



HAL
open science

Sur diverses grandeurs physiques de la théorie de Dirac

L. Goldstein

► **To cite this version:**

L. Goldstein. Sur diverses grandeurs physiques de la théorie de Dirac. Journal de Physique et le Radium, 1935, 6 (2), pp.78-88. 10.1051/jphysrad:019350060207800 . jpa-00233302

HAL Id: jpa-00233302

<https://hal.science/jpa-00233302>

Submitted on 4 Feb 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

SUR DIVERSES GRANDEURS PHYSIQUES DE LA THÉORIE DE DIRAC

Par L. GOLDSTEIN.

Institut Henri Poincaré.

Sommaire. — On étudie les valeurs *probables* ou valeurs *moyennes* de diverses grandeurs opératorielles de la théorie de Dirac dans les états discrets des atomes hydrogénéoïdes. Une discussion, en connexion avec ces valeurs moyennes, des composantes de la *vitesse* (dérivées temporelles des coordonnées de l'électron) et de l'*accélération* conduit à classer ces grandeurs avec les grandeurs *intrinsèques* (spin, moments magnétique et électrique) et les opérateurs à densité invariante en un groupe de grandeurs non observables. Celles-ci se présentent toujours sous la forme d'un produit de matrices fondamentales ou d'une combinaison linéaire de tels produits. Cette forme opératorielle serait une condition suffisante du caractère non observable. L'étude du moment magnétique atomique, opérateur de perturbation, permet d'écrire sous sa forme exacte l'opérateur du second ordre, en l'énergie, de Dirac qui a été donné toujours, en présence d'un champ extérieur, sous une forme légèrement inexacte. On montre, en même temps, que la masse intervient sous la forme opératorielle dans les opérations sur des grandeurs quantiques.

1. — Les grandeurs physiques contenues dans l'équation de Dirac se divisent en deux groupes du point de vue de leur caractère classique ou quantique. Les seules grandeurs (1) qui gardent un sens précis sur la base de la notion classique de trajectoire sont la charge de l'électron, sa masse et la vitesse de la lumière dans le vide. Toutes les autres grandeurs sont des grandeurs q , des grandeurs opératorielles. Dans le présent travail, nous étudions ces opérateurs et ceci surtout du point de vue des valeurs probables qu'ils sont susceptibles de prendre dans les états discrets des atomes hydrogénéoïdes donnés à l'avance. Simultanément, ceci permet d'apporter des précisions quant à l'interprétation physique de ces opérateurs et quant à leur étymologie. Dans certains cas, l'étude des valeurs propres ou caractéristiques de diverses grandeurs conduit à avancer divers arguments en vue de pouvoir décider du caractère *observable* ou *mesurable* de la grandeur en question ou de deux grandeurs liées intimement entre elles.

Un résultat qui semble se dégager du présent travail consiste en la possibilité de classer divers opérateurs parmi ceux qui ne seraient pas associés à des grandeurs physiques observables, qui échappent à la mesure. Il apparaît que les opérateurs se présentant sous la forme d'une matrice fondamentale de Dirac, de produit de telles matrices ou de leur combinaison linéaire, abstraction faite, bien entendu, du facteur dimensionnel qui est un nombre c , ces opérateurs ne seraient pas des observables. Nous entendons par là qu'aucune mesure physique *réelle* et non pas *mentale* ne peut atteindre leurs valeurs propres. La forme d'opérateur indiquée serait une condition suffisante du caractère non observable. Souvent ces grandeurs complètent d'autres également non observables pour for-

mer une observable. La condition de non observabilité apparaît en connexion avec l'étude des composantes de la vitesse (dérivées temporelles des coordonnées) et de l'accélération qui échapperaient à la mesure. Ces grandeurs se rangeraient ainsi avec les opérateurs intrinsèques, dont le caractère non-observable est bien connu, et avec les opérateurs $\alpha_i m$ et le produit des quatre matrices fondamentales $\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4$, dans un groupe de grandeurs dont les valeurs *propres* et partant les valeurs probables ne correspondraient qu'à des mesures idéales ou mentales. Le présent travail ne touche en rien à la difficulté actuelle de l'effet de polarisation de Mott.

L'étude du moment magnétique de l'atome, qui est un opérateur de perturbation, a permis d'écrire sous une forme exacte l'équation du second ordre de Dirac, en l'énergie, qui avait été donnée sous une forme légèrement inexacte en présence d'un champ extérieur. En liaison avec ceci, il s'est trouvé que la grandeur masse doit être prise dans des opérations sur des grandeurs quantiques sous la forme de l'opérateur non observable $\alpha_i m$.

Les diverses grandeurs étudiées dans ce travail peuvent être classées approximativement en trois groupes, le groupe des opérateurs cinématiques, celui des opérateurs dynamiques et le groupe électromagnétique. On étudiera successivement les grandeurs suivantes : vitesse et accélération (groupe cinématique), impulsion, moment cinétique et spin, force (groupe dynamique) et enfin les moments magnétique et électrique intrinsèques et le moment magnétique atomique (groupe électromagnétique). Le dernier opérateur n'est défini en réalité que comme une grandeur de perturbation.

2. — Les dérivées temporelles des coordonnées de l'électron définissent les composantes de la vitesse.

(1) N. ВОНН. *Rapports et discussions au 6^e Conseil Solvay*, p. 276. Gauthier-Villars, éditeur, Paris, 1932.

Considérons d'abord le cas d'un électron libre. L'opérateur énergie est alors

$$H = c(\alpha \mathbf{p}) + \alpha_4 mc^2 \quad (1)$$

et la dérivée de la coordonnée x_k est (1)

$$\dot{x}_k = \frac{dx_k}{dt} = \frac{2\pi i}{h} [H, x_k] = c\alpha_k \cdot \frac{2\pi i}{h} [p_k, x_k] = c\alpha_k. \quad (2)$$

Il est facile de voir que l'opérateur précédent garde encore la même forme pour un électron en présence d'un champ électromagnétique. Soient, en effet, V et \mathbf{A} (A_1, A_2, A_3) les potentiels scalaire et vecteur du champ et $-e$ la charge de l'électron. L'opérateur (1) devient

$$H = c(\alpha \mathbf{P}) + \alpha_4 mc^2 - eV \quad (3)$$

avec

$$P_k = p_k + \frac{e}{c} A_k. \quad (4)$$

Si l'on se rappelle que x_k commute avec V et A_k , on vérifie que (2) représente encore \dot{x}_k ou v_k . Il n'en est plus de même avec les composantes de l'opérateur accélération. En effet (2), on a d'abord pour le cas de l'opérateur (1) :

$$\begin{aligned} \gamma_k &= \frac{dv_k}{dt} = c\dot{\alpha}_k = c \cdot \frac{2\pi i}{h} [H, \alpha_k] \\ &= \frac{4\pi mc^3}{h} ([\sigma \times \mathbf{p}/mc]_k - \varepsilon_k) \end{aligned} \quad (5)$$

où l'on a posé :

$$\sigma_i = (\sqrt{-1}) \cdot \alpha_k \alpha_l; \quad \varepsilon_k = (\sqrt{-1}) \cdot \alpha_k \alpha_l; \quad (i, k, l = 1, 2, 3). \quad (6)$$

(5) est donc la composante k de l'opérateur accélération associé à un électron libre. L'opérateur γ_k dépend explicitement des composantes p_l et p_i de l'impulsion, il en résulte, et on le vérifie aisément qu'en présence d'un champ électromagnétique, les composantes de l'accélération sont :

$$\Gamma_k = \frac{4\pi mc^3}{h} \left([\sigma \times \mathbf{P}]_k \frac{1}{mc} - \varepsilon_k \right) \quad (7)$$

les P_k étant définis par (4).

L'opérateur impulsion est un opérateur correspondant, c'est-à-dire sa signification est identique à celle de l'opérateur impulsion en théorie non relativiste.

Le moment cinétique est défini, comme on le sait, par

$$\mathbf{M} = \mathbf{L} + \mathbf{s} \quad (8)$$

avec

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{P} \quad (9)$$

$$\mathbf{s} = -\frac{h}{4\pi} \boldsymbol{\sigma} \quad (10)$$

le vecteur matrice $\boldsymbol{\sigma}$ étant donné par (6).

Pour obtenir l'expression explicite de l'opérateur force on doit, en vertu de la dynamique de la relativité restreinte, calculer la dérivée temporelle de l'impulsion. On trouve, après un calcul simple

$$F_k = \frac{dP_k}{dt} = (-e) \cdot (E_k + [\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{H}]_k) \quad (11)$$

\mathbf{E} et \mathbf{H} désignant les vecteurs champs électrique et magnétique. On reconnaît dans le second membre la force de Lorentz avec α_i à la place de $\frac{v_i}{c}$.

