

RECHERCHE COOPÉRATIVE SUR PROGRAMME N° 25

JEAN LERAY

Chapitre IV Équation de Dirac, avec effet Zeeman

Les rencontres physiciens-mathématiciens de Strasbourg - RCP25, 1978, tome 25
« Analyse lagrangienne et mécanique quantique par Jean Leray », , exp. n° 6, p. 267-295

http://www.numdam.org/item?id=RCP25_1978__25__267_0

© Université Louis Pasteur (Strasbourg), 1978, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la série « Recherche Coopérative sur Programme n° 25 » implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/conditions>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques
<http://www.numdam.org/>

CHAPITRE IV

EQUATION DE DIRAC, AVEC EFFET ZEEEMAN.

INTRODUCTION . - Le § 1 résout mod. $\frac{1}{v^2}$ un problème lagrangien homogène à plusieurs inconnues, qui est l'un des plus simples de ceux auxquels s'applique le théorème 3 du chap. II, § 4 ; la résolution de ce problème introduit le quadruplet de nombres quantiques qui intervient dans l'étude de l'équation de Dirac.

Le § 2 réduit, en analyse lagrangienne, l'équation de Dirac mod. $\frac{1}{v^2}$ au système plus simple qu'a résolu le § 1 ; cette réduction est analogue au théorème de réduction 2.2 du chap. II, § 4. Ce § 2 prouve ainsi que les solutions lagrangiennes, définies mod $\frac{1}{v^2}$ sur des variétés compactes, de l'équation de Dirac (atome à un électron, dans un champ magnétique) existent pour des niveaux d'énergie qui sont exactement ceux pour lesquels existe la solution classique de cette équation (compte tenu des effets Zeeman et même Paschen - Back) .

§ 1. Un problème lagrangien à deux inconnues.

Ce § 1 donne une application du chap. II, § 4, théorème 3.

1. CHOIX D'OPERATEURS COMMUTANT mod. $\frac{1}{v^3}$. - Comme au chap. III, § 1, n° 1,

notons :

$$(1.1) \quad X = X^* = E^3 ; x, p \in E^3 ; R(x) = |x| , P(p) = |p| , Q(x,p) = \langle p, x \rangle , L(x,p) = |x \wedge p|$$

en sorte que :

$$(1.2) \quad L^2 + Q^2 = P^2 R^2 ;$$

notons $(M_1, M_2, M_3 = M)$ les composantes de $x \wedge p$.

Vu le chap. III, § 1, (1.3), les trois fonctions suivantes sont deux à deux en involution (cf. chap. III, § 1, n° 2) :

$$(1.3) \quad H^{(1)}(x,p) = H[L(x,p), M(x,p), Q(x,p), R(x)] ; H^{(2)}(x,p) = L^2(x,p) ; H^{(3)}(x,p) = M(x,p).$$

L'emploi du chap. II, § 4, théorème 3 exige la donnée de trois $\mu \times \mu$ matrices, fonctions de $(x,p) \in X \oplus X^*$, telles que les matrices d'opérateurs lagrangiens associés aux trois matrices

$$(1.4) \quad H^{(k)} E + \frac{1}{v} J^{(k)} \quad (E : \mu \times \mu \text{ matrice unité}) \text{ commutent mod } \frac{1}{v^3}.$$

Vu la note 3 du chap. II, § 4, puisque les $H^{(k)}$ sont involution, cette commutation équivaut à la condition $(\forall i, k)$:

$$(1.5) \quad (H^{(i)}, J^{(k)}) - (H^{(k)}, J^{(i)}) + J^{(i)} J^{(k)} - J^{(k)} J^{(i)} = 0 ,$$

où $(. , .)$ est la parenthèse de Poisson .

Choisissons $\mu = 2$: les valeurs des $J^{(k)}$ sont des matrices, opérant sur les vecteurs de l'espace \mathbb{C}^2 , que nous munirons d'une structure hermitienne ; nous choisirons les $J^{(k)}$ self-adjointes. (Les vecteurs de \mathbb{C}^2 se nomment spineurs).

Notations . - Notons $\sigma_0 = 1$ la 2×2 matrice unité ; toute 2×2 matrice auto-adjointe est du type $x_0 \sigma_0 + \sigma$, x_0 étant un nombre réel et σ une matrice auto-adjointe, de trace nulle ;

$$(1.6) \quad \sigma = \sigma [x_1, x_2, x_3] = \begin{pmatrix} x_3 & x_1 - i x_2 \\ x_1 + i x_2 & x_3 \end{pmatrix} = x_1 \sigma_1 + x_2 \sigma_2 + x_3 \sigma_3$$

où $(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{E}^3$

et où

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

sont les matrices de Pauli, qui vérifient les relations :

$$(1.7) \quad \sigma_k^2 = 1, \sigma_i \sigma_k = -\sigma_k \sigma_i, \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 = i \quad (\text{la matrice unité est notée } \sigma_0 = 1);$$

d'où :

$$(1.8) \quad \sigma^2 [x] = |x|^2.$$

Note 1.1. - Rappelons les conséquences de (1.8) : soit u_2 un isomorphisme de \mathbb{C}^2 conservant sa mesure : $u_2 \in S U(2)$; $u_2 \sigma [x] u_2^{-1}$ est self-adjointe, de trace nulle, donc du type $\sigma(y)$; notons $y = u x$:

$$\sigma [u x] = u_2 \sigma [x] u_2^{-1};$$

vu (1.8), u conserve $|x|^2$: plus précisément, u est une rotation de E^3 :

$u \in S O(3)$; d'où un morphisme

$$S U(2) \ni u_2 \mapsto u \in S O(3),$$

qui est un revêtement d'ordre 2 de $S O(3)$.

LEMME 1. - Supposons donné

$$(1.9) \quad J^{(1)} = i f \sigma_3 + i g \sigma [x \wedge p],$$

où :

$$f(x,p) = f [L(x,p), M(x,p), Q(x,p), R(x)], \quad g = g [L, M, Q, R];$$

alors on satisfait (1.5) en choisissant :

$$(1.10) \quad J^{(2)} = 0, \quad J^{(3)} = \frac{i}{2} \sigma_3$$

Note 1.2. - Les relations (1.5) restent évidemment vérifiées quand on ajoute aux $H^{(i)}$ et $J^{(k)}$ des nombres complexes arbitraires (c'est-à-dire : leurs produits par la matrice unité, notée : $\sigma_0 = 1$).

Preuve de (1.5)_{1,2} . - $(H^{(2)}, J^{(1)}) = 0$, car, vu le ch. III, § 1, n° 1 ,

L est en involution avec Q, R, $M = M_3$ et de même avec M_1 et M_2 .

Preuve de (1.5)_{1,3} . - Puisque M est en involution avec L, Q, R :

$$(1.11) \quad (H^{(3)}, J^{(1)}) = i g(M, \sigma[x \wedge p]) = i g \circ [-M_2, M_1, 0] ,$$

car un calcul immédiat et classique donne :

$$(M, M_1) = -M_2, (M, M_2) = M_1 .$$

D'autre part, (1.7) implique :

$$\sigma_3 \sigma[x \wedge p] - \sigma[x \wedge p] \sigma_3 = 2i \sigma[-M_2, M_1, 0] ;$$

d'où, vu les définitions (1.9) et (1.10) de $J^{(1)}$ et $J^{(3)}$:

$$(1.12) \quad J^{(3)} J^{(1)} - J^{(1)} J^{(3)} = -i g \sigma[-M_2, M_1, 0] .$$

De (1.11) et (1.12) résulte (1.5)_{1,3} .

La preuve de (1.5)_{2,3} est évidente.

2. RESOLUTION D'UN PROBLEME LAGRANGIEN A DEUX INCONNUES . - Notations . - Soient :

$$a_{f,g} , a_{L^2} , a_M$$

les 2×2 matrices d'opérateurs lagrangiens associées aux 2×2 matrices :

$$(2.1) \quad H[L, M, Q, R] + \frac{i}{v} f[L, M, Q, R] \sigma_3 + \frac{i}{v} g[L, M, Q, R] \sigma[x \wedge p] , L^2, M ;$$

étudions les solutions $U = (U_1, U_2)$ du système (dont le lemme 1 et la note 1.2 prouvent l'intérêt) :

$$(2.2) \quad a_{f,g} U = (a_{L^2} - L_0^2 - \frac{2i}{v} L_0 \ell') U = (a_M - M_0 - \frac{i}{v} m' + \frac{i}{2v} \sigma_3) U = 0 \text{ mod. } \frac{1}{\sqrt{2}} ,$$

où U_1 et U_2 sont deux fonctions lagrangiennes définies sur une variété lagrangienne COMPACTE V , où ℓ' et m' sont des nombres réels voisins de 0 , de carrés négligeables et où L_0 , M_0 sont deux nombres réels .

