

PENSEE PHYSIQUE ET MATHEMATIQUE

À PROPOS DU PROBLEME DE L'ADEQUATION

Jan LACKI (Université de Genève)

INTRODUCTION

Quand on réfléchit au rôle des mathématiques en physique, l'usage des grandeurs quantifiées s'impose en premier. Cet aspect — disons numérique — de la mathématisation n'est cependant pas le propre de la physique et n'épuise de loin pas tout l'apport des mathématiques dans cette science. La physique puise aussi dans les mathématiques une grande partie de son assise conceptuelle. Dans la majorité de ses théories, et en particulier dans les plus récentes qui touchent aux domaines frontières (relativité générale, mécanique quantique), l'intelligibilité des concepts fondamentaux dépend étroitement d'une compréhension des structures mathématiques sous-jacentes. Les mathématiques jouent un rôle capital dans la physique. Ce rôle se laisse appréhender dans les propos qui font l'éloge de la beauté mathématique d'une théorie, ou encore qui soulignent le caractère unique d'une théorie au sens de l'unicité mathématique de la structure sur laquelle cette théorie s'appuie. Ce sont alors autant de compliments qui, dans la bouche de physiciens, sont synonymes d'une approbation de la théorie, voire d'un jugement en faveur de sa *plausibilité*. Des multiples exemples historiques ne leur donnent manifestement pas tort. Rendre ainsi compte de cette adéquation entre la physique et les mathématiques est un problème classique de la philosophie des sciences. La solution est d'autant plus malaisée à fournir quand on conçoit la physique comme un corpus essentiellement disparate d'énoncés auquel les mathématiques viennent donner non seulement une traduction mais une organisation formelle. A la physique la compilation d'énoncés singuliers (comptes rendus expérimentaux), la formulation des énoncés universels (par induction ou dans le cadre d'une démarche hypothético-déductive), aux mathématiques le soin de la structure. Une telle conception — ici volontairement exagérée — ne peut alors que contribuer à cette impression de miracle face à la constante aptitude des mathématiques à organiser le discours physique. La situation serait tout autre si nous pouvions identifier au sein même du raisonnement physique la présence de véritables structures, plus précisément d'opérations sur les objets du monde (expérience possible) ou de la pensée (expérience de pensée) donnant lieu à la possibilité d'y identifier des structures. Les données du problème de l'adéquation seraient alors changées : ce ne serait plus aux mathématiques d'organiser un matériau brut sur une *tabula rasa* structurelle et formelle, mais ce serait la physique qui se servirait des objets des mathématiques pour *représenter* ses structures.

La possibilité de ce retournement de perspective repose sur deux prémisses. La première affirme la possibilité d'identifier des structures au sein même de la saisie conceptuelle du phénomène par le raisonnement physique, ceci avant toute intervention des mathématiques. La seconde admet la possibilité d'une représentation de la structure ainsi mise en évidence

par les structures mathématiques connues. Cette dernière condition est moins astreignante dans la mesure où elle dépend à son tour de l'état de la connaissance mathématique. Il semble probable qu'en cas de défaut de cette dernière, l'activité des mathématiciens saurait y pallier, ce qui a été amplement illustré par l'histoire des mathématiques et de leur interaction avec la physique. La première prémisses est donc la plus importante. Que faut-il donc comprendre par une structure proprement physique en aval de toute formalisation mathématique ? La première discussion historique de cet article vise à fournir un exemple d'une telle structure réalisé en termes d'opérations sur des systèmes physiques idéaux. Il s'agit de la fameuse analyse par Clausius du cycle de Carnot qui l'amène à la notion de l'entropie.

Le deuxième exemple historique — l'étape cruciale du raisonnement de Heisenberg fondant la mécanique quantique — illustre une autre facette de la manière dont les mathématiques viennent à être tissées dans la trame d'une théorie physique. Ici encore, les mathématiques ne rencontrent pas un terrain vierge mais cette fois-ci une théorie déjà formalisée — la mécanique classique des systèmes conditionnellement périodiques. Cette dernière, plus particulièrement sa manière de représenter les quantités observables, n'est pas compatible avec les prescriptions *ad hoc* de la physique quantique (le principe de correspondance et la règle de fréquences de Bohr) ce qui amène à la nécessité d'une refonte formelle. Heisenberg, en imposant la cohérence de la correspondance entre les grandeurs et leur représentants mathématiques au sein de la nouvelle théorie, réussit à en définir le trait essentiel, et posa ainsi les jalons de la mécanique matricielle.

EXEMPLES HISTORIQUES

Entropie

Dans son article de 1854 portant le titre « Ueber eine veränderte Form der zweiten Hauptsatzes der mechanischen Wärmetheorie »¹, Rudolf Clausius introduisit pour la première fois le concept d'entropie². L'expression mathématique de ce que Clausius identifia comme le véritable contenu du théorème de Carnot (selon sa propre expression) introduisit une nouvelle grandeur physique, la « valeur d'équivalence » d'une transformation, que ne reçut le nom d'entropie que quelques années plus tard en 1867. Rappelons ici quelques éléments de la réflexion de Carnot.

