

Annales de la Fondation Louis de Broglie

Vol. 6, n° 2, 1981

L'ELECTRON :
ONDE ET CORPUSCULE

par Xavier OUDET

Laboratoire de Magnétisme

C. N. R. S.

1, place Aristide Briand,

92190 MEUDON

(manuscrit reçu le 26 janvier 1980)

Résumé : Nous proposons de considérer l'électron comme une "masse fluide localisée" se déplaçant sur une trajectoire orbitale. Cette image caractérise son aspect corpusculaire supposé compatible avec ses propriétés ondulatoires. Ces dernières quant à elles résultent du système d'ondes susceptibles de prendre naissance dans la masse fluide. Il est ainsi possible d'individualiser les différents électrons d'un même atome. Le fil conducteur pour appréhender le caractère corpusculaire de l'électron est la division en sous-couches des couches np , nd et nf . Pour une même couche, ces couches correspondent à un moment cinétique orbital qui diffèrent d'une unité \hbar . Le caractère corpusculaire est souligné d'une manière qualitative d'abord par la différence des propriétés attachées à une orbite circulaire ou elliptique caractéristique des sous-couches $4f$ et qui explique la division des éléments des terres rares en terres ceriques et yttriques. L'aspect corpusculaire est ensuite souligné par la période du mouvement qui permet de décrire un nouveau type de liaison entre atome.

L'appartenance d'un électron à une sous-couche est ensuite mise en évidence par un rappel des manifestations du spin. Ces manifestations sont principalement l'effet Zeeman, les expériences de Stern et Gerlach, le moment magnétique d'un solide et sa constante de Curie. Dans toutes ces expériences l'appartenance à une sous-couche se manifeste au travers du facteur de Landé g .

L'importance des sous-couches pose ensuite la question de savoir si elles sont réellement absentes du modèle de Schrödinger. La comparaison des modèles de Dirac et de Schrödinger conduit alors à retenir pour ce dernier en plus des valeurs positives du moment cinétique orbital des valeurs négatives en nombre égale, le signe de ce moment caractérisant son orientation par rapport au moment cinétique propre.

Abstract : We propose to consider the electron as a "localized fluid mass" moving on an orbital trajectory. This picture characterizes the corpuscular aspect which is supposed consistent with its wave like properties. The latter arises from the waves system which can spring in the fluid mass. Like this it is possible to individualize each electron in the same atom. The clue to apprehend the corpuscular character of the electron is the division in subshells of the np , nd and nf shells. In the same shell there are two subshells having an orbital angular momentum which differ by one unit \hbar . The corpuscular character is first underlined in a qualitative way by the difference of properties attached to a circular or elliptic orbit characteristic of the subshells $4f$ and which explains the division of the rare earth elements in ceric and yttric earths. The corpuscular aspect is then underlined by the period of the motion which allows to describe a new kind of bond between atoms.

The appartenance of an electron to a subshell is then revealed by a recall of the spin manifestations. Those manifestations are mostly the Zeeman effect, the Stern and Gerlach experiments, the magnetic moment of a solid and its Curie constant. In all these experiments this appartenance to a subshell appears through the Landé factor g .

The importance of the subshells raises then the question to know if they are really absent in the Schrödinger' model. The comparison of the Dirac and Schrödinger' models leads to retain for the latter besides having equal number of positive and negative values of the orbital angular momentum, the sign of this angular momentum being characteristic of its orientation with respect to its spin.

Introduction

Depuis la découverte de l'aspect ondulatoire de la matière par Louis de Broglie (1) et en particulier de l'électron, l'aspect corpusculaire de celui-ci a perdu son droit de cité. Si nous voulons parler du mouvement orbital de l'électron dans son atome, nous ne pouvons plus le faire qu'en tant qu'image ou à titre historique. Cette situation de fait est tellement bien ancrée dans notre approche des phénomènes que l'approche corpusculaire relève d'une hypothèse. Ayant acquis depuis plusieurs années la conviction profonde de la réalité corpusculaire de l'électron, et accumulé depuis un certain nombre d'évidences tant qualitatives que quantitatives, ce travail se propose de montrer quelques aspects importants des propriétés de la matière, plus spécialement de l'état solide, qui font germer l'hypothèse du mouvement orbital. Il s'appuie sur l'image déjà envisagée (2) de l'électron "*masse fluide*". Le mouvement de cette masse sur une trajectoire fermée caractérise l'aspect corpusculaire. L'aspect ondulatoire quant à lui résulte du système d'onde susceptible de prendre naissance dans cette masse fluide supposée à chaque instant relativement localisée sur son orbite. Enfin, la propriété quantique est conçue comme le reflet des conditions de stabilité du système d'ondes de cette masse fluide sur sa trajectoire du fait de la résonance l'un sur l'autre des mouvements propre et orbital.

Le guide pour résoudre les questions que pose l'hypothèse corpusculaire est avant tout la division en sous-couches des couches np, nd et nf (n nombre quantique principal), dont certaines propriétés magnétiques nous ont montré le caractère permanent, indépendamment de l'état de liaison de l'élément considéré. Ce caractère permanent nous a conduit à la comparaison des modèles de Dirac et de Schrödinger donné au § IV. Cette

comparaison ne s'appuie sur aucune hypothèse nouvelle et peut très bien ignorer les paragraphes qui la précèdent, nous l'avons d'ailleurs récemment exposé ainsi (3). Or cette comparaison à elle seule peut ébranler, pensons-nous, les convictions les mieux ancrées quant à notre conception actuelle de l'électron et nous conduire à la reconsidérer. Si nous avons tenu à la faire précéder de ce qui conduit à l'hypothèse corpusculaire, c'est qu'il ne nous serait jamais venu à l'idée de décortiquer les modèles de Dirac et de Schrödinger sans les bases tant expérimentales que théoriques lentement acquises et qui sont le fondement de ce travail.

Ces bases sont d'abord la périodicité des propriétés des éléments qui nous conduit à individualiser chaque électron d'un atome, § I ; puis ce sont deux aspects qualitatifs, l'un spatial l'autre temporel, § II ; c'est enfin une analyse des manifestations du spin de l'électron à travers ces propriétés magnétiques, § III.

I. Sur l'individualité de l'électron dans son atome

Une des difficultés de la physique atomique vient de ce que l'atome d'hydrogène avec un seul électron est le seul cas où nous sachions déterminer rigoureusement l'ensemble des fonctions d'onde. Dès que l'atome possède plusieurs électrons ou qu'il se trouve dans une molécule ou un solide, nous ne savons plus déterminer rigoureusement les diverses fonctions d'onde. Il semble, par suite, difficile de parler des propriétés d'un électron parmi les autres. La vision actuelle purement ondulatoire de la mécanique quantique renforce cette difficulté. En effet, dans un atome à plusieurs électrons, nous savons que les propriétés ondulatoires de chacun réagissent sur celles des autres, "*interférent*". Il en résulte que seule la fonction d'onde de l'ensemble peut nous paraître avoir

une réalité, celle des différents électrons n'étant pas discernable. En quelque sorte, l'électron devrait perdre tout statut personnel dès qu'il fait partie d'un groupe.

L'approche corpusculaire conduit à une position différente. En effet, l'image électron "*masse fluide*" localisée sur une trajectoire orbitale permet d'imaginer plusieurs électrons distincts sur des orbitales distinctes. Certes, il y aura interaction du groupe sur chaque électron pris séparément, mais rien n'interdit de supposer que chaque électron garde une certaine individualité. A notre sens, la possibilité "*d'étiqueter*" chaque électron avec les nombres quantiques qui définissent les états de l'électron dans l'atome d'hydrogène nous autorise à une telle conception.