Parmi les opérateurs intrinsèques, nous avons déjà rencontré l'opérateur spin \mathbf{s} donné par (10); nous étudierons encore les grandeurs intrinsèques suivantes :

$$\mathfrak{M} = B \cdot \boldsymbol{\sigma} \alpha_4; \quad \mathfrak{E} = B \cdot \boldsymbol{\varepsilon}; \quad B = -\frac{eh}{4\pi mc} \quad (12)$$

les moments magnétique et électrique respectivement.

Nous nous occuperons finalement du moment magnétique atomique, qui n'est qu'un opérateur défini à l'aide de la théorie des perturbations.

3. — Connaissant la forme explicite des grandeurs à étudier on peut passer maintenant à l'évaluation des valeurs probables qui leur sont associées dans les états discrets des atomes hydrogénéoïdes.

Considérons d'abord les composantes de la vitesse v_k . Ces composantes s'expriment, d'après (2), par $c\alpha_k$. La valeur probable ou valeur moyenne de cet opérateur dans un état donné ψ est définie par

$$\bar{v}_k(\psi) = c \int \psi^* \alpha_k \psi \, d\tau \quad (13)$$

avec

$$\psi^* \alpha_k \psi = \sum_{\mu=1}^4 \psi_{\mu}^* (\alpha_k \psi)_{\mu}. \quad (14)$$

On vérifie facilement dans le cas des électrons libres que pour une solution *monochromatique* donnée les valeurs moyennes (13) se réduisent aux composantes de la vitesse relativiste classique (1). Pour calculer maintenant (13) dans les états discrets des atomes hydrogénéoïdes, on doit y remplacer les fonctions propres associées à ces états. Ces fonctions normalisées à l'unité sont (2) :

niveaux : $n, l, j = l + 1/2, m_j$ (on écrira m au lieu de m_j ; il est demi-entier).

$$\left. \begin{aligned} u_1 &= i \cdot a_1(l, m) Y_{l+1, m-1/2}(\theta, \varphi) \cdot f_{nl}(r); \\ u_2 &= i \cdot a_2 Y_{l+1, m+1/2} \cdot f_{nl}; \\ u_3 &= a_3 Y_{l, m-1/2} \cdot g_{nl}; \\ u_4 &= -a_4 Y_{l, m+1/2} \cdot g_{nl}; \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

(1) G. BREIT. *Proc. Nat. Acad. Am.*, 14, 553, 1928

(2) Pour les dérivées temporelles implicites des matrices α_k et des produits de ces matrices. Cf. AL. PROCA : Thèses. Paris, 1933 et aussi J. SOLOMON, *J. Phys.* [7], 4, 368, 1933.

(1) Cf. L. DE BROGLIE. *L'électron magnétique*, p. 165. Hermann et Cie, éditeurs, Paris, 1933.

(2) Cf. H. BETHE. *Handbuch d. Phys.*, XXIV, 1. Springer, Berlin, 1933.

niveaux : $n, l, j = l - 1/2, m$.

$$\left. \begin{aligned} u_1 &= ib_1 Y_{l-1, m-1/2} \cdot f_{nl}; & u_3 &= b_3 Y_{l, m-1/2} \cdot g_{nl} \\ u_2 &= -ib_2 Y_{l-1, m+1/2} \cdot f_{nl}; & u_4 &= b_4 Y_{l, m+1/2} \cdot g_{nl} \end{aligned} \right\} (16)$$

avec

$$a_{\frac{1}{2}} = \left(\frac{l \mp m + 3/2}{2l + 3} \right)^{1/2}; \quad a_{\frac{3}{4}} = \left(\frac{l \pm m + 1/2}{2l + 1} \right)^{1/2} \quad (15a)$$

$$b_{\frac{1}{2}} = \left(\frac{l \pm m - 1/2}{2l - 1} \right)^{1/2}; \quad b_{\frac{3}{4}} = \left(\frac{l \mp m + 1/2}{2l + 1} \right)^{1/2} \quad (16a)$$

les $Y_{r,s}(\theta, \varphi)$ sont des fonctions sphériques zonales normalisées à l'unité;

$$\left. \begin{aligned} Y_{r,s}(\theta, \varphi) &= \left(\frac{r-s!}{r+s!} \frac{2r+1}{4\pi} \right)^{1/2} P_r^s(\cos\theta) e^{is\varphi}; \\ Y_{r,-s} &= (-)^s Y_{r,s}. \end{aligned} \right\} (17)$$

Les fonctions radiales réelles f et g ont la forme explicite suivante, en introduisant la variable sans dimension $u = \frac{2Z}{aN} r$:

$$\left. \begin{aligned} -f_{nl}(r) &= \mathcal{N}_- \cdot e^{-u/2} u^{\gamma} [(N-\gamma)F_2(u) + n_r F_1(u)]; \\ -g_{nl}(r) &= \mathcal{N}_+ \cdot e^{-u/2} u^{\gamma} [(N-\gamma)F_2(u) - n_r F_1(u)]; \\ \mathcal{N}_{\pm}^2 &= (1 \pm \varepsilon) \cdot \Phi \\ &= (1 \pm \varepsilon) \cdot \left(\frac{2Z}{aN} \right)^3 \frac{2\gamma+2+n_r!}{n_r! 2^{\gamma+2} 4N(N-\gamma)} \cdot 1; \\ n_r &= n - |\gamma|; \quad a = \frac{h^2}{4\pi^2 m e^2}; \\ \gamma &= \begin{cases} l-1 = \gamma_+ & \text{pour } j = l+1/2 \\ l & = \gamma_- & \text{pour } j = l-1/2; \end{cases} \\ \gamma &= -1 + \sqrt{\gamma_-^2 - Z^2 \alpha^2}; \quad \varepsilon = E/mc^2; \\ \alpha &= \frac{2\pi e^2}{ch}; \quad N^2 = n^2 - 2n_r (|\gamma| - \gamma - 1). \end{aligned} \right\} (17a)$$

E désigne l'énergie totale de l'électron, son énergie au repos mc^2 comprise.

Les fonctions F_1 et F_2 sont les suivantes :

$$\left. \begin{aligned} F_1(u) &= F(-n_r - 1, 2\gamma + 3, u); \\ F_2(u) &= F(-n_r, 2\gamma + 3, u); \\ F(x, \gamma, x) &= \sum_{\nu} \frac{\alpha_{\nu}}{\gamma_{\nu} \nu!} x^{\nu}; \\ \alpha_{\lambda} &= \gamma_{\lambda} (x+1) \dots (x+\lambda-1); \quad \alpha_0 = 1; \end{aligned} \right\} (17b)$$

ce sont des fonctions hypergéométriques confluentes qui se réduisent ici à des simples polynômes, le paramètre α étant un entier négatif. Les fonctions radiales sont normalisées à l'unité suivant

$$\int (f^2 + g^2) r^2 dr = 1. \quad (17c)$$

Rappelons que le choix des matrices fondamentales α_k auquel correspond la forme précédente des fonctions propres est celui qui dérive des matrices de second rang de Pauli

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

suivant la règle bien connue.

Considérons d'abord les densités des valeurs moyennes des composantes de la vitesse (on désignera par Dv la densité des valeurs moyennes de l'opérateur v) :

$$Dv_k = c \psi^* \alpha_k \psi = c \sum_{\mu=1}^4 \psi_{\mu}^* (\alpha_k \psi)_{\mu}. \quad (18)$$

On vérifie facilement à l'aide des fonctions précédentes que seules les densités composantes Dv_1 et Dv_2 sont différentes de zéro. Mais les valeurs moyennes $\bar{v}_1(n, l, j = l \pm 1/2)$ et \bar{v}_2 sont nulles. Les valeurs moyennes des composantes cartésiennes de la vitesse dans les états stationnaires discrets représentés par les solutions (15) et (16) sont nulles. On peut alors passer des composantes cartésiennes aux composantes polaires. On trouve alors que

$$Dv_r = Dv_{\theta} = 0 \quad (19)$$

$$\begin{aligned} Dv_{\varphi}(n, l, l+1/2, m) &= \frac{c}{\pi} (a_1 a_4 \mathcal{X}_{l+1}^{m-1/2}(\cos\theta) \mathcal{X}_l^{m+1/2} \\ &+ a_2 a_3 \mathcal{X}_{l+1}^{m+1/2} \mathcal{X}_l^{m-1/2}) f_{nl}(r) \cdot g_{nl}(r) \end{aligned} \quad (20, a)$$

$$\begin{aligned} Dv_{\varphi}(n, l, l-1/2, m) &= -\frac{c}{\pi} (b_1 b_4 \mathcal{X}_{l-1}^{m-1/2} \mathcal{X}_l^{m+1/2} \\ &+ b_2 b_3 \mathcal{X}_{l-1}^{m+1/2} \mathcal{X}_l^{m-1/2}) f_{nl} \cdot g_{nl} \end{aligned} \quad (20, b)$$

où les a_i et b_k sont donnés par (15 a) et (16 a) et les $\mathcal{X}_r^s(x)$ sont les polynômes de Legendre associés de première espèce normalisés à l'unité.

