

POINCARÉ ET LES QUANTA

T. PAUL
C.N.R.S. ET D.M.A., ECOLE NORMALE SUPÉRIEURE

TABLE DES MATIÈRES

1. Introduction	0
2. Chronologie	2
3. La théorie des quanta en 1911/12	3
4. L'article de Planck de 1900	4
5. Les articles de Poincaré	5
6. La masse de Dirac	10
7. Que nous apprend presque un siècle après l'article de Poincaré?	11
Références	12

1. INTRODUCTION

Poincaré s'intéressa très tard à la théorie des quanta. Invité au Congrès Solvay de 1911, il découvrit la problématique quantique et écrivit alors coup sur coup plusieurs articles sur le sujet. Certains de "vulgarisation" [7], et deux articles scientifiques [8, 9] dans lesquels il va s'efforcer de montrer que l'hypothèse de Planck ne peut être contournée et remplacée par une théorie "continue". Il s'agit pour lui de se demander si la formule de Planck donnant la densité d'énergie du corps noir, et dérivée depuis l'hypothèse des quanta (qui consiste, pour dire vite, à remplacer dans un calcul une intégrale par une somme) peut être (ou non) déduite d'un modèle continu d'interaction entre rayonnement et molécules. Le résultat que Poincaré lui-même présentera comme négatif validera la théorie de Planck.

Ces deux articles sont peu cités de nos jours, mais ont eu un retentissement important l'époque. En est la preuve le fait que deux articles dans le Volume 38 d'Acta Mathematica en

hommage à Poincaré y sont consacrés. De plus l'argument de Poincaré sera repris et d'une certaine manière rendu plus rigoureux dans le célèbre traité de Mécanique Statistique de Fowler en 1929 [1]. Leur (re)lecture après plus d'un siècle de Mécanique Quantique est intéressante à plusieurs égards. Tout d'abord ils montrent, à travers une discussion parfaitement technique, l'affrontement entre discret et continu, en ce début de XXIème siècle où la problématique fondationnelle des mathématiques fait rage. Ensuite, et justement autour de cette dualité discret/continu, ils présentent de merveilleuses mathématiques. On est pressenti en particulier la masse de Dirac, et le lemme de la phase stationnaire, qui deviendra si important par la suite pour la Mécanique Quantique y est utilisé. Enfin et surtout ils exhibent clairement une part méthodologique de son héritage scientifique : l'intérêt pour les résultats négatifs, pour les erreurs. depuis l'erreur dans le système des 3 corps jusqu'à son "échec" dans la tentative de remplacer l'hypothèse des quanta Poincaré n'aura cessé de décortiquer le négatif pour y faire naître le constructif.

Rappelons pour terminer cette introduction que la principale contribution de Poincaré à la Mécanique Quantique nous semble consister en le deuxième Tome des "Méthodes nouvelles de la Mécanique Céleste". C'est avec les calculs de perturbations de la mécanique céleste que Max Born essaiera dans les années 20 (en le citant explicitement, voir [2]) de quantifier perturbativement l'hélium, avant dy plonger son jeune assistant W. Heisenberg qui fera sortir de l'algèbre de convolution des séries de Fourier l'algèbre non-commutative des matrices (voir [5]).

2. CHRONOLOGIE

	<i>Planck</i>		<i>Poincaré</i>
1854			<i>Naissance</i>
1858	<i>Naissance</i>		
1889			<i>Roi de Suède</i>
1892			<i>Méthodes nouvelles</i>
1900	<i>quanta</i>		
1905	<i>Photon</i>		
1911	<i>Congrès</i>		<i>Solvay</i>
1912			<i>Sur la théorie des quanta</i>
1912			<i>Mort</i>
1915	<i>Hommages</i>	<i>à</i>	<i>Poincaré</i>
1925/6	<i>Mécanique quantique</i>		
1929			<i>Traité de Fowler</i>
1947	<i>Mort</i>		