Notons, comme au chap. III, § 1, $V [L_0, M_0]$ la variété lagrangienne de $E^3 \oplus E^3$ d'équations :

$$(2.3) \quad V [L_0, M_0] : H [L_0, M_0, Q, R] = L(x, p) - L_0 = M(x, p) - M_0 = 0 ;$$

quand elle est compacte, c'est un tore, dont les coordonnées sont

$$t \text{ mod. } c [L_0, M_0] , \Psi \text{ mod. } 2 \pi , \Phi \text{ mod. } 2 \pi ;$$

$\Gamma [L_0, M_0]$, puis t et $c [L_0, M_0]$ sont définis au chap. III, § 1 par (2.5) (2.6) et (2.7) ; nous supposons que, sur $V [L_0, M_0]$;

$$(f - \frac{1}{2} H_M) c [L, M] \text{ et } L g c [L, M]$$

sont voisins de 0 et de carrés négligeables ; nous noterons, pour $V [L_0, M_0]$, donc $\Gamma [L_0, M_0]$, compactes :

$$(2.4) \quad f_0 = \pi N_M [L_0, M_0] + \int_{\Gamma [L_0, M_0]} f [L_0, M_0, Q, R] dt , g_0 = L_0 \int_{\Gamma [L_0, M_0]} g [L_0, M_0, Q, R] dt ,$$

$$2 \pi \epsilon [L_0, M_0] = \sqrt{f_0^2 + 2 \frac{M_0}{L_0} f_0 g_0 + g_0^2} > 0 ; \text{ où } |M_0| < L_0 ;$$

nous verrons que f_0 , g_0 , ϵ sont de carrés négligeables.

THEOREME 2. - Les variétés COMPACTES V de $E^3 \oplus E^3$ sur lesquelles sont définies des solutions U du système (2.2) sont les tores $V [L_0, M_0]$ tels que :

$$(2.5) \quad L_0 = \hbar (\ell + \frac{1}{2} - \ell') , \quad M_0 = \hbar (m - m') ,$$

$$\hbar (\ell + \frac{1}{2}) + N [\hbar (\ell + \frac{1}{2}), \hbar m] = \hbar n \pm \frac{\hbar}{2} \in [\hbar (\ell + \frac{1}{2}), \hbar m] ,$$

$\ell, m - \frac{1}{2}, n$ étant trois entiers vérifiant les inégalités :

$$(2.6) \quad |m| \leq \ell + \frac{1}{2} , \quad \ell < n ;$$

ℓ' et m' sont des nombres voisins de 0, arbitraires, sauf quand $m = \ell + \frac{1}{2}$;

ils doivent être alors choisis tels que :

$$(2.7) \quad |M_0| < L_0 .$$

Note 2.1. - U sera noté U_+ ou U_- suivant que (2.5)₃ vaut avec le choix + ou - ; l'amplitude lagrangienne $\beta = (\beta_1, \beta_2)$ de $U = U_{\pm}$ sera notée β_{\pm} ; elle vérifie les relations :

$$(2.8) \quad \begin{aligned} \beta_{\pm}(t+c[L_0, M_0], \psi, \phi) &= c_{\pm 1} \beta_{\pm}(t, \psi, \phi), \\ \beta_{\pm}(t, \psi+2\pi, \phi) &= c_{\pm 2} \beta_{\pm}(t, \psi, \phi), \\ \beta_{\pm}(t, \psi, \phi+2\pi) &= c_{\pm 3} \beta_{\pm}(t, \psi, \phi); \end{aligned}$$

les $c_{\pm k}$ sont des nombres complexes, de module 1, valant :

$$(2.9) \quad \begin{aligned} c_{\pm 1} &= e^{2\pi i (\ell' N_L [L_0, M_0] + m' N_M [L_0, M_0] \mp \epsilon [L_0, M_0])} \\ c_{\pm 2} &= e^{2\pi i \ell'} , \quad c_{\pm 3} = e^{2\pi i m'} . \end{aligned}$$

Preuve. - Vu le lemme 1 et la note 1.2, le théorème 3 du chap. II, § 4 s'applique. Les \check{V} sur lesquels une solution U du système (2.2) est définie sont donc les revêtements des variétés V d'équations (2.3) ; celles des V qui sont compactes sont donc les tores $V [L_0, M_0]$. Cherchons quand U est défini sur $V [L_0, M_0]$, c'est-à-dire quand

$$(2.10) \quad \left(\frac{\eta}{d^3 x}\right)^{1/2} e^{v_0 \varphi_{R_0}} \beta : V [L_0, M_0] \rightarrow \mathbb{C}^2 ,$$

où R_0 est le repère utilisé,

$$\arg \eta = 0 , \arg d^3 x = m_{R_0} ,$$

m_{R_0} et φ_{R_0} étant l'indice de Maslov et la phase de $V [L_0, M_0]$ dans R_0 ;

vu le chap. III § 1, (3.5) et (3.4) :

$$m_{R_0} = \left[\frac{1}{\pi} \Psi \right] - \left[\frac{1}{\pi} \operatorname{arc} \operatorname{tg} \frac{H_Q}{H_R} \right], \quad \text{où } [\dots] = \text{Partie entière de } \dots, \quad (2.11)$$

$$\varphi_{R_0} = \Omega + L_0 \Psi + M_0 \Phi,$$

où Ω est défini au chap. III, § 1 par (2.8).

Achevons l'application du théorème 3 du chap. II, § 4. Vu les notes 3.2 et 3.3 du chap. III, § 1, les vecteurs caractéristiques κ , κ_{L^2} , κ_M des hamiltoniens H, L^2, M sont :

$$\kappa : dt = 1, \quad d\Psi = H_L, \quad d\Phi = H_M;$$

$$\kappa_{L^2} : dt = 0, \quad d\Psi = 2L_0, \quad d\Phi = 0;$$

$$\kappa_M : dt = 0, \quad d\Psi = 0, \quad d\Phi = 1.$$

Le système (2.2) équivaut donc, vu ce théorème, à la condition :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + H_L \frac{\partial}{\partial \Psi} + H_M \frac{\partial}{\partial \Phi} \right) \beta + i f \sigma_3 \beta + i g \sigma [x \wedge p] \beta = 0,$$

$$\frac{\partial \beta}{\partial \Psi} - i \ell' \beta = 0, \quad \frac{\partial \beta}{\partial \Phi} - i m' \beta + \frac{i}{2} \sigma_3 \beta = 0;$$

c'est-à-dire au système de Pfaff, que ce théorème affirme être complètement intégrable :

$$(2.12) \quad d\beta + i [f \sigma_3 dt + g \sigma [x \wedge p] dt - \ell' (d\Psi - H_L dt) - (m' - \frac{1}{2} \sigma_3) (d\Phi - H_M dt)] \beta = 0.$$

Vu chap. III, § 1, (1.5) :

$$x \wedge p = L_0 J_3,$$

donc, vu chap. III, § 1, (1.12)₃ et (1.11) :

$$\sigma [x \wedge p] = L_0 [\sigma_1 \cos \Phi \sin \Theta + \sigma_2 \sin \Phi \sin \Theta + \sigma_3 \cos \Theta],$$

où

$$(2.13) \quad \cos \Theta = \frac{M_0}{L_0} ;$$

donc, vu (1.7) :

$$\begin{aligned} \sigma [x \wedge p] &= L_0 \sigma_1 (\cos \Phi + i \sigma_3 \sin \Phi) \sin \Theta + L_0 \sigma_3 \cos \Theta \\ &= L_0 \sigma_1 e^{i\Phi \sigma_3} \sin \Theta + L_0 \sigma_3 \cos \Theta \\ &= L_0 e^{-\frac{i}{2} \Phi \sigma_3} (\sigma_1 \sin \Theta + \sigma_3 \cos \Theta) e^{\frac{i}{2} \Phi \sigma_3} . \end{aligned}$$

D'autre part, les fonctions λ et μ de $[L, M, t]$ définies par chap. III, § 1, (2.10) vérifient, vu chap. III, § 2, (2.3) :

$$(2.14) \quad \lambda_t = -H_L, \quad \mu_t = -H_M .$$

Notons :

$$(2.15) \quad \beta = e^{-\frac{i}{2} \sigma_3 \Phi + i \ell' (\Psi + \lambda) + i m' (\Phi + \mu)} \gamma ;$$

le système (2.12) s'écrit donc :

$$(2.16) \quad d\gamma + i \left[\left(f - \frac{1}{2} H_M \right) \sigma_3 + L_0 g (\sigma_1 \sin \Theta + \sigma_3 \cos \Theta) \right] \gamma dt = 0 ;$$

la vérification que ce système est complètement intégrable est évidente : γ est indépendant de Φ et Ψ et n'est fonction que de t .

