

SPG MITTEILUNGEN COMMUNICATIONS DE LA SSP

AUSZUG - EXTRAIT

Histoire de la Physique (9)

Le modèle atomique de Bohr: origines, contexte et postérité

Jan Lacki, Uni Genève

*Cet article est apparu à l'origine en deux parts:
part 1 dans les **Communications de la SSP**, no. 40 (p. 52 - 55),
part 2 dans les **Communications de la SSP**, no. 41 (p. 28 - 33).*

Cet article a été téléchargé de:
http://www.sps.ch/uploads/media/Mitteilungen_Histoire_9.pdf

© voir http://www.sps.ch/bottom_menu/impressum/

Histoire de la Physique (9)

Le modèle atomique de Bohr: origines, contexte et postérité

Jan Lacki, Uni Genève

Nous célébrons cette année le centième anniversaire du modèle atomique de Niels Bohr. Pour le physicien, il est le commencement de la route qui allait mener à la formulation de la mécanique quantique; pour l'homme de la rue, il symbolise à lui tout seul la nature quantique du monde atomique. Nombre de ses particularités sont depuis passées dans les esprits et se sont banalisées: c'est oublier combien ce modèle a été révolutionnaire à son époque et combien il reste encore aujourd'hui paradoxal, mais de ces paradoxes profonds et fructueux qui ont pavé la voie de la physique contemporaine. L'atome de Bohr appartient ainsi à cette classe restreinte de grandes idées qui ont fait basculer le cours de la science. Malgré cette importance, peu de personnes, y compris les physiciens, connaissent le contexte précis de la découverte de Bohr et la formulation qu'il donna à ses idées. Son article, tout comme, pour donner un autre exemple notable, celui d'Einstein initiant la relativité en 1905, est aujourd'hui peu connu et encore moins lu. Le centenaire du modèle de Bohr offre une excellente occasion de revenir sur cet épisode capital de l'histoire de la physique quantique.

1 Une courte histoire de la spectroscopie

Quand Bohr entre en scène, l'étude des spectres est vieille de plus d'un demi-siècle, et ses racines remontent encore plus loin ¹. L'histoire commence avec l'observation du spectre solaire par le britannique William H. Wollaston, qui relève en 1802 l'existence des raies sombres; elles intrigueront ensuite fortement Joseph v. Fraunhofer qui en comptera 476 entre 1814 et 1815. Fraunhofer introduira aussi dans le champ de la spectroscopie l'usage des réseaux et obtiendra ainsi des résultats remarquables sur la relation entre l'angle d'observation et la longueur d'onde des raies. Il se livrera également à l'étude des spectres d'émission provenant de flammes colorées ou encore d'étincelles produites par décharge des machines électrostatiques. L'étude des spectres électriques se poursuivra et se systématisera avec l'utilisation des bobines d'induction et, dans les années 1845-1850, de la bobine de Ruhmkorff.

Il reviendra à Gustav Kirchhoff (1859) d'apporter des arguments décisifs en faveur de l'interprétation des raies sombres du soleil comme des raies d'absorption. Observons que c'est dans le contexte de ces travaux que Kirchhoff parviendra à une découverte capitale pour le développement ultérieur de la physique. Réfléchissant sur le rapport entre les pouvoirs d'émission et d'absorption d'un

corps à une longueur d'onde et température données, Kirchhoff obtient son fameux résultat affirmant son universalité pour tout corps. C'est le début de la problématique du rayonnement du corps noir qui amènera à la toute fin du siècle à la loi du rayonnement de Planck et la découverte des quanta.

