagnétisme effectué sur le modèle linéaire. C'est en fait toute la théorie qui serait à refaire dans le cadre défini ici.

Dans le cas des états 2s (fonction d'onde à un zéro), les résultats s'éloignent plus notablement de ceux de l'équation linéaire. Par exemple dans le cas le plus défavorable, $Z=1$, la fonction ψ_2 est nettement distincte de ψ_2^0 comme on le voit sur la figure 4. Mais les valeurs numériques sont encore bonnes:

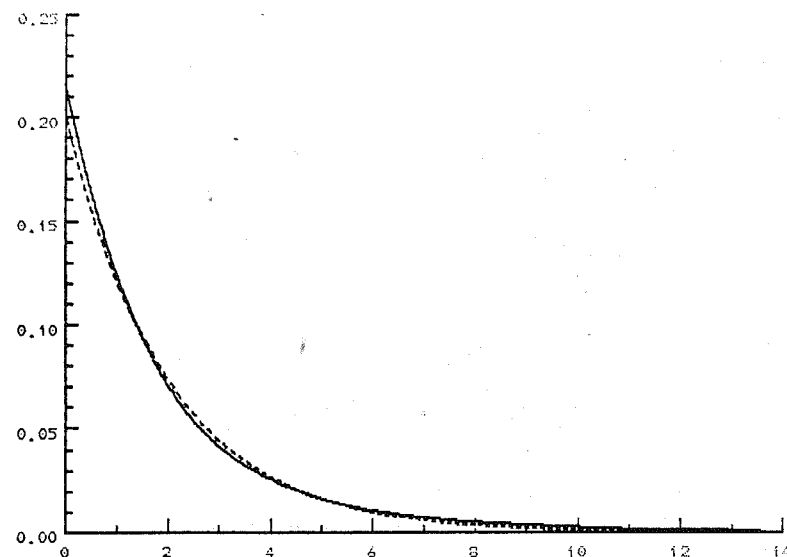


Fig. 2. ψ en fonction de ξ ; solution linéaire en tirets, solution non linéaire en trait plein.

$$\lambda_2 = 0,0042 \quad \langle \psi_2, \psi_2^0 \rangle = 0,92 \quad (39)$$

Les résultats pour l'état 3s sont similaires. Dans ces cas, la différence semble suffisante pour être décelable expérimentalement, mais nous ne connaissons pas de mesures donnant (aussi directement que possible) ψ^2 ou u dans les états excités de l'hydrogène atomique, et le problème reste ouvert.

3.4 Le problème des valeurs propres.

On aura remarqué que si l'accord avec la théorie linéaire paraît suffisant en ce qui concerne les valeurs de la fonction d'onde, il n'en est pas de même pour les valeurs propres. Par exemple dans le cas le plus défavorable $Z=1$, on a

$$\lambda_1 = 0,058 \quad \lambda_1^0 = 0,25 \quad \lambda_2 = 0,0042 \quad \lambda_2^0 = 0,0625 \quad (40)$$

(en valeurs réduites la valeur propre linéaire vaut $Z^2/(4n^2)$).

