

L'état quantique et les notions de spin, de fonction d'onde et d'action

XAVIER OUDET

Laboratoire de Magnétisme et d'Optique de l'Université de Versailles
CNRS, 45 Avenue des Etats-Unis, 78035 Versailles, France

RÉSUMÉ. Les résultats expérimentaux et théoriques qui fondent la notion de spin sont examinés en détail. Pour comprendre les propriétés du spin de l'électron celui-ci est conçu comme une petite masse fluide. Cette masse est supposée déformée par l'énergie qu'il échange avec le champ électrique le long de sa trajectoire. Cette énergie échangée représente l'action mécanique. La fonction d'onde associée à l'électron est par suite interprétée comme l'action agissante le long d'un élément de trajectoire pendant la durée correspondante. L'analyse des nombres quantiques et des énergies qu'ils permettent de faire correspondre aux différents degrés de liberté conduit à pressentir qu'il y a une énergie associée au spin. Sur le plan des niveaux d'énergie ceux caractéristiques d'un doublet correspondent à des électrons qui gravitent sur des trajectoires différentes mais avec des distances au noyau très voisines. Ce point est mis en évidence avec l'étude de la fonction d'onde et il apparaît qu'une unité de quantification est réservé au spin. L'électron et l'espace qu'il occupe sont ensuite analysés. Il apparaît que la rotation de l'électron ne concerne pas uniquement le spin mais également le mouvement orbital. Finalement l'interprétation du facteur de décomposition spectrale qui entre dans le calcul du moment magnétique de l'état quantique est proposé comme confirmation du modèle

ABSTRACT. Experimental and theoretical results making the foundation of the notion of spin are revisited. To understand its spin properties, the electron is thought as a small fluid mass. The shape of this mass is supposed to be transformed according to the energy exchanged between the field and the electron along its trajectory. This exchanged energy stands for the mechanical action. As a result the associated wave function to the electron is interpreted as the energy acting along an element of trajectory during the corresponding time. The analysis of the quantum numbers and of the energies associated

with the different degree of freedom leads to suppose that there is an energy associated with the spin. The two energy levels associated with a doublet are found to correspond to electrons gravitating on different trajectories but at distances to nucleus which are very close. This point is put in view from the study of the wave function and it appears that one unit of quantification is used for the spin. Then the occupied space by the electron is analysed. It appears that the rotation of the electron not only involves the spin but also the orbital motion. Finally the interpretation of the spectroscopic splitting factor determining the magnetic momentum of the quantum state is proposed as a confirmation of the model.*

1. Introduction

L'étude de la lumière émise par les atomes révèle les propriétés quantiques des électrons sous formes de raies [1]. Ces raies patiemment classifiées nous ont montré l'existence de séries. Bohr [2] le premier puis Wilson [3], Sommerfeld [4] et Schrödinger [5] ont proposés des interprétations qui nous ont fait découvrir la structure de l'état quantique de l'électron. Dans le puzzle que représente la compréhension de l'état quantique l'existence de raies doubles telle la raie D du sodium qui est en réalité composée de deux raie très voisines de longueur d'onde $\lambda_1 = 5890\text{\AA}$ et $\lambda_2 = 5896\text{\AA}$ fut une énigme difficile. Pour expliquer cette dualité Uhlenbeck et Goudsmit [6,7] proposèrent l'hypothèse du spin. Selon cette hypothèse l'électron est conçu comme une petite masse rigide qui possède une rotation propre autour d'un axe et par suite un moment magnétique associé. Ce fut un progrès important dans notre compréhension de l'état quantique. Soulignons pourtant que cette conception a laissée s'insinuer l'idée que les propriétés du spin sont découplées de celles de trajectoire de l'électron. Il y a là une grave difficulté qui fait obstacle à une meilleurs compréhension des propriétés magnétiques comme le montre l'étude "Moment angulaire total et moments magnétiques" [8]. En effet ce travail utilise la théorie de Dirac où seule la somme du moment orbital et de spin se conserve et le moment magnétique de chaque électron, apportant une contribution, est celui qu'il aurait s'il appartenait à un atome d'hydrogène et cela quelque soient les interactions. L'étude du paramagnétisme confirme cette approche [9].

* An english version is available from the author.

La conception de l'électron comme une petite masse solide est une autre difficulté, la découverte de ses propriétés ondulatoires par de Broglie la met bien en relief [10]. Avec cette découverte Schrödinger [5] d'abord, Dirac [11] ensuite ont pu retrouver l'ensemble des propriétés quantiques. Dirac en particulier retrouve les propriétés magnétiques associées au spin de l'électron avec le facteur de décomposition spectral intimement lié au spin [12]. Dans ce travail le spin apparaît comme une contribution additionnelle de $\frac{1}{2}\hbar$ au moment cinétique orbital (\hbar est la constante de Planck h divisée par 2π) et par des valeurs demies entières des moments magnétiques associés. Mais malgré sa force ce travail reste marqué par le caractère abstrait et mystérieux attaché à l'algèbre des opérateurs et la notion de fonction d'onde déjà déroutante avec une composante et qui, avec quatre, semble nous enlever tout espoir de la comprendre. Pourtant l'expression simple $g = k/(k + 1/2)$ de ce facteur (k est le nombre quantique caractéristique des propriétés angulaire de la fonction d'onde) semble indiquer une propriété quantique fondamentale et dire que derrière la complexité apparente de l'algèbre et de la fonction d'onde se cache une réalité simple que nous aurions avantage à comprendre.