3. LA THÉORIE DES QUANTA EN 1911/12

1911 se situe dans une période un peu creuse pour la théorie quantique. L'hypothèse des quanta, énoncée par Planck en 1900 et généralisée par Einstein avec l'effet photoélectrique en 1905, est certes bien acceptée, mais une véritable dynamique quantique (Heisenberg 1925) et l'application à la théorie atomique (Bohr 1913) se font attendre. De plus Planck, qui ne sera jamais un supporter fanatique de la mécanique quantique, est réticent (il semble qu'il soit toujours resté insatisfait de sa loi qu'il aurait voulu dériver de principes strictement thermodynamiques), et l'on peut bien imaginer qu'Einstein est fort occupé à inventer la relativité générale. Est-ce pour cette raison que Poincaré ne s'est jamais, auparavant, vraiment intéressé aux quanta ? La réponse nous semble justement se trouver dans l'article que nous allons décrire et commenter : le changement paradigmatique des quanta est grand, déjà à l'époque, et bien avant les "problèmes conceptuels" de la mécanique quantique.

Car il s'agit de l'opposition continu/discret, et de l'idée d'une théorie physique qui puiserait ses sources hors du cadre "naturel" des équations différentielles de la culture classique. L'hypothèse des quanta consiste, dans notre langage moderne, à discrétiser une intégrale (ce que fait notre ordinateur), mais sans faire tendre, a posteriori, le pas de discrétisation vers zéro.

Poincaré est invité au Congrès Solvay de 1911 et il prend à bras le corps la problématique quantique : ne serait-il pas possible de dériver la même loi que Planck sans l'hypothèse discrète ? Poincaré y consacra une note et un article, et donnera une réponse négative. Il mourra en 1912, en 1913 Niels Bohr appliquera avec le succès que l'on sait la théorie au modèle planétaire de l'atome, et en 1926 Erwin Schrödinger définira une équation aux dérivées partielles (donc plongée dans le *continu*), qui n'aura de solution raisonnable que pour des valeurs *discrètes* des paramètres

d'énergie : la boucle sera donc bouclée 15 ans après l'article de Poincaré que nous allons présenter maintenant.

4. L'ARTICLE DE PLANCK DE 1900

Nous n'allons pas ici rappeler la théorie du corps noir ni présenter en détail la contribution de Planck. Nous verrons dans la section suivante la dérivation "critique" de la loi de Planck par Poincaré lui-même. Disons seulement que le problème consiste à trouver une formule d'interpolation pour la densité d'énergie u d'un corps "noir", exprimée par rapport à la fréquence du rayonnement ν , telle que

$$u(\nu) \sim \nu^2, \quad \nu \rightarrow 0$$

et

$$u(\nu) \sim e^{-c\nu}, \quad \nu \rightarrow \infty.$$

Une formule simple est celle imaginée par Planck :

$$u(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}.$$

C'est cette loi que Planck dérive en 1900 sous l'hypothèse des quanta. Plus exactement il montre que, si l'on suppose que l'énergie de chaque oscillateur est un multiple entier d'une certaine quantité ϵ , donc de la forme $P\epsilon$, P entier, un calcul combinatoire donne que l'entropie S de chaque oscillateur est une fonction (explicite) de $\frac{U}{\epsilon}$, où U est l'énergie de chaque oscillateur. Plus précisément

$$(4.1) \quad S = k \left(\left(1 + \frac{U}{\epsilon}\right) \log \left(1 + \frac{U}{\epsilon}\right) - \frac{U}{\epsilon} \log \frac{U}{\epsilon} \right)$$

Utilisant la loi de Wien concernant la température

$$\frac{1}{kT} = \frac{dS}{dU},$$

où k est la constante de Boltzmann et un peu d'analyse dimensionnelle qui donne que $\epsilon = h\nu$, où h a la dimension d'une action

et ν l'inverse d'un temps, on peut intégrer (4.1). On obtient :

$$u := \frac{8\pi\nu^2}{c^3}U = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}.$$

C'est la loi de Planck.