À défaut d'une correspondance stable entre les éléments et leurs spectres (on a réalisé dans les années 1870 qu'un élément peut produire plusieurs spectres selon les conditions physiques ce qui met fin à l'espoir d'une spectrochimie), on observe tout de même d'autres régularités. On remarque des analogies entre les spectres d'éléments aux mêmes propriétés chimiques et on relève des rapports numériques entre raies d'un même élément (Mascart 1869, Lecoq de Boisbaudrant 1869, Cornu 1885). L'observation des doublets et triplets suggère que l'on a affaire à des harmoniques. Les tentatives d'expliquer les spectres sur la base d'une mécanique de vibrations en analogie avec les phénomènes sonores s'en trouvent renforcées. Les spectres à raies correspondraient aux vibrations internes des molécules alors que leur interaction dans les liquides et les solides conduirait aux spectres continus (Clifton 1866, Stoney 1868, 1871). L'hypothèse d'harmoniques perd cependant de son attrait à partir des années 1880: certaines raies seraient associées à des harmoniques d'ordre trop élevé par rapport à ce qui est physiquement plausible. Alors que l'on ne croit plus à une explication aussi simple des spectres, la conviction de l'existence de lois bien définies régissant les fréquences spectrales et susceptibles de renseigner sur les mécanismes internes à l'atome va cependant croissant. L'histoire de la spectroscopie franchit une étape capitale avec l'obtention de premières lois empiriques pour les longueurs d'onde des raies. La formule de Balmer (1885) pour les raies d'Ångström de l'hydrogène (1868), d'une précision remarquable, donne une impulsion forte à la recherche de formules empiriques de plus en plus générales. Celles-ci culminent avec les contributions de Rydberg (1890) et bien sûr de Ritz avec son principe de combinaisons (1908). Ces travaux s'appuient de manière fondamentale sur la découverte récente, pour des éléments chimiquement semblables, de l'existence de séries homologues aux propriétés communes comme celles de présenter un point d'accumulation vers les hautes fréquences avec des intensités de raies allant décroissant.

2 La spectroscopie et la structure de l'atome: questions et enjeux au tournant du siècle

L'obtention de formules empiriques pour les fréquences de séries de raies ne pouvait qu'aviver les tentatives pour concevoir un modèle de l'atome. Des modèles dynamiques avaient été proposés bien avant l'avènement de la théorie des quanta et la découverte de l'électron. La conception de la lumière comme ondulation d'un éther élastique suggérait que les spectres résultaient de vibrations moléculaires transmises mécaniquement à l'éther (Stokes 1852, Stoney 1868). La question de la structure atomique qui permettait

¹ Pour des études détaillées de l'histoire de la spectroscopie, on consultera H. Dingle, *A Hundred Years of Spectroscopy*, *British Journal of History of Science*, vol. 1 (1963), 199-216 ; M.C. Lawrence, *The Role of Spectroscopy in the Acceptance of an Internally Structured Atom (1860-1920)*, thèse de doctorat, University of Wisconsin, 1964 ; W. McGucken, *Nineteenth-Century Spectroscopy : development of the understanding of spectra, 1802-1897*, Johns Hopkins Press, 1969 ; J. C. D. Brand, *Lines of Light: The Sources of Dispersive Spectroscopy, 1800-1930*, Gordon & Breach Science Pub., 1995 ou encore M. Saillard, *Histoire de la spectroscopie*, Cahiers d'histoire et de philosophie des sciences, no 26 (1988).

ces vibrations ne pouvait donner lieu qu'à des spéculations. Suivant les travaux de Helmholtz sur l'hydrodynamique des vortex dans un fluide idéal (1858), William Thomson (Lord Kelvin) proposait déjà en 1867 un modèle de l'atome comme un vortex de l'éther. Plus que les résultats de la spectroscopie, la découverte de l'électron (1896) rendit obsolètes ces premières tentatives. Avec l'idée d'électrons comme corpuscules fondamentaux de la matière, et donc de l'atome, on disposait d'un nouveau principe de sa construction en prenant en compte l'émission de rayonnement électromagnétique par des charges en accélération. Le mécanisme d'excitation mécanique de l'éther était remplacé par celui de l'excitation électromagnétique par le mouvement de l'électron devenu oscillateur hertzien (Larmor 1897, pressenti par Stoney 1889). La difficulté principale consistait alors à concilier les conditions assurant les stabilités mécanique et radiative de l'atome. En effet, on savait depuis longtemps (Earnshaw 1831) qu'un système de corpuscules sous l'effet mutuel des forces en inverse du carré de la distance ne pouvait donner lieu à des configurations statiques stables: il fallait donc que les électrons de l'atome soient en mouvement. Cela impliquait à son tour que ces électrons devaient, pour rester confinés et assurer la permanence de l'atome, subir nécessairement des accélérations et donc rayonner de l'énergie électromagnétique, ce qui hypothéquait de nouveau la stabilité de l'atome par perte de son énergie.

Larmor montrait cependant en 1897 que les déperditions d'énergie pour un système de charges accélérées pouvaient être limitées, voire nulles, si la somme vectorielle des accélérations était nulle. On le voit, la satisfaction simultanée de conditions assurant la stabilité constituait déjà en soi un problème formidable mais il fallait encore que les solutions de ce problème soient en nombre suffisant pour expliquer la variété d'éléments chimiques connus. Comme si ces défis ne suffisaient pas, tout modèle stable de l'atome devait de surcroît rendre compte des raies spectrales en accord avec les formules empiriques de Rydberg et Ritz.