C'est dans cet esprit que nous avons entrepris ce travail. Notre première hypothèse pour le mener à terme est celle de l'électron conçu comme une petite masse fluide [13-15]. Avec cette hypothèse nous avons déjà proposé d'interpréter l'état quantique comme une résonance entre les ondes créées par les mouvements propre et orbital, toutefois l'origine et la nature de ce mouvement propre reste aujourd'hui une question à résoudre. Dans ce but il y a lieu de se demander comment prennent naissance les ondes dans la matière de l'électron. S'il y a des ondes il y a nécessairement des déformations dans la distribution de la matière de l'électron qui permettent que des ondes existent. Mais s'il y a des déformations dans la masse fluide de l'électron celles-ci ne peuvent venir que d'échanges entre le champ électrique et la matière fluide de l'électron au même titre que le photon émis ou absorbé lors d'une transition entre deux états quantiques. De tels échanges ont lieu continûment le long de la trajectoire et représentent des quantités d'énergie par unité de temps, c'est à dire l'*action mécanique* dont nous savons le rôle fondamental qu'elle joue dans les propriétés quantiques et ondulatoire de l'électron. Or si de telles déformations existent elles montrent qu'il n'est pas possible de séparer le mouvement de rotation propre du mouvement orbital et nous savons que c'est un des résultats importants de la théorie de Dirac

qui montre que seul le moment cinétique total est une constante du mouvement. De tels échanges en perturbant la distribution de la matière de l'électron modifient profondément la loi de conservation de la quantité de mouvement. Il y a là un point important qui sera abordé dans le paragraphe: "l'espace, l'électron et l'action" et qui permet de comprendre que la stabilité d'un état quantique vient de ce que sa fonction d'onde satisfait l'équation de Dirac [16].

Cette approche des phénomènes suggère alors l'hypothèse que la fonction d'onde Ψ est en fait l'action c'est à dire l'énergie échangée pendant la période T définie par la relation $ET = h$ le long d'un élément de trajectoire de dimension égale à la longueur d'onde associée à la quantité de mouvement p par la relation $p\lambda = h$. Cette hypothèse est corroborée par l'éclairage qu'elle apporte sur la quantification. En quantifiant la fonction d'onde c'est l'action qui est quantifiée. Si les constantes du mouvement se trouvent quantifiées également, elles le sont avec des caractéristiques distinctes de celles de l'action. En effet l'action a nécessairement les propriétés de symétrie du champ électrique créé par le noyau de l'atome. Ces propriétés sont celles de la sphère et de ce fait l'action en a les caractéristiques radiales et angulaires. Le caractère fluide de l'électron permet alors de comprendre qu'il y a une unité de quantification qui peut être prise sur les caractéristiques radiales ou angulaires de l'action. C'est comme nous le verrons cette dualité qui est la propriété caractéristique du spin. Une courte version anglaise de ce travail a déjà fait l'objet d'une publication [17].

2. Le spin, les nombres quantiques et l'énergie

Dans le modèle corpusculaire de Bohr, Wilson et Sommerfeld, basé sur la quantification de l'action, toute l'énergie de l'électron dans un état quantique donné est associée soit au mouvement de rotation, soit au mouvement radial, en d'autres termes aux différents degrés de liberté du mouvement. De ce fait chaque degré de liberté est quantifié séparément ce qui conduit à des nombres quantiques ou nombres d'unités de quantifications attachés à ces degrés de liberté. Ainsi l'on distingue le nombre quantique azimutal ou secondaire k pour le mouvement de rotation et le nombre quantique radial r pour le mouvement radial leur somme étant égale à n le nombre quantique principal $n = k + r$, ces nombres étant strictement positifs. Le nombre k qui caractérise le mouvement de rotation est supposé mesurer le moment cinétique M du mouvement orbital en unité \hbar ($\hbar = h/2\pi$, où h est la constante de Planck) soit $M=k\hbar$.

L'interprétation des doublets réguliers et de leurs propriétés magnétiques a fait soupçonner avant l'hypothèse du spin, l'existence d'un autre nombre quantique appelé à cette époque interne [18 et 19]. Cette hypothèse a été prise sans qu'une énergie lui soit clairement associée. Cette même situation se retrouve avec l'hypothèse du spin. Cette approche c'est ensuite concrétisée avec l'équation de Schrödinger où l'on a $n = \ell + r + 1$. Le nombre ℓ caractérise le moment cinétique, le nombre r reste le nombre radial. Mais l'unité restante à laquelle correspond une énergie, puisque l'énergie du niveau est $E_n = \frac{1}{2}nh\nu$ si ν est la fréquence du mouvement, n'est pas associée à un degré de liberté du mouvement. La même situation se retrouve encore avec le spin. En effet aux deux états de spin sont attribués les moments $j = \ell + 1/2$ ou $j = \ell - 1/2$. Si nous introduisons ces nombres dans l'expression de n nous obtenons les relations suivantes: $n = j + r + 1/2$ pour $j = \ell + 1/2$ et $n = j + r + 3/2$ pour $j = \ell - 1/2$ et les nombres $1/2$ ou $3/2$ ne se trouvent pas plus attachés à un degré de liberté du système. En fait nous savons que le spin de l'électron apparaît comme un degré de liberté interne, il semble donc naturel de supposer qu'il y a une énergie associée à ce mouvement propre. C'est ce que nous nous proposons de monter dans ce travail.