Rappelons que des deux fonctions radiales, f est la petite fonction et que $f \rightarrow 0$ lorsque $c \rightarrow \infty$, tandis que g tend vers la fonction radiale normalisée à l'unité des fonctions propres hydrogénoïdes de la théorie de Schrödinger. Il en résulte que

$$\lim_{c \rightarrow \infty} Dv_{\varphi}(n, l, l+1/2, m) = 0 \quad (21)$$

montrant que la densité d'opérateur Dv_{φ} n'a pas de correspondant en théorie non relativiste.

On passe maintenant facilement des densités aux valeurs moyennes après intégration sur tout l'espace. On rencontre au cours de ce calcul, d'après (20, a) et (20, b), deux intégrales, une angulaire et une radiale

$$I(l, m) = \int \mathcal{X}_l^m(\cos\theta) \mathcal{X}_{l \pm 1}^{m \pm 1}(\cos\theta) \sin\theta d\theta \quad (22)$$

et

$$K(n, l) = \int f_{nl}(r) g_{nl}(r) r^2 dr \quad (23)$$

que nous donnons dans les Note I et II respectivement.

Comme ces expressions sont compliquées nous nous bornons ici à donner les valeurs moyennes de v_z dans divers états discrets de nombre quantique azimutal l donné.

On trouve en laissant de côté l'indice φ , pour \bar{v} dans les états s :

$$\bar{v}(n, s, 1/2, \pm 1/2) = \pm Z\alpha c \cdot \left(\frac{\pi}{4}\right) \cdot \frac{1}{N^2}; \quad \left. \begin{array}{l} \\ N^2 = n^2 + 2(n-1)\gamma; \quad \gamma = -1 + \sqrt{1 - Z^2\alpha^2} \end{array} \right\} (24, a)$$

Dans les états $p, j = 3/2$ on a :

$$\bar{v}(n, p, 3/2, \pm 3/2) = \pm Z\alpha c \cdot \left(\frac{9\pi}{26}\right) \cdot \frac{1}{N^2}; \quad \left. \begin{array}{l} \\ \bar{v}(n, p, 3/2, \pm 1/2) = \pm Z\alpha c \cdot \left(\frac{5\pi}{26}\right) \cdot \frac{1}{N^2} \end{array} \right\} (24, b)$$

$$N^2 = n^2 - 2(n-2)\gamma; \quad \gamma = -1 + \sqrt{4 - Z^2\alpha^2};$$

et dans les états $p, j = 1/2$ on a :

$$\bar{v}(n, p, 1/2, \pm 1/2) = \pm Z\alpha c \cdot \left(\frac{\pi}{4}\right) \cdot \frac{1}{N^2}; \quad \left. \begin{array}{l} \\ N^2 = n^2 + 2(n-1)\gamma; \quad \gamma = -1 + \sqrt{1 - Z^2\alpha^2}; \end{array} \right\} (24, c)$$

On voit que

$$\bar{v}(n, s, 1/2, \pm 1/2) = \bar{v}(n, p, 1/2, \pm 1/2) \text{ pour } n \geq 2 \quad (24, d)$$

Cette égalité des valeurs moyennes de v_z , dans ces états qui coïncident énergétiquement, n'est cependant pas générale.

Comme le produit αc est $2\pi e^2/h$ on voit que les valeurs moyennes $\bar{v}(n, l, j, m)$ ne dépendent pas de c , la vitesse de la lumière dans le vide. Il en résulte que l'on ne peut, sur ces valeurs moyennes, effectuer le passage à la limite $c \rightarrow \infty$ comme c'était le cas pour Dv_z . Il apparaît donc que pour l'étude *étymologique* d'un opérateur o on doit utiliser Do et non pas \bar{o} .

4. Le problème qui se pose maintenant est de savoir si la théorie ne contient pas un opérateur correspondant à l'opérateur vitesse non relativiste. Il semble bien qu'un tel opérateur existe (1). Les composantes se déduiraient des composantes d'espace du quadrivecteur vitesse, ou vitesse d'Univers, par une méthode de correspondance. On sait que les composantes d'espace x_k sont données à l'aide des composantes v_0, v_k ($k = 1, 2, 3$) du quadrivecteur par la relation

$$\dot{x}_k = \frac{v_k}{v_0} \quad (25)$$

avec, encore

$$v_k = \frac{p_k}{m} = \frac{1}{m} \left(p_k + \frac{e}{c} A_k \right); \quad v_0 = -\frac{1}{m} (p_0 - eV) \quad (26)$$

(1) V. Fock a attiré l'attention sur ce point, *Z. Physik*, **55**, 127, 1929.

Ces mêmes relations seraient encore vraies en théorie de Dirac *tout au moins en absence de champ magnétique*, à condition de remplacer v_0 par l'opérateur V_0

$$V_0 = \frac{H + eV}{mc^2} \quad (27)$$

où H est l'opérateur $-eV + (\alpha \mathbf{p})c + \alpha_i m c^2$. Les composantes V_k de l'opérateur cherché sont donc

$$V_k = \frac{p_k}{mV_0} = \frac{p_k}{\alpha_i m + \alpha \mathbf{p}/c} = \frac{p_k c^2}{H + eV} \quad (28)$$

Si l'on admet que $\alpha \mathbf{p}/c$ est plus petit devant $\alpha_i m$ on voit que l'on a approximativement

$$V_k \sim \frac{p_k}{\alpha_i m} \quad (28 a)$$

ce qui indique l'intervention de la masse sous la forme opératorielle; il est clair qu'à la limite

$$c \rightarrow \infty, \quad V_k \rightarrow \frac{p_k}{m}$$

qui n'est autre que la vitesse non relativiste.

D'après Fock ce serait l'opérateur V_k qui correspond à la vitesse véritable corpusculaire en théorie de Dirac malgré qu'elle n'y intervient pas directement. L'opérateur avec les composantes $c \alpha_k$ aurait le caractère d'une vitesse ondulatoire. On peut le rapprocher, en effet, de la vitesse d'une perturbation ondulatoire qui se propage avec la même vitesse dans toutes les directions et pour laquelle il n'a aucun sens de former la somme des carrés des composantes, comme c'est le cas pour les $c \alpha_k$. Cet opérateur correspondrait à la vitesse de phase de de Broglie et qui en théorie de Dirac ne pourrait prendre que les valeurs $\pm c$.

En vertu de cette interprétation, l'opérateur $c \alpha_k$ ne serait pas une *observable* puisqu'une vitesse de phase ne l'est pas. Ceci éliminerait également les difficultés que comportait l'essai d'interprétation des composantes $c \alpha_k$, comme on le verra plus loin. La limite nulle de $D(c \alpha_k)$ pour $c \rightarrow \infty$ s'expliquerait également; cet opérateur n'aurait aucun correspondant en théorie de Schrödinger, dont le formalisme ne contient pas la vitesse de phase. D'un autre côté, le rôle fondamental que joue l'opérateur $c \alpha_k$ dans la description des phénomènes d'interaction de l'électron et du champ électromagnétique, malgré que cet opérateur semble échapper à la mesure, ne doit pas étonner puisque la plupart des opérateurs en les matrices α_k n'interviennent que sous forme de complément nécessaire dans les grandeurs physiques mesurables de la théorie, en analogie, par exemple, avec l'énergie potentielle qui complète l'énergie cinétique pour donner la grandeur énergie qui seule est atteinte par la mesure.

On vérifie, par l'intermédiaire de (28), que les valeurs moyennes de $c \alpha_k$ et de V_k coïncident pour le cas des

solutions monochromatiques associées aux électrons libres (1).

Il n'est pas sans intérêt de rappeler ici la situation que l'on rencontre à propos de la vitesse en théorie de Schrödinger.

