

**LA THÉORIE**  
**DES**  
**PARTICULES DE SPIN  $1/2$**   
**(ÉLECTRONS DE DIRAC)**

## OUVRAGES DU MÊME AUTEUR

---

**La Mécanique ondulatoire des systèmes de corpuscules.** (*Collection de Physique mathématique*, publiée sous la direction de É. BOREL, FASCICULE V.) In-8 (16-25) de vi-224 pages; 1950.

**Problèmes de propagations guidées des ondes électromagnétiques.**  
In-8 (16-25) de vi-114 pages, avec 14 figures.

**Théorie générale des particules à spin.** *Méthode de fusion.* In-8 (16-25) de 210 pages; 1943.

**Mécanique ondulatoire du photon et théorie quantique des champs.** In-8 (16-25) de vi-208 pages; 1949.

## OUVRAGE DE MM. MAURICE et LOUIS DE BROGLIE

**Introduction à la Physique des rayons X et des rayons gamma.**  
In-8 (16-25) de 201 pages, avec 27 figures dans le texte et 11 planches hors texte.

---

**LA THÉORIE**  
DES  
**PARTICULES DE SPIN 1/2**  
(ÉLECTRONS DE DIRAC)

PAR

**Louis de BROGLIE**

SECRÉTAIRE PERPÉTUEL DE L'ACADÉMIE DES SCIENCES



PARIS

**GAUTHIER-VILLARS, IMPRIMEUR-ÉDITEUR**

LIBRAIRE DU BUREAU DES LONGITUDES, DE L'ÉCOLE POLYTECHNIQUE

Quai des Grands-Augustins, 55

—  
1952

Copyright by Gauthier-Villars, 1952.

Tous droits de traduction, de reproduction et d'adaptation réservés  
pour tous pays.

## PRÉFACE

---

Dans le présent volume, j'ai exposé la théorie des particules de spin  $\frac{1}{2}$  (électrons de Dirac) en comparant mes points de vue sur quelques grands problèmes à ceux que d'autres auteurs ont indiqués dans des mémoires récents.

J'ai commencé par rappeler les principes généraux de la Mécanique ondulatoire et de son interprétation physique. Puis j'ai introduit la notion de spin d'une particule et je l'ai examinée sous divers aspects. J'ai fait ensuite un exposé de la théorie de l'électron considéré comme un corpuscule de spin  $\frac{1}{2}$  (théorie de Dirac).

Je n'insiste pas ici sur les phénomènes qui en ont reçu une interprétation satisfaisante alors qu'ils étaient rebelles à toute explication complète par les anciennes théories; pour ces questions, je renvoie à mon livre "L'électron Magnétique"<sup>(1)</sup>

Par contre, j'ai analysé une dynamique relativiste des fluides à spin et des particules à spin due à M. Weyssenhoff pour montrer sa liaison avec des conceptions exposées antérieurement.

La dernière partie de cet ouvrage est consacrée à la possibilité de la mesure du spin de l'électron : la validité des arguments de Bohr tendant à prouver qu'il est impossible de mesurer directement le spin de l'électron me semble en général limitée au cas des vitesses faibles par rapport à celle de la lumière. Enfin l'opinion de M. Pauli, selon laquelle la mécanique ponctuelle d'un électron de Dirac est identique à la mécanique ponctuelle d'un électron sans spin, est en contradiction avec mes conclusions. Et sur ce point, dans l'état actuel des recherches, un examen, même approfondi, ne permet pas encore de se prononcer.

La présentation que l'on a donnée à ce livre a été volontairement choisie pour conserver à ces réflexions leur caractère d'actualité.

Je tiens à remercier bien vivement M. Michel Cazin de l'aide très importante qu'il m'a apportée pour la publication du présent ouvrage.

Louis de Broglie.

(1) "L'électron Magnétique" (HERMANN, Paris, 1934).

## CHAPITRE I

# LA MÉCANIQUE ONDULATOIRE NON RELATIVISTE A UNE FONCTION D'ONDE

---

### I. IDÉES ET ÉQUATIONS GÉNÉRALES DE LA MÉCANIQUE ONDULATOIRE

L'idée qui a servi de point de départ à la Mécanique ondulatoire a été la suivante : puisque pour la lumière, il existe un aspect corpusculaire et un aspect ondulatoire reliés entre eux par la relation :

$$\text{énergie} = h \times \text{fréquence}$$

où figure la constante  $h$  des quanta de Planck, il est naturel de supposer que pour la matière aussi, il existe un aspect corpusculaire et un aspect ondulatoire, ce dernier longtemps méconnu. Ces deux aspects doivent être reliés par des relations générales où figure la constante de Planck et doivent contenir comme cas particuliers les relations applicables à la lumière.