Les *Réflexions sur la puissance motrice du feu*³ de Saadi Carnot s'attachent à étudier les principes de fonctionnement de machines à feu et les obstacles qui entravent un rendement maximal. Carnot reconnut ainsi qu'il fallait limiter autant que possible les transferts de chaleur entre parties contiguës de la machine qui n'étaient pas accompagnées de variation de volume (perte de force motrice). Il imagina ainsi un processus idéal où le fluide qui « travaille » (typiquement de la vapeur) subissait une série des transformations en se trouvant toujours à la température du corps avec lequel il était en contact. Le fluide était chauffé à la température t_1 d'une source chaude, puis injecté dans une cavité où on le laissait se dilater d'abord à température constante (transformation isotherme), puis de manière adiabatique,

¹ *Annales de Poggendorff*, vol. vol. XCIII (1854), pp. 481-506. Une version française de cet article parut dans le *Journal de Liouville*, t. XX, p. 63, et se trouve sous la forme du mémoire no. IV du recueil des travaux de Clausius sur la chaleur, *Théorie mécanique de la chaleur*, Paris, Eugène Lacroix, 1868, réimpression Jacques Gabay, 1991.

² Pour une étude générale du développement des idées sur la chaleur, voir l'ouvrage de Stephen Brush : *The kind of motion we call heat*, Amsterdam, Oxford, North-Holland, 1986.

³ Saadi Carnot, *Réflexions sur la puissance motrice de feu*, édition critique par R. Fox, Paris, Vrin, 1978.

obtenant du travail effectué contre une paroi mobile; lorsque le fluide atteignait la température t_2 de la source froide, il était comprimée à température constante jusqu'à atteindre son volume initial.

Nous savons que Carnot avait une compréhension erronée du processus physique à l'origine de la production du travail. Il croyait à l'époque à l'existence d'un fluide calorique indestructible et concevait le travail obtenu comme le résultat d'une « chute » du calorique de la température t_1 à t_2 (Carnot parlait de la « restauration de l'équilibre du calorique »), en analogie avec le fonctionnement d'un moulin à eau.

Dans son mémoire précédent de 1850, « Ueber die bewegende Kraft der Wärme und die Gesetze, welche sich daraus für die Wärmelehre selbst ableiten lassen »⁴ Clausius montra comment réconcilier le principe de la conservation de l'énergie et les conceptions de Carnot. Il fallait pour cela reconnaître qu'une partie de la chaleur prise de la source t_1 était en fait consommée (transformée en travail). Clausius reconnut ainsi brillamment que la véritable importance de l'analyse de Carnot consistait dans le fait que la conversion de la chaleur en travail comme résultat d'un cycle des transformations amenant le fluide à son état initial s'accompagnait nécessairement d'un processus associé où une certaine quantité de chaleur était transférée de la source chaude à la source froide. De plus, le rapport entre la chaleur consommée et celle transférée ne dépendait que des deux températures de fonctionnement t_1 et t_2 .

Dans son mémoire de 1854, Clausius alla plus loin. Il formula les assertions précédentes sous la forme du théorème suivant (pp. 137-138) :

Le principe de Carnot mis en harmonie avec le premier principe exprime une relation entre deux espèces de transformations : la transformation de la chaleur en travail et le passage de la chaleur d'un corps chaud à un corps plus froid, passage que nous pouvons regarder comme une transformation d'une quantité de chaleur à une température élevée en chaleur à une température plus basse. Sous sa forme actuelle ce principe peut s'énoncer en ces termes : *Dans tous les cas où une quantité de chaleur se transforme en travail, et où le corps qui opère cette transformation revient finalement à son état initial, il faut en même temps qu'une autre quantité de chaleur passe d'un corps chaud à un corps plus froid; et le rapport de cette dernière quantité de chaleur à la première ne dépend que des températures des deux corps entre lesquels son passage s'exécute, et non de la nature de la matière médiatrice.*

Se référant à son travail précédent, Clausius continua, p. 138 :

Mais la déduction de ce principe est fondée sur un phénomène trop simple, dans lequel il n'intervient que deux corps qui perdent ou reçoivent de la chaleur; et, par suite, on y suppose tacitement que la chaleur transformée en travail provient de l'un des deux corps entre lesquels s'effectue le passage de la chaleur. Comme, de cette manière, on a admis une hypothèse déterminée sur la température de la chaleur transformée en travail, l'influence qu'un changement dans cette température produirait sur le rapport des deux quantités de chaleur reste cachée, et le principe est, par conséquent, incomplet sous cette forme.