Enfin il existe une autre difficulté si l'on considère l'équation de Dirac et ses solutions. En effet les solutions de cette équation admettent les valeurs négatives de k or si j caractérise le moment cinétique total c'est à dire le moment orbital plus le moment de spin il y a lieu de considérer ses valeurs négatives au même titre que k . Par ailleurs ces valeurs négatives peuvent être retenues dans l'équation de Schrödinger car elles viennent de ce que le produit $k(k+1)$ ne change pas en prenant $k = \ell$ ou $k = -\ell - 1$. En effet ce produit est généralement écrit $\ell(\ell+1)$ dans l'étude des solutions de l'équation de Schrödinger et il y a lieu de supposer que ce qui est retenu avec l'équation de Dirac doit l'être également avec celle de Schrödinger. En fait seule l'équation de Dirac retrouve correctement les niveaux d'énergie associées au spin et c'est elle qu'il faut étudier pour tenter de mieux comprendre la notion de spin.

3. Doublets d'écran et doublets réguliers

Il existe deux types de doublets : les doublets réguliers et les doublets d'écran. Pour bien comprendre la notion de spin il apparaît nécessaire de rappeler comment ces deux types de doublets se manifestent et ce qui les distinguent. En spectroscopie X les niveaux d'énergie des électrons profonds sont très voisins de ceux d'un atome hydrogénoïde.

Ces différents niveaux sont donnés par la théorie de Dirac qui retrouve en fait l'expression de Sommerfeld. L'énergie $E_{n,k}$ d'un niveau est donnée par la relation:

$$\frac{E_{n,k}}{m_0 c^2} = \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{[p + \sqrt{k^2 - \alpha^2 Z^2}]^2} \right]^{-\frac{1}{2}} - 1 \quad (1)$$

$E_{n,k}$ est l'énergie de liaison du niveau qui s'ajoute à celle de masse, m_0 est la masse au repos de l'électron, c est la vitesse de la lumière, α est la constante de structure fine $\alpha = e^2/\hbar c$, Z est le numéro atomique de l'élément ou la charge apparente vue par l'électron, k est le nombre quantique qui caractérise le moment cinétique orbital dans le modèle de Sommerfeld mais qui dans le modèle de Dirac a, comme nous le verrons, un sens différent et peut prendre toutes valeurs entières positives ou négatives excepté la valeur zéro, si n est le nombre quantique principal, p est donné par la relation $p = n - |k|$, il remplace le nombre quantique radial r du modèle de Sommerfeld.

Sous l'angle historique il est intéressant de rappeler que presque tous les niveaux d'énergie et leur répartition en différentes couches furent découverts avant la théorie quantique. De ce fait l'usage du mot terme symbolisé par la lettre T, qui désigne la fréquence d'une raie, s'est établie avec les travaux des pionniers tels Rydberg et Ritz. Le terme est définie par la relation $T = W/h$. Aujourd'hui l'équivalence entre la fréquence et l'énergie est bien établie et le terme désigne souvent l'énergie. Pour décrire les différentes raies il est commode de développer l'expression 1 en série [1]. Ce qui donne:

$$T = \frac{R(Z - \sigma)^2}{n^2} + \frac{R\alpha^2(Z - s)^4}{n^4} \left(\frac{n}{|k|} - \frac{3}{4} \right) +, +, +, \quad (2)$$

R est la constante de Rydberg donnée par la relation $R = 2\pi^2\mu e^4/h^3$ où μ est la masse réduite de l'électron pour tenir compte de ce que celle du noyau n'a pas une masse infinie. Les nombres σ et s sont des constantes d'écran. Dans cette expression le premier terme en $1/n^2$ est le terme principal. Le deuxième terme en α^2 est le premier terme correctif caractéristique de la structure fine. L'ensemble des niveaux correspondants à une même valeur du nombre quantique principal n est désigné en spectroscopie par couche. Ces couches sont appelées K, L, M, N, O etc... pour les valeurs respectives 1, 2, 3, 4, 5, etc... du nombre n .

A l'intérieur d'une couche n il existe encore des groupes de niveaux qui se séparent bien les uns des autres car à chacun correspond un facteur d'écran σ différent. Nous les appellerons également couches. Elles sont connues sous le label "s", "p", "d" et "f". Le facteur σ caractérise pour une couche n donnée la réduction de la charge du noyau dû à la présence des électrons intérieurs à cette couche et également pour une faible contribution de celle des électrons extérieurs à cette couche. Le fait que pour une même couche n les facteurs d'écran σ des couches "s", "p", "d" et "f" soient différents montre que les électrons dans les états quantiques correspondants gravitent de manière très différente et voient en conséquence des charges apparentes différentes. La constante d'écran s traduit pour les termes correctifs la même propriété mais avec cette différence que dans ce cas les charges apparentes sont voisines.

3.1 Les doublets réguliers

Toute raie est définie par la différence de deux termes $T_1 - T_2$. Une série représente l'ensemble des raies dont le premier terme correspond au niveau sur lequel retombe l'électron excité, il est appelé le terme fixe, le deuxième terme qui varie avec la valeur du nombre quantique principal n est le terme courant. C'est ce terme qui a donné son nom à la série soit "s" pour sharp, "p" pour principal, "d" pour diffuse et "f" pour fondamental. Avant la découverte de l'état quantique il avait été reconnu que les termes "s" sont tous simples alors que les termes p, d ou f sont doubles et donnent au série l'aspect de doublets formés de deux raies rapprochées, en particulier lorsque la transition a lieu entre un niveau "s" et un niveau "p", seul le niveau "p" est double. Ce sont ces raies qui forment les doublets réguliers appelés également alcalins ou relativistes.