La condition (2.10), que U est défini sur $V [L_0, M_0]$, s'énonce donc :

$$\left(\frac{\pi}{d^3 x} \right)^{1/2} e^{v_0 \Omega + v_0 L_0 \Psi + v_0 M_0 \Phi - \frac{i}{2} \sigma_3 \Phi + i \ell' (\Psi + \lambda) + i m' (\Phi + \mu)} \gamma : V \rightarrow \mathbb{C}^2 .$$

Or Ω, λ, μ ne dépendent que de t et, vu chap. III, § 2, (1.4) et (1.5), croissent de

$$(2.17) \quad \Delta_t \Omega = 2\pi N [L_0, M_0], \quad \Delta_t \lambda = 2\pi N_L [L_0, M_0], \quad \Delta_t \mu = 2\pi N_M [L_0, M_0],$$

quand t croît de $c [L_0, M_0]$; N est défini au chap. III, § 1, par (2.9) .

Si nous notons $v_0 = i / \hbar$ (> 0), la condition (2.10) que U est lagrangien sur V s'énonce donc, vu (2.11), comme suit, car $e^{-\pi i \sigma_3} = -1$:

il existe $\epsilon \in \mathbb{R}$ tel que :

$$(2.18) \quad \gamma(t + c [L_0, M_0]) = e^{2\pi i \epsilon} \gamma(t)$$

$$(2.19) \quad \frac{1}{\hbar} N [L_0, M_0] + \ell' N_L + m' N_M + \frac{1}{\hbar} + \epsilon = \frac{1}{\hbar} L_0 + \ell' - \frac{1}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} M_0 + m' - \frac{1}{\hbar} = 0 \pmod{1} .$$

La recherche des solutions γ de (2.16) vérifiant (2.18) est classique :

$$\left[\left(f - \frac{1}{\hbar} H_M \right) \sigma_3 + L_0 g \left(\sigma_1 \sin \Theta + \sigma_3 \cos \Theta \right) \right]$$

est une matrice self-adjointe, de trace nulle, fonction périodique de t ; la période est $c [L_0, M_0]$; la 2×2 - matrice $u(t)$ définie par

$$(2.20) \quad du + i \left[\left(f - \frac{1}{\hbar} H_M \right) \sigma_3 + L_0 g \left(\sigma_1 \sin \Theta + \sigma_3 \cos \Theta \right) \right] u dt = 0, u(0) = 1,$$

est donc une matrice unitaire, de déterminant 1 : $u \in S U(2)$; elle vérifie :

$$u(t + c [L_0, M_0]) = u(t) u(c [L_0, M_0]) ;$$

la solution générale de (2.16) est

$$\gamma(t) = u(t) \delta, \text{ où } \delta \in \mathbb{C}^2 ;$$

pour que γ vérifie (2.18), il faut et suffit que δ soit l'un des vecteurs propres de la matrice $u(c [L_0, M_0]) \in S U(2)$; notons :

$$(2.21) \quad e^{\pm 2\pi i \epsilon [L_0, M_0]} \quad (0 \leq \epsilon [L_0, M_0] \leq \frac{1}{2}) \quad \text{les valeurs propres de } u(c [L_0, M_0]) ;$$

dans (2.18) :

$$\epsilon = \frac{\pm}{+} \epsilon [L_0, M_0] .$$

Donc, la condition qu'existe une solution lagrangienne U de (2.2) définie sur le tore $V [L_0, M_0]$ est qu'existent trois entiers $\ell, m - \frac{1}{\hbar}, n$ tels que :

$$\frac{1}{h} L_0 + \ell' + \frac{1}{h} N [L_0, M_0] + \ell' N_L + m' N_M = n \pm \epsilon [L_0, M_0],$$

(2.22)

$$\frac{1}{h} L_0 + \ell' - \frac{1}{2} = \ell, \quad \frac{1}{h} M_0 + m' = m, \quad \text{où } |M_0| < L_0.$$

Cette condition ne suppose pas $\ell', m', (f - \frac{1}{2} H_M) c [L, M], L g c [L, M]$ de carrés négligeables sur $V [L_0, M_0]$.

U et β seront notés U_{\pm} et β_{\pm} suivant que (2.22) vaut avec $\pm \epsilon [L_0, M_0]$; vu (2.15), (2.17), (2.18), où $\epsilon = \mp \epsilon [L_0, M_0]$, β_{\pm} vérifie (2.8), les $c_{\pm k}$ ayant les valeurs (2.9).

Supposons négligeables les carrés de ℓ', m' et les carrés des dérivées de $h \epsilon$: (2.22) se réduit à (2.5): les entiers ℓ, m, n doivent satisfaire la condition $(2.5)_3$, qui est indépendante de ℓ' et m' . Vu que ℓ et n sont entiers, que ϵ est voisin de 0 et que $N > 0$, $(2.5)_3$ implique $\ell < n$; puisque ℓ' et m' sont voisins de 0, $(2.5)_1$ et $(2.5)_2$ impliquent $|m| \leq \ell + 1/2$, ce qui achève la preuve de (2.6).

Il reste à prouver que $\epsilon [L_0, M_0]$ a l'expression approchée (2.4). Puisque, sur $V [L_0, M_0]$

$$(f - \frac{1}{2} H_M) c [L, M] \text{ et } L g c [L, M]$$

sont supposés voisins de 0 et de carrés négligeables, la solution de (2.20) est, mod. ces carrés, vu $(2.14)_2$:

$$u = 1 - i \left[\left(\frac{1}{2} \mu + \int_0^t f dt \right) \sigma_3 + L_0 \int_0^t g dt (\sigma_1 \sin \Theta + \sigma_3 \cos \Theta) \right]$$

c'est-à-dire, en choisissant le second membre dans $S U (2)$, comme u :

$$u = e^{-i \left[\left(\frac{1}{2} \mu + \int_0^t f dt \right) \sigma_3 + L_0 \int_0^t g dt (\sigma_1 \sin \Theta + \sigma_3 \cos \Theta) \right]};$$

donc, vu (2.17), la définition (2.21) de $\epsilon [L_0, M_0]$ et la définition (2.4) de f_0 et g_0 , $\pm 2\pi \epsilon [L_0, M_0]$ sont approximativement les valeurs propres de la matrice self-adjointe de trace nulle :

$$f_0 \sigma_3 + g_0 (\sigma_1 \sin \Theta + \sigma_3 \cos \Theta) ;$$

or, vu (1.7) et (2.13), son carré est :

$$\left(f_0 + g_0 \cos \Theta \right)^2 + g_0^2 \sin^2 \Theta = f_0^2 + 2 \frac{M_0}{L_0} f_0 g_0 + g_0^2 ;$$

d'où l'expression approchée (2.4)₂ de $\epsilon [L_0, M_0]$.

Note 2.2. - Les nombres quantiques

$$l, m, n, \pm 1$$

sont ceux qu'emploie la résolution classique de l'équation de Dirac, en leur imposant une condition :

- plus stricte que (2.6) ;

- moins stricte que celle que, vu (2.7), leur imposerait le choix : $l' = m' = 0$,

à savoir :

$$(2.6)^{\text{bis}} \quad |m| \leq l - \frac{1}{2}, \quad l < n .$$

Voici cette condition.