C'est la raison pour laquelle Clausius préféra considérer une situation plus générale en adoptant l'axiome suivant, p. 138-139 :

Cet axiome, sur lequel reposent tous les développements qui suivent, s'énonce en ces termes : on ne peut jamais passer de chaleur d'un corps froid à un corps plus chaud, à moins qu'il ne se présente en même temps une autre modification qui dépende de la première. Cet axiome est confirmé par tout ce que nous savons de l'échange de chaleur entre des corps de températures différentes, puisque la chaleur montre partout une tendance à équilibrer les différences de température existantes, et, par suite, à

⁴ *Annales de Poggendorff*, t. LXXXIX; la version française, « Sur la force motrice de la chaleur et les lois qui s'en déduisent pour la théorie même de la chaleur » constitue le mémoire no I du recueil *Théorie mécanique de la chaleur*, op. cit.

passer des corps chauds aux corps plus froids; je pense donc qu'on en admettra l'exactitude sans qu'il soit nécessaire d'entrer à ce sujet dans plus de développements.

Clausius réussit finalement à exprimer mathématiquement la nécessaire conjonction entre la production (consommation) de chaleur et le transfert de chaleur d'une source chaude à une source froide (d'une source froide à une source chaude). C'est pour trouver l'expression mathématique de cette appariement nécessaire d'effets que Clausius introduit la notion de *valeur d'équivalence* d'une transformation devenue plus tard (dans sa forme intégrale) l'entropie⁵.

Analysons en détail la démarche de Clausius. Le suite des transformations de Carnot ne se prêtait pas à une démonstration suffisamment générale, et Clausius introduisit en conséquence un cycle plus complexe qui lui permettait d'isoler plus clairement les deux processus fondamentaux, celui de la conversion de chaleur en travail, et celui du transfert de chaleur entre les deux sources.

Dans le cycles amélioré de Clausius, composé de six étapes distinctes, une quantité de chaleur Q était convertie en travail à la température t du réservoir K , température différente de deux températures t_1 et t_2 des réservoirs chaud et froid, K_1 respectivement K_2 , entre lesquels s'opérait le transfert de chaleur Q . Clausius appela ces processus de première, respectivement de deuxième espèce. Les différentes étapes du cycle fermé s'effectuaient de manière telle qu'il était possible de les inverser (transformations réversibles). Sous ces hypothèses, Clausius affirma que les quantités de chaleur propres aux deux transformations étaient dans un rapport qui ne dépendait que des températures des réservoirs. La démonstration de cette affirmation utilisait de manière caractéristique un raisonnement utilisant un enchaînement des cycles, p. 144 :

Pour [les cycles fermés réversibles] nous pouvons démontrer au moyen de l'axiome précédent que la quantité de chaleur Q_1 transportée de K_1 en K_2 doit rester dans un rapport constant avec la quantité de chaleur Q transformée en travail. Car s'il existait deux cycles fermés tels que les valeurs de Q étant les mêmes dans tous les deux, celles de Q_1 fussent différentes, on pourrait les effectuer l'un après l'autre celui dans lequel Q_1 serait plus petit directement et l'autre inversement. Alors la quantité de chaleur Q qui a été transformée par le premier en travail serait de nouveau transformée en chaleur par le second et restituée au corps K tandis que du reste tout se retrouverait finalement dans son état initial sauf qu'il aurait passé plus de chaleur de K_2 en K_1 , que dans le sens opposé. En tout donc il aurait passé de la chaleur du corps froid K_2 au corps plus chaud K_1 sans qu'il y ait eu aucune compensation ce qui est en contradiction avec le principe.

En vertu de la réversibilité, toute transformation d'une espèce pouvait se remplacer par une de l'autre espèce, p. 144 :

Des deux transformations qui surviennent dans un cycle fermé réversible chacune prise en sens contraire peut remplacer l'autre; de sorte que si une transformation d'une certaine espèce a eu lieu elle peut être anéantie et remplacée par une transformation de l'autre espèce sans qu'il s'introduise aucune autre modification permanente. Si par exemple la quantité de chaleur Q a été produite par du travail et reçue par le corps K on pourra la soustraire à celui-ci par le cycle fermé décrit et la retransformer en travail; mais pour cela il faudra que la quantité de chaleur passe de K_1 à K_2 ; si au contraire cette quantité de chaleur Q a passé d'abord de K_1 à K_2 on pourra la restituer à K_1 pourvu que l'on produise par du travail une quantité de chaleur Q à la température du corps K .

⁵ Ce terme apparut en 1865, voir le mémoire no IX de la *Théorie mécanique de la Chaleur*, op. cit.

On voit donc que ces deux espèces de transformations peuvent être considérées comme des phénomènes de même nature; nous nommerons *équivalentes* deux transformations qui peuvent se remplacer mutuellement de cette manière.

Il est important de noter ici que Clausius considère les deux transformations équivalentes comme ayant une même nature physique. Nous arrivons ainsi à l'étape de la mathématisation, p. 144-145 :

Il s'agit maintenant de trouver la loi suivant laquelle on devra représenter mathématiquement ces transformations afin que leur équivalence résulte de l'égalité de leurs valeurs. Nous nommerons la valeur mathématique d'une transformation déterminée de cette manière sa *valeur d'équivalence*.

