

Réinterprétation en théorie quantique des relations cinématique et mécanique

W. Heisenberg

Le présent article vise à établir une base pour la mécanique quantique fondée exclusivement sur les relations entre quantités qui sont en principe observables.

Il est bien connu que les règles formelles qui sont utilisées en théorie quantique pour calculer les quantités observables telles que l'énergie d'un atome d'hydrogène peuvent être sérieusement critiquées sur la base du fait qu'elles contiennent, comme éléments de base, des relations entre des quantités qui sont apparemment non observables en principe, e.g. comme la position et la période de révolution d'un électron. Par conséquent, ce problème des quantités physiques inobservables pourrait plus tard ne plus poser problème dans le cadre de la détermination expérimentale. Un tel espoir pourrait être justifiable si les règles mentionnées ci-dessus étaient intrinsèquement consistantes et applicables à des problèmes de mécanique quantique d'un domaine clairement défini. L'expérience montre pourtant que seul l'atome d'hydrogène et son effet brut peuvent être traités par ces règles formelles de la théorie quantique. Des difficultés fondamentales surgissent déjà dans le problème des champs croisés (un atome d'hydrogène dans des champs électrique et magnétique de directions différentes). De plus, la réaction des atomes à des champs variant périodiquement ne peut être décrite par ces règles. Finalement, l'extension des règles quantiques au traitement des atomes ayant plusieurs électrons s'est avérée infaisable.

C'est devenu une pratique courante que de caractériser cet échec des règles de la théorie quantique comme une déviation de la mécanique classique, puisque les règles elles-mêmes furent principalement dérivées à partir de la mécanique classique. Cette caractérisation a, pourtant, peu de signification quand on réalise que la condition de fréquence d'*Einstein-Bohr* (qui est valide dans tous les cas) représente déjà un éloignement complet de la mécanique classique ; ou plutôt (en utilisant le point de vue de la théorie ondulatoire) de la cinématique sous-tendant cette mécanique, à tel point que même pour les problèmes les plus simples de la théorie quantique, la validité de la mécanique classique ne peut tout simplement pas se maintenir. Dans cette situation, il semble judicieux d'abandonner tout espoir qu'on avait conservé jusqu'ici d'observer des quantités inobservables, telles que la position et la période de l'électron, et de concéder qu'un accord partiel des règles quantiques avec l'expérience est plus ou moins fortuit. Il semble plutôt plus raisonnable d'essayer d'établir une mécanique quantique théorique, analogue à la mécanique classique, mais dans laquelle seules des relations entre quantités observables adviennent. On peut voir la condition de fréquence et la théorie de la dispersion de Kramers¹, avec ses extensions dans des articles récents², comme les premières étapes les plus importantes vers une telle mécanique quantique théorique. Dans cet article, nous chercherons à établir quelques nouvelles relations mécaniques quantiques et à les appliquer à quelques problèmes particuliers. Nous nous restreindrons aux problèmes impliquant un seul degré de liberté.

Note de l'éditeur. Cet article a été publié dans Zs. Phys. 33 (1925) 879-893. Il était signé depuis le "Göttingen, Institut für theoretische Physik".

Traduction de la version anglaise de l'article, voir <http://fisica.ciens.ucv.ve/svincenz/SQM261.pdf>
Denise Vella-Chemla, décembre 2020.

1. H. A. Kramers, Nature **113** (1924) 673.

2. M. Born, Zs. f. Phys. **26** (1924) 379. H. A. Kramers and W. Heisenberg, Zs. f. Phys. **31** (1925) 681. M. Born and P. Jordan, Zs. f. Phys. (in course of Publication) [**33** (1925) 479; paper 7a].

1. En théorie classique, la radiation émise par un électron en mouvement (dans la zone d'onde, i.e., dans la région où \mathfrak{E} et \mathfrak{H} sont du même ordre de grandeur que $1/r$) n'est pas entièrement déterminée par les expressions

$$\mathfrak{E} = \frac{e}{r^3 c^2} [\mathfrak{r} [\mathfrak{r} \mathfrak{v}]] , \quad \mathfrak{h} = \frac{e}{r^2 c^2} [\mathfrak{v} \mathfrak{r}] ,$$

mais des termes additionnels adviennent dans l'ordre suivant d'approximation, e.g. des termes de la forme $e \mathfrak{v} \mathfrak{v} / r c^3$ que l'on peut appeler "radiation quadripole". Dans des ordres de grandeur encore plus élevés, des termes comme $e \mathfrak{v} \mathfrak{v}^2 / r c^4$ apparaissent. De cette manière, l'approximation peut être poussée selon un ordre arbitrairement grand. (Les symboles suivants ont été utilisés : \mathfrak{E} , \mathfrak{H} sont les forces des champs en un point, \mathfrak{r} le vecteur entre ce point et la position de l'électron, \mathfrak{v} la vitesse et e la charge de l'électron).

