Sur la condition de quantification de Sommerfeld et Epstein

par Albert EINSTEIN

(Zum Quantensatz von Sommerfeld und Epstein, Verhandl. Dtsch. Phys. Ges., 1917, 19, 82-92). Ce travail avait été exposé devant la Société Allemande de physique le 11 Mai 1917).

1. La formulation actuelle. On peut difficilement douter, aujourd'hui de l'exactitude de la condition de quantification (de Sommerfeld et Debye) pour un système mécanique périodique à un degré de liberté :

$$(1) \qquad \int p dq = \int p \frac{dq}{dt} dt = nh.$$

L'intégrale est prise ici sur une période entière du mouvement ; q désigne la coordonnée et p l'impulsion du système, qui lui est conjuguée. En outre, les travaux de Sommerfeld sur la théorie des spectres montrent indiscutablement que, pour les systèmes à plusieurs degrés de liberté, au lieu de cette unique condition quantique, il en apparait plusieurs, dans le cas général autant (ℓ) que le système possède de degrés de liberté. D'après Sommerfeld, ces ℓ conditions doivent être de la forme :

$$(2) \qquad \int p_i \, dq_i = n_i \, h.$$

Comme cette formulation dépend du choix des coordonnées, elle ne peut se réaliser que pour un choix déterminé. Ce n'est qu'à la condition que ce choix soit correct et que les q_i soient des fonctions périodiques du temps, que le système (2) exprimera des propriétés déterminées du mouvement.

C'est à Epstein (et à Schwartzschild) que nous devons le progrès essentiel suivant. Le premier fonde son procédé pour choisir les coordonnées q_i de Sommerfeld sur le

théorème de Jacobi qui consiste, comme on sait, en ceci. Supposons que $H(H[q_i,p_i])$ soit la fonction de Hamilton, dépendant de q_i, de p_i et de t, qui entre dans les équations canoniques :

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \tag{3}$$

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \tag{4}$$

Si cette fonction ne contient pas explicitement le temps t, elle s'identifie à l'énergie[1]. Si $J(t, q_1,\ldots, q_\ell, \alpha_1,\ldots,\alpha_\ell)$ est une intégrale complète de l'équation aux dérivées partielles de Hamilton-Jacobi :

$$\frac{\partial J}{\partial t} + H(q_i,\frac{\partial J}{\partial q_i}) = 0, \tag{5}$$

la solution des équations canoniques sera de la forme :

$$\frac{\partial J}{\partial \alpha_i} = \beta_i \tag{6}$$

$$\frac{\partial J}{\partial q_i} = p_i \tag{7}$$

Si H ne contient pas le temps explicitement, ce que nous pouvons supposer dans ce qui suit, on peut satisfaire à l'équation (5) par la substitution :

$$J = J^* - ht, \tag{8}$$

où h est une constante et où J^* ne dépend plus explicitement du temps. Alors, au lieu de (5), (6), (7), nous aurons les

[1] En effet, nous avons dans ce cas :

$$\frac{dH}{dt} = \sum_i \frac{\partial H}{\partial q_i}\dot{q}_i + \sum_i \frac{\partial H}{\partial p_i}\dot{p}_i = 0$$

équations :

$$H(q_i,\frac{\partial J^*}{\partial q_i}) = h, \tag{5a}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial J^*}{\partial \alpha_i} = \beta_i \\[2ex] \dfrac{\partial J^*}{\partial h} = t - t_0 \end{cases} \tag{6a}$$

$$\frac{\partial J^*}{\partial q_i} = p_i, \tag{7a}$$

où la première des équations (6a) ne contient plus que $\ell-1$ équations et où l'on a introduit la constante h au lieu de α_n et la constante $-t_0$ au lieu de β_n.

Mais, d'après Epstein, les coordonnées q_i doivent être choisies de façon telle qu'il existe une intégrale complète de l'équation (5a) qui soit de la forme :

$$J^* = \sum_i J_i(q_i) \tag{8a}$$

où J_i ne dépend que de q_i et non pas des autres q. Alors les conditions quantiques (2) de Sommerfeld doivent être satisfaites pour ces coordonnées q_i, si les q_i sont des fonctions périodiques du temps.