Définition 2. - Le chap. III, § 1 résout un système à une inconnue, analogue au système (2.2) quand on y choisit $l' = m' = 0$. Au chap. III, § 1 l'amplitude lagrangienne de l'inconnue est nécessairement constante ; c'est conforme au caractère de l'amplitude α et de la phase $v_0 \varphi_R$ en physique : α doit varier moins vite que $e^{v_0 \varphi_R}$. Rapprochons-nous de cette situation : donnons-nous un quadruplet

$$l, m, n, \pm 1$$

vérifiant la condition (2.5)₃ d'existence $(\forall l', m')$ d'une solution de (2.2)

lagrangienne sur $V [L_0, M_0]$; imposons à (l', m') de donner des valeurs voisines

de son minimum à la fonction :

$$(\ell', m') \mapsto |c_{\pm 1} - 1|^2 + |c_{\pm 2} - 1|^2 + |c_{\pm 3} + 1|^2 \in \mathbb{R},$$

c'est-à-dire, vu (2.9), puisque ℓ'^2 et m'^2 sont négligeables par rapport à

ℓ' et m' à la fonction :

$$(\ell', m') \mapsto \ell'^2 + m'^2 + [\ell' N_L + m' N_M \mp \epsilon]^2 \in \mathbb{R};$$

si ce choix :

$$(\ell', m') \text{ voisin de } \pm \frac{\epsilon}{1 + N_L^2 + N_M^2} (N_L, N_M)$$

vérifie la condition nécessaire (2.7), alors, et alors seulement, nous dirons que

le quadruplet $(\ell, m, n, \pm 1)$ est admissible.

Au § 2 (équation de Dirac), le cas suivant se présentera :

Exemple 2. (N_L, N_M) est voisin de $(-1, 0)$; donc (ℓ', m') est voisin de

$(\mp \frac{\epsilon}{2}, 0)$. Vu (2.7) : les quadruplets $(\ell, m, n, \pm 1)$ admissibles sont ceux qui vérifient la condition $(2.5)_3$ et, les signes se correspondant, la condition :

$$(2.23) \quad 0 \leq \ell < n, \quad |m| \leq \ell \pm \frac{1}{2}.$$

L'usage, en mécanique quantique est de noter

$$j = \ell \pm \frac{1}{2}$$

et d'employer des quadruplets de nombres quantiques :

$$(\ell, m, n, j = \ell \pm \frac{1}{2});$$

ils sont admissibles s'ils vérifient $(2.5)_3$ et si :

$$(2.24) \quad 0 \leq \ell < n, \quad |m| \leq j;$$

il leur correspond alors, pour chaque choix admissible de (ℓ', m') , des solutions U de (2.2), égales entre elles, à un facteur de proportionnalité près ; ce facteur est une constante $\in \mathbb{C}$.

§ 2. L'équation de Dirac.

L'équation de Dirac est un système à 4 inconnues ; les théorèmes 2.1 et 2.2 du chap. II, § 4 ne s'y appliquent pas, car les zéros de $\det. a_0^0$ sont doubles.

Le théorème 1, dont l'énoncé ressemble à celui de ce théorème 2.2 du chap. II, § 4, change, mod. $\frac{1}{v^2}$, ce système à 4 inconnues en un système auto-adjoint à 2 inconnues.

Par suppression de termes, qui sont négligeables vu l'ordre de grandeur du champ magnétique, le n° 2 transforme ce système en l'« équation de Dirac réduite », qui est du type résolu au § 1 .

Le n° 3 constate que les niveaux d'énergie définis par cette équation de Dirac réduite, en analyse lagrangienne, sont ceux que définit la résolution classique de l'équation de Dirac, même quand le champ magnétique est assez intense pour produire l'effet Paschen-Back.

Mais le n° 4 obtient une probabilité de présence de l'électron qui diffère de celle de la mécanique ondulatoire et s'apparente à la première théorie quantique.

1. REDUCTION DE L'EQUATION DE DIRAC, EN ANALYSE LAGRANGIENNE. - Donnons-nous deux applications, indéfiniment différentiables, et une constante :

$$A : E^3 \setminus \{0\} \rightarrow R_+ ; B : E^3 \rightarrow R ; C \in R_+ ;$$

soient a' et a'' les deux 2×2 - matrices d'opérateurs lagrangiens dont l'expression dans $Z(\mathfrak{z}) = E^3 \oplus E^3$ est :

$$a' = A(x) + \sigma \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial x} + B(x) \right], a'' = A(x) - \sigma \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial x} + B(x) \right],$$

σ étant la 2×2 - matrice définie au § 1 par (1.6) ; a' et a'' sont auto-adjointes ; elles sont associés aux matrices auto-adjointes.

$$A(x) + \sigma [p + B(x)] \quad \text{et} \quad A(x) - \sigma [p + B(x)] ;$$

l'équation de Dirac est le système :

$$(1.1) \quad a' U' = C U'' \quad , \quad a'' U'' = C U' \quad ,$$

dont les inconnues U' et U'' sont des vecteurs ; imposons aux 2 composantes de chacun de ces vecteurs d'être des fonctions lagrangiennes , définies sur une même variété lagrangienne COMPACTE V de $Z(3) = E^3 \oplus E^3$.

L'équation de Dirac (1.1) équivaut évidemment

i) au système d'inconnue U' :

$$(1.2) \quad [C^2 - a'' \circ a'] U' = 0 \quad ;$$

ii) au système d'inconnue U'' :

$$(1.3) \quad [C^2 - a' \circ a''] U'' = 0 \quad .$$

Le calcul de $C^2 - a'' \circ a'$ et $C^2 - a' \circ a''$ est aisé et classique ; pour expliciter le résultat, notons :

$$(1.4) \quad \begin{aligned} H(x, p) &= \frac{1}{2} |p + B(x)|^2 + \frac{C^2}{2} - \frac{1}{2} A^2(x) \quad , \\ J'(x, p) &= \frac{i}{2} \sigma \left[\frac{\partial}{\partial x} \wedge B(x) \right] + \frac{1}{2} \sigma [A_x] \quad , \quad J'' = \frac{i}{2} \sigma \left[\frac{\partial}{\partial x} \wedge B \right] - \frac{1}{2} \sigma [A_x] \quad , \end{aligned}$$

où :

$$\frac{\partial}{\partial x} \wedge B = \text{rot. } B \quad ;$$

$\frac{1}{2} [C^2 - a'' \circ a']$ est la matrice associée à la 2×2 matrice : $H + \frac{1}{v} J'$;

$\frac{1}{2} [C^2 - a' \circ a'']$ est la matrice associée à la 2×2 matrice : $H + \frac{1}{v} J''$;

Note 1.1. - Ces matrices ne sont pas auto-adjointes, mais adjointes l'une à l'autre.

Notations . - Soit W l'hypersurface de $E^3 \oplus E^3$ d'équation

$$(1.5) \quad W : H(x, p) = 0 \quad ;$$

soient β' et β'' les amplitudes lagrangiennes de U' et U'' :

$$\beta' : V \rightarrow \mathbb{C}^2 ; \quad \beta'' : V \rightarrow \mathbb{C}^2 .$$

Vu le théorème 4 du chap. II, § 3, l'équation (1.2) équivaut, mod. $\frac{1}{v^2}$, aux conditions :

$$(1.6) \quad \begin{aligned} &V \subset W , \\ &\frac{d\beta'}{dt} + J' \beta' = 0 , \end{aligned}$$

où $\frac{d}{dt}$ est la dérivée de Lie, \mathcal{L}_μ , suivant le vecteur caractéristique μ de V .

De même, (1.3) équivaut, mod. $\frac{1}{v^2}$, aux conditions : $V \subset W$;

$$(1.7) \quad \frac{d\beta''}{dt} + J'' \beta'' = 0 .$$

Vu (1.1), β' et β'' vérifient sur V les deux relations équivalentes :

$$(1.8) \quad \{ A(x) + \sigma [p+B(x)] \} \beta' = C \beta'' ; \quad \{ A - \sigma [p+B] \} \beta'' = C \beta' .$$

L'équivalence de (1.2) et (1.3) prouve l'équivalence des équations (1.6) et (1.7) ; la relation (1.8) transforme évidemment les solutions de l'une de l'une de ces équations en les solutions de l'autre.