On peut se demander quelle forme ces termes d'ordres plus élevés prendraient en théorie quantique. Les approximations d'ordres plus élevés peuvent facilement être calculées en théorie classique si le mouvement de l'électron est donné en développement de Fourier, et on s'attendrait à un résultat similaire en théorie quantique. Ce point n'a rien à voir avec l'électrodynamique mais plutôt - et cela semble être particulièrement important - est de nature purement cinématique. On peut poser la question dans sa forme la plus simple : si plutôt qu'une quantité classique $x(t)$, nous avons une quantité de théorie quantique, quelle quantité de théorie quantique apparaîtra à la place de $x(t)^2$? Avant que nous ne puissions répondre à cette question, il est nécessaire de garder à l'esprit qu'en théorie quantique, il n'a pas été possible d'associer l'électron à un point dans l'espace, considéré comme une fonction du temps, au moyen de quantités observables. Pourtant, même en théorie quantique, il est possible d'attribuer à un électron l'émission d'une radiation. Pour caractériser cette radiation, nous avons d'abord besoin des fréquences qui apparaissent comme des fonctions de deux variables. En théorie quantique, ces fonctions sont de la forme

$$\nu(n, n - \alpha) = \frac{1}{h} \{W(n) - W(n - \alpha)\},$$

et en théorie classique, elles sont de la forme

$$\nu(n, \alpha) = \alpha \nu(n) = \alpha \frac{1}{h} \frac{dW}{dn}$$

(Ici, on a $nh = J$, où J est l'une des constantes canoniques).

Comme caractéristique pour la comparaison entre les théories classique et quantique par rapport à la fréquence, on peut écrire les relations de combinaison :

Classique :

$$\nu(n, n - \alpha) + \nu(n - \alpha, n - \alpha - \beta) = \nu(n, n - \alpha - \beta).$$

Quantique :

$$\nu(n - \beta, n - \alpha - \beta) + \nu(n, n - \beta) = \nu(n, n - \alpha - \beta).$$

ou

$$\nu(n, \alpha) + \nu(n, \beta) = \nu(n, \alpha + \beta).$$

Pour compléter la description de la radiation, il est nécessaire d'avoir non seulement les fréquences mais également les amplitudes. Les amplitudes peuvent être traitées comme des vecteurs complexes, chacun déterminé par six composantes indépendantes, et cela détermine à la fois la polarisation et la phase. Comme les amplitudes sont aussi des fonctions des deux variables n et α , la partie correspondante de la radiation est donnée par les expressions suivantes :

Quantique :

$$(1) \quad \text{Re}\left\{\mathfrak{U}(n, n - \alpha)e^{i\omega(n, n - \alpha)t}\right\}.$$

Classique :

$$(2) \quad \text{Re}\left\{\mathfrak{U}_\alpha(n)e^{i\omega(n)\alpha t}\right\}.$$

Au premier abord, la phase contenue dans \mathfrak{U} semble être dépourvue de signification physique en théorie quantique, puisque dans cette théorie, les fréquences sont en général incommensurables à leurs harmoniques. Pourtant, nous verrons dans le cas présent qu'en théorie quantique également, la phase a une signification définie qui est analogue à sa signification en théorie classique. Si nous considérons maintenant une quantité donnée $x(t)$ dans la théorie classique, elle peut être vue comme représentée par un ensemble de quantités de la forme

$$\mathfrak{U}_\alpha(n)e^{i\omega(n)\alpha t},$$

qui, selon que le mouvement est périodique ou pas, peut être combinée en une somme ou une intégrale qui représente $x(t)$:

$$x(n, t) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{U}_\alpha(n)e^{i\omega(n)\alpha t}$$

ou

(2a)

$$x(n, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{U}_\alpha(n)e^{i\omega(n)\alpha t} d\alpha.$$

Une combinaison similaire des quantités en théorie quantique semble impossible à réaliser de manière unique et par conséquent n'a pas de sens, au regard du poids égal des variables n et $n - \alpha$. Pourtant, on peut facilement regarder l'ensemble des quantités $\mathfrak{U}(n, n - \alpha)e^{i\omega(n, n - \alpha)t}$ comme une représentation de la quantité $x(t)$ et alors tenter de répondre à la question ci-dessus : comment doit être représentée la quantité $x(t)^2$?