Ici aussi on rencontre deux sortes de vitesses, plus exactement on définit une densité opératorielle à partir de l'absence de divergence du vecteur densité de courant, dont l'expression bien connue est

$$D\mathbf{v}^{(0)} = \frac{\hbar}{4\pi m i} (\psi^* \overrightarrow{\text{grad}} \psi - \psi \overrightarrow{\text{grad}} \psi^*). \quad (29)$$

D'un autre côté, les dérivées temporelles des coordonnées x_k conduisent à l'opérateur ayant les composantes

$$V_k^{(0)} = \frac{p_k}{m}. \quad (30)$$

Il se trouve, en explicitant (29), que seul $Dv_z^{(0)}$ est différent de zéro dans les états hydrogénéoïdes discrets, par contre $DV_r^{(0)}$ et $DV_\theta^{(0)}$ existent mais ils sont imaginaires. $DV_z^{(0)}$ coïncide avec $Dv_z^{(0)}$ et l'on a pour ces densités en désignant un instant, par μ la masse de l'électron.

$$Dv_z^{(0)}(n, l, |m|) = |m| \cdot \frac{\hbar}{2\pi\mu} \cdot \frac{1}{r(n, l)} \cdot \frac{1}{\sin\theta(l, m)} \quad (31)$$

avec

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{r(n, l)} &= \int_0^\infty R_{nl}^2(r) r dr; \\ \frac{1}{\sin\theta(l, m)} &= \int_0^\pi (\mathcal{A}_l^m(\cos\theta))^2 d\theta \end{aligned} \right\} \quad (31a)$$

les $R_{n,l}(r)$ étant les parties radiales normalisées à l'unité des fonctions hydrogénéoïdes. Comme $1/\bar{r}(nl)$ est égal à Z/na^2 , a étant le rayon de l'orbite fondamentale de Bohr, on a (2)

$$\bar{v}_z^{(0)}(n, l, |m|) = |m| \cdot Z\alpha c \cdot \frac{1}{n^2 \sin\theta(l, m)}. \quad (32)$$

On trouve, en particulier :

$$\left. \begin{aligned} \bar{v}_z^{(0)}(n, p, |1|) &= Z\alpha c \cdot \left(\frac{3\pi}{8}\right) \cdot \frac{1}{n^2}; \\ \bar{v}_z^{(0)}(n, d, |2|) &= Z\alpha c \cdot \left(\frac{5 \cdot 3^2 \cdot \pi}{2^6}\right) \cdot \frac{1}{n^2}; \\ \bar{v}_z^{(0)}(n, d, |1|) &= Z\alpha c \cdot \left(\frac{5 \cdot 3 \cdot \pi}{2^6}\right) \cdot \frac{1}{n^2}. \end{aligned} \right\} \quad (32a)$$

(1) On démontre également (Cf. V. Fock. *loc. cit.*) que les éléments de matrices non diagonaux (rs) de cx_k et de V_k tendent vers la même limite pour les nombres quantiques très grands (r, s très grand, $r - s \neq 0$!).

(2) Pour le calcul de $1/\sin\theta(l, m)$, cf. la Note I.

5. — L'opérateur accélération a les composantes suivantes :

$$\gamma_k = \frac{4\pi mc^3}{\hbar} \left([\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}]_k \frac{1}{mc} - \varepsilon_k \right) \quad (5)$$

où les matrices σ_i et ε_k sont définies par (6).

On vérifie tout d'abord facilement que les valeurs moyennes de l'opérateur précédent sont nulles pour une solution monochromatique associée à un électron libre. Il n'en est pas de même des valeurs propres de (5). On trouve, en effet pour ces valeurs propres $\lambda_k^{(k)}$ associées à γ_k les deux valeurs égales et de signe contraire suivantes :

$$\begin{aligned} \lambda_{1,2}^{(k)} &= \pm \left(\sqrt{\frac{p_l^2 + p_m^2}{m^2 c^2} + 1} \right) \frac{4\pi c^3 m}{\hbar} \\ &= \pm \left(\sqrt{p^2 - p_k^2 + m^2 c^2} \right) \frac{4\pi c^2}{\hbar}; \quad \left(p^2 = \sum_i p_i^2 \right). \end{aligned} \quad (33)$$

Ce résultat paraît paradoxal ; il est en effet difficile de concevoir qu'une mesure, si elle est possible, puisse donner pour un électron, dont on a affirmé qu'il est libre, une accélération différente de zéro. Certes on pourrait dire ici que l'existence des valeurs propres (33), toujours différentes de zéro n'est pas en contradiction immédiate avec le fait que l'électron est libre puisque l'opérateur force, dans ce cas, est identiquement nul. Il se pose ici, il nous semble, un problème relatif à l'interprétation quantitative du fait que l'électron est libre. Que signifie, pour ce qui regarde un processus de mesure ultérieur, l'affirmation que l'électron est libre, se souvenant de ce que cette affirmation est conditionnée par une sorte d'expérience sur cet électron.

On doit se demander également par quelle expérience peut-on atteindre les valeurs (33). Rappelons, encore une fois, que l'opérateur accélération n'a pas de lien immédiat avec l'opérateur force, tout comme l'opérateur cx_k n'en a pas avec v_k . Par définition, γ_k , la dérivée temporelle de cx_k mesurerait la variation de ce dernier pour un intervalle de temps Δt très petit. Donc, deux mesures de vitesse successives faites à des instants suffisamment rapprochés pourraient, semble-t-il, renseigner sur les valeurs caractéristiques de γ_k . Rappelons, en effet, qu'il s'agit ici de mesures essentiellement répétibles puisque l'on ne présume absolument rien de l'état de l'électron avant les mesures, en dehors du fait qu'il est libre. Or, dans ce cas, les mesures, si elles sont possibles, sur la grandeur cx_k ne peuvent donner que le résultat $\pm c$ et ceci éternellement. La méthode de mesure en question ne peut donc pas conduire aux valeurs propres de γ_k malgré qu'elle se présente automatiquement comme pouvant renseigner sur la variation dans le temps de cx_k . Il nous semble que cet état de chose est en faveur du caractère non observable de γ_k . Il est clair que si l'on admet que cx_k n'est pas observable, γ_k ne l'est pas non plus, à la condition que l'on puisse démontrer que la méthode de mesure précédente soit la seule qui atteint γ_k . Il semble bien cepen-

dant que γ_k ne se soumet guère à une mesure parce que cet opérateur ne dérive que de cx_k , et ne présente aucune liaison à d'autres grandeurs. Les discussions précédentes de cx_k et de γ_k conduisent surtout à les considérer comme des grandeurs non observables.

Nous voudrions encore rappeler qu'au début du développement de la théorie on soutenait la possibilité pour que le résultat d'une mesure de vitesse d'un électron soit $\pm c$ puisque l'opérateur cx_k n'a que ces valeurs propres. Du point de vue physique ceci paraît être difficile à accepter, puisque l'on ne voit guère qu'une mesure non mentale puisse conduire à la vitesse de la lumière dans le vide pour un corpuscule ou entité physique autre que la lumière. Les valeurs possibles ne peuvent être que $\pm c$ rigoureusement, et non pas « presque $\pm c$ » ; cette limite représente davantage le résultat d'un passage à la limite mental qu'une constante empirique pouvant être atteinte par des mobiles. L'opérateur cx_k ne pourrait, par suite, guère être considéré comme une observable.

Nous donnons les valeurs moyennes de γ_k pour les états discrets des atomes hydrogénoïdes. On trouve d'abord que l'opérateur ε_r a seul des valeurs moyennes différentes de zéro dans ces états. On a, en effet,

$$\bar{\varepsilon}_r(n, l, j = l \pm 1/2) = -2 \int f_{nl}(r) g_{nl}(r) r^2 dr \quad (34)$$

$$\lim_{c \rightarrow \infty} (D\varepsilon_r) = 0. \quad (34a)$$

La première partie de l'opérateur (5) $[\sigma \times \mathbf{p}]_k \frac{1}{mc}$ que nous désignons par γ'_k , sans dimension, n'a des valeurs moyennes non nulles que pour γ_r et l'on trouve pour celles-ci

$$\bar{\gamma}'_r(n, l, j = l + 1/2) = \frac{h}{2\pi mc}$$

$$(l \int g_{nl}^2(r) r dr - (l + 2) \int f_{nl}^2(r) r dr) \quad (35)$$

$$\bar{\gamma}'_r(n, l, j = l - 1/2) = \frac{h}{2\pi mc}$$

$$((l - 1) \int f_{nl}^2(r) r dr - (l + 1) \int g_{nl}^2(r) r dr). \quad (35a)$$

A l'aide des expressions précédentes on forme immédiatement les valeurs moyennes de la composante γ_r de l'opérateur accélération. On voit également que cet opérateur n'a aucun correspondant en théorie de Schrödinger.

On trouve, par exemple, dans l'état $1s$,

$$\bar{\gamma}_r(1s) = \frac{4\pi mc^3}{h} \cdot \frac{Z\alpha}{\sqrt{1 - Z^2\alpha^2}} (2\sqrt{1 - Z^2\alpha^2} - 1) \quad (36)$$

qui tend vers $-\infty$ pour $Z \rightarrow 1, \alpha \sim 137$. Cette limite n'est pas en contradiction avec la limite analogue de l'opérateur force quoique aucune liaison immédiate n'existe entre ces deux grandeurs.