La définition (1.5) de W exprime l'existence d'une fonction

$$\rho : W \rightarrow \mathbb{R}_+$$

telle que :

$$(1.9) \quad A = C \operatorname{ch} 2\rho ; \quad |p+B| = C \operatorname{sh} 2\rho ;$$

notons

$$(1.10) \quad \tau = \frac{1}{C \operatorname{sh} 2\rho} \sigma [p+B], \quad \text{en sorte que} \quad : \quad \tau^2 = 1,$$

vu § 1, (1.8) ; d'où :

$$C e^{+2\rho\tau} = A_+ \sigma [p+B] ;$$

la relation (1.8) liant β' et β'' s'écrit donc :

$$\beta'' = e^{2\rho\tau} \beta' ;$$

elle exprime l'existence d'une fonction

$$\beta : V \rightarrow \mathbb{C}^2$$

telle que :

$$\beta' = e^{-\rho \tau} \beta, \quad \beta'' = e^{\rho \tau} \beta;$$

les relations équivalentes (1.6) et (1.7) s'écrivent donc :

$$(1.11) \quad \frac{d\beta}{dt} + J \beta = 0,$$

où la 2×2 - matrice J vaut :

$$(1.12) \quad J = e^{\rho \tau} \frac{d}{dt} (e^{-\rho \tau}) + e^{\rho \tau} J' e^{-\rho \tau} = e^{-\rho \tau} \frac{d}{dt} (e^{\rho \tau}) + e^{-\rho \tau} J'' e^{\rho \tau}.$$

Nous allons prouver que cette définition de J équivaut à (1.14), ce qui rend évident le théorème suivant :

THEOREME 1. - La résolution sur V , mod. $\frac{1}{v^2}$, des systèmes (1.2) et (1.3), équivalents à l'équation de Dirac (1.1), équivaut à la résolution du système à deux inconnues :

$$(1.13) \quad a U = 0 \quad \text{mod.} \quad \frac{1}{v^2},$$

où a est la matrice d'opérateurs lagrangiens associée à la 2×2 - matrice :

$$H + \frac{1}{v} J;$$

H est défini par (1.4)₁ et J par :

$$(1.14) \quad J(x, p) = \frac{i}{2} \sigma \left[\frac{\partial}{\partial x} \wedge B \right] + \frac{i}{2} \frac{1}{A+C} \sigma \left[(p+B) \wedge A_x \right].$$

Note 1.2. - $\frac{1}{v} J$ et par suite a sont auto-adjoints. D'où, vu la note 1.1, l'intérêt de substituer (1.13) à (1.2) - (1.3) .

Preuve de (1.14) . - Vu les définitions (1.4) et (1.12) de J' , J'' et J , il suffit de prouver les formules suivantes, où $\langle ., . \rangle$ est le produit scalaire

dans E^3 et $\text{rot. } B = \frac{\partial}{\partial x} \wedge B$:

$$(1.15) \quad \frac{C}{2} \left\{ e^{\rho \tau} \frac{d}{dt} (e^{-\rho \tau}) + e^{-\rho \tau} \frac{d}{dt} (e^{\rho \tau}) \right\} =$$

$$- \frac{i}{2} (A - C) \sigma [\text{rot. } B] - \frac{i}{2} \frac{A}{A+C} \sigma \left[(p+B) \wedge A_x \right] + \frac{i}{2} \langle p+B, \text{rot. } B \rangle \tau \text{th } \rho;$$

$$(1.16) \quad \frac{iC}{4} \{ e^{\rho\tau} \sigma [\text{rot. B}] e^{-\rho\tau} + e^{-\rho\tau} \sigma [\text{rot. B}] e^{\rho\tau} \} =$$

$$\frac{i}{2} A \sigma [\text{rot. B}] - \frac{i}{2} \langle p+B, \text{rot. B} \rangle \tau \text{th } \rho ;$$

$$(1.17) \quad \frac{C}{4} \{ e^{\rho\tau} \sigma [A_x] e^{-\rho\tau} - e^{-\rho\tau} \sigma [A_x] e^{\rho\tau} \} =$$

$$\frac{i}{2} \sigma [-(p+B) \wedge A_x] .$$

Note 1.3. - Les relations de Pauli [§ 1, (1.7)] s'écrivent :

$$(1.18) \quad (\forall x, y \in E^3) \sigma [x] \sigma [y] = \langle x, y \rangle + i \sigma [x \wedge y] .$$

D'où, en particulier :

$$(1.19) \quad \sigma [x] \sigma [y] + \sigma [y] \sigma [x] = 2 \langle x, y \rangle ;$$

$$(1.20) \quad \sigma [x] \sigma [y] - \sigma [y] \sigma [x] = 2 i \sigma [x \wedge y] .$$

Preuve de (1.15) . - Puisque $\tau^2 = 1$ et que ρ est à valeurs dans R :

$$e^{\pm \rho \tau} = \text{ch } \rho \pm \tau \text{ sh } \rho ;$$

donc :

$$\begin{aligned} e^{\mp \rho \tau} \frac{d}{dt} (e^{\pm \rho \tau}) &= e^{\mp \rho \tau} \left[\frac{d\rho}{dt} \text{sh } \rho \pm \tau \frac{d\rho}{dt} \text{ch } \rho \pm \frac{d\tau}{dt} \text{sh } \rho \right] \\ &= \pm \tau \frac{d\rho}{dt} \pm e^{\mp \rho \tau} \frac{d\tau}{dt} \text{sh } \rho ; \end{aligned}$$

d'où :

$$(1.21) \quad \frac{1}{2} \left[e^{\rho\tau} \frac{d}{dt} (e^{-\rho\tau}) + e^{-\rho\tau} \frac{d}{dt} (e^{\rho\tau}) \right] = -\tau \frac{d\tau}{dt} \text{sh}^2 \rho .$$

Pour calculer $\tau \frac{d\tau}{dt}$, dérivons la définition (1.10) de τ :

$$C \frac{d\tau}{dt} \text{sh } 2\rho + 2 C \tau \frac{d\rho}{dt} \text{ch } 2\rho = \sigma \left[\frac{d}{dt} (p+B) \right] ;$$

d'où, vu (1.9) et (1.10) :

$$C^2 \tau \frac{d\tau}{dt} \operatorname{sh}^2 2\rho = -\frac{1}{2} \frac{dA^2}{dt} + \sigma [p+B] \sigma \left[\frac{d}{dt} (p+B) \right];$$

donc, vu (1.18) et vu que $A^2 = C^2 + |p+B|^2$ sur W :

$$(1.22) \quad C^2 \tau \frac{d\tau}{dt} \operatorname{sh}^2 2\rho = i \sigma \left[(p+B) \wedge \frac{d}{dt} (p+B) \right].$$

Vu la définition de $\frac{d}{dt}$, chap. II, § 3, (3.10) :

$$\frac{dx}{dt} = H_p(x, p), \quad \frac{dp}{dt} = -H_x(x, p);$$

d'où, par des calculs aisés :

$$\frac{d}{dt} (p+B) = - (p+B) \wedge \operatorname{rot}. B + A A_x,$$

$$(p+B) \wedge \frac{d}{dt} (p+B) = |p+B|^2 \operatorname{rot}. B - \langle p+B, \operatorname{rot}. B \rangle (p+B) + A (p+B) \wedge A_x;$$

puisque

$$2 C \operatorname{ch}^2 \rho = C [\operatorname{ch} 2\rho + 1] = A + C, \quad |p+B|^2 = A^2 - C^2,$$

(1.22) s'écrit donc, vu (1.10)

$$2 C \tau \frac{d\tau}{dt} \operatorname{sh}^2 \rho = i(A-C) \sigma [\operatorname{rot}. B] - i \langle p+B, \operatorname{rot}. B \rangle \tau \operatorname{th} \rho + i \frac{A}{A+C} \sigma [p+B] \wedge A_x];$$

d'où (1.15), vu (1.21) .