Pour développer cette idée, il faut chercher à associer un élément périodique au concept de corpuscule. Imaginons un corpuscule qui se meut d'un mouvement rectiligne et uniforme dans une certaine direction en l'absence de tout champ. Nous fixons uniquement notre attention sur l'état du mouvement du corpuscule, abstraction faite de sa position dans l'espace. Ce mouvement s'effectue dans une certaine direction que nous prendrons comme axe des  $z$  et il est défini par les deux grandeurs "énergie" et "quantité de mouvement" dont les expressions relativistes en fonction de la masse propre  $m_0$  du corpuscule et de sa vitesse  $v = \beta c$  sont données par les formules :

$$W = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1-\beta^2}} \quad \vec{p} = \frac{m_0 \vec{v}}{\sqrt{1-\beta^2}}$$

d'où l'on tire la relation :

$$|\vec{p}| = p = \frac{Wv}{c^2}$$

L'état de mouvement se trouve ainsi défini dans un certain système de référence Galiléen, pour un observateur A qui emploie des coordonnées  $x, y, z, t$ .

Soit maintenant un autre observateur B qui possède par rapport au premier la vitesse  $\vec{v}$  dans la direction  $oz$ , autrement dit qui est lié au mouvement du corpuscule. Nous pouvons supposer que B a choisi un axe  $O_0 z_0$  qui glisse sur  $oz$  et des axes  $O_0 x_0$  et  $O_0 y_0$  parallèles à  $ox$  et à  $oy$ . Cela étant, les coordonnées  $x_0, y_0, z_0, t_0$  employées par B sont liées aux coordonnées  $x, y, z, t$  de l'observateur A par les formules de la transformation de Lorentz :

$$x = x_0 \quad y = y_0 \quad z_0 = \frac{z - vt}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad t_0 = \frac{t - \frac{\beta}{c} z}{\sqrt{1 - \beta^2}}$$

Or pour l'observateur B, la vitesse du corpuscule est nulle: il pose donc comme valeurs de l'énergie et de la quantité de mouvement :

$$W_0 = m_0 c^2 \quad \vec{p}_0 = 0$$

Suivant notre idée de base, nous devons maintenant chercher à introduire un élément périodique et nous tenterons de définir l'élément périodique souhaité sous la forme d'une onde stationnaire dans le système propre du corpuscule (système de l'observateur B). Nous poserons donc :

$$\psi_0 = A e^{2\pi i \nu_0 t_0}$$

et nous supposerons A constant;  $\nu_0$  est la fréquence propre de l'onde et doit dépendre de la nature du corpuscule envisagé. Quelle valeur devons nous donner à cette constante? Nous devons évidemment chercher à la définir à partir d'une valeur non nulle qui caractérise le corpuscule dans son système propre et nous n'avons à notre disposition comme telle grandeur que l'énergie  $W_0$ . Etant donné le rôle joué par la constante des quanta dans toutes les théories quantiques, il est naturel de poser :

$$\nu_0 = \frac{W_0}{h} = \frac{m_0 c^2}{h}$$

analogue à la relation d'Einstein pour les photons.

Comment va se manifester pour l'observateur A l'élément périodique que nous venons de définir pour l'observateur B? En supposant, ce qui est l'hypothèse la plus simple, que  $\psi$  soit un invariant relativiste, il suffira pour obtenir l'expression de l'onde pour A de substituer dans son expression pour B la quatrième équation de la transformation de Lorentz, d'où :

$$\psi(x, y, z, t) = A e^{2\pi i \nu \left(t - \frac{z}{v}\right)}$$

avec :

$$\nu = \frac{\nu_0}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad , \quad v = \frac{c}{\beta} = \frac{c^2}{v}$$

Ainsi pour l'observateur A, les phases de l'élément périodique introduit sont réparties comme les phases d'une onde plane monochromatique dont la fréquence  $\nu$  et la vitesse de propagation de la phase  $V$  ont les valeurs indiquées.