Les séries sharp et principale des métaux alcalins sont de bons exemples de ces séries:

$$\begin{aligned}\nu_n^s &= R/(1 + P)^2 - R/(n + S)^2 \\ \nu_n^p &= R/(1 + S)^2 - R/(n + P)^2\end{aligned}$$

Les nombres S et P sont deux constantes. Les transitions ont lieu entre une couche s et une couche p comme seule la couche p est double au lieu d'observer une seule raie pour ν_n^s et ν_n^p ce sont deux raies très voisines l'une de l'autre qui sont observées.

Compte tenu des problèmes d'écran l'étude de l'équation de Dirac nous montre que l'existence des doublets réguliers vient de ce que le

produit $k(k+1)$ reste le même pour les deux valeurs $k = \ell$ et $k = -\ell - 1$. En remplaçant dans les expressions (1) ou (2), k par ces deux valeurs et en remplaçant également p par celles qui lui correspondent on vérifie que les deux niveaux sont très proches puisque α la constante de structure fine est un terme petit. De plus lorsque $\ell = 0$ seul la valeur $k = -1$ est autorisée on retrouve donc bien le caractère simple des états “s” et doubles des autres états. Ainsi la notion de couche “s”, “p”, “d” et “f” vient des valeurs possibles de ℓ qui sont respectivement 0, 1, 2 et 3. Il est important ici de prendre en compte que ce sont les deux valeurs de k des états “p”, “d” et “f” qui caractérise les deux types de spin puisque l’hypothèse du spin a été proposée pour expliquer les doublets réguliers [6 et 7]. Ce point montre comme nous l’avons déjà souligné [8] que les états “s” correspondent à un seul type de spin contrairement la conception développée à partir du modèle de Schrödinger.

3.2 Les doublets d’écran

A côté des doublets réguliers il existe des doublets d’écran dont il importe de rappeler la nature pour les distinguer des premiers. Ce sont les effets d’écran des couches “s”, “p”, “d” et “f” qui sont à l’origine de ces doublets. Considérons par exemple la couche L pour laquelle $n = 2$. Les différents niveaux sont au nombre de trois soit: L_I avec $k = -1$, L_{II} avec $k = 1$ et L_{III} avec $k = -2$. Le niveau L_I correspond aux états “2s” et les niveaux L_{II} et L_{III} aux états “2p”. Ces deux derniers niveaux sont très proches ils caractérisent les doublets réguliers; pour ces deux niveaux le terme principal dans l’expression 2 est le même. Pour les atomes lourds en spectroscopie X les niveaux L_I et L_{II} sont bien séparés, ils correspondent à des facteurs d’écran σ différents qui font varier le terme principal. Pour la suite des éléments qui vont du césium à l’uranium soit pour un numéro atomique allant de 55 à 92 la différence:

$$\sqrt{\frac{L_I}{R}} - \sqrt{\frac{L_{II}}{R}} = (Z - \sigma_1) - (Z - \sigma_2)$$

reste sensiblement constante ce qui montre qu’en première approximation la différence $\sigma_1 - \sigma_2$ garde la même valeur [20]. En éliminant dans L_I et L_{II} les termes qui ne dépendent pas de σ on trouve que cette différence est réellement constante d’où la notion de doublet d’écran qui dans son essence est différente de celle de doublets réguliers.

4. Les doublets réguliers, la fonction d'onde et l'action

L'existence des doublets réguliers, qui correspondent à de faibles écarts d'énergie, montre que les états quantiques qui leur donnent naissance correspondent à des électrons qui gravitent sur des trajectoires très semblables. C'est ce point qui a mis en difficulté l'interprétation de la structure fine de Sommerfeld qui aboutissait à l'expression (1) mais uniquement avec des valeurs positives de k . La difficulté est la suivante: pour deux valeurs de k différentes mais positives il y a bien deux niveaux différents très proches si la charge effective $Z - \sigma$ reste la même. Or avec des k positifs différents nous avons des ellipticités différentes donc des facteurs d'écran différents. La théorie de Dirac donne le même résultat que le modèle de Sommerfeld mais avec des valeurs positives et négatives de k . Il reste toutefois à comprendre le sens physique du signe de k et également à montrer que les deux valeurs $k = \ell$ et $k = -\ell - 1$ qui donne un doublet correspondent à des propriétés radiales très voisines. Il y a en effet un point à éclaircir car aux deux valeurs ℓ et $-\ell - 1$ de k correspondent deux valeurs de p différentes puisque $p = n - |k|$. Or p semble a priori être l'équivalent dans le modèle de Dirac du nombre quantique radial de Sommerfeld $r = n - k$ et justement pour une même valeur de n dans ce modèle quand r a des valeurs différentes les facteurs d'écran sont différents. Cette hypothèse de facteurs d'écran différents suivant l'ellipticité, bien vérifiée en spectroscopie X, est basée sur les propriétés spatiales de la trajectoire c'est à dire celle d'une courbe fermée ou presque fermée, qui sont différentes de celles du champ électrique qui a la symétrie sphérique. L'étude des propriétés d'espace de la fonction d'onde Ψ montre qu'elle a bien les propriétés de symétrie du champ électrique. Ces propriétés lui sont d'ailleurs toujours attribuées par analogie avec lui. En procédant ainsi nous donnons à la fonction d'onde les propriétés de l'action. C'est ce point essentiel mais rester inaperçu qui fait aujourd'hui obstacle à l'interprétation de la fonction d'onde. Nous allons étudier en détail ces propriétés d'espace de la fonction d'onde pour bien les caractériser, nous donnerons une description plus détaillée de l'électron dans le paragraphe "L'espace, l'électron et l'action".