Preuve de (1.16) et (1.17) . - Soit $y \in E^3$;

$$(1.23) \quad e^{\pm \rho \tau} \sigma [y] e^{\mp \rho \tau} =$$

$$\sigma [y] \operatorname{ch}^2 \rho \pm \frac{1}{2} \{ \tau \sigma [y] - \sigma [y] \tau \} \operatorname{sh} 2\rho - \tau \sigma [y] \tau \operatorname{sh}^2 \rho ;$$

or, vu la définition (1.10) de τ et la formule de commutation (1.20) :

$$(1.24) \quad \frac{C}{2} \{ \tau \sigma [y] - \sigma [y] \tau \} \operatorname{sh} 2\rho = i \sigma [(p+B) \wedge y];$$

vu (1.10 et (1.19) :

$$\tau \sigma [y] = \frac{2}{C \operatorname{sh} 2\rho} \langle p+B, y \rangle - \sigma [y] \tau ;$$

donc

$$(1.25) \quad \tau \sigma [y] \tau = \frac{2}{C \operatorname{sh} 2\rho} \langle p+B, y \rangle \tau - \sigma [y] ;$$

vu (1.24) et (1.25) , (1.23) s'écrit :

$$C e^{\frac{+\rho \tau}{2}} \sigma [y] e^{\frac{-\rho \tau}{2}} = A \sigma [y] - \langle p+B, y \rangle \tau \operatorname{th} \rho \pm i \sigma [(p+B) \wedge y] .$$

d'où les deux formules :

$$\frac{C}{2} \{ e^{\rho \tau} \sigma [y] e^{-\rho \tau} + e^{-\rho \tau} \sigma [y] e^{\rho \tau} \} = A \sigma [y] - \langle p+B, y \rangle \tau \operatorname{th} \rho ,$$

$$\frac{C}{2} \{ e^{\rho \tau} \sigma [y] e^{-\rho \tau} - e^{-\rho \tau} \sigma [y] e^{\rho \tau} \} = i \sigma [(p+B) \wedge y] ,$$

qui prouvent respectivement (1.16) et (1.17) .

2. L'EQUATION DE DIRAC REDUITE, POUR L'ATOME A UN ELECTRON, DANS UN CHAMP MAGNETIQUE CONSTANT. - Choisissons A, B et C tels que la fonction H définie par (1.4)₁ soit l'hamiltonien de l'électron relativiste, placé dans un champ magnétique constant : H doit être, au facteur μ près, la fonction définie par les formules (4.15) et (4.18) du chap. III, § 1 ; donc :

A est fonction de R ; la fonction $R \mapsto R A (R)$ est affine ;

$$B = \frac{1}{2} (- b x_2, b x_1, 0), \quad \text{où } b \in \mathbb{R} .$$

Dans l'expression (1.4) de H, négligeons B^2 , comme le fait (4.20) au chap. III, § 1 ; dans l'expression (1.14) de J, négligeons de même

le terme $\frac{i}{2} \frac{1}{A+C} \sigma [B \wedge A_x]$ par rapport à $\frac{i}{2} \sigma [\frac{\partial}{\partial x} \wedge B]$,

car, sur V, $\frac{x \cdot A_x}{A+C}$ sera négligeable par rapport à 1 ; les expressions (1.4) et

(1.14) de H et J se réduisent donc à :

$$(2.1) \quad H (x, p) = \frac{1}{2} [P^2 + b M + C^2 - A^2 (R)] ,$$

où : b et $C \in \mathbb{R}$; $R \mapsto R A (R)$ est affine ;

$$(2.2) \quad J(x, p) = \frac{i}{2} b \sigma_3 - \frac{i}{2} \frac{A_R}{R(A+C)} \sigma [x \wedge p].$$

H et J étant ainsi choisis, la matrice d'opérateurs lagrangiens associée à

$$H + \frac{1}{v} J$$

sera notée a_r et nommée « opérateur de Dirac réduit ».

Note 2 . - H, défini par (2.1), s'identifie donc, au facteur μ près, à la fonction définie par la formule (4.20) du chap. III, § 1 ; d'où :

$$A = \frac{1}{c} \left(E + \frac{e^2 Z}{R} \right), \quad b = \frac{e \mathcal{H}}{c}, \quad C = \mu c,$$

où : c est la vitesse de la lumière ;

μ et e sont la masse et la charge de l'électron, Z le nombre atomique du noyau ;

E est le niveau d'énergie de l'atome ; il est voisin de μc^2 ;

\mathcal{H} est l'intensité du champ magnétique.

Nous substituons à l'étude de l'équation de Dirac celle du système :

$$(2.3) \quad a_r U = \left(a_{L_2} - L_0^2 - \frac{2i}{v} L_0 \ell' \right) U = \left(a_M - M_0 - \frac{i}{v} m' + \frac{i}{2v} \sigma_3 \right) U = 0,$$

où le vecteur U a deux composantes, qui sont des fonctions lagrangiennes définies sur une variété lagrangienne COMPACTE V de $E^3 \oplus E^3$, et où ℓ' et m' sont réels et de carrés négligeables.

Le théorème 2 du § 1 s'applique à ce système (2.3), au moyen des deux lemmes suivants, qui l'explicitent.

LEMME 2.1. - Une valeur approchée de la fonction ϵ , définie au § 1 par (2.4)₃ est :

$$(2.4) \quad \epsilon [L_0, M_0] = \frac{1}{\xi} \sqrt{(1 + N_L)^2 + 2 \frac{M_0}{L_0} (1 + N_L) N_M + N_M^2},$$

où $N_L = N_L [L_0, M_0]$, $N_M = N_M [L_0, M_0]$.

Preuve . - Explicitons les valeurs de f_0 et g_0 , définies au § 1 par (2.4)₁ et (2.4)₂. Vu (2.1) :

$$(2.5) \quad H [L, M, Q, R] = \frac{L^2 + Q^2}{2R^2} + \frac{b}{2} M + \frac{1}{2} C^2 - \frac{1}{2} A^2 (R);$$

donc :

$$H_L = \frac{L}{R^2}, \quad H_M = \frac{b}{2};$$

or vu chap. III, § 2, (2.3) :

$$\lambda_t = -H_L, \quad \mu_t = -H_M;$$

vu chap. III, § 2, (1.5), on a, en écrivant Γ pour $\Gamma [L_0, M_0]$:

$$\int_{\Gamma} \lambda_t dt = \Delta_t \lambda = 2 \pi N_L, \quad \int_{\Gamma} \mu_t dt = \Delta_t \mu = 2 \pi N_M;$$

donc :

$$(2.6) \quad \int_{\Gamma} \frac{L_0}{R^2} dt = -2 \pi N_L, \quad \int_{\Gamma} \frac{b}{2} dt = -2 \pi N_M.$$

Cette dernière formule et la formule (2.4)₁ du § 1, où $f = b/2$, vu le choix (2.2) de J , donnent :

$$(2.7) \quad f_0 = -\pi N_M.$$

Vu ce choix de J et au § 1 la définition (2.4) de g_0 :

$$(2.8) \quad g_0 = -\frac{L_0}{2} \int_{\Gamma} \frac{A_R}{R(A+C)} dt;$$

or vu chap. III, § 1, (2.14) et vu (2.5), on a sur Γ :

$$(2.9) \quad dt = \frac{dR}{R H_Q} > 0, \quad H_Q = \frac{Q}{R^2}; \quad \text{donc : } dt = \frac{R dR}{Q} > 0;$$

les relations (2.8) et (2.6)₁ s'explicitent donc comme suit :

$$(2.10) \quad g_0 = -\frac{1}{2} \int_{\Gamma} \frac{L_0}{Q} \frac{A_R dR}{A+C}; \quad 2 \pi N_L = - \int_{\Gamma} \frac{L_0}{Q} \frac{dR}{R}.$$

Calculons une valeur approchée de g_0 : sa valeur pour $b = 0$. Vu (2.5), l'équation de Γ est alors

$$(2.11) \quad \Gamma : Q^2 = A'(R) A''(R) - L_0^2, \text{ où } A'(R) = RA(R) + CR, A''(R) = RA(R) - CR;$$

A' et A'' sont des fonctions affines ; vu la note 2 : A' croît ; $A'(R) > 0$ pour $R > 0$; d'où, par un calcul de résidu facile :

$$(2.12) \quad \int_{\Gamma} \frac{L_0}{Q} \frac{A'_R}{A'} dR = 2\pi;$$

or, vu (2.11)₂ :

$$\frac{A'_R}{A'} = \frac{1}{R} + \frac{A_R}{A+C};$$

les relations, (2.10) et (2.12) prouvent donc que

$$(2.13) \quad g_0 = -\pi(1 + N_L).$$

Les formules (2.7), (2.13) et, au § 1, (2.4)₃ prouvent le lemme.

Les hypothèses faites au § 1, n° 2, y compris celles de l'exemple 2 du § 1, sont vérifiées, vu le :

LEMME 2.2. - Les valeurs des grandeurs physiques définissant A , B et C (Note 2) sont telles, que pour les niveaux d'énergie E qu'emploiera le n° 3 :

$$f_0 = -\pi N_M, \quad g_0 = -\pi(1 + N_L), \quad N_{L^2}, \quad N_{LM}, \quad N_{M^2}$$

sont petits par rapport à 1.