Ces nombres sont :

- n le nombre quantique principal,

- k le nombre quantique orbital dans le modèle de Dirac, étroitement lié au nombre l du modèle de Schrödinger § IV ; k pouvant être positif ou négatif, il n'y a pas lieu dans ce décompte d'introduire le nombre quantique de spin $s = \pm 1/2$ comme cela est fait dans le modèle de Schrödinger pour retrouver la totalité des états quantiques. Les différentes valeurs de k définissent les sous-couches $ns_{1/2}$, $np_{1/2}$, $np_{3/2}$, $nd_{3/2}$, $nd_{5/2}$, $nf_{5/2}$, $nf_{7/2}$, etc...

Enfin le nombre quantique magnétique u permet d'atteindre la totalité des états quantiques observables.

Plusieurs propriétés de la matière montrent clairement l'étiquetage des différents électrons d'un atome donné. La spectroscopie X montre la répartition des électrons des couches pleines en sous-couches $np_{1/2}$, $np_{3/2}$,

etc... Pour les électrons des couches externes incomplètes, la spectroscopie du domaine du visible - spectroscopie qui est à l'origine de la découverte de l'état quantique - nous montre des transitions entre deux niveaux bien définis par les nombres n , k , u . Pour les électrons des couches profondes incomplètes, par exemple 3d pour les éléments allant du scandium au zinc ou 4f pour ceux des terres rares, les mesures magnétiques permettent d'accéder également à la sous-couche ; la mesure de la constante de Curie des terres rares permet même d'accéder au nombre quantique magnétique u des différents états 4f occupés, § III.2.

Ces quelques propriétés sont les cas simples où l'étiquetage des électrons est facile à déterminer. Il n'en est pas toujours ainsi mais nous pouvons encore prendre conscience des caractéristiques quantiques des divers électrons d'un élément d'une autre manière. Pratiquement la grande majorité des propriétés des éléments sont le reflet de l'existence, sur l'élément considéré, de couches incomplètes. Or nous savons que ces propriétés des éléments ont un caractère périodique remarquablement mis en relief par Mendeleïev. Cette conjoncture peut se comprendre en admettant que ce qui est cause de l'état quantique est indépendant du nombre des électrons en interaction, par suite le nombre des états possibles reste le même pour tous les atomes. Lorsqu'avec le numéro atomique le nombre des électrons de l'atome croît, les états sont occupés progressivement d'où le tableau périodique reflet de la périodicité des états quantiques. Il en résulte que chaque électron possède un ensemble de valeurs n , k , u , qui lui est propre et d'où il tire son individualité ; mais répétons-le cette hypothèse ne veut pas dire que l'état quantique d'un électron ne subit pas de perturbation due à la présence d'autres électrons. Elle signifie seulement que l'état quantique est une propriété multiple mais spécifique d'un électron donné dans un potentiel central. La multiplicité des états

mise à part, cette spécificité est comparable à sa masse m , sa charge électrique e et son moment cinétique propre observable \hbar , toutes quantités qui sont bien indépendantes de la présence des autres électrons. Par contre, sa fonction d'onde sera nécessairement modifiée par la présence des autres électrons, de même que la répartition de sa masse. Dans cette approche de l'individualité de l'électron son caractère corpusculaire apparaît encore de manière relativement tenu. Considérons maintenant deux propriétés plus spécifiquement corpusculaires.

II. Deux aspects corpusculaires des mouvements orbitaux

Avant d'aborder les aspects quantitatifs qui conduisent à l'hypothèse corpusculaire, considérons d'abord un aspect spatial et un aspect temporel de cette hypothèse qui nous aideront à l'appréhender.

II.1. Un aspect spatial

Soit deux états quantiques qui ne diffèrent en énergie que par des corrections d'ordre relativiste. Dans l'hypothèse corpusculaire, il est relativement simple de saisir qu'un électron gravitant sur une orbite circulaire donnera à son atome des propriétés différentes de celles qu'il lui donne en gravitant sur une orbite elliptique, et ceci quelque soit la déformation orbitale qu'entraîne la présence des autres électrons de son atome ainsi que la présence des atomes voisins avec lesquels son atome est en interaction.

L'aspect qualitatif important vient de ce que le centre du cercle étant le foyer de l'ellipse, l'électron sur orbite elliptique s'écarte plus du noyau de son atome que l'électron sur l'orbite circulaire. L'électron

en s'écartant plus du noyau interagit plus fortement avec les atomes voisins d'où des propriétés différentes. Or, non seulement cet aspect des phénomènes est relativement simple à découvrir si nous voulons bien nous donner la peine de le chercher, mais il semble bien que dans le cas des deux sous-couches des terres rares, nous ayons là une preuve de l'aspect corpusculaire.

La périodicité des propriétés des éléments, comme nous l'avons souligné au § précédent, vient de la division en couches ns , np , nd et nf (n étant le nombre quantique principal) des niveaux d'énergie de l'électron et du nombre des états quantiques correspondants. Ces couches, excepté les couches ns , sont elles-mêmes divisées en sous-couches comme le montre en particulier les séries doublets et l'effet Zeeman, phénomènes qui sont à l'origine de la découverte du spin (⁴,⁵).

Le terme d'énergie lié à l'occupation de l'une ou l'autre des deux sous-couches d'une même couche est généralement faible devant les termes provenant des interactions avec d'autres éléments. Ce fait explique qu'en général les éléments se manifestent pas, dans leurs classifications périodiques, des propriétés de sous-couches au même titre que des propriétés de couches ; sous cet angle les éléments des terres rares qui correspondent au remplissage de la couche $4f$ semblent jouir d'une situation particulière. Ainsi, pour le chimiste, de faibles différences de propriétés permettent de distinguer le groupe des terres cériques et le groupe des terres yttriques (⁶). Pour le physicien, cette distinction connue aussi sous le label anglo-saxon de *light Rare Earths and heavy Rare Earths*, se retrouve en particulier dans l'étude des propriétés magnétiques (⁷). Cette possibilité de division vient de la profondeur des électrons $4f$ qui donne à la famille une très grande homogénéité de propriétés chimi-

ques, homogénéité qui met en relief les faibles différences éventuelles, sur lesquelles est basée la division en deux groupes. Comme nous l'avons récemment souligné (3), cette division peut se comprendre comme le reflet de celle de la couche 4f en deux sous-couches. En particulier, la différence d'énergie entre les deux sous-couches permet de comprendre leur remplissage successifs qui se manifeste entre autre à travers les propriétés magnétiques des grenats (8,9).

Toutefois, cette possibilité de classer les terres rares en deux groupes est essentiellement basée sur des propriétés de liaisons, comme à travers la solubilité des sulfates (6) ou la structure cristalline de leurs oxydes trivalents (10), propriétés qui sont le reflet de probabilités de présence distinctes. Sous cet angle, cette possibilité reste difficile à comprendre dans l'interprétation actuelle de la notion de fonction d'onde. En effet, dans ce cadre les probabilités de présence sont déterminées par le carré des fonctions d'onde ; or entre deux sous-couches d'une même couche, les différences sont de l'ordre de α (la constante de structure fine) sur les différents coefficients ou exposants de la fonction d'onde, donc trop faibles pour être tenues pour responsable de la division en terres cériques et terres yttriques. Cette difficulté disparaît par contre si nous nous autorisons à considérer l'aspect corpusculaire de l'électron comme une réalité tout aussi tangible que l'aspect ondulatoire. En effet, dans cette éventualité, les orbites de la première couche 4f, soit $4f_{5/2}$, ont un caractère elliptique tandis que les orbites de la deuxième sous-couche, soit $4f_{7/2}$, ont un caractère circulaire ; deux caractères suffisamment différents, comme nous l'avons souligné plus haut, pour que les liaisons correspondantes permettent de diviser les éléments correspondant en deux groupes distincts.