6. — a) L'opérateur *impulsion* est un opérateur correspondant par excellence. L'expression générale des

valeurs moyennes de cet opérateur est cependant compliquée. Nous nous bornons à donner ici les valeurs moyennes dans divers états discrets. Les seules valeurs acceptables sont fournies par la composante p_z . On trouve alors,

$$\bar{p}_z(n, s, \pm 1/2) = \pm \frac{h}{8} \int f_{nl}^2(r) r dr. \quad (37)$$

$$\bar{p}_z(n, p, 1/2, \pm 1/2) = \pm \frac{h}{8} \int g_{nl}^2(r) r dr. \quad (38)$$

$$\bar{p}_z(n, p, 3/2, \pm 3/2) = \pm \frac{3h}{64}$$

$$(4 \int g_{nl}^2(r) r dr + 7 \int f_{nl}^2(r) r dr). \quad (39a)$$

$$\bar{p}_z(n, p, 3/2, \pm 1/2) = \pm \frac{h}{64}$$

$$(4 \int g_{nl}^2(r) r dr + 9 \int f_{nl}^2(r) r dr) \quad (39b)$$

et, en particulier,

$$\bar{p}_z(1s, \pm 1/2) = \pm Z\alpha mc \cdot \left(\frac{\pi}{8}\right) \frac{1 - \sqrt{1 - Z^2\alpha^2}}{\sqrt{1 - Z^2\alpha^2}}. \quad (40)$$

$$\bar{p}_z(2p, 1/2, \pm 1/2) = \pm Z\alpha mc \left(\frac{\pi}{8}\right) \frac{N-1}{N^2} \cdot \frac{1 + \varepsilon}{\sqrt{1 - Z^2\alpha^2}} \quad (41).$$

$$\left. \begin{aligned} N - 1/N^2 &= \frac{\sqrt{2(1 + \sqrt{1 - Z^2\alpha^2})} - 1}{2(1 + \sqrt{1 - Z^2\alpha^2})}; \\ \varepsilon &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \sqrt{1 - Z^2\alpha^2}} \end{aligned} \right\} \quad (42)$$

$$\bar{p}_z(2p, 3/2, \pm 3/2) = \pm Z\alpha mc \left(\frac{3\pi}{2^9}\right) \cdot \frac{11}{\sqrt{4 - Z^2\alpha^2}};$$

$$\bar{p}_z(2p, 3/2, \pm 1/2) = \pm Z\alpha mc \left(\frac{\pi}{2^9}\right) \cdot \frac{13}{\sqrt{4 - Z^2\alpha^2}}.$$

On remarque sur les formules précédentes l'existence de valeurs moyennes non nulles de l'impulsion dans des états s . $Dp_z(s)$ tend cependant vers zéro avec $c \rightarrow \infty$ comme ceci est nécessaire. A part du fait précédent, l'*impulsion* ne présente pas de particularités essentielles en théorie relativiste.

b) Il n'en est pas de même pour le *moment cinétique*. On sait que cet opérateur est donné par

$$\mathbf{M} = \mathbf{L} + \mathbf{s}. \quad (8)$$

Considérons d'abord l'opérateur intrinsèque

$$\mathbf{s} = -\frac{h}{4\pi} \boldsymbol{\sigma} \quad (10)$$

$$s_i = -\frac{h}{4\pi} i \alpha_k \alpha_l. \quad (10a)$$

On vérifie facilement que seul s_3 a des valeurs moyennes différentes de zéro. On a, en effet,

$$Ds_3 = \frac{h}{4\pi} \sum_i \psi_i^*(s_3 \psi_i) = \frac{h}{4\pi} (\psi_1^* \psi_1 - \psi_2^* \psi_2 + \psi_3^* \psi_3 - \psi_4^* \psi_4) \quad (43)$$

et remplaçant ici les solutions associées aux états discrets on trouve les valeurs moyennes suivantes :

$$\bar{s}_3(n, l, l+1/2) = \frac{h}{4\pi} \left[(a_1^2 - a_2^2) \int f_{nl+}^2 r^2 dr + (a_3^2 - a_4^2) \int g_{nl+}^2 r^2 dr \right] \quad (44a)$$

et

$$\bar{s}_3(n, l, l-1/2) = \frac{h}{4\pi} \left[(b_1^2 - b_2^2) \int f_{nl-}^2 r^2 dr + (b_3^2 - b_4^2) \int g_{nl-}^2 r^2 dr \right] \quad (44b)$$

où les indices + ou - à côté des fonctions radiales indiquent qu'elles se rapportent respectivement à un niveau avec $j = l + 1/2$ et $j = l - 1/2$.

Or,

$$\int f_{nl\pm}^2 r^2 dr = \frac{1 - \epsilon_{\pm}}{2}; \quad \int g_{nl\pm}^2 r^2 dr = \frac{1 + \epsilon_{\pm}}{2} \quad (45)$$

en vertu de la condition de normalisation des fonctions radiales.

Rappelons que l'on a

$$\epsilon_{\pm} = \frac{E_{\pm}}{mc^2} = \left[\left(\frac{Z\alpha}{n - |\chi|_{\pm} + \sqrt{\chi_{\pm}^2 - Z^2\alpha^2}} \right)^2 + 1 \right]^{-1} \quad (46)$$

où χ_{\pm} est donné par (17a). On trouve ainsi finalement

$$\bar{s}_3(n, l, l+1/2, m) = \frac{h}{4\pi} \cdot \frac{2m}{(2l+3)(2l+1)} (1 - 2\chi_+ \epsilon_+) \quad (47a)$$

$$\bar{s}_3(n, l, l-1/2, m) = \frac{h}{4\pi} \cdot \frac{2m}{(2l+1)(2l-1)} (1 - 2\chi_- \epsilon_-). \quad (47b)$$

Voici quelques valeurs particulières.

$$\bar{s}_3(1s, \pm 1/2) = \pm \frac{h}{4\pi} (1 + 2\sqrt{1 - Z^2\alpha^2}) \frac{1}{3} \quad (48)$$

$$\bar{s}_3(2s, \pm 1/2) = \pm \frac{h}{4\pi} (1 + \sqrt{2(1 + \sqrt{1 - Z^2\alpha^2})}) \frac{1}{3} \quad (49)$$

montrant qu'à la limite $Z \rightarrow 1/x$ 137 la valeur moyenne du spin dans les états précédents peut décroître jusqu'au tiers de sa valeur en absence de champ. Il est clair cependant que ceci ne correspond pas à une grandeur observable. On trouve de même pour

$$\bar{s}_3(2p, 1/2, \pm 1/2) = \pm \frac{h}{4\pi} (1 - \sqrt{2(1 + \sqrt{1 - Z^2\alpha^2})}) \frac{1}{3} \quad (50)$$

$$\bar{s}_3(2p, 3/2, m) = \frac{h}{4\pi} \cdot \frac{2m}{15} (1 + 2\sqrt{1 - Z^2\alpha^2}). \quad (51)$$

L'étude de l'opérateur moment cinétique *orbital*

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{P} \quad (9)$$

montre que seule la composante L_3 a des valeurs moyennes non nulles dans les états qui nous occupent et l'on trouve, tous calculs faits,

$$\bar{L}_3(n, l, l+1/2, m) = \frac{h}{4\pi} \cdot \frac{2m}{(2l+3)(2l+1)} [4l(l+2) + 2 + 2\chi_+ \epsilon_+] \quad (52a)$$

$$\bar{L}_3(n, l, l-1/2, m) = \frac{h}{4\pi} \cdot \frac{2m}{(2l+1)(2l-1)} [2(2l^2-1) + 2\chi_- \epsilon_-] \quad (52b)$$

donc les valeurs moyennes de la partie orbitale L_3 présentent une allure semblable, mais en sens opposé, à celle de s_3 avec le champ où se trouve l'électron (variation avec Z contenu en ϵ_+ et ϵ_-). Le *moment cinétique total* M_3 présente les valeurs moyennes évidentes,

$$\bar{M}_3(n, l, l \pm 1/2, m) = \bar{L}_3(n, l, l \pm 1/2, m) + \bar{s}_3(n, l, l \pm 1/2, m) = \frac{h}{4\pi} (2m) = m \cdot \frac{h}{2\pi}. \quad (53)$$

Il est clair que l'opérateur précédent est un opérateur correspondant.

c) Supposons maintenant que l'atome soit placé dans un champ magnétique uniforme d'intensité H , dirigé dans le sens positif de l'axe des z . Pour calculer les valeurs moyennes du moment cinétique dans ce cas on devrait connaître les fonctions propres exactes de l'atome en présence du champ magnétique. On se bornera ici aux fonctions d'approximation d'ordre zéro. L'opérateur M_3 a cependant changé, puisque l'impulsion \mathbf{p} doit être complété ici de l'impulsion électromagnétique $e\mathbf{A}$, \mathbf{A} étant le potentiel vecteur du champ magnétique appliqué. Dans le cas qui nous occupe,

$$\left. \begin{aligned} A_x &= -\frac{1}{2} Hr \sin \theta \sin \varphi; \\ A_y &= \frac{1}{2} Hr \sin \theta \cos \varphi; \quad A_z = 0. \end{aligned} \right\} \quad (54)$$