D'autre part, d'après la formule (20), la valeur propre λ n'est plus

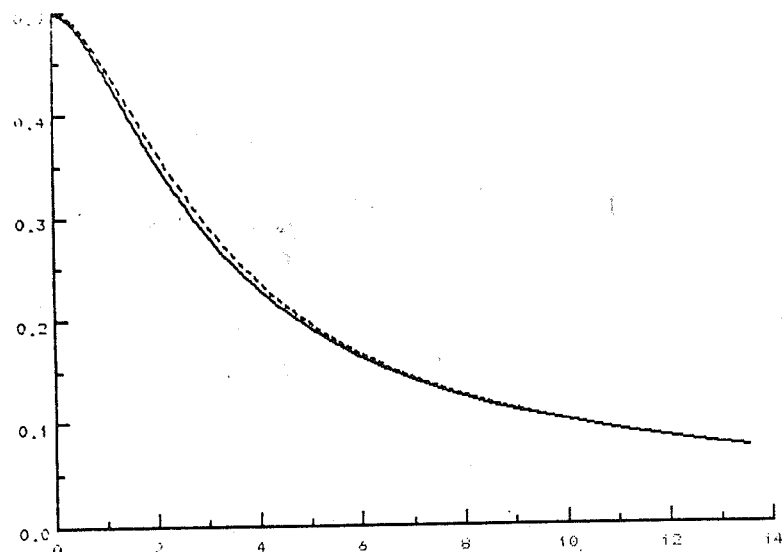


Fig. 3. Potentiels électriques en fonction de ξ ; équation linéaire en tirets, équation non linéaire en trait plein >

proportionnelle à l'énergie, contrairement au cas linéaire. On peut calculer l'énergie, ce qui donne

$$\begin{aligned} W_1 &= -0,154 & W_1^0 &= -\lambda_1^0 = -0,25 \\ W_2 &= -0,030 & W_2^0 &= -\lambda_2^0 = -0,0625 \end{aligned} \quad (41)$$

Là non plus il n'y a pas accord.

En ce qui concerne les raies spectrales, ceci peut néanmoins s'expliquer comme suit. Dans le modèle d'électron étudié ici, les fréquences des raies sont celles des oscillations dans les transitions quantiques. On est donc ramené au problème déjà étudié par F. Fer [1], et que nous avons brièvement décrit au début. A ceci près que maintenant on n'a plus le droit de supposer que $u+g \approx 0$ à cause de la forme de g , très différente de celle de u . Une grande partie des calculs de [1] reste néanmoins valable et on arrive en particulier à la conclusion qu'en première approximation la fréquence d'oscillation de ψ dans une transition est la différence non pas entre les deux valeurs propres de l'équation d'onde, mais entre une valeur propre du

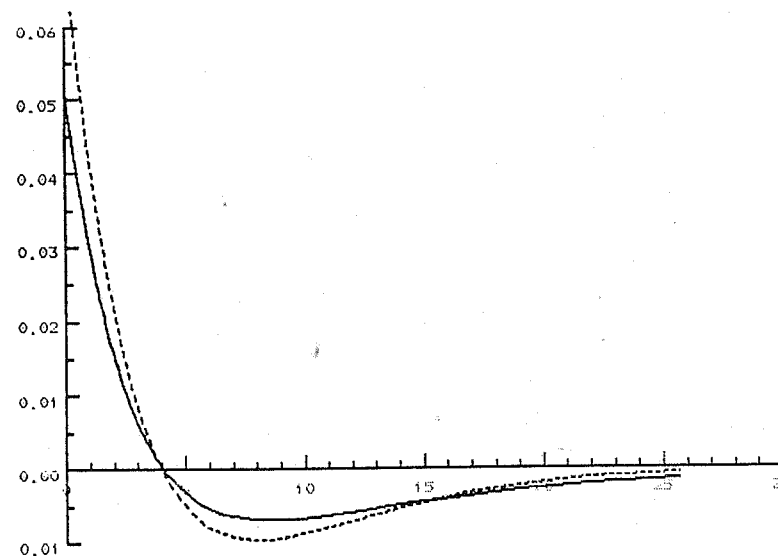


Fig. 4. Etat $2s$; ψ en fonction de ξ , solution linéaire en tirets, solution non linéaire en trait plein.

mouvement perturbé et la valeur propre du niveau de départ. D'après les quelques essais numériques que nous avons faits, les fréquences ainsi trouvées semblent déjà beaucoup plus proches des valeurs expérimentales (moins de 10 % d'écart) mais pour conclure il faudra procéder à une analyse beaucoup plus approfondie.

4 Conclusions et développements.

Nous avons donc développé ici un modèle d'électron dû à F. Fer, en introduisant une classe de potentiels de cohésion dont les principales caractéristiques sont:

- action à très courte portée
- affaiblissement rapide de la force quand ψ croît.