Preuve. - L'expression de $N[.,.]$ est donnée au chap. III, § 1 par (4.8), où A_0 , B_0 et C_0 sont définis par l'identification des formules (4.6) et (4.20) de ce chap. III, § 1 :

$$(2.14) \quad \frac{1}{\hbar} N[L_0, M_0] = \alpha Z \left[\frac{\mu c^2 (\mu c^2 + 2\beta \mathcal{N} M_0 / \hbar)}{E^2} - 1 \right]^{-\frac{1}{2}} - \left[\left(\frac{L_0}{\hbar} \right)^2 - \alpha^2 Z^2 \right]^{\frac{1}{2}},$$

où : Z, c, μ, ϵ, E et \mathcal{N} sont les grandeurs physiques définies par la note 2,

$$(2.15) \quad \alpha = \frac{\epsilon^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \text{ est la « constante de structure fine », sans dimension ;}$$

$$(2.16) \quad \beta = \frac{\epsilon \hbar}{2\mu c} \text{ est le « magnéton de Bohr » .}$$

Le n° 3 choisira :

$$0 < \frac{\mu c^2}{E} - 1 \approx \frac{\alpha^2 Z^2}{2n^2} \quad (\approx : \text{ de l'ordre de grandeur de ; } n \text{ entier})$$

l'énergie magnétique $\beta \mathcal{H}$ très petite par rapport à μc^2 ;

$2 M_0 / \hbar$ entier, ne prenant pas de grandes valeurs ; $\frac{L_0}{\hbar} > \frac{1}{2}$.

D'où le lemme.

3. LES NIVEAUX D'ENERGIE . - Notations . - Les formules (4.23) et (4.25) du chap. III, § 1 ont déjà défini la fonction F valant :

$$(3.1) \quad F(n, k) = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\alpha Z}{n - k + \sqrt{k^2 - \alpha^2 Z^2}} \right)^2}} ;$$

notons le signe de ses dérivées :

$$F_n > 0, F_k > 0 .$$

F permet de donner à la relation :

$$(3.2) \quad \hbar k + N [\hbar k, \hbar m] = \hbar n ,$$

où N a l'expression (2.14), la forme :

$$E^2 = \mu c^2 [\mu c^2 + 2 \beta \mathcal{H} m] F^2(n, k) ,$$

c'est-à-dire, au degré d'approximation utilisé ici :

$$(3.3) \quad E = \mu c^2 F(n, k) + \beta \mathcal{H} m ;$$

dans ces formules α est la constante de structure fine (2.15) et β le magnéton de Bohr (2.16)

THEOREME 3 . - Les niveaux d'énergie E pour lesquels le système (2.3) (où l' et m' sont réels et de carrés négligeables) possède des solutions lagrangiennes ADMISSIBLES (§ 1, définition 2), sur une variété lagrangienne COMPACTE, sont définis par les quadruplets de nombres quantiques

$$(3.4) \quad j = l \pm \frac{1}{2}, m, n$$

tels que :

$$(3.5) \quad l, m - \frac{1}{2}, n \text{ sont entiers ;}$$

$$(3.6) \quad |m| \leq j, 0 \leq l < n .$$

A des quantités négligeables près, E s'exprime comme suit, en fonction de

$$(3.7) \quad k = j + \frac{1}{2}, m, n :$$

$$(3.8) \quad E = \mu c^2 F(n, k) \pm \frac{\mu c^2}{2} \left[\sqrt{F_k^2 + \frac{4m}{2\ell+1} F_k \frac{\beta \mathcal{H}}{\mu c^2} + \frac{\beta^2 \mathcal{H}^2}{\mu^2 c^4} - F_k} \right] + \beta \mathcal{H} m.$$

Le signe \pm est le même dans (3.4) et (3.8).

Note 3.1. - Pour $\mathcal{H} = 0$, puisque $F_k > 0$, (3.8) se réduit à

$$(3.9) \quad E = \mu c^2 F(n, k).$$

Preuve. - Vu le théorème 2 du § 1, les niveaux d'énergie E tels que le système (2.3) ait des solutions définies sur des variétés lagrangiennes compactes sont ceux qui vérifient la condition (2.5) du § 1 ; vu la valeur approchée que le lemme 2.1 donne de $\epsilon \in [L_0, M_0]$, ces valeurs de E sont approximativement celles qui vérifient la condition :

$$(3.10) \quad \begin{aligned} & \mathcal{H} \left(\ell + \frac{1}{2} \right) + N \left[\mathcal{H} \left(\ell + \frac{1}{2} \right), \mathcal{H} m \right] = \\ & = \mathcal{H} n \pm \frac{\mathcal{H}}{2} \sqrt{(1 + N_L)^2 + \frac{4m}{2\ell+1} (1 + N_L) N_M + N_M^2}, \end{aligned}$$

$$|m| \leq \ell + \frac{1}{2}, \ell < n; \ell, m - \frac{1}{2}, n \text{ entiers}; 1 + N_L \text{ et } N_M \text{ petits.}$$

Vu l'équivalence de (3.2) et (3.3), une approximation grossière de E est donc :

$$(3.11) \quad E \simeq \mu c^2 F(n, \ell + \frac{1}{2}) \simeq \mu c^2 \left[1 - \frac{\alpha^2 Z^2}{2n^2} \right]$$

ce qui suffit à justifier l'emploi du lemme 2.2 et à déduire de (2.14) que

$$1 + N_L < 0;$$

Vu (2.14), $N_M = 0$ pour $\mathcal{H} = 0$; donc (3.10)₁ s'écrit, pour $\mathcal{H} = 0$, vu que

$$k = \ell + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} :$$

$$\mathcal{H} k + N \left[\mathcal{H} k, \mathcal{H} m \right] = \mathcal{H} n$$

et pour \mathcal{H} quelconque :

$$(3.12) \quad \hbar k + N \left[\hbar k, \hbar m \right] = \hbar n \pm \frac{\hbar}{2} \left[\sqrt{(1+N_L)^2 + \frac{4m}{2\ell+1} (1+N_L) N_M + N_M^2 + 1 + N_L} \right].$$

Vu l'exemple 2 du § 1 et le lemme 2.2, la condition que des solutions admissibles du système (2.3) correspondent à un choix de ℓ, m, n et E vérifiant (3.12) est que

$$|m| \leq \ell \pm \frac{1}{2},$$

c'est-à-dire qu'on ait (3.6) et (3.4), le signe \pm de (3.4) et (3.12) étant le même.

Puisque (3.2) équivaut à (3.3), d'une part (3.12) s'écrit :

$$(3.13) \quad E = \mu c^2 F \left(n \pm \frac{1}{2} \left[\sqrt{(1+N_L)^2 + \frac{4m}{2\ell+1} (1+N_L) N_M + N_M^2 + 1 + N_L} \right], k \right) + \beta \mathcal{H} m;$$

d'autre part les deux relations suivantes sont équivalentes ($\forall dk, dm, dn$) :

$$(1+N_L) dk + N_M dm = dn, \quad \mu c^2 (F_n dn + F_k dk) + \beta \mathcal{H} dm = 0.$$

Cette équivalence signifie que :

$$\mu c^2 F_n = - \frac{\mu c^2 F_k}{1+N_L} = - \frac{\beta \mathcal{H}}{N_M};$$

donc, puisque $F_n > 0$:

$$\left[\sqrt{(1+N_L)^2 + \frac{4m}{2\ell+1} (1+N_L) N_M + N_M^2 + 1 + N_L} \right] F_n =$$

$$\sqrt{F_k^2 + \frac{4m}{2\ell+1} F_k \frac{\beta \mathcal{H}}{\mu c^2} + \frac{\beta^2 \mathcal{H}^2}{\mu^2 c^4}} - F_k;$$

(3.13) équivaut donc à (3.8) .