En comparant les équations précédentes, on trouve  $W = h\nu$ , relation qui sera évidemment valable dans tous les systèmes Galiléens puisque rien ne distingue l'observateur A des autres observateurs Galiléens. Pour la longueur d'onde de l'onde  $\psi$  d'après la définition usuelle, on trouve :

$$\lambda = \frac{V}{\nu} = \frac{c^2}{V} \cdot \frac{h}{W} = \frac{h}{p}$$

formule fondamentale qui, pour les faibles vitesses, prend la forme approchée :

$$\lambda = \frac{h}{mV}$$

vérifiée avec une grande précision par les expériences de diffraction par les cristaux des électrons et autres particules (y compris les neutrons) ainsi que par les expériences de Börsch sur la diffraction des électrons par le bord d'un écran.

Pour une particule de vitesse très voisine de  $c$ , on trouve

$$v = V = c \quad W = h\nu \quad p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h\nu}{c}$$

On retrouve ainsi les formules fondamentales de la théorie des photons (quanta de Lumière d'Einstein).

Nous pouvons maintenant écrire la forme du  $\psi$  dans le système A :

$$\psi = Ae^{\frac{2\pi i}{h}(Wt - p_z z)}$$

et plus généralement, si les axes rectangulaires ont une orientation quelconque,

$$\psi(x, y, z, t) = Ae^{\frac{2\pi i}{h}(Wt - p_x x - p_y y - p_z z)} = Ae^{\frac{2\pi i}{h}(Wt - \vec{p} \cdot \vec{r})}$$

On voit donc qu'au facteur  $\frac{2\pi}{h}$  près la phase de l'onde est égale à l'action Hamiltonienne du corpuscule. En constatant cette proportionnalité entre l'action Hamiltonienne du corpuscule et la phase de l'onde qui lui est associée, on s'aperçoit que le principe d'action stationnaire valable pour la dynamique des corpuscules doit n'être qu'une traduction du principe de Fermat valable pour l'onde associée. Mais la théorie ondulatoire nous apprend que le principe de Fermat est valable seulement dans le domaine où l'optique géométrique est utilisable et perd sa valeur dans le domaine de l'optique physique proprement dite. On arrive ainsi à l'idée fondamentale que l'ancienne Mécanique (aussi bien sous la forme relativiste que sous sa forme Newtonienne classique) n'est qu'une approximation ayant le même domaine de validité que l'optique géométrique. Dès lors, on est

amené à concevoir la nécessité de construire une nouvelle Mécanique qui serait à la Mécanique ancienne ce qu'est l'Optique ondulatoire à l'Optique géométrique. C'est cette idée que nous allons développer.

## 2. ÉQUATIONS D'ONDES DE LA MÉCANIQUE ONDULATOIRE

Nous sommes parvenus à l'idée qu'il faut associer à un corpuscule une onde représentée par une fonction  $\psi(x,y,z,t)$  qui sera généralement différente de zéro dans une région étendue de l'espace. En d'autres termes, nous adjoignons à l'idée de corpuscule celle d'un champ au sens de la physique du champ, le champ  $\psi$ .

La fonction d'onde  $\psi$  devra satisfaire à une certaine "équation de propagation" qui va remplacer les équations classiques de Newton et servir de base à la nouvelle Mécanique. Nous allons chercher à écrire cette équation sans nous préoccuper pour l'instant de satisfaire aux exigences de la théorie de la Relativité. Nous obtiendrons ainsi une Mécanique ondulatoire non relativiste valable seulement pour les mouvements de vitesses très inférieures à  $c$ .

Considérons un corpuscule de masse  $m$  se déplaçant dans un champ de force qui dérive de la fonction potentielle  $U(x,y,z,t)$ . Soient  $\vec{p}$  l'impulsion du corpuscule,  $E$  son énergie totale :

$$E = \frac{1}{2} mv^2 + U(x,y,z,t) = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + U(x,y,z,t)$$

Par définition, nous appelons fonction Hamiltonienne  $H(x,y,z,t, p_x, p_y, p_z, t)$  la fonction des coordonnées, des composantes de l'impulsion et du temps qui donne la valeur de l'énergie. On a donc ici :

$$H(x,y,z,t, p_x, p_y, p_z) = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + U(x,y,z,t)$$

Le développement de la Mécanique ondulatoire a montré que l'on obtient l'équation de propagation pour les ondes  $\psi$  à partir de la fonction Hamiltonienne  $H$  par le procédé suivant : on commence par remplacer dans l'expression de  $H$  chacun des moments  $p_k$  par l'opérateur  $-\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_k}$  ce qui fournit l'opérateur :

$$H_{op} = H\left(x,y,z,t, -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}, -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y}, -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z}\right)$$

dit "opérateur Hamiltonien" ou plus brièvement Hamiltonien. Puis ont écrit :

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = H_{op} \psi$$

$\psi$  étant la fonction d'onde. On obtient ainsi l'équation d'ondes du corpuscule considéré.