Quels que soient les succès obtenus grâce à la généralisation des conditions quantiques proposée par Sommerfeld et Epstein pour les systèmes à plusieurs degrés de liberté, celle-ci n'en comporte pas moins le défaut de nous obliger de recourir à une séparation de variables, conformément à l'égalité (8a), sans lien particulier aucun avec le problème quantique. On proposera ci-dessous une petite modification des conditions de Sommerfeld-Epstein qui écarte ce défaut. Je vais exposer ici, brièvement, les idées principales, après quoi je les examinerai plus en détail.

2. La formulation modifiée

Tandis que pdq est un invariant pour un système à un seul degré de liberté, c'est-à-dire qu'il ne dépend pas du choix de la coordonnée q, les produits séparés $p_i\ dq_i$, pour un système à plusieurs degrés de liberté, ne sont pas des invariants ; c'est pourquoi la condition quantique (2) n'est pas de caractère invariant. Seule la somme $\sum_i p_i\ dq_i$ étendue à tous les ℓ degrés de liberté est invariante. Pour obtenir, à partir de cette somme, un ensemble de conditions quantiques invariantes, on peut procéder de la façon suivante. Considérons les p_i comme des fonctions des q_i. En termes géométriques, on peut alors regarder les p_i comme un vecteur ("covariant") de l'espace à ℓ dimensions de coordonnées q_i. Si nous traçons, dans l'espace des q_i, une courbe fermée quelconque, qui n'est absolument pas obligée de représenter une "trajectoire" du système mécanique, alors l'intégrale prise le long de cette courbe :

$$\int \sum_i p_i\ dq_i \tag{9}$$

sera invariante. Si les p_i sont des fonctions des q_i, alors, à toute courbe fermée, correspondra une valeur de l'intégrale (9). Si le vecteur p_i dérive d'un potentiel J*, c'est-à-dire si on a les relations :

$$\frac{\partial p_i}{\partial q_k} - \frac{\partial p_k}{\partial q_i} = 0 \tag{10}$$

conformément à la relation

$$p_i = \frac{\partial J^*}{\partial q_i} \tag{10a}$$

alors l'intégrale (9) prendra la même valeur pour toutes les courbes fermées qui peuvent être transportées l'une sur l'autre par une transformation continue. Il s'ensuit que l'intégrale (9) s'annule sur toutes les courbes continûment réductibles à un point. Mais si l'espace considéré se trouve être

multiplement connexe, il existera des trajectoires fermées qui ne se réduiront pas un point par une transformation continue ; alors J* ne sera plus une fonction uniforme des q_i, elle sera multiforme, et l'intégrale (9), prise sur une telle courbe, ne sera en général pas nulle. Cependant, dans l'espace des q, il existera un nombre fini de courbes auxquelles on peut ramener toutes les courbes fermées de cet espace. On pourra, dans ce cas, écrire un nombre fini d'équations

$$\int \sum_j p_j\ dq_j = n_i h \tag{11}$$

en qualité de conditions quantiques. A mon avis, elles doivent prendre la place des conditions quantiques (2). Nous devons nous attendre à ce que le nombre d'équations (11) irréductibles les unes aux autres soit égal au nombre de degrés de liberté. S'il est moindre, nous nous trouverons dans un cas de "dégénérescence".

L'idée fondamentale ayant été exposée ci-dessus de façon volontairement schématique, nous allons maintenant l'examiner plus en détails.

3. Une déduction intuitive de l'équation différentielle de Hamilton-Jacobi.

Si, dans l'espace des coordonnées, on se donne un point P de coordonnées q_i et la vitesse correspondante, c'est-à-dire les moments conjugués p_i, le mouvement sera entièrement déterminé par les équations canoniques (3), (4)(*). ALors la vitesse sera définie en chaque point de la trajectoire L, c'est-à-dire que sur L, les moments p_i seront définis comme des fonctions des q_i. Si nous imaginons que sur une "surface" à (ℓ-1) dimensions de l'espace des coordonnées, on donne en chaque point P des q_i et p_i conjugués, il correspondra, à chaque point, un mouvement le long d'une trajectoire L de l'espace des coordonnées. Si les p_i sont, sur cette surface, des

(*) On suppose que H ne dépend pas explicitement du temps t.

fonctions continues des q_i, ces trajectoires rempliront continûment l'espace des coordonnées (ou une partie de cet espace). Par chaque point (q_i) de l'espace des coordonnées, passera une trajectoire déterminée, autrement dit, à ce point, correspondront également des coordonnées déterminées p_i de l'impulsion. Par là-même, dans l'espace des coordonnées q_i, se trouve défini un champ de vecteurs p_i. Posons nous, maintenant, le problème de trouver à quelle loi obéit ce champ de vecteurs.