4.1 Les propriétés angulaires de la fonction d'onde et l'action

Pour éclaircir cette question il nous faut étudier les fonctions d'onde caractéristiques des doublets c'est à dire des deux types de spins. En nous référant à l'étude faite par de Broglie [21] ces fonctions avec leur quatre composantes se décrivent ainsi:

$$\begin{aligned} \text{Type I :} & & k = -\ell - 1 & & p = r \\ \psi_1 = iF_+ Y_{\ell+1}^m & ; & \psi_2 = -iF_+ Y_{\ell+1}^{m-1} \\ \psi_3 = (\ell - m + 1)G_+ Y_\ell^m & ; & \psi_4 = (\ell + m)G_+ Y_\ell^{m-1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Type II :} & & k = \ell & & p = r + 1 \\ \psi_1 = i(\ell - m)F_- Y_{\ell-1}^m & ; & \psi_2 = -i(\ell + m - 1)F_- Y_{\ell-1}^{m-1} \\ \psi_3 = G_- Y_\ell^m & ; & \psi_4 = -G_- Y_\ell^{m-1} \end{aligned}$$

Les fonctions ψ_1 et ψ_2 sont les petites composantes et les fonctions ψ_3 et ψ_4 les grandes cela pour les deux types. Cette distinction vient de ce que les fonctions radiales F sont beaucoup plus petites que les deux fonctions radiales G . Nous remarquons alors que les fonctions angulaires c'est à dire les harmoniques sphériques des grandes composantes ψ_3 et ψ_4 sont les même pour les deux types. Si nous supposons que la fonction d'onde est le reflet de l'action agissant le long de la trajectoire ce point traduit le fait que l'action associée au moment cinétique orbital est la même pour les deux types de solutions. Le nombre quantique ℓ qui le caractérise est différent de la valeur absolue du nombre quantique k pour les solution du type I . C'est un des points qui conduit à soupçonner que les nombres quantiques associés à la fonction d'onde caractérisent l'action et non pas les différents degrés de liberté du mouvement. Les fonctions radiales qui caractérisent les différentes composantes de la fonction d'onde, montrent un aspect semblable.

4.2 Les propriétés radiales de la fonction d'onde et l'action

Il nous faut maintenant étudier les deux fonctions radiales qui caractérisent les états quantiques correspondants des deux états de spins. Le nombre $p = n - |k|$ est égal au degré du polynôme g qui entre dans ces fonctions. Considérons ce polynôme g qui caractérise les grandes composantes. Nous avons:

$$g = e^{-x} x^\gamma (b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + \dots + b_p x^p) \text{ avec } \gamma^2 = k^2 - \alpha^2 \quad (3)$$

$$\begin{array}{lll} \text{pour } k = \ell & \text{lorsque } \alpha \rightarrow 0 & \gamma \rightarrow \ell \\ \text{pour } k = -\ell - 1 & \text{lorsque } \alpha \rightarrow 0 & \gamma \rightarrow \ell + 1 \end{array}$$

L'étude du comportement de g lorsque $\alpha \rightarrow 0$ c'est à dire lorsque la vitesse de la lumière tend vers l'infini puisque $\alpha = e^2/\hbar c$ montre que pour $k = \ell$, $b_0 \rightarrow 0$ [13]. Le terme b_0 apparaît comme un terme correctif. On peut écrire g pour $k = \ell$ comme suit:

$$g_{(k=\ell)} = e^{-x} x^{\gamma+1} (b_1 + b_2 x^{2-1} + \dots + b_p x^{p-1}) + b_0 e^{-x} x^{\gamma} \quad (4)$$

Ainsi au terme correctif près $g_{(k=\ell)}$ a un polynôme de même degré que $g_{(k=-\ell-1)}$. Le même raisonnement tient pour la fonction f qui correspond à $k = \ell$. Par ailleurs l'étude complète montre que ces deux fonctions g tendent vers une même fonction y qui est la partie radiale des fonctions d'onde solutions de l'équation de Schrödinger [13]. Par suite les états quantiques des deux sous-couches d'une même couche qui correspondent aux deux niveaux doublets ont bien des distributions radiales très proches. Il faut donc considérer que l'énergie associée au mouvement radial est caractérisée par $r = n - \ell - 1$. Pour les solutions du type II cela vient de ce que $p = r + 1$ avec $k = \ell$, pour celles du type I cela vient de ce que $|k| = \ell + 1$ avec $p = r$. Ainsi en admettant que le degré du polynôme caractérise l'énergie associée au mouvement radial il y a une unité de nombre quantique qui ne semble pas associée à un degré de liberté. Cette unité est prise soit sur les unités angulaires k pour $k = -\ell - 1$ (type I), soit sur les unités radiales pour $p = r + 1$ (type II). C'est un des points qui fait soupçonner que les nombres quantiques associés à la fonction d'onde caractérisent l'action et non pas l'énergie associée aux différents degrés de liberté. Il nous faut maintenant comprendre comment deux états caractérisés par des niveaux d'énergie très proches peuvent être obtenus par des fonctions d'onde qui diffèrent par leur caractéristiques radiales et angulaires. C'est ce que nous tenterons de faire avec le modèle d'électron fluide au paragraphe 6. Nous avons maintenant à rappeler les propriétés magnétiques des doublets réguliers.