II.2. Aspect temporel

Dans l'hypothèse corpusculaire, le mouvement orbital de part sa périodicité, permet dans plusieurs domaines et en particulier dans les problèmes de liaison d'introduire un aspect temporel dont le rôle nous semble d'une importance capitale. Considérons dans ce but, l'interaction de deux atomes d'un même élément chimique et sur chacun de ces atomes un électron dans un même état quantique, figure 1. La conception corpusculaire oblige, pour discuter de la liaison, à considérer les époques successives de passages en un lieu donné de chacun des deux électrons. Considérons en particulier (figure 1) la zone de l'espace qui sépare les deux atomes : la cohésion maximum sera obtenue lorsque par exemple l'électron e_B passera entre les deux atomes A et B en b, l'électron e_A étant au point d ; en effet, dans cette situation e_B est attiré par le noyau de A plus fortement que dans toutes autres situations (11).

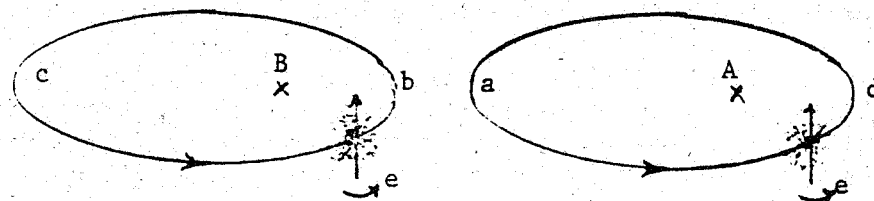


Fig. 1. Le mouvement de l'électron et la liaison synchrone

Au zéro degré absolu les deux électrons étant dans le même état quantique ils ont même période, cette situation peut donc se perpétuer indéfiniment. Cet aspect de la cohésion est très riche de possibilités. Il montre en particulier, dans les problèmes d'ordre magnétique, pourquoi les énergies en cause sont d'ordre coulombienne.

Pour les métaux, la conception actuelle des bandes d'énergie peut sembler un obstacle sérieux. Le but de ce travail est de comprendre avant tout l'atome et l'état quantique aussi nous ne discuterons pas en profondeur ce problème. Disons simplement que dans cette conception, l'origine des bandes n'est pas celle que nous lui avions attribuée. L'existence de bandes vient simplement de ce que dans tout mouvement orbital l'électron, à l'état solide, est soumis à un potentiel variable car, en plus du potentiel central de l'atome isolé, il subit l'attraction plus ou moins forte des atomes voisins, comme le montre en particulier le type de liaison décrit sur la figure 1, attraction qui fait varier l'énergie de cohésion de l'électron à son atome.

Il est d'ailleurs à noter que, dans le cas des électrons les plus externes, cette énergie peut devenir très voisine de zéro ce qui donne aux métaux leurs propriétés conductrices. Nous avons donné, par ailleurs, dans l'étude de la transition isolant métal une description des propriétés électriques des corps, description à la fois qualitative et quantitative (12, 13).

Après ces deux aspects qualitatifs du caractère corpusculaire de l'électron, il nous faut maintenant élucider la difficulté que représente l'hypothèse de moments cinétiques nuls, en mécanique quantique tel qu'elle est comprise aujourd'hui. Dans ce but, nous allons d'abord analyser les diverses manifestations du spin. Ce travail nous montrera l'absence de moment cinétique nul. Dans le paragraphe suivant, nous pourrons alors le mettre en évidence par le décompte des états quantiques.

III. Le spin de l'électron

L'hypothèse du spin a été proposée par Uhlenbeck et Goudsmit (4) pour expliquer l'"énigme" des doublets relativistes observés dans les spectres des rayons X et dans les spectres du domaine du visible des alcalins. Ce phénomène est le suivant : prenons le cas du sodium, il possède une électron 3s, par excitation thermique dans une flamme, il vient entre autre occuper le niveau 3p. La raie jaune du sodium est due à la transition inverse $3p \rightarrow 3s$, s'il n'y avait pas le spin, nous devrions observer une seule raie. Or à l'aide d'un spectromètre suffisamment dispersif, nous découvrons qu'il y a deux raies au lieu d'une, d'où l'appellation doublet. Le spin est alors introduit comme un quatrième degré de liberté interne que possède l'électron qui est supposé être un moment cinétique propre auquel correspond un moment magnétique égal à deux fois la valeur que permet de prévoir les lois classiques de l'électromagnétisme. La multiplicité d'ordre deux des séries doublets se comprend alors en admettant que le moment cinétique propre de l'électron peut prendre deux orientations par rapport au moment orbital. Cette multiplicité d'ordre deux, Dirac l'a ensuite retrouvée dans son modèle d'électron (14) à travers le signe algébrique du nombre quantique k , qui est le nombre quantique azimutal de Sommerfeld (15) appelé également secondaire. Notons que k ne prend jamais de valeur nulle. Par ailleurs, nous aurons l'occasion de revenir sur l'importance du signe algébrique de k ★.

★ Dans son mémoire original Dirac a repéré le nombre quantique orbital par la lettre j et nous avons repris cette notation dans nos premières publications. Il apparaît toutefois plus judicieux de garder la lettre j pour le nombre quantique cinétique total comme cela est d'usage aujourd'hui. C'est la raison pour laquelle nous repérons le nombre quantique orbi-

tal par la lettre k, notation souvent utilisée et qui a l'avantage de faire référence au nom de Kepler et par là de souligner la notion de mouvement dans une conception corpusculaire.

III.1. L'effet Zeeman

Un autre phénomène dans lequel le spin de l'électron joue un rôle important est l'effet Zeeman dit anormal. Considérons par exemple, les deux raies du doublet du sodium, elles se décomposent dans un champ magnétique H, l'une en quatre composantes et l'autre en six, réparties respectivement de façon symétrique en énergie par rapport à leur raie d'origine. Ce sont ces deux groupes de raies qui permettent de compter les états quantiques de chaque sous-couche pour les couches p et dont il existe des homologues dans les couches d et f.

Runge dès 1907 avait donné une décomposition en unité de Lorentz (15). Puis Landé (16), en introduisant le facteur de décomposition spectrale g qui porte son nom, a pu en donner une interprétation vectorielle. Mais il fallut attendre Dirac (17) pour un calcul quantique correct. Il trouve pour l'éclatement ΔW des niveaux

$$\Delta W = u g \mu_B H$$

u dans ce modèle est le nombre quantique magnétique $u = - (m - \frac{1}{2})$ où m est un entier qui obéit à la double relation $-|k| + 1 \leq m \leq |k|$. μ_B est le magneton de Bohr, le facteur de Landé g est donné par l'expression $g = \frac{k}{k + \frac{1}{2}}$. Comme il ressort du modèle de Dirac § IV, k est en unité \hbar le moment cinétique orbital, caractéris-

tique de la sous-couche. De ce fait g apparaît également par cette expression comme une propriété caractéristique de la sous-couche indépendante du nombre des électrons, propriété que nous avons largement retrouvée à l'état solide. Comme il est permis de le soupçonner et nous en avons proposé une interprétation, la quantité $\frac{1}{2}$ au dénominateur de g vient du spin (3). Ainsi, dans ces expériences, le spin se manifeste clairement à travers le facteur g ou ce qui revient au même au travers du nombre k par son signe. Notons par ailleurs que pour les expériences dites de Stern et Gerlach (18), du moins pour la plupart, elles s'interprètent avec pour moment magnétique M l'expression théorique $M = g u \mu_B$, donc avec les mêmes caractéristiques que pour l'effet Zeeman.