La réponse en théorie classique est évidente :

$$(3) \quad \mathfrak{B}_\beta(n)e^{i\omega(n)\beta t} = \sum_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{U}_\alpha \mathfrak{U}_{\beta-\alpha} e^{i\omega(n)(\alpha+\beta-\alpha)t}$$

ou

$$(4) \quad = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{U}_\alpha \mathfrak{U}_{\beta-\alpha} e^{i\omega(n)(\alpha+\beta-\alpha)t} d\alpha,$$

de telle façon que

$$(5) \quad x(t)^2 = \sum_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{B}_\beta(n) e^{i\omega(n)\beta t}$$

ou, respectivement,

$$(6) \quad = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{B}_\beta(n) e^{i\omega(n)\beta t} d\beta$$

En théorie quantique, il semble que la supposition la plus simple et la plus naturelle devrait être de remplacer les équations (3) et (4) par :

$$(7) \quad \mathfrak{B}(n, n - \beta) e^{i\omega(n, n - \beta)t} = \sum_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{U}(n, n - \alpha) \mathfrak{U}(n - \alpha, n - \beta) e^{i\omega(n, n - \beta)t}$$

or

$$(8) \quad = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{U}(n, n - \alpha) \mathfrak{U}(n - \alpha, n - \beta) e^{i\omega(n, n - \beta)t} d\alpha,$$

et en fait, ce type de combinaison est une conséquence presque nécessaire des règles de combinaison des fréquences. En faisant les suppositions (7) et (8), on reconnaît que les phases des \mathfrak{U} en théorie quantique ont exactement autant de sens que leurs analogues classiques. Seule l'origine de l'échelle temporelle et par conséquent un facteur de phase commun à tous les \mathfrak{U} est arbitraire et donc dépourvu de sens physique, mais les phases des \mathfrak{U} individuels entrent de façon essentielle en jeu dans la quantité \mathfrak{B} ³. Une interprétation géométrique de telles relations de phases en théorie quantique en analogie avec celles de la théorie classique semble à présent à peine possible.

Si nous demandons alors, plus avant, une représentation pour la quantité $x(t)$ ³ nous trouvons sans difficulté :

Classique :

$$(9) \quad \mathfrak{T}(n, \gamma) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \sum_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{U}_\alpha(n) \mathfrak{U}_\beta(n) \mathfrak{U}_{\gamma-\alpha-\beta}(n).$$

Quantique :

$$(10) \quad \mathfrak{T}(n, n - \gamma) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \sum_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{U}(n, n - \alpha) \mathfrak{U}(n - \alpha, n - \alpha - \beta) \mathfrak{U}(n - \alpha - \beta, n - \gamma)$$

3. Cf. aussi H. A. Kramers et W. Heisenberg, loc.cit. Les phases interviennent principalement dans les expressions utilisées là pour le moment de la diffraction induite.

ou les formes intégrales correspondantes.

De façon similaire, on peut trouver une représentation en théorie quantique pour toutes les quantités de la forme $x(t)^n$, et si l'une des fonctions quelconques $f[x(t)]$ est donnée, on peut toujours trouver l'expression correspondante en théorie quantique, à partir du moment où la fonction peut être développée en une série de puissances de x . Une difficulté notable surgit, pourtant, si nous considérons deux quantités $x(t), y(t)$, et si nous nous interrogeons sur leur produit $x(t)y(t)$. Si $x(t)$ est caractérisée par \mathfrak{U} , et $y(t)$ par \mathfrak{B} , nous obtenons les représentations suivantes pour $x(t)y(t)$:

Classique :

$$\mathfrak{T}_\beta(n) = \sum_{-\infty}^{+\infty} {}_\alpha \mathfrak{U}_\alpha(n) \mathfrak{B}_{\beta-\alpha}(n).$$

Quantique :

$$\mathfrak{T}(n, n - \beta) = \sum_{-\infty}^{+\infty} {}_\alpha \mathfrak{U}(n, n - \alpha) \mathfrak{B}(n - \alpha, n - \beta).$$

Tandis qu'en théorie classique $x(t)y(t)$ est toujours égal à $y(t)x(t)$, ce n'est pas nécessairement le cas en théorie quantique. Dans des cas particuliers, e.g., dans l'expression $x(t)x(t)^2$, cette difficulté ne survient pas.

Si, comme dans la question posée au début de cette section, on s'intéresse à des produits de la forme $v(t)\dot{v}(t)$, alors en théorie quantique, ce produit $v\dot{v}$ devrait être remplacé par $\frac{1}{2}(v\dot{v} + i\dot{v}v)$, pour que $v\dot{v}$ soit le coefficient différentiel de $\frac{1}{2}v^2$. De façon similaire, il semble toujours possible de trouver des expressions naturelles pour les valeurs moyennes en théorie quantique, même si elles peuvent être encore plus hypothétiques que les formules (7) et (8).

En dehors de la difficulté juste mentionnée, les formules du type (7), (8) devraient assez généralement également suffire à exprimer l'interaction des électrons dans un atome en fonction des amplitudes caractéristiques des électrons.