Clausius associa à un transfert de chaleur Q de t_1 à t_2 l'expression mathématique $Q F(t_1, t_2)$, alors que pour la production de chaleur Q à la température t à partir du travail il posa l'expression $Q f(t)$. Il supposa de plus que les opérations contraires recevaient les mêmes expressions mais de signe algébrique contraire. Les deux fonctions F et f restaient à déterminer. L'expression mathématique de l'énoncé de l'équivalence des transformations ci-dessus s'exprime alors :

$$-Q f(t) + Q F(t_1, t_2) = 0. \quad (1)$$

Clausius démontra ensuite, en utilisant un enchaînement judicieux des cycles, que la fonction inconnue F pouvait s'exprimer en termes de f :

$$F(t_2, t_1) = f(t_1) - f(t_2),$$

et la tâche ne revenait plus qu'à trouver f comme fonction de la température. Clausius, guidé par sa connaissance de la théorie de la chaleur, posa alors

$$f(t) = \frac{1}{T},$$

et il reléguait la détermination de la fonction inconnue $T = T(t)$ à la fin du mémoire. Toute transformation se voyait ainsi dotée d'une valeur, ce que Clausius résuma de manière élégante selon les termes suivants, p. 148-149 :

Si l'on appelle équivalentes deux transformations qui peuvent se remplacer mutuellement sans exiger aucune autre modification permanente, la production de la quantité de chaleur Q à la température t au moyen de travail aura la valeur d'équivalence

$$\frac{Q}{T}$$

et le passage de la quantité de chaleur Q de la température t_1 à la température t_2 aura la valeur d'équivalence

$$Q \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

où T est une fonction de la température, indépendante de la nature de l'opération par laquelle s'est effectuée la transformation.

Si l'on met la dernière expression sous la forme

$$Q \left(\frac{1}{T_2} \right) - Q \left(\frac{1}{T_1} \right)$$

on voit que le passage de la quantité de chaleur Q de la température t_1 à la température t_2 , a la même valeur d'équivalence qu'une double transformation de la première espèce, c'est à dire la transformation

de la quantité Q de chaleur à la température t_1 en travail et la retransformation de ce travail en chaleur à la température t_2 .

Clausius montra finalement que T correspondait à la température absolue. Pour nous, l'essentiel s'est cependant déjà joué⁶.

En effet, ce qu'il y a de décisif dans le raisonnement de Clausius, résumé ci-dessus, c'est la supposition de pouvoir exprimer l'équivalence physique de deux transformations en termes d'une égalité des valeurs numériques de leur représentants mathématiques. Nous avons vu que la notion d'équivalence physique était définie, mais aussi justifiée, par l'interchangeabilité réalisée par le fonctionnement d'un cycle (dans le sens direct ou inverse). Cette notion d'interchangeabilité n'est pas triviale; elle ne repose pas sur une égalité d'effets, mais sur la possibilité de défaire le résultat d'une transformation au prix, justement, de son équivalent.

Les cycles de Carnot-Clausius apparaissent ainsi comme des véritables éléments d'une sorte de *calcul conceptuel* où les résultats se jaugent en termes de la production/consommation de chaleur et travail, et où les « opérations » inverses sont réalisées en parcourant les cycles à l'envers. Si l'on adopte ce point de vue, l'opérationnalisation (au sens de la mise en œuvre d'une procédure opératoire sur les cycles) peut être considérée ici comme l'expression d'une véritable étape pré-mathématique de raisonnement physique, pré-mathématique mais réalisant déjà une algèbre (une structure) sans le symbolisme mathématique. La réalisation de cette structure s'obtient en termes d'un ensemble de processus physique idéaux qui peuvent se combiner par enchaînement, définissant ainsi une « loi de composition ». Pour obtenir la forme correcte de la réalisation mathématique de son « calcul des cycles », il suffisait alors à Clausius de définir la valeur numérique correspondant à la valeur d'équivalence par l'énoncé de « conservation » (1). L'expression mathématique de l'entropie était donc d'emblée fixée par la contrainte de représenter fidèlement le calcul abstrait des cycles.

Les amplitudes de Heisenberg

En 1925 Werner Heisenberg posa les jalons de la mécanique matricielle (Heisenberg 1925)⁷. L'approche de Heisenberg avait comme motivation déclarée de ne prendre en compte que les grandeurs observables et leur règles de manipulation. Comme nous allons le voir, on peut analyser le problème auquel fit face Heisenberg comme essentiellement celui de déterminer comment associer des suites de nombres (amplitudes) aux grandeurs physiques en théorie quantique. Clairement, une telle association devait être consistante, pas seulement au niveau de la concordance des amplitudes avec les valeurs des grandeurs physiques, mais à un niveau plus structurel que je mettrai en évidence ici. C'est l'exigence

⁶ En fait, l'expression de la « conservation » (1) implique déjà une étape intermédiaire. A ce stade, on ne peut écrire que l'équation

$$U(Q,t)+V(Q_1,t_1,t_2)=0,$$

où les fonctions U et V sont inconnues. Le fait de factoriser les chaleurs Q et Q_1 en posant $U(Q,t)=-Qf(t)$ et $V(Q_1,t_1,t_2)=Q_1 F(t_1,t_2)$ découle de la supposition que la relation entre Q et Q_1 dépend que des températures des réservoirs.