III.2. Spin et magnétisme

Le magnétisme des solides présente deux types de mesures relativement simples à calculer et à mesurer. Ce sont le moment magnétique à saturation à zéro degré Kelvin σ et la constante de Curie C. σ caractérise l'ordre parfait et C le désordre complet. σ est la somme algébrique des moments magnétiques des atomes σ_A qui compose le solide tandis que C est la somme arithmétique du carré des moments σ_A . Quant à lui σ_A est le reflet des propriétés quantiques magnétiques des différents électrons qui contribue au moment de l'atome. La contribution de spin par exemple est $g \mu_B$ pour chaque électron, et la contribution Zeeman de chaque électron qui intervient dans la constante de Curie des terres rares est $u g \mu_B$ où u est le nombre quantique magnétique comme dans l'effet Zeeman. Ainsi tout électron qui apporte sa contribution, de par son facteur g manifeste son état de spin. C'est ce qui fait l'intérêt des mesures magnétiques de σ et de C, du moins dans le modèle que nous développons depuis le congrès de magnétisme de Moscou en 1973 (8, 9, 19, 20, 21).

Pour le voir prenons par exemple le cas du fer-rite de magnésium $Mg Fe_2 O_4$. Dans ce corps le moment σ est dû aux seuls ions du fer couplés antiparallèlement, de tel sorte que les moments σ_A s'annulent deux à deux, excepté la contribution d'un électron de ces deux atomes. Si cet électron est sur la première sous-couche $3d_{3/2}$ sa contribution doit être $g\mu_B = 0,8 \mu_B$, s'il est sur la deuxième $3d_{5/2}$ sous-couche cette contribution doit être $g\mu_B = 1,2 \mu_B$. L'expérience donne $0,83 \mu_B$ (22) ou $0,86 \mu_B$ (23). Nous voyons donc que cet électron est sur la première sous-couche avec $g = 0,8$.

C'est ainsi par le choix pour chaque électron, à l'intérieur d'une même couche, d'un des deux facteurs g qu'apparaît la dualité du spin. La cohérence entre la théorie et l'expérience obtenue avec des corps cristallisant avec la structure spinelle ou grenat est très satisfaisante. Cette cohérence montre, par suite, la présence de la dualité du spin dans toutes les mesures magnétiques tant pour le moment magnétique à saturation à 0 K que pour la constante de Curie. Cet état de fait situe tout électron sur une sous-couche bien précise, avec un moment cinétique orbital $k\hbar$ différent de zéro puisque k n'est jamais nul.

Généralement, nous travaillons avec le modèle de Schrödinger dans lequel il n'y a pas de sous-couche et où est admis des états quantiques avec un moment cinétique nul. Il y a là une difficulté par rapport au modèle de Dirac. Le paragraphe suivant va nous permettre de la surmonter.

IV. Sur les différents états quantiques, leurs sous-couches et la bifurcation de celles-ci

Nous venons de voir avec les propriétés du spin de l'électron comment le facteur g permettrait d'atteindre la sous-couche. Le calcul du moment magnétique à saturation σ fait encore apparaître d'une autre manière le rôle des sous-couches. Ce calcul est basé sur le décompte des électrons non appariés. Or, les sous-couches en particulier pour les éléments des terres rares, se remplissent successivement ; elles jouent alors le rôle qui est généralement imparti aux couches du modèle de Schrödinger. Par exemple, pour les ions dont le nombre d'électrons sur la couche correspond à celui des états quantiques de la première sous-couche, si ces électrons viennent remplir d'abord cette sous-couche, ils sont tous appariés tandis que dans le modèle de Schrödinger, ils sont au contraire tous non appariés. Cette possibilité offre une explication simple des propriétés particulières rencontrées pour le Samarium et l'Europium (7 et 13). Il y a donc dans ce cas et souvent dans d'autres, deux possibilités d'interprétation radicalement différentes. La cohérence des interprétations obtenues avec le modèle de Dirac qui contient cette division en sous-couches conduit à le comparer au modèle actuel de Schrödinger qui l'ignore.

Certes cette comparaison a souvent été faite, en particulier par Dirac lui-même dans son mémoire original. Elle montre, par exemple, l'origine du point de vue énergétique des différents termes correctifs qu'introduit l'équation de Dirac par rapport à celle de Schrödinger (13, 24, 25, 26). Cette comparaison, par contre, ne semble pas jusqu'ici avoir conduit à discuter le fait que le modèle de Dirac le nombre quantique orbital puisse prendre des valeurs positives ou négatives, possibilité qui n'a pas été envisagée pour le modèle de Schrödinger bien qu'à priori rien ne l'interdit.

Pour bien poser le problème, il est important de garder à l'esprit que le point essentiel est ici de compter les états quantiques ce qui permet de se placer dans le cas simple de l'atome d'hydrogène. En effet, comme nous l'avons vu au § 1, la correspondance entre la périodicité des états quantiques de cet atome et celle des propriétés des éléments mise en évidence dans le tableau de Mendeleiev permet de supposer que le nombre des états quantiques est indépendant de celui des électrons de l'atome considéré. Il est donc possible pour compter les états quantiques de se servir d'un modèle à un électron sans avoir à se préoccuper des interactions entre électrons.

IV.1. Le modèle de Dirac

Considérons un électron de charge e et de masse m à la distance r d'un potentiel central V créé par la charge Ze où Z est le nombre effectif de protons auxquels est soumis l'électron. Dans le modèle de Dirac, la fonction d'onde d'un état quantique a quatre composantes. Chacune est le produit d'une harmonique sphérique et d'une fonction radiale. Les fonctions radiales sont : $f r^{-1}$ pour deux d'entre elles, les petites composantes, $g r^{-1}$ pour les deux autres, les grandes composantes. Soit ψ_3 la grande composante dont l'harmonique sphérique est y_ℓ^m (27). Pour la comparaison avec le modèle de Schrödinger que nous souhaitons faire - compter les états quantiques - il est suffisant de considérer uniquement ψ_3 .

Soit k le nombre quantique orbital, pour une valeur donnée de ℓ , il y a généralement deux types de solutions. L'un avec $k = \ell$, l'autre avec $k = -\ell - 1$. Pour ces deux types de solutions, les fonctions radiales f et g sont solution du même système d'équations différentielles :

$$(E + mc^2 - V)f - \hbar c \frac{dg}{dr} - \hbar c \frac{k}{r} g = 0 \quad (1)$$

$$(E - mc^2 - V)g - \hbar c \frac{df}{dr} - \hbar c \frac{k}{r} f = 0 \quad (2)$$

avec, $E = E + mc^2$ et $V = \frac{e^2 Z}{r}$; "c" est la vitesse de la lumière ;

L'énergie du système est donnée par :

$$\frac{E}{mc^2} = \left[1 + \frac{\alpha^2}{\left[p + \sqrt{k^2 - \alpha^2} \right]^2} \right]^{-1/2} - 1 \quad (3)$$

Avec $\alpha = \frac{e^2 Z}{\hbar c}$; p est le nombre quantique radial.

C'est sur cette expression de l'énergie qui est la même que celle de Sommerfeld dans son approche corpusculaire que le caractère orbital du nombre quantique k est le plus tangible (28, 15).