5. LES ARTICLES DE POINCARÉ

Poincaré va reprendre le calcul en partant d'un densité d'énergie w et montrer tout d'abord que si w est ce que l'on appellerait aujourd'hui un "peigne de Dirac" sur les entiers ($\times h$) il retrouve la loi de Planck. C'est donc en quelque sorte une vision plus mathématique, ou plutôt moins thermodynamique, que Planck ; mais il va surtout faire le chemin inverse, et "montrer" que la forme de la fonction u détermine w de façon univoque et donc que seule l'hypothèse des quanta donne le bon résultat.

Poincaré commence par montrer que la densité d'énergie

$$W(\eta_1, \dots, \eta_n; \xi_1, \dots, \xi_p)$$

(on écrit à l'époque $W(\eta_1, \dots, \eta_n; \xi_1, \dots, \xi_p)d\eta_1\dots d\eta_n d\xi_1\dots d\xi_p$ de n oscillateurs (identiques) d'énergies $\eta_1 \dots \eta_n$ et p molécules (identiques) d'énergie $\xi_1 \dots \xi_p$ peut prendre la forme :

$$W(\eta_1, \dots, \eta_n; \xi_1, \dots, \xi_p) = \prod_{i=1}^n w(\eta_i) = w(\eta_1)\dots w(\eta_n)$$

pour une certaine fonction $w(\eta)$. C'est cette fonction w qu'il va montrer devoir avoir une primitive discontinue.

Pour cela il considère tout d'abord, dans \mathbb{R}^{n+p} la surface d'énergie $S_h = \{(\eta_1, \dots, \eta_n; \xi_1, \dots, \xi_p) / \eta_1 + \dots + \eta_n + \xi_1 + \dots + \xi_p = h\}$.

Puis les 3 intégrales :

$$I = \int_S w(\eta_1)\dots w(\eta_n)d\eta_1\dots d\eta_n d\xi_1\dots d\xi_p$$

$$I' = \int_S (\eta_1 + \dots + \eta_n)w(\eta_1)\dots w(\eta_n)d\eta_1\dots d\eta_n d\xi_1\dots d\xi_p$$

$$I'' = \int_S (\xi_1 + \dots + \xi_p)w(\eta_1)\dots w(\eta_n)d\eta_1\dots d\eta_n d\xi_1\dots d\xi_p$$

On définit alors les énergies moyennes des résonnateurs et des molécules, X et Y , par :

$$nYI = I' \text{ et } pXI = I''$$

Si l'on pose maintenant

$$(5.1) \quad \int_{\eta_1 + \dots + \eta_n = x} w(\eta_1) \dots w(\eta_n) d\eta_1 \dots d\eta_n = \phi(x),$$

un calcul simple donne

$$I = \frac{1}{(p-1)!} \int_0^h (h-x)^{p-1} \phi(x) dx$$

De la même façon

$$I' = \frac{1}{(p-1)!} \int_0^h x(h-x)^{p-1} \phi(x) dx$$

et

$$I'' = \frac{1}{(p-1)!} \int_0^h (h-x)(h-x)^{p-1} \phi(x) dx,$$

et finalement :

$$nY = \frac{\int_0^h x(h-x)^{p-1} \phi(x) dx}{\int_0^h (h-x)^{p-1} \phi(x) dx} \text{ et } pX = \frac{\int_0^h (h-x)^p \phi(x) dx}{\int_0^h (h-x)^{p-1} \phi(x) dx}.$$

Poincaré montre alors que l'on obtient la formule de Planck si l'on choisit pour w la "fonction" définie, à partir de $\epsilon > 0$, de la façon suivante :

$$w(\eta) = 0 \quad \text{si} \quad k\epsilon < \eta < k\epsilon + \mu \quad (k \in \mathbb{N}) \quad \forall \mu, \quad 0 < \mu < \epsilon$$

et

$$\int_{k\epsilon}^{k\epsilon + \mu} w(\eta) d\eta = 1, \quad \forall \mu, \quad 0 < \mu < \epsilon.$$

Mais Poincaré ne s'arrête pas là. Comme il l'a dit dans l'introduction de son article [9], il veut absolument s'assurer que ce choix de w est le seul qui donne la loi de Planck, et surtout qu'aucun choix "continu" ne redonne le même résultat. Nous

allons présenter en même temps la dérivation directe et la solution du problème inverse.