En explicitant la forme de  $H_{op}$ , on obtient :

$$(I,a) \quad \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{-h^2}{8\pi^2 m} \Delta \psi + U \psi$$

ou encore :

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

Cette équation de propagation étant du premier ordre par rapport au temps, permet en principe de calculer la forme de la fonction  $\psi$  à tout instant  $t$  quand on connaît sa forme  $\psi(x,y,z,t_0)$  à l'instant initial  $t_0$ .

L'équation (I,a) est à coefficients complexes : la fonction  $\psi$  a un caractère essentiellement complexe. Nous désignerons par  $F^*$  la quantité complexe conjuguée de la quantité complexe  $F$ . L'équation satisfaite par la fonction  $\psi^*$  est l'équation complexe conjuguée de (I,a).

Si nous posons par définition :

$$\rho = \psi \psi^* ; \quad \vec{f} = \frac{h}{4\pi i m} (\psi^* \text{grad } \psi - \psi \text{grad } \psi^*)$$

on démontre en partant des équations satisfaites par  $\psi$  et  $\psi^*$  que l'on a :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{f} = 0$$

Cette équation à la forme classique d'une équation de continuité. Si l'onde  $\psi$  occupe un domaine  $D$  (fini ou infini) et est nulle aux limites de  $D$ , on tire de l'équation précédente que :

$$\int_D \rho d\tau = \int_D |\psi|^2 d\tau$$

est constante au cours du temps. Comme la fonction  $\psi$ , solution d'une équation linéaire n'est définie qu'à une constante multiplicative près, on pourra choisir cette constante de façon à avoir constamment :

$$\int_D |\psi|^2 d\tau = 1$$

On dit alors que  $\psi$  est normée et nous admettrons que toutes les fonctions  $\psi$  doivent toujours être normées, hypothèse que justifiera l'interprétation physique donnée plus loin à la grandeur  $|\psi|^2$ . Même normée, la fonction  $\psi$  contient encore un facteur arbitraire  $e^{i\alpha}$  de norme 1.

On démontre que la Mécanique ondulatoire dont nous venons d'obtenir l'équation de base admet la Mécanique ancienne comme approximation au degré d'approximation de l'optique géométrique.

Un cas particulier important est celui où la fonction  $U$  ne dépend pas du temps (champ extérieur permanent). L'équation des ondes  $\psi$  admet alors des solutions "monochromatiques" ne contenant

le temps que par un facteur exponentiel de la forme  $e^{\frac{2\pi i}{h} Et}$ . Une telle onde est solution de l'équation :

$$\Delta \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} [E - U(x, y, z, t)] \psi = 0$$

comme cela résulte par substitution dans l'équation (I, a).

Dans le cas plus particulier encore où  $U=0$ , on trouve comme solution de l'équation des ondes les "ondes planes monochromatiques" du type :

$$\psi = A e^{\frac{2\pi i}{h} [Et - \sqrt{2mE} (\alpha x + \beta y + \gamma z)]}$$

où  $A$  est une constante et  $\alpha, \beta, \gamma$  sont les cosinus directeurs d'une même direction liés par la relation  $\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1$ . Cette solution représente une onde plane monochromatique de fréquence  $\nu = \frac{E}{h}$  et de longueur d'onde :

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

se propageant dans la direction  $\alpha, \beta, \gamma$ . Nous retrouvons donc ainsi (avec seulement une différence sans importance dans la définition de la fréquence  $\nu$ ) l'onde plane monochromatique que, dès ses débuts, la Mécanique ondulatoire avait fait correspondre au mouvement rectiligne et uniforme en l'absence de champ d'un corpuscule de masse  $m$ , d'énergie  $E$  et de quantité de mouvement  $mv$  dans la direction  $\alpha, \beta, \gamma$ .