Si nous considérons, dans les équations canoniques (3), les p_i comme des fonctions des q_i, nous devons remplacer les nombres de gauche par

$$\sum_n \frac{\partial p_i}{\partial q_k} \frac{dq_k}{dt}$$

ce qui peut s'écrire aussi, en tenant compte des équations (4), sous la forme

$$\sum_k \frac{\partial p_i}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k}$$

Ainsi, au lieu de l'équation (3), nous obtenons

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} + \sum_h \frac{\partial H}{\partial p_k} \frac{\partial p_i}{\partial q_k} = 0. \tag{12}$$

Ceci n'est autre qu'un système d'équations différentielles linéaires auquel doivent satisfaire les p_k comme fonctions des q_k.

Demandons-nous maintenant s'il existe un champ de vecteurs pour lequel on peut trouver un potentiel J^*, tel que les conditions (10) et (10a) soient satisfaites. Dans ce cas, en vertu de (10), l'équation (12) prendra la forme

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} + \sum_k \frac{\partial H}{\partial p_k} \frac{\partial p_k}{\partial q_i} = 0$$

cette équation signifie que H ne dépend pas des q_i. Il s'ensuit que des champs de gradient du type que nous cherchons existent, que le potentiel J^* d'où ils dérivent obéit à l'équation de Hamilton-Jacobi (5a) et que J obéit à l'équation (5)(*).

On a démontré par là même qu'on peut remplacer l'équation (3) par le système d'équations (7a) et (5a), ou (7) et (5). Bien que cela n'ait pas d'importance pour ce qui suit, nous allons montrer ci-dessous que les solutions (6a) ou (6) satisfont au système d'équations (4). Si, après l'intégration de (5a) nous exprimons les p_i, à l'aide de (7a), comme fonctions des q_i, l'équation (4) constitue un système d'équations différentielles ordinaires qui détermine les q_i comme fonctions du temps. D'après la théorie des équations différentielles du premier ordre, ce système d'équations différentielles ordinaires équivaut à l'équation aux dérivées partielles :

$$\sum_k \frac{\partial H}{\partial p_k} \frac{\partial \phi}{\partial q_k} + \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0 \tag{13}$$

Mais cette dernière est satisfaite par la substitution

$$\phi = \frac{\partial J}{\partial \alpha_i}$$

si J est une intégrale complète de (5). En effet, si nous introduisons cette expression dans le membre de gauche de (13) en tenant compte de l'égalité (7), nous obtiendrons :

(*) N.d.T. : En effet les p_k sont fonctions des q_k et nous venons d'écrire que $\frac{\partial}{\partial q_i}[H(q_k, p_k(q_k))] = 0$. On a donc $H(q_k, p_k(q_k)) = C^{nte}$ (soit h cette constante). Dire alors que $p_k = \frac{\partial J^*}{\partial q_k}$ équivaut à dire que J^* satisfait à l'équation :

$$H(q_k, \frac{\partial J^*}{\partial q_k}) = h.$$

$$\sum_k \frac{\partial H}{\partial(\frac{\partial J}{\partial q_k})} \frac{\partial^2 J}{\partial q_k \partial \alpha_i} + \frac{\partial^2 J}{\partial t \partial \alpha_i}$$

soit :

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_i}\{H(q_k, \frac{\partial J}{\partial q_k}) + \frac{\partial J}{\partial t}\}$$

mais ces grandeurs sont nulles en vertu de l'égalité (5). Il suit de là que les relations (6) ou (6a) sont solutions de l'équation (4).