Poincaré va montrer que le rapport $\frac{Y}{X}$ détermine w . Puisqu'il a montré que le choix discontinu donne la bonne formule il aura gagné (mais dira qu'il aura perdu).

L'argument utilise l'analyse complexe et nous allons le décrire rapidement. On introduit tout d'abord la transformée de Laplace (que Poincaré appelle "intégrale de Fourier") de w :

$$\Phi(\alpha) = \int_0^{\infty} w(\eta) e^{-\alpha\eta} d\eta.$$

w (et donc ϕ) est déterminé par Φ grâce à la formule d'inversion de la transformée de Laplace :

$$w(\eta) = \frac{1}{2\pi i} \int_L \Phi(\alpha) e^{\alpha\eta} d\alpha,$$

où L est une droite complexe parallèle à l'axe imaginaire dans le demi-plan $\{\Re\alpha > 0\}$.

D'autre part, par définition (5.1) de ϕ , on a :

$$(\Phi(\alpha))^n = \int_0^{\infty} \phi(x) e^{-\alpha x} dx,$$

puisque

$$\begin{aligned} (\Phi(\alpha))^n &= \left(\int_0^{\infty} w(\eta) e^{-\alpha\eta} d\eta \right)^n \\ &= \int w(\eta_1) \dots w(\eta_n) e^{-\alpha(\eta_1 + \dots + \eta_n)} d\eta_1 \dots d\eta_n \\ &= \int_{x=0}^{\infty} \left(\int_{\eta_1 + \dots + \eta_n = x} w(\eta_1) \dots w(\eta_n) d\eta_1 \dots d\eta_n \right) e^{-\alpha x} dx \\ &= \int_0^{\infty} \phi(x) e^{-\alpha x} dx. \end{aligned}$$

D'où :

$$\phi(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_L (\Phi(\alpha))^n e^{\alpha x} d\alpha,$$

et donc, après la renormalisation $x = n\omega$, $h = n\beta$, et avoir posé

$$\Theta(\alpha, \omega) := \Phi(\alpha)e^{\alpha\omega}(\beta - \omega)^{\frac{p}{n}},$$

on obtient :

$$nY = \frac{\frac{n^{p+1}}{2\pi i} \int_0^\beta \int_L \frac{\omega}{\beta - \omega} \Theta^n d\omega d\alpha}{\int_0^h (h - x)^{p-1} \phi(x) dx}$$

et

$$(5.2) \quad pX = \frac{\frac{n^{p+1}}{2\pi i} \int_0^\beta \int_L \Theta^n d\omega d\alpha}{\int_0^h (h - x)^{p-1} \phi(x) dx}.$$

Vient ensuite l'utilisation du fait que le système physique contient un grand nombre d'oscillateurs (on a un champ de rayonnement). Poincaré fait tout d'abord l'hypothèse que Θ atteint un maximum à $\omega = \omega_0$ et $\alpha = \alpha_0$.

Puisque n est très grand et que les intégrales précédentes font intervenir Θ^n , il en déduit, en choisissant $L = \{\Re z = \alpha_0\}$ que :

$$(5.3) \quad \frac{nY}{pX} \sim \frac{\omega_0}{\beta - \omega_0}.$$

mais puisque, par ailleurs, $nY + pX = h = n\beta$, on déduit que

$$Y = \omega_0 \quad \text{et} \quad X = \frac{\beta - \omega_0}{k}.$$

En fait Poincaré utilise le théorème de la phase stationnaire qui s'applique ici, puisque, à une constante près, les intégrales précédentes font intervenir la quantité $\Theta(\alpha, \omega)^n = e^{n \log(\Theta(\alpha, \omega))}$. En effet le numérateur de (5.2), par exemple, s'écrit :

$$\frac{n^{p+1}}{2\pi i} \int_0^\beta \int_L e^{n \log(\Theta(\alpha, \omega))} d\omega d\alpha.$$