⁷ W. Heisenberg, Ueber quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen, *Zeit. f. Phys.*, vol. 33 (1925), pp. 879-893; Pour un compte rendu historique voir M. Jammer, *The Conceptual Development of Quantum Mechanics*, McGrawHill Book Company 1966; F. Hund, *Geschichte der Quantentheorie*, Bibliographisches Institut, Hochschultaschenbücher Verlag, 1967, et finalement J. Mehra and H. Rechenberg, *The Historical Development of Quantum Theory*, volume I-V, Springer 1982-87.

de cette consistance qui contient la clé de la réussite de Heisenberg. Il démarra sa réflexion à partir d'un cas où cette consistance était réalisée, le cas de la mécanique classique, mais où les exigences du principe de correspondance n'étaient pas remplies. Il eut ensuite la brillante intuition de subordonner l'organisation des amplitudes en utilisant comme guide la consistance mathématique des opérations algébriques sur les représentant formels des quantités physiques. Pour mieux comprendre ce qui suivra, il convient de faire quelques rappels.

Il faut tout d'abord esquisser ici la situation de la théorie quantique à l'époque du travail de Heisenberg. La dite « vieille théorie quantique » utilisait comme pièce maîtresse de son arsenal théorique la théorie classique des systèmes dits multiples périodiques (ou conditionnellement périodiques) qui sont intégrables et qui permettent l'introduction des variables action-angle. Pour un tel système, possédant s degrés de liberté et supposé non-dégénéré, toute quantité physique U peut s'écrire en termes des variables d'action-angle J_i , $i = 1, \dots, s$, sous la forme du développement de Fourier⁸ :

$$U(t) = \sum_{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_s} U_{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_s}(J_1, J_2, \dots, J_s) e^{2\pi i(\tau_1 v_1 + \tau_2 v_2 + \dots + \tau_s v_s)t} \quad (2)$$

les τ_i parcourent tous les entiers et les $U_{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_s}$ sont des vecteurs complexes qui ne dépendent que des variables d'action J_i . Les fréquences v_i sont liées aux variables d'angle w_k par les équations canoniques $\frac{\partial H}{\partial J_k} = \frac{dw_k}{dt} = 2\pi v_k$.

La prescription de la vieille théorie quantique pour le problème quantique correspondant consistait à imposer d'abord sur les variables d'action les conditions (de quantification) de Sommerfeld⁹

$$J_k = n_k h, \quad (3)$$

où les n_k sont des entiers positifs et h est la constante de Planck. Tout choix de la valeur de n_k définit un état stationnaire du système quantique. L'étape suivante consistait à appliquer le principe de correspondance de Bohr qui permettait de « lire » dans la série classique (2) l'information sur les processus spécifiquement quantiques des transitions entre les états stationnaires. Pour mieux faire comprendre ce point, il faut nous souvenir qu'une transition d'un état stationnaire d'énergie $E = E(n_1, n_2, \dots, n_s)$ à un autre d'énergie $E' = E(n'_1, n'_2, \dots, n'_s)$, la condition de Bohr,

$$h\nu_k = \Delta E = E - E' \quad (4)$$

permet d'obtenir la fréquence ν_k de la radiation émise ($E > E'$), ou absorbée ($E < E'$). Si l'on observe maintenant que les différences d'énergie ΔE s'expriment, dans la limite où les $\Delta J_k \rightarrow 0$, comme

$$\Delta E = \sum_k \frac{\partial E}{\partial J_k} \Delta J_k \equiv \sum_k \nu_k (n_k - n'_k) h$$

⁸ On peut considérer U comme décrivant typiquement un dipôle, qui, en électrodynamique classique, rend compte de la fréquence et l'intensité de la radiation émise par une charge ponctuelle accélérée.

⁹ Ces conditions ont été obtenues sous une forme intégrale par Sommerfeld qui généralisa ainsi la condition de quantification du moment angulaire de l'électron établie par Bohr, voir A. Sommerfeld, Zur Quantentheorie der Spektrallinien, *Annalen der Physik*, vol. 51 (1916), pp. 125-167.