5. Les propriétés magnétiques des doublets

L'étude du nombre de solutions de l'équation de Dirac montre que pour chaque valeur des nombres quantiques n et k il existe $2|k|$ solutions différentes. Ces états quantiques sont caractérisés par le nombre quantique magnétique défini par la relation:

$$u = -\left(m - \frac{1}{2}\right) \quad (5)$$

où m est le nombre algébrique qui définit les harmoniques sphériques Y_l^m dans ψ_3 qui caractérisent l'état quantique. Les valeurs possibles de m sont définies par la relation:

$$1 - |k| \leq m \leq |k| \quad (6)$$

ce qui conduit pour u aux relations d'ordre suivantes:

$$\begin{aligned} -\left(\ell + \frac{1}{2}\right) \leq u \leq \ell + \frac{1}{2} & \quad \text{pour } k = -\ell - 1 \\ -\left(\ell - \frac{1}{2}\right) \leq u \leq \ell - \frac{1}{2} & \quad \text{pour } k = \ell \end{aligned} \quad (7)$$

Il ressort de ces relations que le maximum de u correspond au nombre quantique j .

Au nombre quantique u correspond le moment magnétique μ_e de l'état:

$$\mu_e = gu\mu_B \quad \text{avec} \quad g = \frac{k}{k + \frac{1}{2}} \quad (8)$$

Dans cette expression g est le facteur de décomposition spectral ou facteur de Landé. Tous ces nombres caractérisent les solutions de l'équation de Dirac, on les retrouve sur le plan expérimental dans l'étude de l'effet Zeeman et dans le calcul du moment magnétique ou paramagnétiques des atomes [8 et 9]. En particulier il est important de souligner que le nombre quantique j est mis en évidence sur le plan expérimental uniquement au travers du maximum de u qui lui-même n'est accessible que dans des expériences magnétiques c'est à dire qu'en présence d'un champ magnétique. C'est un point important sur lequel nous reviendrons car j représente le moment cinétique total seulement pour $k = -\ell - 1$.

6. L'espace, l'électron et l'action

Pour comprendre l'existence de l'état quantique nous avons déjà proposé de considérer l'électron comme une masse fluide [13-15]. Cette masse fluide nous nous la représentons constituée d'éléments de volume beaucoup plus petit que celui de l'électron lui-même que nous appellerons grains, tous d'une même nature et qui sont porteurs du mouvement. Nous pensons en effet que le champ et l'électron sont constitués d'une même matière et que lors du mouvement de l'électron dans le champ il y a un échange continu entre les grains du champ et ceux

de l'électron. L'émission ou l'absorption de photon lors d'une transition électronique suggère fortement cette conception de l'électron dans le champ électromagnétique. Par ailleurs dans l'étude de la liaison nous avons montré qu'il y avait lieu de considérer la trajectoire de l'électron. Cette trajectoire donne à l'atome de métal alcalin un caractère dipolaire électrique permettant la liaison entre deux atomes [14,15,22 et 23]. De plus nous savons qu'il n'y a pas de propriétés magnétiques sans mouvement de charges électriques et comme les moments magnétiques sont attachés à l'atome, il y a là une preuve de l'existence des orbites électroniques. Considérons alors l'électron le long de sa trajectoire, il absorbe de l'énergie, mais comme il ne peut pas accumuler continuellement de l'énergie il réémet celle-ci au cours du temps de manière à ce que sa trajectoire soit stable. C'est une manière d'exprimer le principe de moindre action.

6.1 La fonction d'onde

Cette hypothèse d'échanges d'énergie, par l'intermédiaire des grains, entre le champ et l'électron permet de se représenter la fonction d'onde Ψ comme l'action agissant sur l'électron le long de sa trajectoire. Dans cette conception l'énergie E de l'état quantique doit être échangée sur une distance égale à sa longueur d'onde λ et pendant une durée égale à la période T associée à λ de telle sorte que si p est la quantité de mouvement associée, l'action soit $p\lambda = ET = h$. Dans ces conditions la fonction d'onde avec ses quatre composantes représente la quantité d'énergie échangée entre l'électron et le champs au cours du temps et le long de la trajectoire. Mais ces échanges perturbent toute la matière fluide de l'électron. Pour bien se représenter ces échanges il est utile de les considérer sur un petit intervalle de temps ou de trajectoire c'est à dire sur un élément différentiel d'espace-temps. Il suffit pour cela de multiplier Ψ par un nombre arbitrairement petit de telle sorte que les contributions des composantes de Ψ représentent les perturbations qui agissent sur l'électron durant sur un court intervalle de temps et d'espace. Les opérateurs différentiels appliqués aux composantes de la fonction d'onde donnent alors les quantités de mouvements qui agissent le long d'un élément de longueur et de temps. En effet si la fonction d'onde est l'action associée au mouvement sur un court intervalle de temps on a par exemple $(\partial\Psi/\partial x)dx = p_x dx$. Cette approche permet par suite de comprendre l'équation de Dirac. Cette équation, c'est à dire l'ensemble des quatre équations simultanées qu'elle représente, traduit la manière dont Ψ modifie, sur un court intervalle de temps, les différentes composantes

de la quantité de mouvement et comment ces modifications doivent être équilibrées dans le temps par une émission ou une absorption d'énergie pour que l'état quantique correspondant soit stable. C'est cette propriété de l'action sur les quantités de mouvement qui rend nécessaire l'algèbre des matrices de l'équation de Dirac. L'étude des solutions de l'équation de Dirac montre en effet que c'est l'existence de quatre composantes de la fonction d'onde qui permet que les perturbations des quantités de mouvement soient constamment équilibrées de manière à conserver l'énergie du mouvement [16].