### 3. NOUVELLE CONCEPTION DES GRANDEURS ATTACHÉES A UN CORPUSCULE

Dans la méthode que nous venons de développer, on substitue aux grandeurs  $p_x, p_y, p_z$ , qui, dans l'ancienne Mécanique, représentaient la quantité de mouvements du corpuscule les opérateurs  $-\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}, -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y}, -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z}$ . Cette idée de substituer ou de faire correspondre des "opérateurs" aux "grandeurs" classiques a été érigée en principe général au cours du développement de la Mécanique ondulatoire. On a admis qu'à toute grandeur mesurable (observable) définie par la Mécanique classique doit correspondre dans la nouvelle Mécanique un certain opérateur. Pour former cet opérateur à partir de l'expression classique de la grandeur exprimée à l'aide des variables de Lagrange  $x, y, z, p_x, p_y, p_z$ , on a

été amené à adopter la règle suivante : aux grandeurs  $p_x, p_y, p_z$  on fait correspondre, nous le savons déjà, les opérateurs  $-\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}, -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y}, -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z}$ . Aux grandeurs  $x, y, z$ , on fait correspondre les opérateurs  $x, y, z$ , c'est-à-dire multiplication par  $x, y, z$ . Nous n'aurons qu'à remplacer dans l'expression classique de la grandeur considérée en fonction de  $x, y, z, p_x, p_y, p_z$ , les variables canoniques par les opérateurs correspondants pour obtenir l'opérateur qui correspond à la grandeur. Cet opérateur pourra contenir le temps comme paramètre numérique si l'expression de la grandeur le contenait. Remarquons que c'est précisément en appliquant la méthode précédente à la grandeur "énergie" que nous avons obtenu l'opérateur Hamiltonien.

En appliquant cette méthode à la composante suivant l'axe des  $z$  du moment cinétique d'un corpuscule par rapport à l'origine, on trouve l'opérateur :

$$(M_z)_{op} = (x p_y - y p_x)_{op} = -\frac{h}{2\pi i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$\varphi$  étant l'azimut compté autour de  $oz$ .

Les opérateurs que l'on forme ainsi en Mécanique ondulatoire pour les faire correspondre à des grandeurs mesurables sont des opérateurs en général complexes appartenant à la catégorie des opérateurs hermitiens que nous allons maintenant définir : nous dirons qu'un opérateur est Hermitien dans un domaine  $D$  si :

$$\int_D f^* A g d\tau = \int_D g A^* f^* d\tau$$

où  $f$  et  $g$  sont deux fonctions arbitraires dans  $D$ , assujetties seulement à être dans ce domaine finies, uniformes et continues et nulles aux limites de  $D$  de façon que les intégrales de surface apparaissant par l'intégration par parties de  $\int_D$  soient nulles.

Tous les opérateurs qui en Mécanique ondulatoire correspondent à des grandeurs observables sont hermitiens. On peut par exemple le vérifier aisément pour  $H$  et  $M_z$  précédemment définis. Nous verrons plus loin la signification physique de ce fait.

Les opérateurs de la Mécanique ondulatoire ne sont pas seulement hermitiens; ils sont aussi linéaires, c'est-à-dire tels que :

$$A(\varphi_1 + \varphi_2) = A\varphi_1 + A\varphi_2 \quad ; \quad A(c\varphi) = cA\varphi$$

$c$  étant une constante complexe quelconque.

Il y a encore lieu de distinguer en Mécanique ondulatoire deux catégories d'opérateurs : les opérateurs "complets" qui intéressent l'ensemble des variables du domaine  $D$  (ici :  $x, y, z$ ) et les opérateurs "incomplets" qui n'intéressent qu'une partie de ces variables. L'opérateur  $H$  est le type d'un opérateur complet alors que  $M_z$  est incomplet.

Bref en Mécanique ondulatoire, on fait correspondre à toute grandeur physique observable attachée à un corpuscule un opérateur linéaire et hermitien en général complexe. Mais il est bien évident que si l'on parvient à effectuer une mesure précise de cette grandeur, cette mesure s'exprime par un nombre réel. La Mécanique ondulatoire doit donc pouvoir dire quels sont les nombres réels qu'une mesure précise peut nous fournir comme valeurs d'une certaine grandeur physique.

De l'opérateur linéaire et hermitien que la nouvelle Mécanique fait correspondre à une grandeur mesurable, nous devons donc pouvoir déduire une série de nombres réels représentant tous les résultats possibles de la mesure de cette grandeur. Or ceci est précisément possible parce que les opérateurs linéaires et hermitiens tels que ceux employés en Mécanique ondulatoire ont une suite de "valeurs propres" qui sont toujours des nombres réels. Nous allons étudier ce point.

