Théorie quantique sous forme hydrodynamique*

E. Madelung

RESUME. On montre que l'on peut mettre l'équation de Schrödinger de l'électron unique sous la forme des équations de l'hydrodynamique.

ABSTRACT. Schrödinger's equation for a single electron is shown to be expressible in the same form as hydrodynamical equations.

D'après E. Schrödinger[1] la théorie quantique du problème à un électron est régie par l'équation "aux amplitudes":

$$\Delta\psi_0 + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(W - U)\psi_0 = 0 \quad , \quad \psi = \psi_0 e^{i2\pi\frac{W}{h}t}. \tag{1}$$

Où W représente l'énergie du sytème, U l'énergie potentielle comme fonction de la position de l'électron, et m sa masse. On en cherche une solution partout finie et continue. Ceci n'est possible que pour certaines valeurs de W. Ces "valeurs propres" W_i doivent alors être les énergies que le système possède dans ses "états quantiques". On sait qu'on peut les déterminer grâce à la spectroscopie. La comparaison entre théorie et expérience confirme l'intérêt pratique de cette méthode de calcul.

A chaque valeur propre correspond une "solution propre" qui doit être normée et accompagnée du facteur temporel $e^{i2\pi\frac{W}{h}t}$ et représente,

---

* NDLR. Traduction de cet article ("Quantentheorie in hydrodunamischer Form", *Zs. f. Phys.*, **40** (1926) p. 322) si souvent cité dès qu'on parle d'interprétation de la Mécanique Ondulatoire dans l'esprit "ondes de matière" qui prévalait encore en 1926, avant le fameux Congrès Solvay de 1927.

[1] E. Schrödinger, Ann. d. Phys. **79**, 361, 489; **80**, 437; **81**, 109, 1926.

d'après Schrödinger , ce qui se passe dans le système. Schrödinger donne des indications en faveur d'une interprétation qui concorde en principe avec celle qui est donnée dans la suite. Je vais développer cette interprétation et montrer qu'il existe de grandes analogies avec l'hydrodynamique.

Une deuxième équation établie aussi par Schrödinger peut être obtenue en éliminant W dans (1) par incorporation du facteur temporel:

$$\Delta\psi - \frac{8\pi^2 m}{h^2}U\psi - i\frac{4\pi m}{h}\frac{\partial\psi}{\partial t} = 0 \tag{2}$$

Elle admet comme solutions celles de la première équation, mais à la différence de cette dernière, également toutes leurs combinaisons linéaires. C'est tout à fait essentiel. En effet, si on pose $\psi = \alpha e^{i\beta}$, alors d'après (1) seul β doit être considéré comme dépendant linéairement du temps, alors que d'après (2), aussi bien α que β peuvent dépendre du temps.

Avec $\psi = \alpha e^{i\beta}$, (2) devient:

$$\Delta\alpha - \alpha(\operatorname{grad}\beta)^2 - \frac{8\pi^2 m}{h^2}U + \frac{4\pi m}{h}\alpha\frac{\partial\beta}{\partial t} = 0 \tag{3}$$

et

$$\alpha\Delta\beta + 2(\operatorname{grad}\alpha\operatorname{grad}\beta) - \frac{4\pi m}{h}\frac{\partial\alpha}{\partial t} = 0 \tag{4}$$

De (4) on déduit, avec $\phi = -(\beta h)/(2\pi m)$:

$$\operatorname{div}(\alpha^2\operatorname{grad}\phi) + \frac{\partial\alpha^2}{\partial t} = 0 \tag{4'}$$

(4') est du type équation de continuité en hydrodynamique, si on considère α^2 comme une densité et ϕ comme un potentiel des vitesses d'un écoulement $\mathbf{u} = \operatorname{grad}\phi$.

(3) donne alors:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \frac{1}{2}(\operatorname{grad}\phi)^2 + \frac{U}{m} - \frac{\Delta\alpha}{\alpha}\frac{h}{8\pi^2 m^2} = 0 \tag{3'}$$

Cette équation, elle aussi, correspond exactement à une équation hydrodynamique, celle d'un écoulement irrotationnel sous l'action de forces conservatives[2].