6.2 Le mouvement et le spin

Considérons l'électron masse fluide et son volume. L'apparition dans les phénomènes magnétiques de nombres quantiques demi-entiers a conduit Uhlenbeck et Goudsmit à imaginer que l'électron possède une rotation propre ou spin et que cette propriété est caractérisée par un moment cinétique demi-entier $\frac{1}{2}\hbar$. Pour nous représenter cette rotation propre il est utile de considérer un référentiel Re attaché au centre de gravité γ de l'électron dont les axes restent parallèles à ceux du référentiel atomique Ra attaché au potentiel central O qui sert à décrire la fonction d'onde et le mouvement de l'électron.

La question qui se pose est alors la suivante: comment peut-on dans l'électron fluide décrit dans Re distinguer ce qui donne dans Ra le moment cinétique propre du moment cinétique orbital? Puisque l'électron possède un moment cinétique orbital dans Ra il possède également dans Re un mouvement de rotation autour d'un axe. Il n'y a pas lieu de considérer une autre rotation qui serait spécifique de la propriété spin. Du fait du caractère fluide de l'électron il y a quantification simultanée de l'ensemble des mouvements. La quantification impose que le mouvement de rotation de l'électron soit lui-même quantifié. Comme nous l'avons souligné il y a une unité de quantification qui n'est pas attaché au mouvement radial ou de rotation orbitale. Il y a donc lieu de supposer que c'est cette unité qui est attachée à la rotation de l'électron dans Ra c'est à dire au spin.

C'est cette unité dont l'énergie associée donne à l'électron son mouvement de rotation. Son caractère fluide fait que seul se conserve le moment cinétique $\frac{1}{2}\hbar$ caractéristique du spin. L'examen des deux types de solutions nous a appris que l'unité de quantification associé au spin est soit prise sur les unités de la partie radiale soit sur celles de la partie angulaire de la fonction d'onde. Les deux types de spin sont caractéristiques d'états qui diffèrent par la manière dont l'énergie de rotation est communiquée à l'électron. Ils ne diffèrent pas par la manière

dont l'électron tourne sur sa trajectoire. Ainsi le point fondamental apporté par l'hypothèse du spin est d'avoir introduit la notion de rotation de l'électron. Mais cette rotation avec un électron fluide est la seule qui puisse exister et l'image d'une orientation plus ou moins par rapport à une direction donnée ne correspond pas à une réalité physique.

L'interprétation de la fonction d'onde comme la quantité d'action échangée au court du temps le long de la trajectoire permet alors de comprendre que l'énergie associée au mouvement de spin soit prise soit sur la contribution radiale soit sur la contribution orbitale. En effet le champ à la symétrie sphérique de ce fait l'action peut être représentée par le produit d'une fonction du rayon vecteur r et d'une fonction sphérique de Laplace c'est à dire des seules coordonnées angulaires θ et φ . Par suite toute quantification de l'action, donc de la fonction d'onde, possède la symétrie du champ et le spin se trouve attaché aux variables radiales ou angulaires de l'action. C'est pour cette raison que les corrections relativistes sont caractérisées dans les expressions 1 et 2 par les nombres quantiques $|k|$ et p mais pas par ℓ et r .

Ainsi s'éclaire la différence entre les nombres quantiques k et p d'une part et ℓ et r de l'autre. Les nombres k et p caractérisent les unités de quantification angulaire et radiale de l'action tandis que r caractérise le nombre d'unités de quantification du mouvement radial et $(\ell+1)$ celui du mouvement de rotation. Le chiffre un dans ces unités de quantification attachées au mouvement de rotation représente celle qui est attachée au spin. Entre ces nombres nous avons la relation $p + |k| = r + \ell + 1 = n$. Soit alors $E_{n,k}$ l'énergie de l'état et ν la fréquence correspondante. Cette fréquence est donnée par la relation $E_{n,k} = \frac{1}{2}nh\nu$. L'énergie associée au mouvement radial est donnée par la relation $\epsilon_r = \frac{1}{2}r\hbar\nu$ et celle associée au mouvement de rotation par $\epsilon_l = \frac{1}{2}(\ell + 1)h\nu$. Cette expression de l'énergie de rotation est à rapprocher du fait que seul se conserve le moment cinétique total. Comme pour les deux états de spin l'énergie de rotation est la même il y a lieu de considérer que le moment cinétique total est le même. En effet les nombres $j = \ell+1/2$ et $j = \ell-1/2$ caractérisent la valeur maximum en magnéton de Bohr du moment magnétique observable, suivant les valeurs de k , mais ne nous disent rien sur le moment cinétique total et l'énergie correspondante. Ce point comme nous allons le voir avec l'étude des moments magnétiques vient également du rôle de l'action sur le mouvement. Précisons comment le moment de spin $\frac{1}{2}\hbar$ modifie le moment orbital. Lorsque l'énergie associée au spin est prise sur l'action angulaire le moment cinétique $|k|\hbar$ susceptible de lui être

associée est diminué du moment de spin d'où le signe négatif de k . Le moment de spin est par contre ajouté au moment orbital quand il vient de l'action radiale. Le moment cinétique total M observable dans Ra est par suite $M = |k + \frac{1}{2}|\hbar$ en respectant le signe algébrique de k , soit $M = (\ell + 1/2)\hbar$ pour les deux états de spin.