La formule (53) va donc être augmentée à notre approximation de la valeur moyenne de l'opérateur

$$\lambda_3 = e(xA_y - yA_x). \quad (55)$$

On trouve, tous calculs faits,

$$\bar{\lambda}_3(n, l, l \pm 1/2) = e \frac{H}{2} \cdot \bar{r}^2(n, l, l \pm 1/2) \overline{\sin^2 \theta}(l, m) \quad (56)$$

où \bar{r}^2 et, $\overline{\sin^2 \theta}$ représentent les valeurs moyennes du carré du rayon vecteur et de $\overline{\sin^2 \theta}$ respectivement; on trouve

$$\overline{\sin^2 \theta}(l+1/2, m) = 2[l(l+1) + m^2 + 3/4]/(2l+3)(2l+1) \quad (57a)$$

$$\overline{\sin^2 \theta}(l-1/2, m) = 2[l^2 + m^2 - 1/4]/(2l+1)(2l-1). \quad (57b)$$

Rappelons qu'en théorie de Schrödinger on a un terme analogue à (56) pour compléter les valeurs moyennes du moment cinétique en présence d'un champ de la forme (54). On a ici, à la même approximation que plus haut,

$$\overline{\sin^2 \theta} (l, m) = 2 \frac{l(l+1) + m^2 - 1}{(2l+3)(2l-1)} \quad (57, c)$$

et,

$$\overline{r^2} (n, l) = \frac{n^2 a^2}{2Z^2} (3n^2 + 1 - 3l(l+1)). \quad (58)$$

Les valeurs moyennes de r^2 en théorie de Dirac ont une forme plus compliquée (cf. Note II). On trouve pour l'état 1 s,

$$\overline{r^2} (1s) = \frac{a^2}{2Z^2} (1 + \sqrt{1 - Z^2 \alpha^2}) (1 + 2\sqrt{1 - Z^2 \alpha^2}) \quad (59)$$

$$\begin{aligned} \overline{r^2} (2p, 3/2) \\ = \frac{2a^2}{Z^2} (1 + \sqrt{4 - Z^2 \alpha^2}) (1 + 2\sqrt{4 - Z^2 \alpha^2}) \end{aligned} \quad (60)$$

On vérifie facilement qu'à la limite $\alpha \rightarrow 0$ ces valeurs moyennes coïncident avec celles de la théorie non relativiste. Les valeurs moyennes de l'opérateur supplémentaire λ_3 se conduisent comme celles de r^2 et, l'on a pour le moment cinétique total, à l'approximation indiquée,

$$\begin{aligned} \overline{M_3^{(H)}} (n, l, j, m) &= \overline{M_3^{(0)}} (n, l, j, m) + \overline{\lambda_3} (n, l, j, m) \\ &= m \cdot \frac{h}{2\pi} + \overline{\lambda_3} (n, l, j, m) \end{aligned} \quad (61)$$

$\overline{\lambda_3}$ étant donné par (56).

a) Dans les atomes hydrogénoïdes et, en absence de champ extérieur, on a pour l'opérateur force

$$F_k = (-e) E_k \quad (62)$$

E_k est la composante k de la force électrique que subit l'électron dans l'atome donc

$$F_r = -\frac{Ze^2}{r^2} \quad (63)$$

et par conséquent

$$\overline{F_r} (n, l, l \pm 1/2) = -Ze^2 \overline{1/r^2} (n, l, l \pm 1/2). \quad (64)$$

On trouve en particulier

$$\overline{F} (1s) = -\frac{Z^3 e^2}{a^2} \frac{2}{(2\sqrt{1 - Z^2 \alpha^2} - 1)\sqrt{1 - Z^2 \alpha^2}}. \quad (65)$$

$$\overline{F} (2p, 3/2) = -\frac{Z^3 e^2}{2a^2} \frac{1}{(2\sqrt{4 - Z^2 \alpha^2} - 1)\sqrt{4 - Z^2 \alpha^2}}. \quad (66)$$

Il est clair que cet opérateur est un opérateur correspondant par excellence. On a en effet, en théorie non relativiste pour la force dans les atomes hydrogé-

noïdes une expression identique à (63) et ses valeurs moyennes sont

$$\overline{F_r} (n, l) = -Ze^2 \overline{1/r^2} (n, l) = -\frac{2Z^3 e^2}{a^2} \frac{1}{(2l+1)n^3}. \quad (67)$$

On déduit de (67) les valeurs moyennes de l'accélération en théorie non relativiste en divisant (67) par m , la masse de l'électron.

7. — Nous arrivons à l'étude des opérateurs électromagnétiques intrinsèques. Ces opérateurs sont donnés par (12). On vérifie à l'aide des fonctions (15) et (16) que seules la composante \mathfrak{M}_3 du moment magnétique a des valeurs moyennes non nulles. On trouve pour celles-ci :

$$\begin{aligned} \overline{\mathfrak{M}_3} (n, l, l + 1/2, m) \\ = B \cdot \frac{2m}{(2l+3)(2l+1)} (\epsilon_+ - 2\chi_+) \end{aligned} \quad (68, a)$$

$$\begin{aligned} \overline{\mathfrak{M}_3} (n, l, l - 1/2, m) \\ = B \cdot \frac{2m}{(2l+1)(2l-1)} (\epsilon_- - 2\chi_-) \end{aligned} \quad (68, b)$$

où B est $-eh/4\pi mc$ et $\epsilon_{\pm}, \chi_{\pm}$ sont donnés par (46) et (47 a) respectivement. On remarque ici aussi comme c'était déjà le cas de l'opérateur $spin s_3$ la symétrie des valeurs moyennes en ces grandeurs ϵ_{\pm} et χ_{\pm} . On trouve en explicitant, dans les premiers états;

$$\overline{\mathfrak{M}_3} (1s, \pm 1/2) = \pm \frac{B}{3} (2 + \sqrt{1 - Z^2 \alpha^2}) \quad (69)$$

$$\begin{aligned} \overline{\mathfrak{M}_3} (n, l = n - 1, j = n - 1/2, m) \\ = \frac{2m}{4n^2 - 1} \cdot B \cdot \left(2n + \frac{\sqrt{n^2 - Z^2 \alpha^2}}{n} \right) \end{aligned} \quad (70)$$

$$\begin{aligned} \overline{\mathfrak{M}_3} (2p, 3/2, \pm 3/2) &= \pm \frac{B}{3} \left(4 + \frac{1}{2} \sqrt{4 - Z^2 \alpha^2} \right), \\ \overline{\mathfrak{M}_3} (2p, 3/2, \pm 1/2) &= \pm \frac{B}{15} \left(4 + \frac{1}{2} \sqrt{4 - Z^2 \alpha^2} \right) \end{aligned} \quad (71)$$

et enfin :

$$\begin{aligned} \overline{\mathfrak{M}_3} (2p, 1/2, \pm 1/2) \\ = \pm \frac{B}{3} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \sqrt{1 - Z^2 \alpha^2}} - 2 \right) \end{aligned} \quad (72)$$

En comparant les formules précédentes avec celles que donnent les valeurs moyennes de l'opérateur spin s_3 , (48)-(51), on voit qu'elles présentent la même allure avec Z , (le champ du noyau) que celles de s_3 . Cependant comme s_3, \mathfrak{M}_3 n'est pas une observable non plus. Nous verrons plus loin la grandeur observable où entre \mathfrak{M}_3 .

L'opérateur moment électrique n'est autre chose, au facteur $-eh/4\pi mc$ près, que le vecteur matrice \mathbf{e} que nous avons déjà rencontré dans l'étude de l'opérateur

accélération. Nous y avons vu que seule la composante ε_r a des valeurs moyennes non nulles dans les états qui nous occupent. Ces valeurs sont

$$\bar{\varepsilon}_r(n, l, l \pm 1/2) = -2B \cdot \int f_{nl} \cdot g_{nl} \cdot r^2 dr \quad (34)$$

et dans les premiers niveaux :

$$\bar{\varepsilon}_r(1s) = -Z\alpha \cdot B; \quad \bar{\varepsilon}_r(2p, 3/2) = -\frac{1}{2} Z\alpha B.$$

Cet opérateur, comme \mathcal{M}_3 , n'est pas non plus observable.