[2] Voir par ex. Weber et Gans,*Repertorium der Physik I,1, p. 304.*

Si on forme le gradient, on obtient grâce à rot $\mathbf{u} = 0$:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{1}{2} \operatorname{grad} u^2 = \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\frac{\operatorname{grad} U}{m} + \operatorname{grad} \frac{\Delta\alpha}{\alpha} \frac{h^2}{8\pi^2 m^2} = 0. \qquad (3")$$

$-(\operatorname{grad} U)/m$ correspond à la grandeur f/ρ (densité de force : densité de masse), $\frac{\Delta\alpha}{\alpha}\frac{h^2}{8\pi^2 m^2}$ à la grandeur $-\int dp/\rho$, qu'on peut appeler fonction de forces des forces "internes" du continuum[3].

Nous voyons aussi qu'on peut entièrement réinterpréter l'équation (2) de manière hydrodynamique, la seule particularité intervenant dans un unique terme, celui qui représente le mécanisme interne du continuum.

Dans le cas de l'équation (1) on a $\partial\alpha/\partial t = 0$ et $\partial\phi/\partial t = -W/m$. Les solutions propres de (1) donnent donc, malgré le facteur temporel, l'image d'un écoulement stationnaire. Dans cette interprétation, on doit regarder les états quantiques comme des écoulements stationnaires, et même, dans le cas où $\operatorname{grad} \beta = 0$, comme des configurations statiques.

Les solutions de l'équation plus générale (2) sont maintenant faciles à déterminer comme combinaisons linéaires des solutions propres. Posons par exemple $\psi = \alpha e^{i\beta} = \psi_1 + \psi_2 = c_1\alpha_1 e^{i\beta_1} + c_2\alpha_2 e^{i\beta_2}$, où ψ_1 et ψ_2 sont des solutions propres de (1), qui contiennent les facteurs temporels $e^{i2\pi\frac{W}{h}t}$, alors on a:

$$\alpha^2 = c_1^2\alpha_1^2 + c_2^2\alpha_2^2 + 2c_1c_2\alpha_1\alpha_2\cos(\beta_1 - \beta_2)$$

et

$$\alpha^2 \operatorname{grad}\beta = c_1^2\alpha_1^2 \operatorname{grad}\beta_1 + c_2^2\alpha_2^2 \operatorname{grad}\beta_2 + \\ c_1c_2\alpha_1\alpha_2 \operatorname{grad}(\beta_1+\beta_2)\cos(\beta_1-\beta_2),$$

$$\int \alpha^2 dV = c_1^2 \int \alpha_1^2 dV + c_2^2 \int \alpha_2^2 dV.$$

Ainsi, aussi bien la "densité" que "l'intensité du courant" contiennent un terme temporel périodique à fréquence $\nu = (W_1 - W_2)/h$. La "quantité totale", quant à elle, reste constante.

[3] NDLR: c'est ici qu'apparaît, à notre connaissance, pour la première fois le terme auquel de Broglie donnera plus tard (*Introduction à l'étude de la mécanique ondulatoire*, Hermann, Paris, 1930) le nom de "potentiel quantique".

Dans le cas de l'écoulement stationnaire, on tire de (3'):

$$W = \frac{m}{2}(\mathrm{grad}\,\phi)^2 + U - \frac{\Delta\alpha}{\alpha}\frac{h^2}{8\pi^2 m^2}, \tag{5}$$

pour lequel on peut aussi écrire, en posant $\alpha^2 = \sigma$, $\sigma m = \rho$, compte tenu de la normalisation $\int \sigma dV = 1$:

$$W = \int dV \{\frac{\rho}{2}u^2 + \sigma U - \sqrt{\sigma}\Delta\sqrt{\sigma}\frac{h^2}{8\pi^2 m}\}. \tag{5'}$$

Cette expression de l'énergie, comme une intégrale de volume de la densité d'énergie cinétique et potentielle parle d'elle-même.