2. Après ces considérations qui concernaient la cinématique en théorie quantique, tournons notre attention vers le problème dynamique qui consiste en la détermination des \mathfrak{U}, ν, W à partir des forces données du système. Dans la théorie précédente, ce problème était résolu en deux étapes :

1. Intégration de l'équation du mouvement

$$(11) \quad \ddot{x} + f(x) = 0.$$

2. Détermination des constantes pour le mouvement périodique par

$$(12) \quad \oint pdq = \oint m\dot{x}dx = J (= nh).$$

Si l'on cherche à construire un formalisme de mécanique quantique correspondant à la mécanique classique, de la façon la plus proche qui soit, il est très naturel de faire entrer l'équation du mou-

vement (11) directement dans la théorie quantique. À ce point, cependant, il est nécessaire, pour s'éloigner des fondements fermes fournis par ces quantités qui sont en principe observables - de remplacer les quantités \ddot{x} et $f(x)$ par leurs représentations en théorie quantique, comme fournies au § 1. En théorie classique, il est possible d'obtenir la solution de (11) en exprimant d'abord x comme une série de Fourier ou une intégrale de Fourier à coefficients (et fréquences) indéterminés. En général, on obtient alors un ensemble infini d'équations contenant un nombre infini d'inconnues, ou d'équations intégrales, qui peuvent être réduites à des relations récursives simples pour les \mathfrak{U} dans les cas particuliers seulement. En théorie quantique, nous sommes maintenant forcés d'adopter cette méthode pour résoudre l'équation (11) puisque, comme cela a été dit précédemment, il n'est pas possible de définir une fonction de théorie quantique directement analogue à la fonction $x(n, t)$.

Par conséquent, la solution en théorie quantique de (11) est seulement possible dans les cas les plus simples. Avant de considérer de tels exemples simples, fournissons une ré-interprétation en théorie quantique de la détermination, par (12), de la constante du mouvement périodique. Nous supposons (classiquement) que le mouvement est périodique :

$$(13) \quad x = \sum_{-\infty}^{+\infty} {}_{\alpha}a_{\alpha}(n)e^{i\alpha\omega_n t};$$

par conséquent

$$m\dot{x} = m \sum_{-\infty}^{+\infty} {}_{\alpha}a_{\alpha}(n)i\alpha\omega_n e^{i\alpha\omega_n t}$$

et

$$\oint m\dot{x}dx = \oint m\dot{x}^2dt = 2\pi m \sum_{-\infty}^{+\infty} {}_{\alpha}a_{\alpha}(n)a_{-\alpha}(n)\alpha^2\omega_n.$$

De plus, puisque $a_{\alpha}(n) = \overline{a_{\alpha}(n)}$, comme x doit être réel, il en découle que

$$(14) \quad \oint mx^2dt = 2\pi m \sum_{-\infty}^{+\infty} {}_{\alpha}|a_{\alpha}(n)|^2\alpha^2\omega_n.$$

Dans la théorie précédente, cette intégrale de phase était habituellement supposée égale à un multiple entier de h , i.e. égale à nh , mais une telle condition ne s'adapte pas naturellement au calcul dynamique. Il semble, même quand on regarde cela selon le point de vue adopté jusqu'ici, arbitraire au sens du principe de correspondance, parce que selon ce point de vue les J sont déterminés seulement à une constante additive près comme des multiples de h . Plutôt que (14), il serait plus naturel d'écrire

$$\frac{d}{dn}(nh) = \frac{d}{dn} \oint mx^2dt,$$

c'est-à-dire,

$$(15) \quad h = 2\pi m \sum_{-\infty}^{+\infty} {}_{\alpha}\alpha \frac{d}{dn}(\alpha\omega_n \cdot |a_{\alpha}|^2).$$

Une telle condition détermine de façon évidente les a_α seulement à une constante près, et en pratique, cette indétermination a donné naissance aux difficultés dues à l'occurrence de nombres quantiques demi-entiers.

Si nous cherchons une relation de théorie quantique correspondant à (14) et (15) et contenant des quantités observables seulement, l'unicité qui avait été perdue est automatiquement rétablie.

Nous devons admettre que seule l'équation (15) a une reformulation simple en théorie quantique, qui est reliée à la théorie de la dispersion de *Kramers*⁴ :

$$(16) \quad h = 4\pi m \sum_0^{\infty} \{ |a(n, n + \alpha) - |a(n, n - \alpha)|^2 \omega(n, n - \alpha) \}.$$

À nouveau, cette relation suffit pour déterminer les a de manière unique puisque la constante indéterminée contenue dans la quantité a est automatiquement fixée par la condition qu'un état de plus basse énergie devrait exister, état dans lequel aucune radiation n'est émise. Notons cet état de plus basse énergie n_0 ; alors nous devrions avoir $a(n_0, n_0 = \alpha) = 0$ (pour $\alpha > 0$). Par conséquent, nous pourrions nous attendre à ce que la question de la quantification entière ou demi-entière ne se pose pas dans la mécanique quantique théorique basée uniquement sur les relations entre des quantités observables.