Le théorème de la phase stationnaire dit alors que l'intégrale précédente se ramène, dans la limite $n \rightarrow \infty$, à la contribution de l'intégrand aux "points critiques" α_0 et ω_0 résolvant les

équations :

$$\frac{\partial \log(\Theta(\alpha, \omega))}{\partial \alpha} = \frac{\partial \log(\Theta(\alpha, \omega))}{\partial \omega} = 0.$$

ce qui donne

$$\frac{\Phi'(\alpha_0)}{\Phi(\alpha_0)} + \omega_0 = 0$$

et

$$\alpha_0 - \frac{k}{\beta - \omega_0} = 0,$$

d'où (5.3).

On voit donc que $X = \frac{1}{\alpha_0}$.

Utilisant le fait (Boltzmann) que l'énergie moyenne d'une molécule est proportionnelle à la température (absolue) T on en déduit que :

$$\alpha_0 = \frac{C}{T} = \frac{1}{kT}$$

où C est une constante, et donc $Y = \omega_0 = -\frac{\Phi'(\alpha_0)}{\Phi(\alpha_0)}$ nous donne l'énergie moyenne d'un résonnateur en fonction de la température (qui d'ailleurs sera indépendant du rapport $\frac{n}{p}$). Il suffit alors de remarquer que, si la fonction w satisfait l'hypothèse de Planck, alors :

$$\begin{aligned} \Phi(\alpha) &= \int \sum_k \delta(\eta - k\epsilon) e^{-\alpha\eta} d\eta \\ &= \sum_k e^{-k\epsilon\alpha} \\ &= \frac{e^{-\epsilon\alpha}}{1 - e^{-\epsilon\alpha}} \\ &= \frac{1}{e^{\epsilon\alpha} - 1}. \end{aligned}$$

Et donc que, pour la densité U de la section précédente,

$$U = Y = -\frac{\Phi'(\alpha_0)}{\Phi(\alpha_0)} = \frac{\epsilon}{e^{\frac{\epsilon}{kT}} - 1} = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1},$$

ce qui est la loi de Planck.

Mais supposons maintenant que l'on connaisse, *pour toutes les températures*, l'énergie moyenne d'un résonnateur. Alors on en déduira les valeurs de la fonction $\frac{d \log \Phi(\alpha)}{d\alpha}$ pour tous les $\alpha > 0$. Soit, à une constante multiplicative près, les valeurs de Φ sur l'axe réel, et par continuation analytique (nous dit Poincaré) à tout le demi-plan. Et donc, par la formule d'inversion précédemment énoncée, la fonction w sera déterminée (toujours à une constante multiplicative près).

Poincaré déduit alors de ce résultat d'unicité la nécessité de l'hypothèse des quanta.

Finalement Poincaré montre encore que, sans se servir de la loi de Planck, et en confrontant sa formule donnant l'énergie d'un résonnateur à celle du rayonnement du corps noir, w doit vérifier, sous peine que l'énergie totale diverge, que :

$$\lim_{\eta_0 \rightarrow 0} \int_0^{\eta_0} w(\eta) d\eta \neq 0.$$

C'est à dire que w doit être singulière.

6. LA MASSE DE DIRAC

La condition que w soit "choisie" régale à 0 sauf pour $k\epsilon < \eta < k\epsilon + \delta$ ", où " δ est un infiniment petit" et telle que :

$$\int_{k\epsilon}^{k\epsilon+\delta} w(\eta) d\eta = 1$$

s'exprime en langage moderne en disant que w est une distribution, somme de masses de Dirac sur le réseau des $\{k\epsilon \ k = 1, 2 \dots\}$ (pour être rigoureux, la condition intégrale doit être $\int_{k\epsilon-\delta}^{k\epsilon+\delta} w(\eta) d\eta = 1$).