Note 3.2. - Les niveaux d'énergie qu'obtient le théorème 3 sont exactement ceux qu'obtient la théorie classique de l'atome de Dirac : voir par exemple Bethe et Salpeter [2] ; pour $\mathcal{H} = 0$, leur formule (14.29), p. 68, s'identifie à notre formule (3.9) et, pour $\mathcal{H} \neq 0$, leurs formules (46.12), (46.13), (46.15), p. 211, s'identifient à notre formule (3.8), leurs notations correspondant comme suit aux nôtres :

Bethe - Salpeter : $E_0 = m c^2$; E_+ ; E_- ;

Note 2 et n° 3 : μc^2 ; $\mu c^2 F(n, l+1)$; $\mu c^2 F(n, l)$;

B. - S. : $\frac{1}{2} (E_+ + E_-)$; $\Delta E = E_+ - E_-$; μ_0 ; $\xi = \frac{\mathcal{H} \mu_0}{\Delta E}$;

: $\mu c^2 F(n, l + \frac{1}{2})$; $\mu c^2 F_k$; β ; $\frac{\beta \mathcal{H}}{\mu c^2 F_k}$;

B. - S : $E' = \Delta E \left[\xi m \pm \frac{1}{2} \sqrt{1 + \xi \frac{4m}{2l+1} + \xi^2} \right]$.

: $\beta \mathcal{H} m \pm \frac{\mu c^2}{2} \sqrt{F_k^2 + \frac{4m}{2l+1} F_k \frac{\beta \mathcal{H}}{\mu c^2} + \frac{\beta^2 \mathcal{H}^2}{\mu^2 c^4}}$.

Note 3.3. - Quand $\beta \mathcal{H}$ est petit par rapport à $\mu c^2 F_k$, la formule (3.8) s'écrit évidemment :

$$E = \mu c^2 F(n, k) + \beta \mathcal{H} g m, \quad \text{où } g = \frac{j+1/2}{l+1/2}$$

est le « facteur de Landé » : cf. Bethe - Salpeter [2], (46.4) et (46.6), p. 209 .

4. LA PROBABILITE DE PRESENCE DE L'ELECTRON. - Rappelons que

$$x \in X, \quad p \in X^*,$$

X et son dual X^* étant l'espace euclidien E^3 ; x est la position, p est la quantité de mouvement de l'électron. Notons, avec les conventions de la note 2 :

$$R_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$$

la longueur appelée, en première théorie quantique, « rayon de l'atome de Bohr » ; Z étant le nombre atomique du noyau, notons :

$$x' = \frac{Zx}{R_0} \quad , \quad R' = \frac{ZR}{R_0} \quad .$$

THEOREME 4 . - La position x de l'électron de nombres quantiques
 ($j = \ell + \frac{1}{2}$, ℓ, m, n) appartient à la projection V_X sur X de $V[L_0, M_0]$; V_X
est la partie de X comprise entre deux sphères et extérieure à un cône de révo-
lution autour du champ magnétique ; le centre de ces sphères et le sommet de ce cône
coïncident avec le noyau de l'atome.

Convenons que, sur $V[L_0, M_0] \subset X \oplus X^*$, la probabilité de présence de l'électron
est proportionnelle à la mesure invariante η [Cf. Conclusion de l'Introduction au
chap. III] ; alors sur V_X , la probabilité de présence de l'électron est approxi-
mativement :

$$(4.1) \quad \frac{1}{2\pi^3} \frac{\ell + 1/2}{n^2} \frac{d^3 x'}{\sqrt{-R'^2 + 2n^2 R' - (\ell + 1/2)^2 n^2} \sqrt{(\ell + 1/2)^2 (x_1'^2 + x_2'^2) - m^2 R'^2}}$$

Une définition approchée de V_X est celle-ci : V_X est la partie de X où les
radicaux ci-dessus sont tous deux réels.

Note 4.1. - Si $m = \ell + 1/2$, alors : V_X est le disque où :

$$x_3 = 0 ; R'^2 - 2n^2 R' + (\ell + 1/2)^2 n^2 \leq 0 ;$$

la probabilité de présence de l'électron sur ce disque est :

$$\frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{n^2} \frac{d^2 x'}{\sqrt{-R'^2 + 2n^2 R' - (\ell + 1/2)^2 n^2}} \quad .$$

Preuve. - Sur $V[L_0, M_0]$, la probabilité de présence de l'électron est, par
définition :

$$\frac{1}{4\pi} \left[\int_{\Gamma} dt \right]^{-1} dt \wedge d\psi \wedge d\phi, \quad \text{puisque} \quad \eta = dt \wedge d\psi \wedge d\phi.$$

La projection V_X sur X de $V[L_0, M_0]$ est, vu chap. III, § 1, (1.5), (1.11),
 (1.12)₁, l'ensemble des points x de X en lesquels :

$$(4.2) \quad \left| \frac{x_3}{R} \right| \leq \sin \Theta, \quad \text{où} \quad \cos \Theta = \frac{M_0}{L_0} ;$$

l'équation du second degré en Q

$$(4.3) \quad H [L_0, M_0, Q, R] = 0$$

a ses racines réelles

V_X est donc bien la partie de X comprise entre deux sphères et extérieure à un cône de révolution, dont les centres et le sommet sont en O .

Les formules (1.5), (1.6) et (1.12) du chap. III, § 1 montrent que tout point x intérieur à V_X est la projection de 4 points (t, Ψ, Θ) de $V[L_0, M_0]$. Vu chap. III, § 1, (1.16), (3.6) et vu (2.9) :

$$d^3x = -QR \sin \Psi \sin \Theta \, dt \wedge d\Psi \wedge d\Theta, \quad dt = \frac{R dR}{Q} > 0,$$

la donnée de x définit $|Q|$. Sur V_X , la probabilité de présence de l'électron est donc :

$$(4.4) \quad \frac{1}{\pi^2} \left[\int_{\Gamma} \frac{R dR}{Q} \right]^{-1} \frac{d^3x}{|Q| R |\sin \Psi| |\sin \Theta|}$$

Vu chap. III, § 1, (1.12)₁ :

$$x_3 = R \cos \Psi \sin \Theta;$$

donc, vu (4.2)₂ :

$$(4.5) \quad R |\sin \Psi| |\sin \Theta| = \frac{1}{L_0} [L_0^2 (x_1^2 + x_2^2) - M_0^2 R^2]^{\frac{1}{2}}, \quad \text{où } \frac{M_0}{L_0} \simeq \frac{m}{\ell + 1/2}.$$

La définition de Q par l'équation (4.3) donne, vu (2.1) et la note 2, en négligeant $\alpha^2 Z^2$ par rapport à 1 (α : constante de structure fine) et en donnant à E sa valeur approchée (3.11) :

$$(4.6) \quad Q \simeq \frac{\hbar}{n} [-R'^2 + 2n^2 R' - (\ell + 1/2)^2 n^2]^{\frac{1}{2}}.$$

d'où :

$$(4.7) \quad \int_{\Gamma} \frac{R dR}{Q} \simeq 2\pi \frac{R_0^2}{Z^2} \frac{n^3}{\hbar}$$

Les formules (4.5), (4.6), (4.7) donnent à la probabilité (4.4) son expression approchée (4.1) .

V_X , étant la partie de X où (4.5) et Q sont réels, est défini approximativement par la condition que les radicaux figurant dans (4.1) sont réels.

Note 4.2. - Le théorème 4 définit une probabilité de présence de l'électron

extrêmement différente de celle que définit la mécanique ondulatoire, mais étroitement apparentée à la première mécanique quantique : l'électron appartient à une partie compacte V_X de X , qui est la réunion des trajectoires employées par cette première mécanique quantique ; sa probabilité de présence se définit aussi simplement que possible à partir des équations caractérisant V_X .

Note 4.3. - Le cas $m = \ell + 1/2$ présente des difficultés (cf : § 1, Note 2 : la notion de solution admissible), qu'éluciderait peut-être la définition de fonctions lagrangiennes sur des variétés de dimensions inférieures à la dimension maximale des variétés lagrangiennes ; cette notion se relierait peut-être à une partie des travaux de A. VOROS [23]-[24].

CONCLUSION . - Cet article a explicité « la quantification de Maslov ». D'une part, le théorème 3 du chap. IV § 2 prouve qu'elle s'apparente à la mécanique ondulatoire classique, dont elle sauvegarde des résultats essentiels ; d'autre part, le théorème 4 de ce chap. IV, § 2 prouve qu'elle s'apparente à la première théorie quantique, dont elle sauvegarde la simplicité des calculs ; il prouve aussi qu'elle définit une nouvelle probabilité de présence de l'électron, donc une nouvelle expression de l'interaction des électrons d'un atome. Nos chapitres I et II ont montré comment elle substitue à la quantification de Bohr - Sommerfeld une quantification que des motivations mathématiques justifient ; du point de vue de la physique, cette quantification ne se justifierait que si elle parvenait à une évaluation correcte des niveaux d'énergie des atomes à plusieurs électrons ; les calculs sont amorcés dans le cas le plus simple, celui de l'hélium.