Les équations (11) et (16), si on peut les résoudre, contiennent la détermination complète non seulement des fréquences et des valeurs d'énergie mais également des probabilités de transition de la théorie quantique. Pourtant, à présent, la solution mathématique effective ne peut être obtenue que dans les cas les plus simples. Dans de nombreux systèmes, e.g. l'atome d'hydrogène, une complication particulière survient parce que les solutions correspondent à un mouvement qui est en partie périodique et en partie apériodique. Comme conséquence de cette propriété, les séries de la théorie quantique (7), (8) et l'équation (16) se décomposent en une somme et une intégrale. En mécanique quantique, une telle décomposition d'un mouvement en une composante périodique et une composante apériodique ne peut avoir lieu en général.

Cependant, on pourrait regarder les équations (11) et (16) comme solutions satisfaisantes, au moins en principe, du problème dynamique, s'il était possible de montrer qu'elles s'accordent avec (ou bien n'entrent pas en contradiction à quelque niveau que ce soit avec) les relations de la mécanique quantique que nous connaissons à présent. Il devrait, par exemple, être établi que l'introduction d'une petite perturbation dans un problème dynamique amène des termes additionnels dans l'énergie, ou la fréquence, du type trouvé par *Kramers* et *Born* - mais non pas du type trouvé par la théorie classique. De plus, on devrait aussi voir que l'équation (11) dans sa forme actuelle de la théorie quantique doit en général donner naissance à une intégrale d'énergie $\frac{1}{2}m\dot{x}^2 + U(x) = \text{const.}$, et que l'énergie dérivée doit satisfaire la condition $\Delta W = h\nu$, en analogie avec la condition classique $\nu = \partial W / \partial J$. Une réponse générale à ces questions devrait permettre d'élucider les connexions intrinsèques entre les recherches précédentes en mécanique quantique et paver le chemin vers une connexion générale entre la formule de dispersion de *Kramers* et les équations (11) et (16), nous pouvons répondre aux questions ci-dessus dans des cas très particuliers qui peuvent être résolus

4. Cette relation a déjà été dérivée de considérations de dispersion par W. Kuhn, Zs. Phys. **33** (1925) 408, et W. Thomas, Naturwiss. **13** (1925) 627.

par de simples relations récursives.

Le lien général entre la théorie de la dispersion de Kramers et nos équations (11) et (16) s'établit comme suit. De l'équation (11) (plus précisément, de son analogue en théorie quantique), on trouve, juste comme en théorie classique, que l'électron oscillant se comporte comme un électron libre quand on agit sur lui avec un rayon lumineux de fréquence plus grande que les fréquences propres du système. Ce résultat découle aussi de la théorie de la dispersion de Kramers si en plus on prend en compte l'équation (16). En fait, Kramers trouve pour le moment induit par une onde de la forme $E \cos 2\pi\nu t$:

$$M = e^2 E \cos 2\pi\nu t \frac{2}{h} \sum_0^\infty \alpha \left\{ \frac{|a(n, n + \alpha)|^2 \nu(n, n + \alpha)}{\nu^2(n, n + \alpha) - \nu^2} - \frac{|a(n, n - \alpha)|^2 \nu(n, n - \alpha)}{\nu^2(n, n - \alpha) - \nu^2} \right\},$$

de telle façon que pour $\nu \gg \nu(n, n + \alpha)$,

$$M = -\frac{2Ee^2 \cos 2\pi\nu t}{\nu^2 h} \sum_0^\infty \alpha \{ |a(n, n + \alpha)|^2 \nu(n, n + \alpha) - |a(n, n - \alpha)|^2 \nu(n, n - \alpha) \},$$

qui, à cause de l'équation (16), devient

$$M = -\frac{e^2 E \cos 2\pi\nu t}{4\pi^2 m \nu^2}.$$

3. Comme exemple simple, on va traiter maintenant l'oscillateur anharmonique :

$$(17) \quad \ddot{x} + \omega_0^2 x + \lambda x^2 = 0.$$

Classiquement, cette équation est satisfaite par une solution de la forme

$$x = \lambda a_0 + a_1 \cos t + \lambda a_2 \cos 2\omega t + \lambda^2 a_3 \cos 3\omega t + \dots \lambda^{\tau-1} a_\tau \cos \tau\omega t,$$

où les a sont des séries de puissances en λ , dont les premiers termes sont indépendants de λ . Quantiquement, nous essayons de trouver une expression analogue, représentant x par des termes de la forme

$$\begin{aligned} \lambda a(n, n); & \quad a(n, n - 1) \cos \omega(n, n - 1)t; \\ & \quad \lambda a(n, n - 2) \cos \omega(n, n - 2)t; \\ & \quad \dots \lambda^{\tau-1} a(n, n - \tau) \cos \omega(n, n - \tau)t \dots \end{aligned}$$