Considérons alors pour une même valeur du nombre quantique principal $n = p + |k|$, les valeurs $k = \ell$ avec $p = n - \ell$ et $k = -\ell - 1$ avec $p = n - \ell - 1$. Les énergies correspondantes sont très peu différentes mais distinctes. Les fonctions f et g correspondantes sont également très peu différentes, mais distinctes. Les états quantiques sont donc distincts et

$$\psi_3 = g_\ell r^{-1} y_\ell^m \text{ ou } g_{-\ell-1} r^{-1} y_\ell^m$$

Pour $\ell = 0$, k prend uniquement la valeur $k = -1$. Pour une valeur donnée de k il y a $2|k|$ valeurs possibles de m , de telle sorte que pour une même valeur de ℓ et une même valeur de n il y a $4\ell + 2$ états quantiques distincts qui correspondent aux valeurs possibles

de m définies par les relations :

$$\text{pour } k = \ell \quad ; \quad -\ell + 1 \leq m \leq \ell \quad (4)$$

$$\text{pour } k = -\ell - 1 \quad ; \quad -\ell \leq m \leq \ell + 1 \quad (5)$$

Ce sont les états quantiques attachés à une même valeur de n et de ℓ qui donnent la notion de couches, tandis que les deux valeurs $k = \ell$ et $k = -\ell - 1$ donnent la notion de sous-couches, dont nous avons rappelé plusieurs manifestations magnétiques au § III.

Par rapport au nombre quantique magnétique $u = \pm (\mu - \frac{1}{2})$ introduit par Dirac, nous avons $u = - (m - \frac{1}{2})$. Quelque soit le signe de k (²⁷).

La comparaison avec le modèle de Schrödinger se fait en éliminant la fonction f , caractéristique des petites composantes, entre les équations (1) et (2) ; il vient :

$$\frac{d^2 g}{dr^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2 Z}{r} \right) - \frac{k(k+1)}{r^2} \right] g + \epsilon g = 0 \quad (6)$$

Le terme ϵg est petit en comparaison des autres, il tend vers zéro avec c^{-1} et si nous le négligeons nous retrouvons l'équation de Schrödinger. Mais cette manière de déterminer l'équation radiale de Schrödinger fait apparaître une difficulté. En effet, ainsi déterminés à partir du modèle de Dirac, nous devons prendre comme états quantiques possibles tous ceux qui correspondent aux valeurs entières de m satisfaisant aux relations d'ordre (4) et (5) donc à des valeurs positives et négatives de k , excepté pour $\ell = 0$ où $k = -1$. Par contre à partir de la détermination habituelle de l'équation de

Schrödinger, ne passant pas par le modèle de Dirac, nous n'associons à chaque valeur de ℓ qu'une valeur possible du moment cinétique soit $k \hbar = \ell \hbar$. Il y a là un manque de cohérence grave entre ces deux manières de faire et il importe de déterminer ce qui doit être fait.

IV.2. Le moment orbital et la dualité du spin

Considérons d'abord le problème d'un point de vue purement mathématique, c'est-à-dire faisant abstraction de la réalité physique. Soit alors l'équation (6) avec $\epsilon = 0$, cette équation contient k uniquement à travers le produit $k(k+1)$. Ce produit est introduit dans le traitement de l'équation de Schrödinger lors de la séparation des variables angulaire et radiale du fait qu'il est valeur propre de l'opérateur carré du moment cinétique dans l'équation $M^2 \psi = k(k+1) \hbar^2 \psi$ (7) ; si nous remarquons que ce produit est le même pour $k = \ell$ et $k = -\ell - 1$, nous en concluons que toute fonction solution de l'équation (6) avec $\epsilon = 0$ et de l'équation (7) correspond à une solution double, c'est-à-dire que mathématiquement les solutions classiques du modèle de Schrödinger sont solutions soit de la valeur $k = \ell$ soit de la valeur $k = -\ell - 1$. Par ailleurs, l'étude détaillée du comportement des deux solutions distinctes dans le modèle de Dirac (voir annexe) lorsque la vitesse de la lumière tend vers l'infini montre que les deux solutions convergent vers une même solution. A l'inverse si nous partons d'une valeur infini de c vers une valeur non nulle la solution double de Schrödinger bifurque en deux solutions pour reprendre le langage de la morphogenèse (²⁹). Nous avons donc bien dans le modèle de Schrödinger comme dans celui de Dirac la possibilité de considérer les valeurs négatives comme les valeurs positives du nombre quantique orbital k .

Il reste que ce qui est correct sous l'angle mathématique ne l'est pas forcément sous l'angle physique. Or de ce point de vue, si l'espace qui détermine les propriétés physiques de l'électron ne possède aucune propriété qui permette de définir une orientation de son moment cinétique orbital dans un potentiel central, nous ne pouvons pas considérer à la fois des valeurs positives et négatives de ce moment. Il n'est pas sans intérêt dans cette discussion de rappeler que ce fut la situation de Schrödinger ⁽³⁰⁾ lorsqu'il soumit son étude pour publication, son travail a été reçu le 27 janvier 1926. En effet, l'hypothèse du spin qui permet dans le modèle de Dirac d'envisager les valeurs positives et négatives de k a été proposée par Uhlenbeck et Goudsmit dans un travail reçu le 17 octobre 1925. Il est donc peut probable que cette hypothèse fut connue de Schrödinger au moment où il rédigeait son travail et de toute façon il fallait le temps d'en apprécier la solidité avant d'envisager d'en tenir compte.

Par contre puisque maintenant cette hypothèse s'avère juste, que c'est elle qui conduit à retenir les valeurs positives et négatives de k dans le modèle de Dirac, nous devons en faire autant dans l'étude du modèle de Schrödinger puisque mathématiquement cela est possible.

Remarquons d'ailleurs que lorsque, empiriquement, nous ajoutons (ou retranchons) le spin au (du) moment orbital pour retrouver les différents états quantiques dans le modèle de Schrödinger cela revient à considérer le moment orbital comme repère par rapport au spin ce qui, pour décrire les propriétés physiques de l'un par rapport à l'autre, est équivalent à l'autre description qui consiste à considérer le spin comme repère par rapport au moment orbital.

Ceci dit il importe de noter que le modèle de Schrödinger ne nous permet pas de discuter du spectre des valeurs possibles de n , k , ℓ et m , discussion qui doit être faite dans le modèle de Dirac et qui conduit aux résultats des relations (4) et (5). Il est en effet impossible, dans un modèle à une seule composante de la fonction d'onde, de considérer comme solution la valeur $m = \ell + 1$ pour $k = -\ell - 1$ associée à la seule harmonique sphérique y_{ℓ}^m . Cela a un sens dans le modèle de Dirac car cette composante est nulle tandis que l'autre grande composante n'est pas nulle et a pour harmonique sphérique y_{ℓ}^{m-1} soit avec $m = \ell + 1$, y_{ℓ}^{ℓ} .

Considérons alors la méthode empirique qui consiste à associer au moment cinétique $k\hbar$ avec $k = \ell$ un spin positif ou négatif, méthode couramment utilisée dans l'étude des phénomènes magnétiques en physique des solides ⁽³¹⁾. Cette méthode conduit à considérer des états quantiques répartis sur les couches ℓ et $\ell-1$ et non pas uniquement sur la couche ℓ comme nous avons pu le croire. En effet considérer $(k - \frac{1}{2})\hbar$ comme moment cinétique total c'est considérer que, par rapport au moment cinétique propre, le moment cinétique orbital lui est opposé ; il a donc une valeur négative par rapport à lui et nous avons vu que ce sont les valeurs $k = -\ell - 1$ qui appartiennent à la même couche que les valeurs positives $k = \ell$ pour une même valeur de n . L'erreur vient de ce que nous supposons que le maximum du moment magnétique observable a même valeur propre que le moment cinétique total. Or pour la valeur positive du moment cinétique par rapport au spin $M\hbar = (k + \frac{1}{2})\hbar$ le maximum du moment magnétique observable est $u_{\text{B}} = (k - \frac{1}{2})\mu_{\text{B}}$ et non pas $(k + \frac{1}{2})\mu_{\text{B}}$ comme cela est empiriquement supposé dans le modèle de Schrödinger tel qu'il est utilisé actuellement.