Au vu de ces multiples exigences, souvent contradictoires, il n'est pas étonnant que peu de modèles atomiques réussissaient à les satisfaire toutes et encore, ils ne le faisaient qu'au prix d'hypothèses au caractère *ad hoc* marqué². En 1901, James H. Jeans proposait pour chaque électron de l'atome l'existence d'un partenaire positif de même masse. Dans l'état normal de l'atome, la configuration d'ensemble pouvait être stable grâce à l'hypothèse d'une force compensant l'interaction électrostatique ; le spectre résultait des oscillations électroniques autour des positions d'équilibre. Avec ses "dynamides", Philipp Lenard concevait au contraire des paires de charges où le partenaire de l'électron avait une masse sensiblement plus grande (1903). Nous nous souvenons mieux aujourd'hui des conceptions de Jean Perrin qui, en 1901, suggérait un atome planétaire avec une charge positive retenant les charges négatives en orbite. Le Japonais Hantaro Nagaoka 1904 s'inspirait pour sa part des réflexions de jeune Maxwell sur la stabilité gravitationnelle des anneaux de Saturne (1860) pour proposer un modèle saturnien où des anneaux de charges négatives en orbite présentent des oscillations responsables des

raies. Comme il s'avéra rapidement, le modèle de Nagao-ka, basé sur les forces électrostatiques et non gravitationnelles, présentait en fait des problèmes de stabilité mécanique, un handicap plus sérieux que celui de la déperdition d'énergie par rayonnement qui pouvait être résolu selon les lignes suggérées par Larmor.

Dès 1903, J. J. Thomson concevait à son tour un modèle qui marqua pendant quelques années les esprits. Selon sa conception, la charge positive de l'atome était distribuée de manière uniforme dans tout le volume de l'atome. Les électrons, distribués en anneaux, tournaient à l'intérieur. S'appuyant sur les observations de Larmor, Thomson mettait beaucoup d'espoir dans le fait que ses configurations électroniques, pourvu qu'un nombre suffisant d'électrons soit considéré, présentaient un moment dipolaire total nul, ce qui assurait, à cet ordre, l'absence de rayonnement électromagnétique. Peu de temps après le même Thomson montrait cependant que le nombre d'électrons dans l'atome devait être de même ordre de grandeur que le nombre atomique (1906). Cela mettait fin à de nombreux modèles qui multipliaient le nombre des électrons à outrance, à commencer par le sien.

La contrainte sur le nombre d'électrons présents dans l'atome permit à l'époque de trancher aussi l'importante question de savoir si l'ensemble de raies du spectre pouvait être imputé à une seule source, un atome dans une seule configuration, ou si des configurations différentes d'un même atome, voire des variétés atomiques différentes, devaient être envisagées pour chaque raie. Comme les solutions à une seule source pour l'ensemble du spectre impliquaient un nombre prohibitif d'électrons³, on finit par pencher en faveur de configurations atomiques différentes pour chaque raie.

Une étude des modèles atomiques ne devrait pas à ce stade omettre les conceptions du suisse Walter Ritz et de son compatriote Arthur Schidlof. Comme j'eus déjà l'occasion de traiter du parcours scientifique de ces deux pionniers de la physique théorique suisse dans les *Communications*⁴ je terminerai juste sur une remarque. Les modèles de Ritz étaient caractéristiques de leur temps. Tout comme ceux de ses contemporains, ils étaient a posteriori handicapés par la conjonction d'une physique classique et d'hypothèses *ad hoc*. Schidlof, en prenant en compte l'existence du quantum d'action (1911), apparaît au contraire se mettre résolument du côté d'une physique nouvelle⁵. Sa pensée est pourtant encore insuffisamment affranchie de la tradition classique: elle ne visait pas tant l'obtention d'un modèle quantique de l'atome qu'une explication de l'existence et de la valeur du quantum d'action de Planck. Ce sera tout le contraire avec la contribution de Bohr.

3 L'avancée de Niels Bohr

Quand Bohr propose son modèle, les quanta viennent à peine d'être acceptés comme une réalité physique incon-

³ Voir Carazza et Robotti, *op. cit.*, pp. 313-315.

⁴ J. Lacki, Arthur Schidlof, un pionnier de la physique théorique suisse, *Communications de la SSP*, no 34, mai 2011, 48-51; Walter Ritz (1878-1909), the revolutionary classical physicist, *Communications de la SSP*, no 35, septembre 2011, 26-29.