Les formules récursives qui déterminent les a et ω (en termes à λ près, exclus) selon les équations (3), (4) ou (7), (8) sont :

Classique :

$$(18) \quad \begin{aligned} \omega_0^2 a_0(n) + \frac{1}{2} a_1^2(n) &= 0; \\ -\omega^2 + \omega_0^2 &= 0; \\ (-4\omega^2 + \omega_0^2) a_2(n) + \frac{1}{2} a_1^2 &= 0; \\ (-9\omega^2 + \omega_0^2) a_3(n) + a_1 a_2 &= 0; \\ \dots & \end{aligned}$$

Quantique :

$$(19) \quad \begin{aligned} \omega_0^2 a_0(n) + \frac{1}{4} [a^2(n+1, n) + a^2(n, n-1)] &= 0; \\ -\omega^2(n, n-1) + \omega_0^2 &= 0; \\ [-\omega^2(n, n-2) + \omega_0^2] a(n, n-2) + \frac{1}{2} [a(n, n-1) a(n-1, n-2)] &= 0; \\ [-\omega^2(n, n-3) + \omega_0^2] a(n, n-3) + \frac{1}{2} [a(n, n-1) a(n-1, n-3)] \\ + \frac{1}{2} [a(n, n-2) a(n-2, n-3)] &= 0; \\ \dots & \end{aligned}$$

La condition quantique supplémentaire est :

Classique ($J = nh$) :

$$1 = 2\pi m \frac{d}{dJ} \sum_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{4} \tau^2 |a_\tau|^2 \omega.$$

Quantique :

$$h = \pi m \sum_0^{\infty} \left[|a(n+\tau, n)|^2 \omega(n+\tau, n) - |a(n, n-\tau)|^2 \omega(n, n-\tau) \right].$$

Nous obtenons pour le premier ordre, à la fois selon le paradigme classique et selon celui de la mécanique quantique

$$(20) \quad a_1^2(n) \quad \text{ou} \quad a^2(n, n-1) = \frac{(n + \text{const})h}{\pi m \omega_0}.$$

En théorie quantique, la constante dans l'équation (20) peut être déterminée à partir de la condition que $a(n_0, n_0-1)$ devrait s'évanouir dans l'état de plus basse énergie. Si nous numérotions les n de telle façon que dans l'état de plus basse énergie, n vaut zero, i.e. $n_0 = 0$, alors $a^2(n, n-1) = nh/\pi m \omega_0$.

Il découle alors des relations récursives (18) que dans la théorie classique, le coefficient a_τ a (au premier ordre en λ) la forme $\varkappa(\tau) n^{\frac{1}{2}\tau}$ où $\varkappa(\tau)$ représente un facteur indépendant de n . En théorie quantique, l'équation (19) implique

$$(21) \quad a(n, n-\tau) = \varkappa(\tau) \sqrt{\frac{n!}{(n-\tau)!}},$$

où $\varkappa(\tau)$ est le même facteur de proportionnalité, indépendant de n . Naturellement, pour des grandes valeurs de n , la valeur dans la théorie quantique de a_τ tend asymptotiquement vers la valeur en théorie classique.

Une étape évidente serait d'essayer d'insérer l'expression classique pour l'énergie $\frac{1}{2}mx^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2 + \frac{1}{3}m\lambda x^3 = W$, parce que dans le calcul de notre présente première approximation, il est effectivement constant, même lorsque traité en théorie quantique. Sa valeur est donnée par (19), (20) et (21) comme valant :

Classique :

$$(22) \quad W = nh\omega_0/2\pi.$$

Quantique :

$$(23) \quad W = (n + \frac{1}{2})h\omega_0/2\pi$$

ou

$$\nu(n, \alpha) + \nu(n, \beta) = \nu(n, \alpha + \beta).$$

(les termes d'ordre λ^2 ont été omis).

Ainsi, selon le point de vue présent, même l'énergie d'un oscillateur harmonique n'est pas donnée par la "mécanique classique", i.e. par l'équation (22), mais a la forme (23).

Le calcul plus précis, prenant en compte des approximations d'ordre plus élevé dans W, a, ω sera maintenant effectué pour l'exemple le plus simple de l'oscillateur anharmonique $\ddot{x} + \omega_0^2x + \lambda x^3 = 0$.