#### 4. VALEURS PROPRES ET FONCTIONS PROPRES D'UN OPÉRATEUR LINÉAIRE ET HERMITIEN

Soit A un opérateur linéaire et hermitien. Ecrivons l'équation :

$$(I, b) \quad A\varphi = \alpha\varphi$$

où  $\varphi$  est une fonction de  $x, y, z$ , et  $\alpha$  une constante. Le temps  $t$  peut figurer comme paramètre dans  $A, \varphi$  et  $\alpha$ . Par définition, nous nommerons "valeurs propres de l'opérateur A dans le domaine D" les valeurs de la constante  $\alpha$  pour lesquelles l'équation précédente a au moins une solution  $\varphi(x, y, z, \alpha)$  dite "fonction propre" jouissant des propriétés suivantes : elle est uniforme et continue dans D et l'intégrale du carré de son module dans D est convergente. Si D est infini, cette dernière condition entraîne que  $\varphi$  doit décroître assez vite à l'infini pour assurer ladite convergence. De plus, si D est fini,  $\varphi$  doit être nulle aux limites de D.

Nous admettrons l'existence des valeurs propres pour les opérateurs rencontrés en Mécanique ondulatoire et nous allons montrer qu'elles sont réelles. En effet, de (I, b) et de sa conjuguée, on tire :

$$\int_D [\varphi^* A\varphi - \varphi A^* \varphi^*] d\tau = (\alpha - \alpha^*) \int_D |\varphi|^2 d\tau$$

Comme par hypothèse, A est hermitien, le premier nombre est nul : l'intégrale du second nombre étant essentiellement positive, on doit avoir  $\alpha = \alpha^*$ , donc  $\alpha$  est réel.

L'ensemble des fonctions propres de (I, b) forme le spectre de cette équation. Si ces valeurs propres sont isolées, le spectre est discontinu, c'est un "spectre de raies". C'est au

contraire un "spectre continu" si la suite des valeurs propres est continue. Le spectre peut d'ailleurs être en partie continu, en partie discontinu.

Occupons-nous d'abord des spectres discontinus. Désignons par  $\alpha_i$  une valeur propre isolée : il existe au moins une fonction propre  $\varphi_i(x, y, z, t)$  qui lui correspond. Montrons que l'ensemble des fonctions propres du spectre discontinu forme un ensemble orthogonal, c'est-à-dire que si  $\varphi_i$  et  $\varphi_j$  sont deux fonctions propres correspondant à des valeurs propres distinctes  $\alpha_i$  et  $\alpha_j$ , on a :

$$\int_D \varphi_i^* \varphi_j \, d\tau = 0$$

En effet, puisque tous les  $\alpha_i$  sont réels, nous tirons de (I,b) et de sa conjuguée :

$$\int_D [\varphi_i^* A \varphi_j - \varphi_j A^* \varphi_i^*] d\tau = (\alpha_i - \alpha_j) \int_D \varphi_i^* \varphi_j \, d\tau$$

et, le premier membre étant nul (puisque A est hermitien) et  $\alpha_i \neq \alpha_j$ , le résultat annoncé en résulte.

La démonstration précédente serait en défaut pour deux fonctions propres correspondant à une même valeur propre. Quand ce cas se présente, on dit qu'on a affaire à une valeur propre multiple ou dégénérée. Soit  $\alpha_i$  une telle valeur propre à laquelle correspondent  $p$  fonctions propres linéairement indépendantes  $\varphi_{i1}, \varphi_{i2}, \dots, \varphi_{ip}$ . On peut, connaissant ces  $p$  fonctions propres indépendantes, les remplacer par  $p$  combinaisons linéaires linéairement indépendantes de  $\varphi_{i1}, \dots, \varphi_{ip}$  car, l'équation (I,b) étant linéaire, de telles combinaisons sont encore solutions pour la même valeur  $\alpha_i$  de  $\alpha$ . On voit aisément que l'on peut choisir ces combinaisons linéaires de façon qu'elles soient orthogonales. On peut donc même en ce cas choisir les fonctions propres de façon à avoir un système orthogonal.

Les fonctions propres n'étant évidemment définies qu'à une constante complexe multiplicative près en raison du caractère linéaire de (I,b), on peut choisir le module de cette constante de façon que :

$$\int_D |\varphi_i|^2 \, d\tau = 1$$

La fonction  $\varphi_i$  est alors "normée" : elle contient encore un facteur arbitraire de module unité  $e^{i\alpha}$ . Les fonctions  $\varphi_i$  une fois normées forment un système "orthonormal" tel que :

$$\int_D \varphi_i^* \varphi_j \, d\tau = \delta_{ij}$$

où  $\delta_{ij}$  est le symbole de Kronecker ( $\delta_{ij} = 0$  si  $i \neq j$ ;  $\delta_{ii} = 1$ ).