⁵ A. Schidlof, Zur Aufklärung der universellen elektrodynamischen Bedeutung der Planckschen Strahlungskonstanten h , *Annalen der Physik*, vol. 340 (1911), 90-100.

² Pour une étude des modèles atomiques proposés dans le cadre de la physique classique, voir Bruno Carazza et Nadia Robotti, Explaining Atomic Spectra within Classical Physics: 1897-1913, *Annals of Science*, vol. 59 (2002), 299-320.

tourable. Autant on salue en 1900 la loi du rayonnement du corps noir de Planck comme une grande réussite, autant on fait peu de cas, pour ne pas dire qu'on rejette, l'explication ("désespérée" comme l'avait qualifiée lui-même Planck) de cette loi en termes de discontinuités dans les échanges énergétiques entre matière et rayonnement. Des années après la découverte de Planck on en cherchera encore une justification "classique". Il y a pourtant des esprits qui prennent les quanta d'emblée au sérieux, ainsi le jeune Einstein qui contribuera pour beaucoup à leur donner une respectabilité. Dans l'un des articles de sa "merveilleuse année" 1905 Einstein montre que dans le régime de Wien (grandes fréquences/petites températures) les propriétés thermodynamiques d'un volume d'énergie électromagnétique monochromatique de fréquence ν sont *thermodynamiquement semblables* à celles d'un gaz de corpuscules d'énergie individuelle $h\nu$ ⁶. Ces "grains" d'énergie, dont Einstein se garde encore bien d'affirmer l'existence physique autonome, signalent un aspect corpusculaire de la lumière: plus tard Einstein montrera, toujours dans le cadre d'une analyse de propriétés énergétiques, que cet aspect cohabite avec celui, classique et familier, des phénomènes ondulatoires⁷. C'est l'application de la nature "granulaire" de l'énergie électromagnétique à l'explication de l'effet photoélectrique, plutôt que la relativité, qui apportera à Einstein son prix Nobel⁸. En 1907 Einstein récidive sur le chemin de l'exploration des conséquences "quantiques" de la loi de Planck: si on comprend cette dernière comme remplaçant l'énergie moyenne classique d'un oscillateur unidimensionnel, kT , par l'expression:

$$kT \rightarrow \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

alors pourquoi ne pas opérer cette substitution pour les oscillateurs matériels modélisant la matière dans les solides ?⁹ Le résultat permet d'expliquer immédiatement la décroissance des chaleurs spécifiques à basse température, l'une des énigmes qui, vers la fin du XIX^e siècle, constituait un argument puissant contre la théorie cinétique des gaz et contre toute reconstruction de la thermodynamique sur la base d'une mécanique des constituants atomiques: grâce à Einstein, on comprend que ce n'était pas tant cette approche qui était fautive, mais les lois mécaniques sur les-

6 Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt, *Annalen der Physik*, vol. 17 (1905), pp. 132-148

7 Entwicklung unserer Anschauungen über das Wesen und die Konstitution der Strahlung, *Physikalische Zeitschrift*, vol. 10 (1909), 817-825, conférence donnée lors du 81^e congrès de la *Gesellschaft Deutscher Naturforscher* à Salzburg. Einstein y argumente aussi en faveur d'un quantum de lumière aux propriétés résolument corpusculaires. Il faudra cependant encore des années avant que l'idée ne s'impose: les expériences de la diffusion de Compton (1923) jouèrent ici un rôle décisif. Il est intéressant d'observer que Niels Bohr lui-même rejettera initialement la réalité des corpuscules de lumière préférant dans un premier temps voir dans les aspects corpusculaires une manifestation de l'insuffisance, à l'échelle atomique, des descriptions spatio-temporelles, voir par exemple Dugald Murdoch, *Niels Bohr's philosophy of physics*, Cambridge University Press, 1989.

8 On connaît bien les hésitations du comité du Nobel de physique à récompenser Einstein pour la relativité, voir R. M. Friedman, *The Politics of Excellence: Behind the Nobel Prize in Science*, W. H. Freeman Books, 2001.

9 Die Plancksche Theorie der Strahlung und die Theorie der spezifischen Wärme, *Annalen der Physik*, vol. 22 (1907), 180-190.

quelles elle s'appuyait¹⁰.