Classiquement, on peut dans ce cas supposer

$$x = a_1 \cos \omega t + \lambda a_3 \cos 3\omega t + \lambda^2 a_5 \cos 5\omega t + \dots;$$

en théorie quantique, nous tentons de supposer par analogie

$$a(n, n-1) \cos \omega(n, n-1)t; \quad \lambda a(n, n-3) \cos \omega(n, n-3)t; \dots$$

Les quantités a sont une fois de plus des séries de puissances en λ dont le premier terme a la forme, comme dans l'équation (21),

$$a(n, n-\tau) = \varkappa(\tau) \sqrt{\frac{n!}{(n-\tau)!}},$$

comme on le trouve en évaluant les équations correspondant à (18) et (19).

Si l'évaluation de ω et a à partir des équations (18) et (19) est effectuée jusqu'à l'ordre λ^2 ou λ respectivement, on obtient

$$(24) \quad \omega(n, n-1) = \omega - 0 + \lambda \frac{3nh}{8\pi\omega_0^2 m} - \lambda^2 \frac{3h^2}{256\omega_0^5 m^2 \pi^2} (17n^2 + 7) + \dots$$

$$(25) \quad a(n, n-1) = \sqrt{\frac{nh}{\pi\omega_0 m}} \left(1 - \lambda \frac{3nh}{16\pi\omega_0^3 m} + \dots \right)$$

$$(26) \quad a(n, n-3) = \frac{1}{32} \sqrt{\frac{h^3}{\pi^2\omega_0^7 m^3} n(n-1)(n-2)} \cdot \left(1 - \lambda \frac{39(n-1)h}{32\pi\omega_0^3 m} \right).$$

L'énergie, définie comme le terme constant dans l'expression

$$\frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 + \frac{1}{4}m\lambda x^4,$$

(je n'ai pas pu prouver en général que tous les termes périodiques s'évanouissent effectivement, mais c'était le cas pour tous les termes évalués) s'avère être égale à

$$(27) \quad W = \frac{(n + \frac{1}{2})h\omega_0}{2\pi} + \lambda \frac{3(n^2 + n + \frac{1}{2})h^2}{8.4\pi^2\omega_0^2 m} - \lambda^2 \frac{h^3}{512\pi^3\omega_0^5 m^2} (17n^3 + \frac{51}{2}n^2 + \frac{59}{2}n + \frac{21}{2}).$$

Cette énergie peut aussi être déterminée en utilisant l'approche de *Kramers-Born* en traitant le terme $\frac{1}{4}m^4$ comme une perturbation de l'oscillateur harmonique. Le fait qu'on obtienne exactement le même résultat (27) me semble remarquablement corroborer les équations de la mécanique quantique qui ont été prises comme base. De plus, l'énergie calculée à partir de (27) satisfait la relation (cf. eq. 24) :

$$\frac{\omega(n, n-1)}{2\pi} = \frac{1}{h} [W(n) - W(n-1)],$$

qui peut être vue comme une condition nécessaire pour la possibilité d'une détermination des transitions de probabilités selon les équations (11) et (16).

En conclusion, nous considérons le cas d'un objet qui tourne et nous attirons l'attention sur la relation des équations (7), (8) aux formules d'intensité pour l'effet Zeeman⁵ et pour le multiplet⁶. Considérons l'objet tournant (rotator) comme représenté par un électron qui entoure un noyau à distance constante a . À la fois du point de vue classique et du point de vue de la théorie quantique, les "équations du mouvement" établissent simplement que l'électron subit une rotation uniforme, plane, à une distance a et avec une vitesse angulaire ω autour du noyau. Les "conditions quantiques" (16) amènent, selon (12),

$$h = \frac{d}{dn} (2\pi m a^2 \omega),$$

et selon (16)

$$h = 2\{a^2\omega(n+1, n) - a^2\omega(n, n-1)\},$$

5. S. Goudsmit et R. de L. Kronig, *Naturwiss.* **13** (1925) 90; H. Hönl, *Zs. f. Phys.* **31** (1925) 340.

6. R. de L. Kronig, *Zs. f. Phys.* **31** (1925) 885; A. Sommerfeld and H. Hönl, *Sitzungsber. d. Preuss. Akad. d. Wiss.* (1925) 141; H. N. Russell, *Nature* **115** (1925) 835.

d'où, dans les deux cas, il découle que

$$\omega(n, n-1) = \frac{h(n + \text{const})}{2\pi ma^2}.$$

La condition que la radiation doive s'évanouir dans l'état d'énergie la plus basse ($n_0 = 0$) amène à la formule

$$(28) \quad \omega(n, n-1) = \frac{hn}{2\pi ma^2}.$$

L'énergie est

$$W = \frac{1}{2}mv^2,$$

ou, des équations (7), (8),

$$(29) \quad W = \frac{m}{2}a^2 \frac{\omega^2(n, n-1) + \omega^2(n+1, n)}{2} = \frac{h^2}{8\pi^2 ma^2} \left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right),$$

satisfait à nouveau la condition $\omega(n, n-1) = (2\pi/h)[W(n) - W(n-1)]$.