4. Le champ p_i d'une trajectoire unique.

Passons maintenant à un point tout à fait essentiel que j'ai volontairement passé sous silence lors de mon exposé rapide de l'idée générale du parag. 2. Dans les raisonnements du parag. 3 nous avons supposé que le champ p_i est engendré par une infinité à $(\ell-1)$ paramètres de mouvements indépendants les luns des autres qui sont représentés de façon intuitive dans l'espace des q_i par un nombre égal de trajectoires. Imaginons maintenant que nous observions, pendant une durée infinie, le mouvement non perturbé d'un certain système particulier et que nous ayons tracé, dans l'espace des q_i, la trajectoire correspondante. Alors deux cas sont possibles :

1) Ou bien il existe une partie de l'espace des q_i dans laquelle, au cours du temps, la trajectoire approche, aussi près que l'on veut, de *chaque* point de cette partie (à ℓ dimensions) de l'espace.

2) Ou alors, la trajectoire peut être incluse tout entière dans un continuum avec un nombre de dimensions inférieur à ℓ. A cela se rapporte aussi le cas particulier d'un mouvement le long d'une trajectoire fermée.

Le cas 1 est le plus général ; le cas 2 s'obtient de là comme cas particulier. On peut citer comme exemple du cas 2 le mouvement d'un point matériel sous l'effet d'une force centrale, décrit par deux coordonnées (par exemple les

coordonnées polaires r et θ) déterminant la position du point dans le plan de la trajectoire. Le cas 2 s'obtiendra, par exemple, si l'attraction est exactement proportionnelle à $1/r^2$ et si on néglige les déviations relativistes par rapport au mouvement képlérien ; alors la trajectoire sera fermée et ses points forment un continuum à une seule dimension. Dans l'espace à trois dimensions, le mouvement sous l'effet d'une force centrale se rapporte toujours au cas 2, puisque la trajectoire reste toujours incluse dans un continuum à deux dimensions ; dans une description tri-dimensionnelle, le mouvement sous l'effet de forces centrales doit toujours être considéré comme un cas particulier d'un mouvement engendré par une loi de force plus compliquée (par exemple la loi de mouvement étudiée par Epstein dans la théorie de l'effet Stark).

Le raisonnement ci-dessous se rapporte au cas général 1. Considérons un élément $d\tau$ de l'espace des q_i. La trajectoire du mouvement considéré traverse infiniment souvent cet élément. A chacune de ces traversées correspond un système de coordonnées d'impulsion (p_i). A priori deux types de trajectoires sont possibles qui diffèrent, à l'évidence, d'une manière fondamentale :

Type "a" : Les systèmes de valeurs p_i se répètent, si bien qu'à un élément de volume d correspond seulement un nombre *fini* de valeurs p_i. Dans ce cas, les p_i peuvent être représentés, pour le mouvement considéré, comme des fonctions uniformes ou multiformes des q_i.

Type "b" : dans l'élément de volume considéré, on rencontre un ensemble infini de valeurs des p_i. Dans ce cas, on ne peut pas représenter les p_i comme des fonctions des q_i.

Remarquons tout de suite que le type "b" est exclu par la condition quantique (11) formulée au parag. 2. D'autre part, la mécanique statistique classique se rapporte, pour l'essentiel, uniquement au type "b", puisque c'est uniquement dans ce cas qu'un ensemble microcanonique est équiva-

lent à un ensemble temporel se rapportant à ce système[1].

En résumé, nous pouvons dire que l'application de la condition quantique (11) exige qu'il existe des trajectoires telles qu'une *trajectoire unique* définisse un champ p_i pour lequel il existe un potentiel J*.

5. L'espace rationnel des coordonnées.

Nous avons déjà dit que, dans le cas général, les p_i sont des fonctions multiformes des q_i comme exemple simple, nous examinerons à nouveau le mouvement plan d'un point autour d'un centre attractif fixe. Dans ce cas, le point se déplace de façon telle que sa distance r au centre attractif varie périodiquement entre un minimum r_1 et un maximum r_2. Si l'on prend un point dans l'espace des q, c'est-à-dire un point à l'intérieur de l'anneau limité par les deux cercles de rayons r_1 et r_2, une trajectoire, au cours du temps, passera infiniment souvent aussi près que l'on veut de ce point où -en parlant un peu improprement- passera par ce point. Mais, selon la partie de la trajectoire où se produira ce "passage", selon qu'il se fera avec des rayons r croissants ou décroissants, la composante radiale de la vitesse aura un signe ou le signe contraire ; les p_i seront des fonctions bivaluées des q_i.