On ne voit aucune raison pour laquelle cette forme, qu'on peut aussi écrire

$$W = \frac{h}{2\pi}\int dV\,\alpha^2\frac{\partial\beta}{\partial t}$$

ne serait pas non plus valable pour le cas de l'écoulement instationnaire. On établit facilement que la loi de conservation $dW/dt = 0$ est satisfaite, en notant que les solutions propres sont orthogonales entre elles.

Une question intéressante se pose alors: les équations (3'), (4') et (5') contiennent-elles déjà toutes les particularités décrites, en particulier:

1. L'existence discrète d'écoulements stationnaires avec les énergies W_i,

2. le fait que tous les états non stationnaires ne peuvent avoir que des périodicités de la forme $\nu_i k = (W_i - W_k)/h$?

Il est clair que (2) découle univoquement de (3') et (4'), et que (1) s'en déduit, avec (5'). Les équations hydrodynamiques sont donc équivalentes à celles de Schrödinger et livrent tout ce que celles-ci donnent, c'est-à-dire elles sont suffisantes pour fournir un modèle des facteurs essentiels de la théorie quantique de l'atome.

Si le problème quantique posé paraît ainsi résolu à l'aide de l'hydrodynamique d'une distribution continue d'électricité, avec une densité de masse proportionnelle à la densité de charge, il subsiste encore une série de difficultés. D'une part la densité de massen'est pas du type qu'on attendrait d'après l'électrodynamique, d'autre part on s'attendrait à ce que l'interaction des différentes parties de l'électron, qui est représentée par le terme $\sqrt{\sigma}\Delta\sqrt{\sigma}\frac{h^2}{8\pi^2 m}$, dépende non seulement de la densité à cet endroit et de ses dérivées, mais aussi de la répartition totale de la charge.

Je n'ai pu déterminer si ces deux attentes pouvaient être satisfaites par une pure transformation mathématique.

Maintenant, comment doit-on traiter le problème à plusieurs électrons? Schrödinger ne donne pas de forme parfaitement bien déterminée. Il demande seulement que l'énergie cinétique soit calculée comme on fait quand on représente le mouvement dans l'espace de phase, c'est-à-dire qu'on doit poser $T = \sum_i m_i \frac{u_i^2}{2}$, somme des énergies cinétiques des électrons individuels, comme s'ils existaient tous indépendamment les uns des autres, et non comme s'ils formaient en quelque sorte un unique champ fluide.

En fait ceci est une possibilité facile à concevoir. Nous devons nous décider seulement entre les alternatives suivantes:

a) Plusieurs électrons se fondent-ils en une entité plus importante?

b) S'excluent-ils et passe-t-on de l'un à l'autre par des conditions aux limites déterminées?

c) Se pénètrent-ils sans se mélanger?

Il me semble que le plus probable est c). a) conduirait aux mêmes solutions que le problème à un électron, à part une normalisation modifiée, ce qui donne évidemment des résultats faux. b) est, eu égard à des "trajectoires immergées" improbable, mais concevable.

D'après c), on devrait définir plusieurs vecteurs en chaque point de l'espace, ainsi que les potentiels des vitesses correspondants. Le continuum aurait alors apparemment la nature d'un ensemble dont les membres possèderaient un libre parcours infini.

On ne pourra décider de la forme qu'il convient de donner à la fonction U, dans la mesure où elle représente l'interaction des électrons, ainsi qu'au "terme quantique" de l'équation (3'), qu'une fois qu'on aura réussi à calculer avec succès au moins un cas.

On peut ainsi envisager de fonder sur cette base la théorie quantique de l'atome. Mais les processus radiatifs n'y sont que partiellement dominés. Il est vrai qu'on explique apparemment ainsi qu'un atome dans un état quantique ne rayonne pas, et qu'on traduit correctement le rayonnement des bonnes fréquences, et ceci non par des "sauts", mais plutôt par un lent passage par un état non stationnaire; mais beaucoup de choses restent encore obscures, comme par exemple l'absorption quantifiée. Je tiens pour prématuré de rapporter ici des spéculations sur ce sujet.