V. Remarques sur l'opérateur carré du moment cinétique

Nous avons à plusieurs reprises dans ce travail évoqué l'opérateur moment cinétique M et plus particulièrement son carré M^2 sans rien dire sur ce que représente, dans le modèle d'électron proposé, la valeur propre de ce dernier $k(k+1)$. Il importe donc de le faire, ce qui nous semblait difficile avant d'avoir étudié en détail la comparaison des modèles de Dirac et de Schrödinger.

Un résultat important de cette comparaison pour discuter du sens physique de l'opérateur M^2 est de montrer que la valeur $\ell = 0$ du modèle de Schrödinger correspond en fait à une valeur $k = -1$. Un des buts de ce travail est de montrer que $k\hbar$ représente bien le moment cinétique orbital, nous espérons y avoir réussi. Accepter l'hypothèse, avec $\ell = 0$, d'états quantiques avec un moment cinétique orbital nul c'est accepter qu'il n'existe pas réellement d'aspect corpusculaire à cette échelle des phénomènes. Cette hypothèse, moment cinétique nul, était possible pour comprendre la périodicité des propriétés des éléments dans la classification périodique. Mais la comparaison que nous venons de faire, montre qu'il existe une autre solution qui non seulement est compatible avec le modèle ondulatoire mais également avec le modèle corpusculaire, et que de plus la première solution n'était pas indemne de difficultés graves ; aussi c'est cette deuxième solution que nous retiendrons.

Les opérateurs de la mécanique quantique et particulièrement l'opérateur M^2 apparaissent alors comme des êtres mathématiques dont les propriétés que nous leur connaissons sont celles qu'ils doivent posséder dans l'algèbre des équations différentielles qui régissent les propriétés ondulatoires de l'électron, leurs valeurs propres ne correspondant pas nécessairement à une observable comme nous avons pu le croire en particulier dans le cas

de l'opérateur M^2 . Notons d'ailleurs qu'il n'existe pas à notre connaissance de mesure physique du carré du moment cinétique, permettant de vérifier qu'il puisse être de la forme $k(k+1)\hbar^2$. En effet si la constante de Curie est proportionnelle au carré du moment magnétique σ d'une part ce n'est pas le moment cinétique et d'autre part la mesure de C est obtenue à partir de l'aimantation d'un corps dans la zone de température où il est paramagnétique. Or cette aimantation est proportionnelle à $\vec{\sigma}$ ($\vec{\sigma} \cdot \vec{H}$) expression dans laquelle $\vec{\sigma}$ intervient deux fois séparément et non pas par son carré.

Conclusion

Un travail de recherche n'est jamais terminé, si l'approche des phénomènes est meilleure que celle qui existait auparavant, il y a généralement une part d'erreur qui reste à corriger ; aussi nous espérons simplement que ce travail permettra ultérieurement d'aller plus loin.

L'aspect essentiel nous semble la description qualitative de la liaison que nous avons appelé "*synchrone*" et qui met en lumière, si l'hypothèse est juste, le caractère corpusculaire de l'électron. Tout le reste est ce qui nous montre la dualité du spin qui permet à notre sens d'approcher l'aspect corpusculaire.

Cette approche permet alors une vue d'ensemble sur la dualité onde corpuscule, le décompte des états quantiques, les mesures magnétiques, la liaison chimique, etc... vue suffisamment large et belle pour se convaincre de continuer dans cette direction.

Remerciement

En terminant ce travail, je tiens à remercier Monsieur Georges Lochak, Directeur de la Fondation Louis de Broglie qui m'ayant d'abord poussé à le rédiger m'a ensuite, par ses nombreux commentaires et suggestions, permis de le mener à terme.

ANNEXE

SUR LA BIFURCATION DE LA COMPOSANTE RADIALE DES FONCTIONS D'ONDES

Nous savons que l'équation radiale de Schrödinger qui donne la partie correspondante de la fonction d'onde, est l'équation différentielle du 2^{ème} ordre qui donne la partie radiale des grandes composantes de Dirac lorsque la vitesse de la lumière est considérée comme infinie.

A lui seul ce fait montre que, pour une même valeur du nombre quantique principal, à une solution classique de l'équation de Schrödinger définissant une valeur ℓ , correspond en général à deux valeurs du nombre quantique orbital, à savoir $k = \ell$ et $k = -\ell - 1$, c'est-à-dire que la solution est double.

L'importance de ce résultat justifie toutefois d'étudier la bifurcation proprement dite, c'est-à-dire comment la solution double de Schrödinger se sépare en deux solutions de Dirac pour la commodité de l'exposé, nous étudierons comment les deux solutions de Dirac tendent vers la même solution de Schrödinger.

Pour ne pas refaire toute l'étude des solutions, nous partirons pour le modèle de Schrödinger de l'étude donnée par Messiah ⁽²⁴⁾ et pour le modèle de Dirac de celle de De Broglie ⁽²⁷⁾ et de Schiff ⁽²⁵⁾.

Soit $\psi_{\ell}^m(r, \theta, \varphi) = Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) y_{\ell} r^{-1}$ la fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger, $y_{\ell}(r)$ est alors solution de l'équation :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + (l+1) \frac{\hbar}{2mr^2} - \frac{e^2 Z}{r} - E \right] y_\ell = 0$$

posons $\chi = (-2mE)^{1/2} r^{-1}$, $\rho = \frac{\hbar^2}{2mE}$ pour le rayon de Bohr, pour les solutions E_n ou n est le nombre quantique principal $n = (\chi\rho)^{-1}$. Avec le changement de variable $x = \chi r$, y_ℓ s'écrit $y_\ell = e^{-x} v_\ell(x)$ où :

$$v_\ell(x) = x^{\ell+1} (C_0 + C_1 x + C_2 x^2 + \dots + C_v x^v + \dots + C_p x^p) \quad (A1)$$

$$\text{avec } n = \ell + 1 + p \text{ et } \frac{C_v}{C_{v+1}} = \frac{(2\ell+2+v)(v+1)}{2(\ell+v+1-n)} \quad (A2)$$

Soit f et g les parties radiales des petites et des grandes composantes du modèle de Dirac, elles sont solution des équations

$$(E + mc^2 + \frac{e^2 Z}{r}) f - \hbar c \frac{dg}{dr} - \hbar c \frac{k}{r} g = 0 \quad (A3)$$

$$(E - mc^2 + \frac{e^2 Z}{r}) g + \hbar c \frac{dg}{dr} - \hbar c \frac{k}{r} f = 0 \quad (A4)$$

avec $\bar{E} = E + mc^2$ soit $E_{n,k} = \bar{E}_{n,k} - mc^2$ pour les solutions n, k

$$\text{posons } A^2 = \frac{1}{\hbar} (mc + \frac{\bar{E}}{c}) \text{ et } B^2 = \frac{1}{\hbar} (mc - \frac{\bar{E}}{c}) \quad (A5)$$

pour l'étude du comportement de A et B lorsque c^{-1} tend vers zéro, nous avons $E_{n,k}$ de Dirac qui tend vers E_n de Schrödinger comme le montre l'expression (3) :

$$E_n = - \left(\frac{e^2 Z}{\hbar c} \right)^2 \frac{mc^2}{2n^2} = - \alpha^2 \frac{mc^2}{2n^2} \quad (A6)$$

$$\text{d'où } A^2 \rightarrow \frac{mc}{\hbar} \left(2 - \frac{\alpha^2}{2n^2} \right) \quad (A7)$$

$$B^2 \rightarrow \frac{mc}{\hbar} \frac{\alpha^2}{2n^2} = - \frac{E_n}{\hbar c} \quad (A8)$$

$$\text{et } A^2 B^2 \rightarrow - \frac{2mE}{\hbar^2} \text{ soit } AB \rightarrow \chi \quad (A9)$$

Le fait que AB tend vers χ conduit à poser $x = ABr$, les équations (A3) et (A4) deviennent :

$$\left(\frac{A}{B} - \frac{\alpha}{x} \right) f - \frac{dg}{dx} - \frac{k}{x} g = 0 \quad (A10)$$

$$\left(-\frac{A}{B} - \frac{\alpha}{x} \right) g + \frac{dg}{dx} - \frac{k}{x} f = 0 \quad (A11)$$

Les fonctions f et g s'expriment alors ainsi :

$$f = e^{-x} x^\gamma (a_0 + a_1 x + \dots + a_v x^v + \dots + a_p x^p) \quad (A12)$$

$$g = e^{-x} x^\gamma (b_0 + b_1 x + \dots + b_v x^v + \dots + b_p x^p) \quad (A13)$$

L'étude de l'existence de ces solutions permet de déterminer l'exposant γ et les coefficients a et b en substituant f et g dans les équations (A10) et (A11) et en annulant le coefficient de $x^{\gamma+v-1}$ dans les deux expressions.