Ceci n'est jusque là qu'une redérivation, mais sous forme intégrale et non plus combinatoire, de la formule de Planck.

7. QUE NOUS APPREND PRESQUE UN SIÈCLE APRÈS L'ARTICLE DE POINCARÉ ?

Une nouveauté contenue dans cet article tient justement à écrire une somme comme une intégrale ... d'une fonction singulière. Les mathématiques du XXI^{ème} siècle nous ont appris à faire cela. Les distributions de Laurent Schwartz en sont l'outil parfait : par intégration (cette possibilité tellement "continue") elles nous font apparaître des points (entités de mesure nulle). Jean Leray, dans son magnifique résultat d'existence des équations de Navier-Stokes [3] définira lui aussi, en 1934, des solutions faibles pour les équations de l'hydrodynamique censées représenter des flots de particules *ponctuelles* en mouvement. Mais l'idée de chercher un intégrant singulier qui donnerait, par intégration, une somme discrète est tout à fait étonnante en 1911.

Ensuite l'article de Poincaré nous montre un exemple merveilleux de confrontation entre mathématiques et physique. L'hypothèse des quanta est considérée comme physique, comme un changement paradigmatique dans la physique. Elle n'a pas à être justifiée en dehors de son statut d'hypothèse d'un "élément de réalité" comme le dit lui-même Poincaré . Mais Poincaré lui donne un autre statut : celui d'une nécessité mathématique, dans un certain cadre conceptuel, en vue de la dérivation d'une formule donnée. C'est cet argument-là qui me semble expliquer que deux des articles (signés par Lorentz et de Planck!) du Volume d'Acta Mathematica de 1915 en hommage à Poincaré soient consacrés à sa contribution aux quanta [4, 6], et que quelques 27 ans plus tard Fowler y consacre quelques pages dans son traité de Mécanique Statistique (dans lesquelles il va rendre "rigoureux" le raisonnement de Poincaré).

Enfin cet article nous montre l'attitude de Poincaré face aux résultats négatifs. car au fond il nous démontre un résultat positif : l'hypothèse des quanta est nécessaire à la dérivation de

la formule de Planck. Mais il nous présente son raisonnement par la négative, comme un échec (“je suis arrivé à un résultat négatif” [8], “je dois dire tout de suite que j’ai été conduit à répondre négativement à la question posée... ” [9]).

Cet exemple, à la fin de sa vie, vient corroborer celui des 3 corps (“j’attire l’attention sur les résultats négatifs présents dans ce mémoire” [10]) du début et nous montre Poincaré dans une véritable activité positive de déconstruction du négatif.

RÉFÉRENCES

- [1] R. H. Fowler, *Statistical mechanics*, Cambridge, 134-137, 1929.
- [2] M. Born, **The mechanics of the atom**, Ungar, New-York (1927).
- [3] J. Leray, “Sur le mouvement d’un liquide visqueux emplissant l’espace”, *Acta Mathematica*, Vol. 34, p. 193-248 (1934).
- [4] H. A. Lorentz, “Deux mémoires de Henri Poincaré sur la physique mathématique”, *Acta Mathematica*, Vol. 38, 293-308, 1921.
- [5] T. Paul, “On the status of perturbation theory”, *Math. Struct. Comp. Sciences*, Vol. 17, p. 277-288 (2007).
- [6] M. Planck, “Henri Poincaré und die Quantentheorie”, *Acta Mathematica*, Vol. 38, 387-397, 1921.
- [7] H. Poincaré **Œuvres**, T 9., Gauthier-Villars, Paris (1954).
- [8] H. Poincaré “Sur la théorie des quanta”, *CRAS* Vol. 153, p. 1103-1008 (1911).
- [9] H. Poincaré “Sur la théorie des quanta”, *J. de Physique théorique et appliquée*, 5ième série, Vol. 2, p. 5-34 (1912).
- [10] H. Poincaré “Sur le problèmes des trois corps et les équations de la dynamique”, *Act Mathematica*, vol. 13, 5-165, 1890.