Passons au cas du spectre continu. Si A possède un spectre continu, à toute valeur propre de ce spectre correspondra une fonction propre  $\varphi(x, y, z, \alpha)$  où nous écrivons  $\alpha$  comme une variable parce qu'elle varie continuellement dans le spectre. On démontre aisément que toute fonction propre du spectre continu est

orthogonale aux fonctions propres du spectre discontinu s'il y en a un. Mais, pour exprimer que les fonctions propres du spectre continu sont normées et orthogonales entre elles, il est utile, pour éviter certaines difficultés de convergence, de considérer, au lieu des fonctions propres  $\varphi(x,y,z,\alpha)$  elles-mêmes les expressions:

$$\int_{\alpha}^{\alpha+\Delta\alpha} \varphi(x,y,z,\alpha) d\alpha$$

dites "différentielles propres" correspondant à des intervalles  $(\alpha, \alpha+\Delta\alpha)$  choisis aussi petits que l'on veut dans le domaine des variations du paramètre continu  $\alpha$ . Physiquement, cette substitution correspond à celle qu'on opère dans l'ancienne théorie des ondes quand l'on considère, à la place de l'onde plane monochromatique qui est une abstraction, le groupe d'ondes formé par une superposition d'ondes de fréquences très voisines. Pour exprimer l'orthonormalité des différentielles propres, on doit remplacer les relations variables pour le spectre continu par la suivante :

$$\frac{1}{\Delta\alpha} \int_D d\tau \left[ \int_{\alpha}^{\alpha+\Delta\alpha} \varphi(x,y,z,\alpha) d\alpha \right] \left[ \int_{\alpha'}^{\alpha'+\Delta\alpha'} \varphi(x,y,z,\alpha) d\alpha \right]^* = \delta_{\alpha'\alpha}$$

Les fonctions propres des opérateurs complets de la Mécanique ondulatoire possèdent la propriété importante de former un système complet. Cela veut dire que sous des conditions très larges une fonction définie dans le domaine D des variables intéressées par un opérateur A se laisse développer en une somme de fonctions propres de cet opérateur. Si par exemple  $f(x,y,z)$  est une fonction des variables  $x,y,z$ , elle se laisse très généralement développer suivant les fonctions propres d'un opérateur hermitien complet sous la forme :

$$f(x,y,z) = \sum_i c_i \varphi_i(x,y,z) + \int c(\alpha) \varphi(x,y,z,\alpha) d\alpha$$

la somme  $\sum$  étant relative au spectre discontinu et l'intégrale au spectre continu. Dans les développements précédents, nous pouvons mettre en évidence les différentielles propres du spectre continu en écrivant :

$$f(x,y,z) = \sum_i c_i \varphi_i(x,y,z) + \sum_{\Delta\alpha} c(\alpha) \int_{\alpha}^{\alpha+\Delta\alpha} \varphi(x,y,z,\alpha) d\alpha$$

(Pour plus de rigueur, il faudrait introduire ici la notion de "convergence en moyenne", ce que nous ne ferons pas).

En utilisant les formules qui expriment le caractère orthonormal des fonctions propres du spectre discontinu et des différentielles propres du spectre continu, nous trouvons :

$$c_i = \int_D \varphi_i^* f(x,y,z) d\tau ; c(\alpha) = \frac{1}{\Delta\alpha} \int_D d\tau \left[ \int_{\alpha}^{\alpha+\Delta\alpha} \varphi(x,y,z,\alpha) d\alpha \right]^* f(x,y,z)$$

Les coefficients  $c_i$  et  $c(\alpha)$  sont souvent nommés les coefficients de Fourier du développement de la fonction  $f(x,y,z)$  suivant les fonctions propres de l'opérateur  $A$ . La série et l'intégrale de Fourier sont des exemples simples de ce type de développements. Le temps peut figurer comme paramètre numérique dans l'expression des  $c_i$  et des  $c(\alpha)$ .