8. — Si les opérateurs précédents \mathcal{M}_3 et \mathcal{E}_r ne sont pas des observables, l'atome possède, par contre, un opérateur moment magnétique, une grandeur d'approximation ou de perturbation qui est, tout au moins indirectement, une observable. On sait, en effet, que l'énergie de perturbation due à un champ magnétique uniforme est, dans le cas qui nous occupe,

$$W^{(H)} = e \cdot (\mathbf{A}\alpha) \quad (74)$$

et le moment magnétique que l'on peut associer à (74) est

$$\mu = -\frac{W^{(H)}}{|\mathbf{H}|} = -e \cdot \frac{(\mathbf{A}\alpha)}{|\mathbf{H}|} \quad (75)$$

Nous supposons que l'atome soit placé dans un champ identique à celui défini par (54) donc

$$A_x = -\frac{1}{2} Hy; \quad A_y = \frac{1}{2} Hx; \quad A_z = 0. \quad (54)$$

Le moment magnétique devient alors

$$\mu = \frac{(-e)}{2} (x\alpha_2 - y\alpha_1) \quad (75, a)$$

et les valeurs moyennes de cet opérateur sont, comme on s'en assure facilement,

$$\bar{\mu}(n, l, l+1/2, m) = (-e) \left(a_1 a_2 \int \sin^2 \theta \varphi_{l+1}^{m-1/2} \varphi_l^{m+1/2} d\theta \right. \\ \left. + a_2 a_3 \int \sin^2 \theta \varphi_{l+1}^{m+1/2} \varphi_l^{m-1/2} d\theta \right) \int f_{nl} \cdot g_{nl} r^3 dr \quad (76, a)$$

et

$$\bar{\mu}(n, l, l-1/2, m) \\ = (-e) \left(-b_1 b_2 \int \sin^2 \theta \varphi_{l-1}^{m-1/2} \varphi_l^{m+1/2} d\theta \right. \\ \left. - b_2 b_3 \int \sin^2 \theta \varphi_{l-1}^{m+1/2} \varphi_l^{m-1/2} d\theta \right) \\ \cdot \int f_{nl} \cdot g_{nl} \cdot r^3 dr \quad (76, b)$$

et effectuant les calculs, on trouve, désignant par $\Sigma^{(1)}(\alpha+3)$ et $\Sigma^{(2)}(\alpha+3)$ deux grandeurs explicitées dans la Note II,

$$\bar{\mu}(n, l, l+1/2, m) = B \cdot \frac{(-2m\lambda_+)}{(2l+3)(2l+1)} \\ \frac{2\gamma+n+1-l}{n-l-1} \frac{2\gamma+2!^2}{2\gamma+2!^2} \frac{(\Sigma^{(1)}(\alpha+3) - \Sigma^{(2)}(\alpha+3))}{2N(N+l+1)} \quad (77, a)$$

et

$$\bar{\mu}(n, l, l-1/2, m) = B \cdot \frac{(-2m\lambda_-)}{(2l+1)(2l-1)} \\ \frac{2\gamma+2+n-l}{n-l-1} \frac{(\Sigma^{(1)}(\alpha+3) - \Sigma^{(2)}(\alpha+3))}{2N(N-l)} \quad (77, b)$$

On trouve, en particulier, pour les premiers niveaux :

$$\bar{\mu}(1s, \pm 1/2) = \pm \frac{B}{3} (1 + 2\sqrt{1-Z^2\alpha^2}) \quad (78)$$

$$\bar{\mu}(n, l = n-1, j = n-1/2, m) \\ = B \cdot \frac{(-2m\lambda_+)}{4n^2-1} (1 + 2\sqrt{n^2-Z^2\alpha^2}) \quad (79, 1)$$

$$\bar{\mu}(2p, 1/2, \pm 1/2) = \pm B \cdot \frac{1}{3} (\sqrt{2(1+\sqrt{1-Z^2\alpha^2})} - 1) \quad (80)$$

Ceci terminerait l'étude de l'opérateur de perturbation, moment magnétique atomique, défini par (75). Nous voudrions cependant rendre plus visible le rôle que joue ici la grandeur intrinsèque \mathcal{M}_3 que nous avons étudié plus haut.

Pour obtenir une autre forme de (75) on peut utiliser l'opérateur du *second ordre* de Dirac que l'on obtient à partir de (3)

$$\mathcal{O}^{(1)}/c = H + eV/c - \alpha\mathbf{P} - \alpha_1 mc \quad (3)$$

en y appliquant l'opérateur $H + eV/c + \alpha\mathbf{P} + \alpha_1 mc$. On trouve, après un calcul simple, le résultat bien connu, en écrivant E (énergie totale) à la place de H ,

$$\mathcal{O}^{(2)}/c^2 = (E + eV)^2/c^2 - p^2 - 2e/c \cdot (\mathbf{A}\mathbf{p}) - e^2/c^2 \cdot A^2 \\ - m^2c^2 + eh/2\pi c \cdot (\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H}) + eh/2\pi c \cdot (i\boldsymbol{\alpha}\mathbf{E}) \quad (81)$$

(\mathbf{H} , \mathbf{E}) étant les vecteurs champ magnétique et électrique agissant sur l'électron. Pour passer maintenant de (81), écrit en impulsion, à l'opérateur en énergie, on convient de diviser $\mathcal{O}^{(2)}/c^2$ par $2m$, ce qui fait apparaître dans les deux derniers termes $eh/4\pi mc$. Si l'on définissait alors le *moment magnétique* à partir de $\mathcal{O}^{(2)}/2mc^2$, à l'aide des termes proportionnels à \mathbf{H} , on trouverait

$$(-eh/4\pi mc) \left(\frac{(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H})}{|\mathbf{H}|} + \frac{2i}{|\mathbf{H}|} \left(\mathbf{A} \frac{\partial}{\partial x} \right) \right)$$

qui n'a pas les mêmes valeurs moyennes que (75), donc qui n'est pas l'opérateur *exact*. Que les termes supplémentaires en $\boldsymbol{\sigma}$ et $i\boldsymbol{\alpha}$ n'étaient pas sous une forme convenable dans l'opérateur $\mathcal{O}^{(2)}/2mc^2$ avait été déjà remarqué par L. de Broglie, qui montrait⁽²⁾ que l'on devait avoir $\sigma\alpha_1$ et $\alpha\alpha_1$ pour ces termes supplémentaires, ceci d'une part pour éliminer l'opérateur non

(1) Ces formules ont été données par BREIT : *Nature*, 1928, 420, 648. Le calcul pour l'état $1s$ est donné explicitement dans MORR et MASSEY : *The theory of atomic collisions*, Oxford, 1933, p. 55. Je remercie à ce propos M. le Prof. MOTT pour un échange de correspondance aimable sur ce sujet.

(2) Cf. L. DE BROGLIE, *loc. cit.* p. 142.

hermitique $i\alpha$ et d'autre part à cause de la variance relativiste du tenseur densité de moments intrinsèques. En réalité, tout l'opérateur $\mathcal{O}^{(2)}/2mc^2$ est inexact et au lieu de diviser par $2m$, on doit diviser par l'opérateur $2m\alpha_4$ ou opérer sur $\mathcal{O}^{(2)}/c^2$ en le multipliant en arrière par $\alpha_4/2m$; on trouve alors, avec $W + mc^2$ à la place de E ,

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{O}^{(2)}} &= \mathcal{O}^{(2)} \cdot \frac{\alpha_4}{2mc^2} = \{ -p^2/2m + W + eV \\ &+ (W + eV)^2/2mc^2 - e^2/2mc^2 \cdot A^2 \} \alpha_4 \\ &+ (eh/4mc) \cdot 2i \left(\mathbf{A} \cdot \frac{\vec{\partial}}{\partial \mathbf{x}} \right) \alpha_4 - (\mathcal{M} \mathbf{H}) - (\mathcal{E} \mathbf{E}) \end{aligned} \quad (82)$$

où \mathcal{M} et \mathcal{E} sont les opérateurs intrinsèques étudiés plus haut. L'opérateur moment magnétique est donc

$$-W^{(H)}/|\mathbf{H}|$$

et explicitement

$$\mu = B \cdot \left[2i \left(\mathbf{A} \cdot \frac{\vec{\partial}}{\partial \mathbf{x}} \right) \alpha_4 / |\mathbf{H}| + (\sigma \alpha_4 \mathbf{H}) / |\mathbf{H}| \right]; \quad (83)$$

$$B = -\frac{eh}{4\pi mc};$$

et les valeurs moyennes de cet opérateur se calculent rapidement, se rappelant qu'avec le champ (54) on a

$$2i \left(\mathbf{A} \cdot \frac{\vec{\partial}}{\partial \mathbf{x}} \right) / |\mathbf{H}| = i \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

et l'on trouve, tous calculs faits,

$$\bar{\mu}(n, l, l+1/2, m) = B \cdot \frac{(-2m\chi_+)}{(2l+3)(2l+1)} (1-2\chi_+\varepsilon_+) \quad (84, a)$$

$$\bar{\mu}(n, l, l-1/2, m) = B \cdot \frac{(-2m\chi_-)}{(2l+1)(2l-1)} (1-2\chi_-\varepsilon_-) \quad (84, b)$$

On vérifie *directement* l'identité des valeurs moyennes (84) et (77) et avec elle l'identité des opérateurs (75) et (83). Rappelons que χ_{\pm} et ε_{\pm} sont donnés par (17 a) et (46) respectivement.