Il vient :

$$\frac{A}{B} a_{v-1} + \alpha a_v + b_{v-1} - (k+\gamma+v) b_v = 0 \quad (A14)$$

$$-\frac{B}{A} b_{v-1} + \alpha b_v - a_{v-1} - (k-\gamma-v) a_v = 0 \quad (A15)$$

pour $v > 0$, a_{v-1} et b_{v-1} ne sont pas nuls, tandis que pour $v = 0$, ils le sont, ce qui donne :

$$\alpha a_0 - (k + \gamma) b_0 = 0 \quad (A16)$$

$$\alpha b_0 - (k - \gamma) a_0 = 0 \quad (A17)$$

pour que f et g existent avec le facteur x^γ , a_0 et b_0 doivent être différents de zéro, donc (A16) et (A17) doivent être linéairement dépendantes, ce qui implique :

$$\gamma^2 = k^2 - \alpha^2 \quad (A18)$$

pour $\alpha \rightarrow 0$: $\gamma \rightarrow \ell$, pour $k = \ell$ et $\gamma \rightarrow \ell + 1$ pour $k = -\ell - 1$.

Notons sur cette expression que pour $k = \ell$, il faut $\gamma > 0$. En effet, la partie radiale est gr^{-1} ou fr^{-1} et la valeur $k = 0$ donnerait une fonction avec un comportement en r^{-1} au voisinage de $r = 0$, ce qui est inacceptable. Pour $k = \ell$ avec $\ell = 1$ ou $k = -\ell - 1$, avec $\ell = 0$, fr^{-1} et gr^{-1} se comportant en $r^{-\alpha}$ qui reste de carré sommable, ces valeurs sont donc acceptables.

Avant de calculer les différents a_v et b_v , calculons p . Le degré maximum de x dans le facteur polynomial de f ou g . Pour ceci remarquons qu'il est possible d'éliminer a_{v-1} et b_{v-1} entre les équations (A14) et (A15), en multipliant la première par B et la deuxième par A , puis en additionnant. Il vient :

$$[B(k + \gamma + v) - \alpha A] b_v = [\alpha B - A(k - \gamma - v)] a_v \quad (A19)$$

en faisant $v = p$ nous avons une première relation qui contient a_p et b_p , il est possible d'éliminer ces deux coefficients en écrivant (A14) et (A15), pour $v = p + 1$, ces solutions contiennent alors a_{p+1} et b_{p+1} qui sont nuls, a_p et b_p ne l'étant pas, il vient :

$$A a_p = -B b_p \quad (A20)$$

En faisant $v = p$ dans (A19) et compte tenu de (A20), il vient :

$$2 AB (\gamma + p) = \alpha (A^2 - B^2) \quad (A21)$$

soit avec (A18) :

$$2 AB (\sqrt{k^2 - \alpha^2} + p) = \alpha (A^2 - B^2) \quad (A22)$$

en remplaçant A et B par leur expression (A5), la relation (A22) conduit à la relation (3) du texte donnant le spectre d'énergie, qui se décrit en posant $|k| + p = n$.

Regardons alors le comportement de g , relation (A13), lorsque $c^{-1} \rightarrow 0$. Pour $k = -\ell - 1$, $\gamma \rightarrow \ell + 1$, la variable $x = AB r \rightarrow xr$, c'est-à-dire la même variable que

dans le modèle de Schrödinger, si $\frac{b_v}{b_{v+1}} = \frac{c_v}{c_{v+1}}$ nous avons bien $g_{-(\ell+1)} = y_\ell$ puisque le nombre des termes est le même $p = n - \ell - 1$ et que seul compte le rapport des coefficients.

Pour $k = \ell$, il peut sembler que nous avons une solution différente, en effet $\gamma \rightarrow \ell$ et nous savons que nous devons trouver $\ell + 1$ comme exposant de x dans le facteur x^γ . Par ailleurs, le facteur polynomial comporte un terme de plus. En effet, $p = n - \ell$ au lieu de $p = n - \ell - 1$. Mais considérons la relation (A16) :

$$\alpha a_0 - (k + \gamma) b_0 = 0$$

Si $\alpha \rightarrow 0$ et $k = \ell$, $b_0 \rightarrow 0$, ce premier terme b_0 disparaît, nous pouvons mettre dans tous les autres $b_v x^v$, la variable x en facteur ce qui redonne le facteur $x^{\ell+1}$ dans l'expression de g_ℓ et le même nombre de facteur.

Remarquons alors que les termes qui se correspondent avec y_ℓ sont b_{v+1} et c_v , il nous faut donc dans ce cas montrer que $\frac{b_{v+1}}{b_{v+2}} = \frac{c_v}{c_{v+1}}$

Nous avons donc à calculer $\frac{b_v}{b_{v+1}}$ pour $c^{-1} \rightarrow 0$.

Dans ce but, écrivons (A19) en posant :

$$F_v = A(\gamma + v - k) + \alpha B \quad (A23)$$

$$G_v = B(k + \gamma + v) - \alpha A \quad (A24)$$

Il vient :

$$\frac{a_v}{b_v} = \frac{G_v}{F_v} \quad (A25)$$

L'étude du comportement de (A25) montre a_v/b_v est de l'ordre de grandeur de α^2 , la fonction f est bien petite devant la fonction g et tend vers zéro avec c^{-1} . Par ailleurs (A19) donc (A25) reste vérifiée pour $v = 0$ donc $\frac{a_0}{b_0}$ est encore de l'ordre de α^2 , comme d'après (A16) $b_0 = \frac{\alpha a_0}{k+\gamma}$ pour $k = \ell$, a_0 est de l'ordre de α^3 .

En remplaçant v par $v + 1$ dans (A14) puis en remplaçant a_v et a_{v+1} par leurs valeurs tirées de (A25), il vient :

$$\frac{A}{B} \frac{G_v}{F_v} b_v + \alpha \frac{G_{v+1}}{F_{v+1}} b_{v+1} + b_v - (k + \gamma + v + 1) b_{v+1} = 0 \quad (A26)$$

Soit :

$$\frac{b_v}{b_{v+1}} = \frac{F_v}{F_{v+1}} \frac{\alpha B G_{v+1} - (k + \gamma + v + 1) B F_{v+1}}{A G_v + B F_v} \quad (A27)$$

D'après (A23) et (A24) compte tenu de ce que $AB \rightarrow \chi$ (A9) nous avons pour les différents termes de (A27) :

$$A G_v \rightarrow \chi(k + \gamma + v) - \alpha A^2 \quad (A28)$$

$$B F_v \rightarrow \chi(\gamma + v - k) + \alpha B^2 \quad (A29)$$

$$A G_v + B F_v \rightarrow 2\chi(\gamma + v) - \alpha(A^2 - B^2) \quad (A30)$$

$$D'après (A21) \alpha(A^2 - B^2) = 2AB(\gamma + p)$$

$$\text{Soit } \alpha(A^2 - B^2) \rightarrow 2\chi n \quad (A31)$$

(A30) devient alors :

$$A G_v + B F_v \rightarrow 2\chi(\gamma + v - n) \quad (A32)$$

Par ailleurs, avec (A29), il vient :

$$\frac{F_v}{F_{v+1}} \rightarrow \frac{k - \gamma - v}{k - \gamma - v - 1} \quad (A33)$$