### 5. SPECTRE CONTINU DE L'OPÉRATEUR HAMILTONIEN D'UN CORPUSCULE LIBRE

L'équation aux valeurs propres de l'opérateur Hamiltonien peut s'écrire :

$$H\varphi = E\varphi$$

$E$  étant la constante  $\alpha$  du cas général. Pour un corpuscule libre

$$U=0 \text{ et } H = -\frac{h^2}{8\pi^2m} \Delta$$

d'où :

$$-\frac{h^2}{8\pi^2m} \Delta\varphi = E\varphi$$

soit  $\vec{p}$  le vecteur impulsion du corpuscule. On trouve les fonctions propres :

$$\varphi(x,y,z,\vec{p}) = ae^{-\frac{2\pi i}{h}(p_x x + p_y y + p_z z)} = ae^{-\frac{2\pi i}{h}(\vec{p} \cdot \vec{r})}$$

avec :

$$(I,c) \quad \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) = \frac{p^2}{2m} = E$$

On voit donc : 1°) que toute valeur positive de  $E$  est valeur propre; 2°) qu'à toute valeur propre de  $E$  correspond une infinité de fonctions propres du type précédent obtenues en donnant à  $p_x, p_y, p_z$  toutes les valeurs compatibles avec (I,c). Donc pour l'énergie, on trouve un spectre continu allant de 0 à  $+\infty$  avec dégénérescence d'ordre  $\infty$  pour toute valeur de  $E$  autre que 0.

A chaque fonction propre correspond une onde plane monochromatique de la forme :

$$\psi_{\vec{p}}(x,y,z,t) = \varphi(x,y,z,\vec{p}) e^{\frac{2\pi i}{h}Et} = ae^{\frac{2\pi i}{h}(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})}$$

On peut pour simplifier l'écriture poser :

$$k = \frac{2\pi}{hc} E \quad \vec{k} = \frac{2\pi}{h} \vec{p}$$

ce qui donne :

$$\psi_{\vec{k}} = ae^{i(kct - \vec{k} \cdot \vec{r})}$$

avec la relation :

$$kc = \frac{1}{2m} |\vec{k}|^2 \frac{h}{2\pi}$$

qui exprime (I,c) avec les nouvelles notations.

Le vecteur  $\vec{k}$  est appelé le vecteur de propagation de l'onde plane qui est entièrement spécifiée par cette seule donnée. Il faut bien distinguer  $k$  et  $|\vec{k}|$ .

On peut prendre indifféremment comme fonctions propres de H soit les  $\psi_{\vec{k}}$ , soit les  $\varphi_{\vec{k}}$  qui n'en diffèrent que par le facteur  $e^{ikct}$ .

On peut exprimer l'orthonormalité des ondes planes en introduisant les différentielles propres. Au cours de ce calcul dont nous ne reproduisons pas les détails, on est amené à introduire avec Dirac la fonction "impropre" ou "singulière"  $\delta(x)$  ayant les deux propriétés suivantes :

1°)  $\delta(x)$  est une fonction paire de  $x$

$$2^\circ) \text{ On a toujours } \int_{x_1}^{x_2} f(x) \delta(x) dx = \begin{cases} f(0) \text{ si } x_1 \text{ et } x_2 \text{ sont de signes} \\ \text{contraires} \\ 0 \text{ si } x_1 \text{ et } x_2 \text{ sont de même} \\ \text{signe.} \end{cases}$$

On peut représenter  $\delta(x)$  par la fonction singulière de Dirichlet en posant :

$$\delta(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\sin 2\pi N x}{\pi x}$$

Finalement le calcul en question montre que les fonctions propres du spectre continu doivent s'écrire :

$$\varphi(\vec{k}, x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad ; \quad \psi(\vec{k}, x, y, z, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i(kct - \vec{k} \cdot \vec{r})}$$

Le caractère complet de l'ensemble des  $\varphi_{\vec{k}}$  se traduit par le fait que, sous des conditions très générales, une fonction  $f(x, y, z)$  sera développable en intégrale de Fourier sous la forme :

$$f(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} c(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d\vec{k}$$

$d\vec{k}$  désignant  $dk_x \cdot dk_y \cdot dk_z$ . Les  $c(\vec{k})$  sont données par la formule

$$c(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_D f(x, y, z) e^{+i\vec{k} \cdot \vec{r}} d\vec{r}$$

$d\vec{r}$  désignant  $dx \cdot dy \cdot dz$ . C'est la formule d'inversion donnant les coefficients d'un développement de Fourier.

On peut aussi écrire :

$$f(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} c(\vec{k}, t) \psi_{\vec{k}}(x, y, z, t) d\vec{k}$$

avec :

$$c(\vec{k}, t) = c(\vec{k}) e^{-ikct}$$