Ces potentiels permettent une bonne compensation du potentiel électrostatique interne à l'électron.

Bien que la classe des potentiels considérés soit assez large pour qu'on puisse espérer les améliorer encore, leur principal avantage reste de se prêter assez aisément au calcul et de montrer la possibilité pratique de développer quantitativement la théorie. Les résultats acquis nous semblent cependant provisoires et exigent certainement de nouveaux développements, que nous voyons dans deux directions principales:

- s'affranchir de la symétrie sphérique et aborder de manière réaliste l'étude d'une transition quantique,
- passer à un potentiel de cohésion défini par une équation aux dérivées partielles du type habituel, par exemple obéissant à l'équation

$$\Delta g - k^2 g + 4\pi |\psi|^2 = 0 \quad (42)$$

Dans les deux cas, si aucune méthode analytique d'approximation convenable ne se présente, les calculs numériques sont beaucoup plus lourds que dans le cas présenté ici. Ils valent cependant probablement la peine d'être tentés car on entrevoit ainsi la possibilité

"d'expliquer l'existence de régimes stationnaires discrets, leur stabilité et leur ergodisme, et enfin les régimes transitoires et leur irréversibilité"

([3] p. 55).

Remerciements. Ils vont tout particulièrement à M. Fer sans qui, on s'en doute, le présent article n'aurait jamais existé, pour son enseignement tout d'abord, dont j'ai bénéficié pendant de longues années, ainsi que pour les nombreuses discussions que nous avons eues à propos des électrons étendus, mais aussi à mon collègue de mathématiques, M. F. Maisonneuve pour ses avis qui m'ont bien souvent été précieux.

Références.

- [1] F. Fer, C.R. Ac. Sc. **258**, 1964, pp. 2983, 3215, 3435; **262**, 1966, p. 1417; **263**, 1966, p. 103
- [2] J. Andrade e Silva, F. Fer, P. Leruste, G. Lochak, Cah. Phys. **15**, 1961, p. 210; **16**, 1962, p. 1
- [3] F. Fer, *L'irréversibilité, fondement de la stabilité du monde physique*, G.V., Paris, 1977
- [4] E. Madelung, Z. Phys. **40**, 1926, p. 322
- [5] L. de Broglie, J. Phys. **7**, 1926, p. 321; **8**, 1927, p. 225
L. de Broglie, *Une tentative d'interprétation causale et non linéaire...*, G.V. Paris, 1956
- [6] E. Schroedinger, Congrès Solvay 1927
- [7] H. Poincaré, Rend. Circ. Mat. di Palermo **21**, 1906, p. 129
- [8] D. Fargue, Ann. F.L.B. **11**, 1986, p. 57
- [9] N. Rosen, H.B. Rosenstock, Phys. Rev. **85**, 1952, p. 257
- [10] R. Finkelstein, R. Lelevier, M. Ruderman, Phys. Rev. **83**, 1951, p. 326
- [11] A. Kumar, Ya. P. Terletskii, Ann. F.L.B. **3**, 1978, p. 35
Ya. P. Terletskii, F. Edjo, V. Kassandrov, Ann. F.L.B. **6**, 1981, p. 73
- [12] A. F. Ranada, M. F. Ranada, M. Soler, L. Vazquez, Phys. Rev. **D10**, 1974, p. 517
- [13] D. Fargue, in *The wave particle dualism*, S. Diner, D. Fargue, G. Lochak, F. Selleri ed., Reidel, 1984
- [14] Guan Ke Ying, Ann. F.L.B. **11**, 1986, p. 185
- [15] Voir par exemple, A.C. Scott, F.Y.F. Chu, D.W. Mac Laughlin, Proc. IEEE **61**, 1973, p. 1443
G.B. Whitham, *Linear and non linear waves*, Wiley, 1974
- [16] D. Fargue, F. Fer, C.R. Ac. Sc. **288**, 1979, p. 323

(Manuscrit reçu le 10 septembre 1986)