on constate que la fréquence quantique coïncide dans cette limite avec l'une des fréquences classiques dans le développement (2) :

$$v_q = \sum_k v_k (n_k - n'_k) \equiv \sum_k v_k \tau_k$$

Bohr étendit cette correspondance, valide dans la limite des « grands » nombres quantiques n_k , où les niveaux d'énergie sont supposés se rapprocher (donc $(n_k - n'_k) \rightarrow 0$), à toutes les valeurs des nombres quantiques du moins comme approximation. C'est l'expression mathématique du principe de correspondance de Bohr, introduit d'abord comme un principe heuristique. La série de Fourier (2) peut être alors réécrite de la manière suggestive suivante

$$U(t) = \sum_{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_s} U_{n_1, n_1 - \tau_1; n_2, n_2 - \tau_2; \dots; n_s, n_s - \tau_s} e^{2\pi i (\tau_1 v_1 + \tau_2 v_2 + \dots + \tau_s v_s) t} \quad (5)$$

$$= \sum_{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_s} U_{n, n - \tau} e^{2\pi i (\tau_1 v_1 + \tau_2 v_2 + \dots + \tau_s v_s) t} \quad (6)$$

où les indices mettent en évidence maintenant la structure des transitions depuis l'état stationnaire défini par les n_k (qui fixent alors les variables d'action $J_k = n_k h$, donc la valeur des U), à d'autres, « distants » de τ du premier. Bohr établit également le lien entre les $U_{n, n - \tau}$ et les coefficients de probabilité d'émission spontanée d'Einstein $A_n^{n - \tau}$ (ces derniers sont proportionnels à l'intensité de la radiation)¹⁰ :

$$A_n^{n - \tau} = \frac{2\pi\nu}{3c^3 h} |U_{n, n - \tau}|$$

Avant l'avènement de la mécanique quantique les physiciens rendaient donc compte des processus quantiques en « lisant » dans l'expression classique (5) l'information (approximative) sur les fréquences et les intensités du spectre d'émission¹¹.

Nous sommes maintenant prêts à comprendre le problème auquel fit face Heisenberg. Si l'on prend en compte sa reinterprétation physique « quantique » d'une part, et sa signification purement mathématique de l'autre, force est de constater que l'expression (5) est incohérente. Cette série a une signification physico-mathématique que dans la mesure où elle décrit une grandeur classique d'un système classique conditionnellement périodique. Ce n'est que dans ce cas que la somme de la série *correspond effectivement* à la valeur de cette grandeur. La série réinterprétée (5), bien qu'elle contienne comme sommants des termes harmoniques qui relèvent de différents processus quantiques de transition, n'est pas une représentation mathématique du correspondant quantique de U . Dans ce dernier cas, ce qui est essentiel, c'est l'ensemble des amplitudes

¹⁰ Voir Jammer 1966, *op. cit.*, p. 113-114.

¹¹ Mentionnons ici que cette technique de la vieille théorie se révéla d'une efficacité étonnante dans les mains expertes de Heisenberg, Kramers et autres. Il est vrai que l'essentiel de la problématique de l'époque était l'étude des spectres des atomes, conçus comme des systèmes multiplement périodiques selon le modèle planétaire de Bohr.

$$U_{n_1, n_1 - \tau_1; n_2, n_2 - \tau_2; \dots; n_s, n_s - \tau_s} e^{2\pi i(\tau_1 v_1 + \tau_2 v_2 + \dots + \tau_s v_s)t} \tag{7}$$

et non plus la série elle-même, qui ne devient qu'une reminiscence obsolète de l'origine formelle de ces nombres. La mise sur pied d'un formalisme authentiquement quantique passe donc par la nécessité de relier mathématiquement l'ensemble des amplitudes (7) à ce qui deviendra alors un représentant (quantique) de U . Examinons comment Heisenberg affronta ce problème.

Nous allons ignorer ici le préambule de son article et aller directement à l'essentiel. Heisenberg, réfléchissant aux termes d'ordre supérieur dans l'expression de l'intensité de la radiation, termes qui impliquaient des puissances des grandeurs de position et vitesse, fut amené à se poser la question suivante¹² :

On pourrait s'interroger sur la forme que prendraient ces termes dans la théorie quantique. Ces approximations d'ordre supérieur peuvent être facilement calculées dans la théorie classique si le mouvement de l'électron est donné sous la formes d'un développement de Fourier et on s'attendrait à un résultat similaire en théorie quantique. *[Ce problème] n'a rien à voir avec l'électrodynamique mais plutôt — et ceci paraît d'une importance particulière — il est de nature purement cinématique. Nous pouvons ainsi poser la question sous sa forme la plus simple : si au lieu de la quantité classique $x(t)$ nous considérons une quantité de la théorie quantique, quelle quantité de la théorie quantique correspondra à $x(t)$?*

On pourrait paraphraser la question exprimée par la partie de la citation que j'ai marqué en italique en recourant de manière heuristique au langage des diagrammes commutatifs. Il s'agit de trouver une règle ou opération, disons R telle que le diagramme suivant commute (c'est-à-dire qu'il puisse être lu, avec le même résultat, selon les deux chemins distincts menant de x à X^2 , x étant une quantité physique quelconque) :

$$\begin{array}{ccc} x & \longrightarrow & x^2 \\ \Downarrow & & \Downarrow \\ X & \xrightarrow{R} & X^2 \end{array}$$

Les doubles flèches verticales ci-dessus dénotent la correspondance qui associe à l'expression classique sa contrepartie quantique (principe de correspondance). La flèche horizontale correspond à la multiplication standard de x par lui-même, alors que la double flèche horizontale R est l'opération inconnue dont la nature mathématique est soumise à l'exigence de rendre commutatif le diagramme.