6.3 Les moments magnétiques

Ces remarques sur le moment cinétique total et l'énergie associée sont utiles pour comprendre l'origine du facteur g qui affecte les valeurs observables des moments magnétiques. Nous savons qu'un électron sur une orbite électronique classique dont le moment cinétique M a pour projection $u\hbar$ dans la direction du champ magnétique H possède un moment magnétique μ_e donnée par la relation:

$$\mu_e = u\mu_B \quad \text{avec} \quad \mu_B = \hbar \frac{e}{2mc} \quad (9)$$

Pour établir cette relation on utilise l'expression classique donnant le moment d'un anneau de courant:

$$\mu_e = IS/c \quad (10)$$

où I est l'intensité circulant dans l'anneau et S la surface de l'anneau. Pour un électron sur son orbite avec une période de révolution T on a $I = e/T$. Par ailleurs la loi des aires valable aussi bien en mécanique classique que relativiste exprimée sur une période, donne la relation $2mS = T_M M$. Pour $M = \hbar$ nous retrouvons la relation (9) à condition que $T = T_M$. Mais le moment cinétique total $M = |k + \frac{1}{2}|\hbar$ ne correspond pas à l'action angulaire qui est égale à $|k|\hbar$. Par suite les périodes T et T_M sont différentes. La période T_M est en fait fictive et on a la relation:

$$2mS = T|k|\hbar = T_M |k + \frac{1}{2}|\hbar \quad (11)$$

$$T_M = gT \quad \text{avec} \quad g = \frac{k}{k + \frac{1}{2}} \quad (12)$$

Il en résulte que le moment magnétique correspondant à la projection u du moment cinétique total $M = |k + \frac{1}{2}|\hbar$ est donné par la relation:

$$\mu_e = gu\mu_B \quad (13)$$

Finalement cette distinction entre l'action comme source des propriétés et l'énergie associée aux divers degrés de liberté permet de comprendre les valeurs extrêmes du nombre quantique u et dont les deux maxima correspondent aux deux valeurs de j . En effet le maximum de u correspond à la valeur maximum de la projection du moment cinétique total sur Oz il ne saurait être supérieur au moment donné par la relation (11) compte tenu de ce que la période du mouvement est T et non pas T_M .

7. Conclusion

Pour mieux comprendre la notion de spin nous nous sommes attachés à l'interprétation du facteur g qui est caractéristique de chaque type de spin dans la théorie de Dirac. Pour mener à bien ce travail nous avons décrit l'électron comme une masse fluide et proposer une interprétation de la fonction d'onde. Elle apparaît comme l'action reçue sur une longueur d'onde, c'est à dire l'énergie échangée pendant la période correspondante entre l'électron et le champ électrique. Cette conception de l'électron laisse entrevoir la possibilité de décrire le mouvement de l'électron comme guidé par sa fonction d'onde [16].

Références

- [1] White H.E., "Introduction to atomic spectra" McGraw-Hill Book Company, Inc.1934
- [2] Bohr N., Phil. Mag., **26**, 1-25, et 476-501, 1913
- [3] Wilson W., Phil. Mag., **29**, 795, 1915
- [4] Sommerfeld A., Ann. Phys. 51, 1, 1916
- [5] Schrödinger E., Ann. der Phys., **79**, 361, 489, 1926; Phys. Rev., **28**, 1049-70, 1926; "Mémoire sur la mécanique ondulatoire", traduit par Al; Proca, Librairie Félix Alcan, Paris, 1933
- [6] Uhlenbek G.E. and Goudsmit S., Naturwissenschaften **13**, 953, 1925
- [7] Uhlenbek G.E. and Goudsmit S., Nature, **117**, 264, 1926
- [8] Oudet X. et Lochak G., J. Mag. Mag. Mat.65, 99-122, 1987
- [9] Oudet X., J. Mag. Mag. Mat., **98**, 298-332, 1991
- [10] de Broglie L., Thèse, Paris, 25 novembre 1924; Ann. de Phys. **10**, 3, 1925; Réédité chez Masson, 1963
- [11] Dirac P.A.M., **A117**, 610-624, 1928
- [12] Dirac P.A.M., **A118**, 351-361, 1928
- [13] Oudet X., Ann.Fondation Louis de Broglie, **6**, 127-164, 1981
- [14] Oudet X., Ann.Fondation Louis de Broglie, **17**, 315-345, 1992; English version available from the author on request.
- [15] Publié dans "Courants, amers, écueils en microphysique", 299-310, 1994; édité par Christian Cormier-Delanoue, Georges Lochak et Pierre Lochak, Bibliothèque des Annales de la Fondation Louis de Broglie, 23 quai de Conti, 75006 Paris, France.

- [16] Oudet X., J. Appl. Phys. 1996.
- [17] Oudet X. and Lochak G., Sagamore XI, "Charge, spin and momentum densities", August 7-12 1994, Brest France, Extended abstract 73,74
- [18] Sommerfeld A., "La constitution de l'atome et les raies spectrales", traduction de la 3ème édition allemande, par Bellenot H., Librairie scientifique Albert Blanchard, Paris 1923. Les nombres quantiques internes sont définis page 439 et suivantes.
- [19] Landé A., Z. Phys., **5**, 231-241, 1921
- [20] White H.E., ref. 1, pages 319-320.
- [21] L. de Broglie, L'Electron Magnétique (théorie de Dirac), (Hermann, Paris 1934).
- [22] Proceeding of ICMAS-93, 13-14 décembre 1993, pages 159-164.
- [23] Proceeding of the 3èmes Journées études des 16 et 17 novembre 1993, Caen, France.

(Manuscrit reçu le 5 décembre 1994)