La difficulté de représentation liée à cela est écartée au mieux grâce à la méthode introduite par Riemann en théorie des fonctions. Représentons-nous la surface de l'anneau comme étant double et constituée de deux feuillets superposés, en forme d'anneaux. Sur le feuillet supérieur, nous allons représenter les parties de la trajectoire avec une dérivée positive $\frac{dr}{dt}$ et sur le feuillet inférieur les parties avec un $\frac{dr}{dt}$ négatif, en même temps que le système correspondant des vecteurs p. Nous allons supposer que les deux feuillets sont collés l'un à l'autre le long des deux cercles, si bien que la trajectoire doit passer d'un feuillet sur l'autre chaque fois qu'elle est tangente à l'un des deux cercles fron-

[1] Dans un ensemble microcanonique, entrent des systèmes qui ont, pour des q_i donnés, des p_i arbitraires (compatibles avec la valeur de l'énergie).

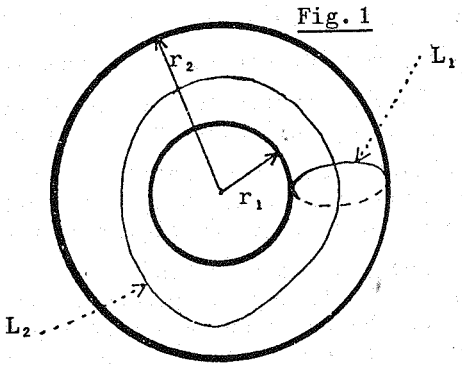

Fig. 1

tières. On voit facilement que, le long de ces circonférences, les p_i des deux feuillets coïncident. Sur cette surface à deux feuillets, les p_i sont non seulement *continus*, mais *uniformes* en fonction des q_i ; c'est là que réside l'intérêt d'introduire une telle surface.

Sur cette surface à deux feuillets, il y a manifestement des trajectoires de deux types qui ne peuvent être ni réduites à un point ni ramenées l'une à l'autre. Des exemples des trajectoires des deux types sont représentées sur la figure 1 (L_1 et L_2). On a représenté en pointillés la partie de l'une des trajectoires qui se trouve sur le feuillet inférieur. Toutes les autres trajectoires fermées peuvent être continuellement déformées jusqu'à être ramenées soit à un point, soit, après un ou plusieurs tours, à l'un des deux types L_1 ou L_2. La condition de quantification (11) doit s'appliquer ici à des lignes du type L_1 ou L_2.

Il est clair que ces raisonnements s'appliquent à tous les mouvements qui satisfont à la condition du parag. 4.

D'une manière analogue, il convient de se représenter l'espace des phases comme étant décomposé en un certain nomber de "feuillets" formés de surfaces "planes" connexes, à (ℓ-1) dimensions, de sorte que les représentations des p_i qui apparaissent ainsi puissent être regardées comme des fonctions continues et uniformes (y compris lors du passage d'un feuillet à un autre) ; cette construction géométrique *ad hoc* sera dite "espace des phases rationnel". La condition de quantification (11) s'appliquera à toutes les lignes fermées de l'espace rationnel des coordonnées.

Pour que l'on puisse attribuer, dans cette inter-

prétation, un sens précis à la condition de quantification il faut que l'intégrale $\int \sum_i p_i \, dq_i$ possède une seule et même valeur quand elle est prise le long de toutes les trajectoires fermées de l'espace rationnel des q_i, qui peuvent se ramener les unes aux autres par continuité. La démonstration s'obtient entièrement selon un schéma connu. Soient L_1 et L_2 des courbes fermées dans l'espace rationnel des q_i (schématiquement représentées sur la figure 2), que l'on peut continûment ramener l'une à l'autre en conservant le sens du parcours indiqué sur le schéma. Alors, la courbe représentée sur la figure 2 sera fermée et continûment rétrécissable à un point. Il s'ensuit, en vertu de la relation (10) que, le long de cette ligne, l'intégrale est nulle. En tenant compte de ce que les intégrales prises le long des lignes A_1A_2 et B_1B_2 qui relient L_1 et L_2 sont égales en vertu de l'uniformité des p_i dans l'espace rationnel des q_i, nous en concluons à l'égalité des deux intégrales prises sur L_1 et L_2.