(A28) montre que $\alpha B G_{v+1} \rightarrow 0$

Il vient finalement pour (A27) :

$$\frac{b_v}{b_{v+1}} \rightarrow - \frac{k - \gamma - v}{k - \gamma - v - 1} \frac{(k + \gamma + v + 1) (\gamma + v + 1 - k)}{2(\gamma + v - n)}$$

Soit
$$\frac{b_v}{b_{v+1}} \rightarrow \frac{(\gamma + v - k) (k + \gamma + v + 1)}{2(\gamma + v - n)} \quad (A34)$$

Pour $k = -l - 1$ $\gamma \rightarrow l + 1$, il vient :

$$\frac{b_v}{b_{v+1}} \rightarrow \frac{(2l + 2 + v) (v + 1)}{2(l + v + 1 - n)} \quad (A35)$$

En rapprochant (A35) de (A2), nous voyons que :

$$\frac{b_v}{b_{v+1}} \rightarrow \frac{c_v}{c_{v+1}} \text{ et } g_{-l-1} \rightarrow y_l$$

Pour $k = l$ $\gamma \rightarrow l$, il vient :

$$\frac{b_v}{b_{v+1}} \rightarrow \frac{v (2l + v + 1)}{2(l + v - n)} \quad (A36)$$

Nous l'avons vu dans la fonction g pour $k = l$, $b_0 \rightarrow 0$ et x est en facteur de tous les termes du polynome, par suite la correspondance terme à terme à lieu entre $\frac{b_{v+1}}{b_v} x^v$ et $\frac{c_v}{c_{v+1}} x^v$, il faut donc comparer $\frac{b_{v+1}}{b_v}$ soit remplacer v par $v + 1$ dans (A36). Il vient :

$$\frac{b_{v+1}}{b_{v+2}} \rightarrow \frac{(v + 1) (2l + 2 + v)}{2(l + v + 1 - n)}$$

Donc, dans ce cas également
$$\frac{b_{v+1}}{b_{v+2}} \rightarrow \frac{c_v}{c_{v+1}}$$

et $g_l \rightarrow y_l$

Les deux fonctions g_l et g_{-l-1} caractérisant la partie radiale de chaque sous-couche d'une couche l tendent vers y_l la fonction unique du modèle de Schrödinger qui est une solution double. Il n'y a donc pas lieu dans le modèle de Schrödinger d'invoquer l'existence du spin orienté positivement ou négativement par rapport au moment orbital. Le signe k donne l'orientation du moment orbital par rapport au spin et ce modèle contient de part ses solutions, si nous tenons compte des valeurs $k = l$ et $k = -l - 1$, l'ensemble des états quantiques que nous connaissons de part la classification périodique.

=====

REFERENCES

- (1) - L. de Broglie - Recherche sur la théorie des quanta thèse (1924) - Ann. de Physique 10^{ème} série tome III page 22 (1925). Rééditée chez Masson et Cie - Paris (1963). Phil. Mag. 47, 446, (1924).
- (2) - G. Lochak, C.R. Hebd. Seances Acad. Sci. 243, 357, (1956) ; thèse (1959) Paris.
- (3) - X. Oudet J. de Phys. (1979) C 5-395.
- (4) - G.F. Uhlenbeck, S. Goudsmit Naturwissenschaften 13, 953, (1925) ; Nature 117, 264, (1926).
- (5) - F.R. Bichowsky, H.C. Urey Proc. Nat. Acd. Sci. 12, 80, (1926)
- (6) - F. Trombe, J. Loriers, F. Gaume-Mahn, C. Henry La Blanchetais - Eléments des Terres Rares, Nouveau traité de chimie minérale Tome VII, sous la direction de P. Pascal, Masson et Cie Paris 1151 (1960).
- (7) - G. Urbain, B. Jantsch, C.R. Hebd. Seances Acad. Sci. 147, 1286, (1908).
- (8) - X. Oudet, 3^{ème} journées de la RCP 520 sur les composés de terres rares à valence intermédiaire, 21 et 22 janvier 1980, Grenoble, France.
- (9) - X. Oudet Phys. Lett. 48A, 252, (1974).
- (10) - R.W.G. Wyckoff, Crystal Structures 2nd Edition V.2. inter Science publishers (1964).
- (11) - X. Oudet, 2^{ème} journées de la RCP 520 sur les composés de terres rares à valence intermédiaire, 24 et 25 avril 1979. Laboratoire de physique des solides, Université Paris-Sud, centre d'Orsay 91205 - Orsay - France.
- (12) - X. Oudet J de Phys. 38, CI - 223, (1977)
- (13) - X. Oudet Valence Instabilities and Related Narrow - Band Phenomena Edited by R.D. Parks, Plenum Press, New-York and London (1977), p. 525.
- (14) - P.A M. Dirac Proc. R. Soc A117, 610, (1928) The principles of Quantum Mechanics 4^{ème} édition Oxford at the Clarendon Press (1958).
- (15) - H.E. Wite Introduction to Atomic Spectra Mc Graw-Hill Book Compagny, Inc. New-York and London (1934).
- (16) - A. Landé, Z. Phys. 5, 231, (1921).
- (17) - P.A.M. Dirac Proc. R. Soc. A118, 351, (1928).
- (18) - E.C. Stoner "Magnetism and Matter", Methuen et Co LTD London (1934).
- (19) - X. Oudet Proc. inter. Conf. Mag. 73, 1(2), 89, (1974) Moscou Acta Physica, Polonica A47, 789, (1975) en français.
- (20) - X. Oudet J. of Mag. Mag. Materials 7, 37, (1978)
- (21) - X. Oudet J. Phys. C 13, L205-8, (1980)
- (22) - G.A. Sawatzky, F. Vander Woude, et A.H. Morrish, Phys. Rev. 187, 747-57, (1969).

- (23) - R. Pauthenet, Ann. de Phys. 7, 710-47, (1952).
- (24) - A. Messiah, Mécanique quantique, Tome I, p. 296 et 350, Dunod Paris (1959).
- (25) - L.I. Schiff, Quantum Mechanics, p. 335, Mc Graw-Hill Book Compagny, INC., New-York, Toronto, London ; Kogakusha Compagny, LTD., Tokio (1955).
- (26) - H.A. Bethe et E.E. Salpeter Handbuck der Physik, édité par S. Flugge, Volume 35, Tome I. Quantum Mechanics of one and two Electron systems, en anglais.
- (27) - L. de Broglie, l'Electron magnétique (Théorie de Dirac), p. 231, Hermann, Paris (1934).
- (28) - A. Sommerfeld Ann. Phys. 51, 1, (1916), Atombau und spectrallinien Fried. Vieweg Braunschweig, (1919). Traduction française, La constitution de l'atome et les raies spectrales, Blanchard, (1923).
- (29) - T. Thom, Modèles mathématiques de la Morphogénèse Union Générale d'Editions, Paris (1974).
- (30) - E. Schrödinger Ann. Phys. 79, 361, 489, 734, (1926) Phys. Rev. 28, 1049, (1926). Mémoires sur la mécanique ondulatoire traduit par Proca, Librairie Félix Alcan, Paris (1933).
- (31) - S. Chikazumi, Physics of Magnetism, John Wiley & Sons, Inc., New-York, London, Sydney, (1964).