Pour déterminer R , Heisenberg s'appuya sur deux observations. La première prenait acte de la forme mathématique de la combinaisons des fréquences découlant de la règle de Bohr (4), p. 263 :

[...] dans la théorie quantique il est possible d'attribuer à un électron une émission de rayonnement. Pour caractériser ce rayonnement nous avons d'abord besoin des fréquences qui apparaissent comme des fonctions de deux variables. En théorie quantique ces fonctions sont de la forme

$$v(n, n - \alpha) = h^{-1} \{ E(n) - E(n - \alpha) \},$$

et dans la théorie classique de la forme

¹² Dans ce qui suit, les pages de l'article de Heisenberg sont celles de sa traduction anglaise parue dans le recueil *Sources of Quantum Mechanics*, van der Waerden, B. L. (éd.), New York, Dover, 1968.

$$v(n, \alpha) = \alpha v(n) = \left[\alpha \frac{dE}{dJ} \right] = \alpha \frac{dE}{dn}$$

(Ici on a $nh = J$, où J est une des constantes canoniques [action]).

Les relations de combinaison suivantes sont caractéristiques pour comparer les cas classique et quantique en ce qui concerne la fréquence:

$$\begin{array}{c} \text{Classique} \\ v(n, \alpha) + v(n, \beta) = v(n, \alpha + \beta) \\ \text{Quantique} \\ v(n, n - \alpha) + v(n - \alpha, n - \alpha - \beta) = v(n, n - \alpha - \beta). \end{array}$$

Heisenberg continue, p. 263 :

Pour compléter la description du rayonnement il faut, en plus des amplitudes, avoir les intensités. Les amplitudes peuvent être considérées comme des vecteurs complexes, chacun déterminé par six composantes indépendantes, et qui déterminent aussi bien la phase que la polarisation. Comme les amplitudes sont aussi fonction de deux variables n et α , la partie correspondante du rayonnement est donnée par les expressions suivantes:

Quantique

$$\operatorname{Re}\{U(n, n - \alpha)e^{i\omega(n, n - \alpha)t}\} \quad (\text{I})$$

Classique

$$\operatorname{Re}\{U_\alpha e^{i\omega(n)\alpha t}\} \quad (\text{II})$$

A première vue la phase contenue dans U ne semble pas avoir de signification physique en théorie quantique, puisque dans cette théorie les fréquences ne sont en général pas commensurables avec leurs harmoniques. Nous allons cependant voir que même en théorie quantique la phase a une signification définie qui est analogue à celle du cas classique. Si nous considérons maintenant une quantité donnée $x(t)$ en théorie classique, celle-ci peut être considérée comme représentée par l'ensemble des quantités de la forme

$$U_\alpha e^{i\omega(n)\alpha t}$$

qui, selon que le mouvement est périodique ou non, peuvent être combinées en une somme ou une intégrale qui représente $x(t)$:

$$x(t) = \sum_{\alpha=-\infty}^{\alpha=\infty} U_\alpha(n) e^{i\omega(n)\alpha t}$$

ou

(IIa)

$$x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} U_\alpha(n) e^{i\omega(n)\alpha t} d\alpha$$

Une combinaison similaire des quantités correspondantes quantiques semble ne pas être possible de manière unique et donc dépourvue de signification au vu du poids égal des variables n et $n - \alpha$. On peut néanmoins facilement considérer l'ensemble des quantités $U(n, n - \alpha)e^{i\omega(n, n - \alpha)t}$ comme

représentation de la quantité $x(t)$ et essayer alors de répondre à la question ci-dessus : comment doit-on représenter la quantité $x(t)^2$?

En théorie classique la réponse est évidemment donnée par :

$$B_{\beta}(n)e^{i\omega(n)\beta t} = \sum_{\alpha=-\infty}^{\alpha=\infty} U_{\alpha}(n)U_{\beta-\alpha}(n)e^{i\omega(n)(\alpha+\beta-\alpha)t} \quad (\text{III})$$

ou

$$= \int_{\alpha=-\infty}^{\alpha=\infty} U_{\alpha}U_{\beta-\alpha}e^{i\omega(n)(\alpha+\beta-\alpha)t} d\alpha \quad (\text{IV})$$

de manière à ce que

$$x^2(t) = \sum_{\beta=-\infty}^{\beta=\infty} B_{\beta}(n)e^{i\omega(n)\beta t} \quad (\text{V})$$

ou, respectivement,

$$= \int_{\beta=-\infty}^{\beta=\infty} B_{\beta}(n)e^{i\omega(n)\beta t} d\beta \quad (\text{VI})$$

En théorie quantique, il semble que la supposition la plus simple et naturelle serait de remplacer les équations (III) et (IV) par :

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

ou

$$\int_{-\infty}^{\infty} U(n,n-\alpha)U(n-\alpha,n-\beta)e^{i\omega(n,n-\beta)t} d\alpha \quad (\text{VIII})$$

et en effet ce type de combinaison est presque une conséquence nécessaire des règles de combinaison des fréquences. Dans les suppositions (VII) et (VIII), on reconnaît que les phases des U quantiques ont une signification physique aussi importante que dans le cas de leur analogues classiques. Seule l'origine de l'échelle du temps et donc un facteur de phase commun à tous les U est arbitraire et dénué par conséquent de toute signification physique, mais les phases des U individuels contribue d'une manière à la quantité B .