Comme corroborant la validité des formules (28) et (29), selon Kratzer⁷, de nombreux spectres de raies (incluant les spectres pour lesquels l'existence d'un moment pour l'électron est improbable) semblent nécessiter des formules du type (28), (29), formules que, pour éviter la rupture avec la théorie de la mécanique classique, on s'était efforcé jusqu'ici d'expliquer par la quantification en demi-entiers.

Pour arriver à la formule de *Goudsmit-Kronig-Hönl* pour l'objet tournant, on doit laisser de côté le domaine des problèmes à un degré de liberté. On suppose que le tourniquet à une direction dans l'espace qui est sujette à une très lente précession σ autour de l'axe des coordonnées z d'un champ extérieur.

Appelons m le nombre quantique correspondant à cette précession. Le mouvement est alors représenté par les quantités

$$\begin{aligned} z &: & a(n, n-1 ; m, m) \cos \omega(n, n-1)t ; \\ x + iy &: & b(n, n-1 ; m, m-1) e^{i[\omega(n, n-1) + \sigma]t} ; \\ && b(n, n-1 ; m-1, m) e^{i[-\omega(n, n-1) + \sigma]t}. \end{aligned}$$

Les équations du mouvement sont simplement

$$x^2 + y^2 + z^2 = a^2.$$

À cause de (7), la façon dont cela amène à l'équation⁸

7. Cf. par exemple, B. A. Kratzer, Sitzungsber. d. Bayr. Akad. (1922) p. 107.

8. Cette équation (30) est assez identique aux règles sommatoires de *Ornstein-Burger*.

$$(30) \quad \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{2} a^2(n, n-1 ; m, m) + b^2(n, n-1 ; m, m-1) + b^2(n, n-1 ; m, m+1) \right. \\ \left. + \frac{1}{2} a^2(n+1, n ; m, m) + b^2(n+1, n ; m-1, m) + b^2(n+1, n ; m+1, m) \right\} = a^2.$$

$$(31) \quad \frac{1}{2} a(n, n-1 ; m, m) a(n-1, n-2 ; m, m) \\ = b(n, n-1 ; m, m+1) b(n-1, n-2 ; m+1, m) \\ + b(n, n-1 ; m, m-1) b(n-1, n-2 ; m-1, m).$$

On a aussi la condition quantique correspondant à (16) :

$$(32) \quad 2\pi m \{ b^2(n, n-1 ; m, m-1) \omega(n, n-1) \\ - b^2(n, n-1 ; m-1, m) \omega(n, n-1) \} = (m + \text{const})h.$$

Les relations classiques correspondant à ces équations sont

$$(33) \quad \frac{1}{2} a_0^2 + b_1^2 + b_{-1}^2 \cdot = a^2 ; \\ \frac{1}{4} a_0^2 = b_1 b_{-1} ; \\ 2\pi m (b_{+1}^2 - b_{-1}^2) \omega = (m + \text{const})h.$$

Elles suffisent (à une constante inconnue près ajoutée à m) à déterminer a_0 , b_1 , b_{-1} de manière unique.

La solution la plus simple des équations de la théorie quantique (30), (31), (32) qui se présente est :

$$b(n, n-1 ; m, m-1) = a \sqrt{\frac{(n+m+1)(n+m)}{4(n+\frac{1}{2})n}} ; \\ b(n, n-1 ; m-1, m) = a \sqrt{\frac{(n-m)(n-m+1)}{4(n+\frac{1}{2})n}} ; \\ a(n, n-1 ; m, m) = a \sqrt{\frac{(n+m+1)(n-m)}{(n+\frac{1}{2})n}}.$$

Ces expressions sont en accord avec les formules de *Goudsmit, Kronig et Hönl*. On ne voit cependant pas facilement que ces expressions représentent les *seules* solutions possibles des équations (30), (31), (32), bien que cela me semble provenir de considération de conditions aux bornes (évanouissement de a et b aux “limites” ; cf. les articles de *Kronig, Sommerfeld et Hönl, Russell* cités plus haut).

Des considérations similaires à celles ci-dessus, appliquées aux formules d'intensité du multiplet amènent au résultat que ces règles d'intensité sont en accord avec les équations (7) et (16). Cette découverte peut à nouveau être vue comme corroborant la validité de l'équation cinématique (7).

Si une méthode pour déterminer les données théoriques en utilisant des relations entre les quantités observables, telle que celle proposée ici, peut être regardée comme satisfaisante en principe, ou si cette méthode permet de représenter une approche beaucoup trop grossière du problème physique de construire une mécanique quantique théorique, un problème évidemment très étudié en ce moment, la pertinence de cette méthode ne pourra être jugée que par des recherches mathématiques intensives ayant pour sujet la méthode qui a été utilisée de façon très superficielle ici.