Le potentiel J* aura une infinité de déterminations dans l'espace rationnel des q_i ; mais en raison de la condition de quantification, cette multiformité est la plus simple que l'on puisse imaginer. En effet, si J* est l'*une* des valeurs du potentiel en un point quelconque de l'espace des q_i, les autres valeurs seront égales à J* + nh où n est un nombre entier.

Note ajoutée à la correction des épreuves.

Un examen plus approfondi montre que la seconde condition d'application de la formule (11), donnée au parag. 4, est automatiquement satisfaite, c'est-à-dire qu'on a la règle : si un mouvement donne un champ p_i, celui-ci dérive nécessairement d'un potentiel J*.

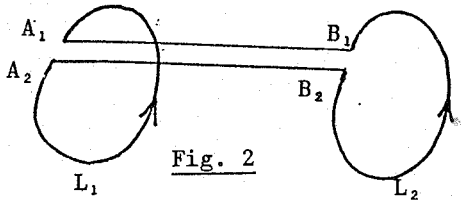

Fig. 2

D'après le théorème de Jacobi, tout mouvement d'un système peut s'obtenir à partir d'une intégrale complète J* de l'équation (5a). Donc il existe au moins une fonction J* des coordonnées q_i, à l'aide de laquelle les impulsions du mouvement considéré du système, en chaque point de la trajectoire de celui-ci, peuvent s'obtenir grâce à l'équation :

$$p_i = \frac{\partial J^*}{\partial q_i} .$$

Maintenant, nous devons nous rappeler que J* s'obtient à l'aide d'une certaine équation aux dérivées partielles, c'est-à-dire à l'aide de l'indication de la manière dont on doit prolonger la fonction J* dans l'espace des q_i.

Ainsi, si nous voulons savoir comment évolue la fonction J* pour le système lors de son mouvement, nous devons considérer la fonction J* comme étant prolongée conformément à l'équation différentielle le long de la trajectoire (et dans son voisinage). Quand, au bout d'un intervalle de temps très long, la trajectoire se retrouvera dans le voisinage immédiat d'un point P par lequel elle était déjà passée auparavant, les dérivées $\partial J^*/\partial q_i$ nous donneront les valeurs des impulsions pour les deux instants considérés si nous intégrons J* continûment le long de toute la partie intermédiaire de la trajectoire. Il n'y a absolument pas lieu de croire que lors de ce prolongement, nous retrouverons les valeurs précédentes de $\partial J^*/\partial q_i$; au contraire, il y a tout lieu de s'attendre à ce que, chaque fois que se reproduira approximativement, au cours du mouvement, une configuration donnée des coordonnées q_i, il apparaîtra un système de p_i tout à fait différent, si bien que pour un mouvement *indéfiniment* prolongé, il est en général impossible de représenter les p_i comme fonctions des q_i. Par contre, si les p_i -et, corrélativement, un nombre fini de systèmes de valeurs de ces grandeurs- se répètent lorsqu'on revient à une même configuration des coordonnées, les $\partial J^*/\partial q_i$ pourront se représenter comme des fonctions des coordonnées pour le mouvement indéfiniment prolongé. Par conséquent si, pour un mouvement indéfiniment

prolongé, il existe un champ de p_i, il existe toujours un potentiel correspondant J^*.

C'est pourquoi on peut affirmer ce qui suit. S'il existe ℓ intégrales des 2ℓ équations du mouvement, de la forme :

$$R_k\ (q_i, p_i) = \text{Cnte}, \tag{14}$$

où les R_k sont des fonctions algébriques des p_i, alors $\Sigma p_i dq_i$ sera toujours une différentielle totale exacte, si l'on exprime les p_i en fonction des q_i à l'aide des équations (14). La condition de quantification suppose que l'intégrale $\int \Sigma p_i dq_i$, le long d'une courbe irréductible, soit égale à un multiple de h. Cette condition coïncide avec celle de Sommerfeld et Epstein si, en particulier, chaque coordonnée d'impulsion p_i ne dépend que de la coordonnée q_i correspondante.

Si le nombre d'intégrales du type (14) est inférieur à ℓ comme, par exemple, dans le problème des trois corps étudié par Poincaré, alors les p_i ne s'expriment pas en fonction des q_i et la condition de quantification de Sommerfeld et Epstein ne s'applique plus, même sous la forme quelque peu généralisée indiquée ici.