Heisenberg basa l'essence de son argumentation sur la cohérence de la représentation mathématique d'une quantité physique et de ses puissances. Le succès de son raisonnement fut spectaculaire. La règle multiplicative (VII) correspond à la multiplication matricielle, comme le reconnut en premier Born quelques mois plus tard¹³. la stratégie suivie par Heisenberg donne alors la clé d'un formalisme authentiquement quantique où le passage par le cas classique et le principe de correspondance (les doubles flèches du diagramme) n'est plus requis. Il devient désormais possible d'écrire d'authentiques équations quantiques qui impliquent de savoir prendre des puissances des grandeurs ainsi que de les multiplier. La mécanique quantique (matricielle) fut découverte sur la base de l'exigence de la cohérence de la correspondance entre les quantités physiques et leur représentations mathématiques.

¹³ M. Born et P. Jordan, Zur Quantenmechanik, *Zeit. f. Phys.*, vol. 34 (1925), pp. 858-888.

CONCLUSION

J'espère avoir illustré à l'aide du premier exemple historique que la physique entame le processus de la formalisation mathématique déjà munie d'une assise structurelle qui lui est propre. Les opérations sur les cycles qui servent l'argumentation de Clausius n'ont clairement pas besoin des mathématiques pour pouvoir être exprimées. Elles réalisent, comme j'ai essayé de le montrer, un véritable calcul au sens où il existe une loi de composition et une manière d'évaluer le résultat net d'un enchaînement des cycles. Ce n'est que quand on cherche une quantification de ce calcul physique que la mathématique intervient, en simple outil qui réalise le calcul des cycles en termes d'une algèbre¹⁴ des nombres. Le seul exemple de Clausius ne suffit pas pour fonder un énoncé général d'existence des structures propres à la physique, mais la conjecture de l'existence de nombreux cas semblables mérite d'être confrontée à l'examen historique.

Le cas des amplitudes de Heisenberg apparaît de prime abord moins radical. Nous sommes ici en présence d'un contexte complètement mathématisée (la mécanique classique des systèmes conditionnellement périodiques). La démarche de Heisenberg illustre cependant comment l'exigence de la cohérence (définie par le « diagramme commutatif » ci-dessus) de la relation entre les observables physiques et leurs représentants mathématiques suffit à définir une nouvelle relation, celle propre à la mécanique matricielle, à partir de la relation classique, déjà connue, mais incompatible avec les préceptes de la théorie quantique. Ces préceptes, en particulier le principe de correspondance de Bohr, amènent à considérer la série (2) comme un simple moyen permettant de donner en un « seul geste » mathématique une suite de coefficients, ayant seuls une signification physique au sein de la reinterprétation quantique (« signification physique » est ici à comprendre au sens de l'observabilité, point de départ la réflexion d'obédience positiviste de Heisenberg). En ce sens, la série (2) est une série génératrice plutôt qu'une série convergente vers une valeur ayant une signification physique, comme c'est le cas dans la théorie classique. Heisenberg se retrouve donc avec une suite des nombres doués d'une signification physique, mais dont il ignore le principe organisateur. La série génératrice n'a pas de signification physique propre, seuls l'on les coefficients qui cependant n'ont pas de « réceptacle » commun susceptible de jouer le même rôle que la série classique. Le génie de la démarche de Heisenberg comporte donc deux étapes qui montrent toute la richesse du jeu complexe entre la partie déjà formalisé de la physique, et celle qui conditionne la manière dont la première est physiquement comprise. C'est l'empirisme déclaré de Heisenberg qui le conduit à voir dans la série (2) une série génératrice pour les quantités observables (fréquences, amplitudes) plutôt qu'une série de Fourier convergente vers la valeur d'une grandeur physique possiblement inobservable directement dans le contexte quantique. C'est d'autre part la nature particulière de la règle mathématique de la combinaison des phases résultant de la condition de Bohr qui donne la clef de la juste manière de combiner les amplitudes. Le nouveau réceptacle est ainsi identifié par la manière dont il réalise une multiplication : puisque les amplitudes du produit s'obtiennent à partir des amplitudes des facteurs selon la règle de la multiplication matricielle, le « réceptacle » quantique des amplitudes observables est une matrice.

¹⁴ J'utilise ici le terme « algèbre » comme synonyme d'une manipulation des symboles soumise à des règles définies. Clausius représente son calcul des cycles par le biais du groupe additif sur les réels.