L'intérêt de l'étude précédente consistait à donner aux valeurs moyennes $\bar{\mu}$ une forme *explicite simple* pour *tous les niveaux*. Elle a permis, en outre, de corriger l'équation du second ordre de Dirac qui avait été donnée, en cas d'un champ extérieur et écrite en énergie, toujours sous une forme inexacte. On voit, en même temps, l'intervention de l'opérateur $\alpha_4 m$ dans le passage d'un opérateur à un autre. Cependant, cet opérateur ne peut guère être considéré comme représentant une observable. Que la valeur propre $-m$ de $\alpha_4 m$ n'a pas de sens physique, il serait difficile de contester. Ce caractère de non observabilité des grandeurs proportionnelles aux matrices fondamentales, à

leur produit ou à une combinaison linéaire de ces produits semble se dégager du présent travail. On est ainsi conduit à classer l'opérateur à densité invariante, le produit $\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4$ également parmi les grandeurs non observables.

NOTE I

Les intégrales angulaires que l'on rencontre dans le calcul de diverses valeurs moyennes sont du type suivant :

$$I(lu, l'u') = \int_{-1}^{+1} \mathcal{P}_l^u(x) \mathcal{P}_{l'}^{u'}(x) dx \quad (1)$$

ou encore avec

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_r^s(x) &= A(r, s) P_r^s(x) \\ A(r, s) &= \left(\frac{r-s!}{r+s!} \frac{2r+1}{2} \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (2)$$

on a

$$I(l, u, l', u') = A(l, u) A(l', u') \int P_l^u(x) P_{l'}^{u'}(x) dx \quad (1a)$$

et développant en série le produit des deux polynômes de Legendre, on trouve :

$$\begin{aligned} I &= \frac{A \cdot A'}{2^{l'+l} \cdot l! \cdot l'!} \\ &\sum_{\lambda}^{\frac{l-u-(1)}{2}} \sum_{\lambda'}^{\frac{l'-u'-(1)}{2}} (-)^{\lambda+\lambda'} \frac{[2(l-\lambda)]!}{l-\lambda!} \frac{[2(l'-\lambda')]!}{l'-\lambda'!} \\ &\int (1-x^2)^{\frac{u+u'}{2}} x^{(l-u)+(l'-u')-2(\lambda+\lambda')} dx \end{aligned} \quad (3)$$

les sommations sur λ et λ' vont jusqu'à $\frac{l-u}{2}$ ou $\frac{l-u-1}{2}$ suivant que $l-u$ ou $l'-u'$ est pair ou impair. L'intégrale en (3) n'est différente de zéro que si $(l-u) + (l'-u')$ est *pair*. Posons :

$$(l-u) + (l'-u') - 2(\lambda + \lambda') = 2\beta$$

on trouve alors, lorsque $u + u'$ est *impair*.

$$u + u' + 1 = 2\alpha.$$

$$\begin{aligned} I_a(lu, l'u') &= \frac{\pi}{2^{l'+l}} \frac{A(lu) A(l'u')}{l! \cdot l'!} \frac{2\alpha-1!!}{2\alpha!!} \\ &\sum_{\lambda}^{\frac{l-u-(1)}{2}} \sum_{\lambda'}^{\frac{l'-u'-(1)}{2}} (-)^{\lambda+\lambda'} \frac{[2(l-\lambda)]!}{l-\lambda!} \frac{[2(l'-\lambda')]!}{l'-\lambda'!} \\ &\times \frac{2\beta-1!!}{(2\alpha+2\beta)(2\alpha+2\beta-2)\dots(2\alpha+2)} \end{aligned} \quad (3a)$$

et lorsque $u + u'$ est *pair* avec

$$u + u' + 1 = 2\alpha + 1$$

$$I_b = \frac{1}{2^{l+l'-1}} \frac{A \cdot A'}{l+u! l'+u'!} \frac{2\gamma!!}{2\alpha+1!!} \left. \begin{aligned} & \frac{l-u-(1)}{2} \frac{l'-u'-(1)}{2} \\ & \sum_{\lambda} \sum_{\lambda'} (-)^{\lambda+\lambda'} \frac{[2(l-\lambda)]! [2(l'-\lambda')]!}{l-\lambda! l'-\lambda'!} \end{aligned} \right\} (3b)$$

$$\times \frac{2\beta-1!!}{[(2\alpha+1)+2\beta][(2\alpha+1)+2\beta-2]\dots[(2\alpha+1)+2]}$$

$2t!! = (2t)(2t-2)\dots 6.4.2; \quad 0!! = 1;$
 $2t-1!! = (2t-1)(2t-3)\dots 5.3.1.$

Dans le calcul de $\overline{c^2 x_k}$ seul I_a intervient.

NOTE II

Les diverses intégrales radiales rencontrées dans ce travail sont de deux types :

$$J = \int_0^\infty f_{nl}^2(r) r^\lambda dr \quad \lambda \geq 0 \quad (1)$$

où à la place de f_{nl} peut figurer également l'autre fonction radiale g_{nl} . Ces fonctions sont définies par les formules (17) à (17 c) du texte. L'autre intégrale type est

$$K = \int_0^\infty f_{nl} \cdot g_{nl} \cdot r^\lambda dr \quad \lambda \geq 0. \quad (2)$$

Substituant en (1) f_{nl} par sa forme (17 a), on trouve, après avoir remplacé la variable r par la variable sans dimension $2Z/Na$ désignée par u ,

$$J = \mathcal{N}_-^2 \cdot \left(\frac{aN}{2Z}\right)^{\lambda+1} \int_0^\infty e^{-u} u^{2\gamma+\lambda} [(N-\gamma)F_2(u) + n_r F_1(u)]^2 du \quad (3)$$

Posons maintenant

$$\Sigma^{(1)}(\alpha+\lambda) = (N-\gamma)^2 \sum_{\mu, \nu}^{n_r} \frac{(-n_r)_\mu (-n_r)_\nu}{(2\gamma+3)_\mu (2\gamma+3)_\nu \mu! \nu!} (\alpha+\lambda)! \quad (4a)$$

$$\Sigma^{(2)}(\alpha+\lambda) = n_r^2 \sum_{\mu, \nu}^{n_r-1} \frac{[-(n_r-1)]_\mu [-(n_r-1)]_\nu}{(2\gamma+3)_\mu (2\gamma+3)_\nu \mu! \nu!} (\alpha+\lambda)! \quad (4b)$$

$$\Sigma^{(3)}(\alpha+\lambda) = 2n_r(N-\gamma) \sum_{\mu}^{n_r} \sum_{\nu}^{n_r-1} \frac{(-n_r)_\mu [-(n_r-1)]_\nu}{(2\gamma+3)_\mu (2\gamma+3)_\nu \mu! \nu!} (\alpha+\lambda)! \quad (4c)$$

avec

$$\alpha = 2\gamma + \mu + \nu$$

on trouve, tenant compte toujours des relations (17) à (17 c) du texte,

$$J = \mathcal{N}_-^2 \cdot \left(\frac{aN}{2Z}\right)^{\lambda+1} (\Sigma^{(1)}(\alpha+\lambda) + \Sigma^{(2)}(\alpha+\lambda) + \Sigma^{(3)}(\alpha+\lambda)). \quad (5)$$

Si g_{nl} se trouve à la place de f_{nl} en J , on a à remplacer en (5)

$$\mathcal{N}_-^2 \text{ par } \mathcal{N}_+^2 \quad \text{et} \quad +\Sigma^{(3)}(\alpha+\lambda) \text{ par } -\Sigma^{(3)}(\alpha+\lambda).$$

On trouvera de même pour l'intégrale K ,

$$K = \mathcal{N}_- \cdot \mathcal{N}_+ \cdot \left(\frac{aN}{2Z}\right)^{\lambda+1} (\Sigma^{(1)}(\alpha+\lambda) - \Sigma^{(2)}(\alpha+\lambda)) \left. \begin{aligned} & = \frac{Z\alpha}{N} \cdot \Phi \cdot \left(\frac{aN}{2Z}\right)^{\lambda+1} (\Sigma^{(1)}(\alpha+\lambda) - \Sigma^{(2)}(\alpha+\lambda)) \end{aligned} \right\} (6)$$

où toutes les grandeurs intervenant sont explicitées dans les formules (17) à (17 c).

Manuscrit reçu le 5 janvier 1935.