Ces deux succès, où le génie d'Einstein se révèle autant que dans son article sur l'électrodynamique des corps en mouvement, contribuent plus que tout autre, à convaincre la communauté de l'intérêt de l'hypothèse quantique et, progressivement, de l'existence réelle des quanta. La première conférence Solvay en 1911 dont nous connaissons la photographie emblématique est consacrée à "La théorie du rayonnement et les quanta": on peut dire que ses travaux officialisent les quanta comme partie intégrante de la physique¹¹. Cependant, nous sommes encore loin d'une modification que les quanta opéreraient sur les lois des systèmes individuels: dans ses deux travaux Einstein tire les conséquences de l'existence des quanta à partir d'un travail d'analyse des lois phénoménologiques obtenues par ses prédécesseurs (Wien, Planck, etc.) mais il ne les dérive pas d'une modification postulée des lois de base de la mécanique ou de l'électrodynamique affectant les constituants élémentaires¹². Bohr se confrontera en revanche frontalement à ces lois classiques et c'est précisément pour cette raison que sa contribution est une étape capitale sur le chemin de la mécanique quantique.

A l'époque de la formulation de son modèle Niels Bohr est depuis mars 1912 collaborateur au laboratoire de Rutherford à Manchester. Il vient à peine de défendre sa thèse à Copenhague sur "la théorie électronique des métaux" (1911). Après un séjour décevant chez J. J. Thomson à Cambridge qui voit les deux hommes s'affronter à propos du... modèle atomique de Thomson, Bohr se tourne vers Rutherford¹³. Celui-ci vient à l'époque d'apporter des arguments décisifs contre la conception de Thomson en montrant que les expériences de la diffusion à large angle des particules alpha concluent aux effets d'une déflexion unique sur des centres de diffusion intraatomiques: le noyau atomique est découvert¹⁴. L'accueil que Bohr reçoit de la part du Néo-zélandais est d'emblée meilleur que celui que lui a réservé Thomson. Rutherford est convaincu de l'importance des idées de Planck et encourage les efforts de son jeune collègue. Dans son laboratoire Bohr travaille sur l'absorption des particules alpha par la matière et c'est pour lui l'occasion de se rapprocher encore plus de la pro-

10 Pour les critiques de la théorie cinétique au XIX^e siècle, voir S. Brush, *The kind of motion we call heat. A History of the Kinetic Theory of Gases in the Nineteenth Century*, North Holland, 1986.

11 C'est Walter Nernst, impressionné par les travaux d'Einstein, qui persuade le riche industriel Ernest Solvay de financer une conférence solennelle consacrée à la physique quantique, voir D. Kormos Barkan, *The Witches' Sabbath: The First International Solvay Congress in Physics*, *Science in Context*, vol. 6 (1993), 59-82. aussi M.-C. Bustamante, Paul Langevin et le Conseil Solvay de 1911, *Images de la physique*, 2011, 3-9.

12 Cela permet de comprendre comment Einstein est dans ces années indiscutablement un père fondateur de la théorie quantique alors qu'il deviendra, un dizaine d'années plus tard, un féroce critique de la mécanique quantique. L'existence des quanta n'entraîne à ce moment pas en conflit avec les convictions profondes d'Einstein sur la réalité et sur la manière dont nous devrions la décrire: les thèmes d'indéterminisme, de l'inexistence de propriétés objectives des systèmes, contre lesquels Einstein se battra jusqu'à la fin, n'étaient pas (encore) affleurants à la surface de la nouvelle physique quantique. Tout changera avec la mécanique quantique et surtout l'interprétation qu'en prônera Bohr.

13 Dans son survol "60 years of quantum mechanics", E. U. Condon rapporte que Bohr, suite à son désaccord avec Thomson, avait été "poliment invité" à aller voir ailleurs, voir *Physics Today*, vol. 15 (1962), 45.

14 The scattering of alpha and beta particles by matter and the structure of the atom, *Philosophical Magazine*, vol. 21 (1911), 669-688.

blématique de l'atome ¹⁵. Le modèle nucléaire de l'atome suggéré par Rutherford offre un cadre prometteur mais entraîne aussi son lot de problèmes. En particulier, Bohr réalise que les lois dynamiques classiques sont impuissantes à fixer seules une échelle pour sa taille. En termes d'analyse dimensionnelle, il manque un ingrédient: le modèle de Rutherford faisant intervenir les masses et les charges des électrons, on peut se convaincre qu'il est impossible de construire à partir de là une constante ayant la dimension d'une longueur. Tout change cependant si l'on introduit la constante de Planck: on peut alors former l'expression h^2/me^2 qui a non seulement la bonne dimension mais aussi le bon ordre de grandeur atomique ($h^2/me^2 \approx 2 \cdot 10^{-10}$ m). La stratégie de Bohr allait dès lors différer considérablement de celle de ses prédécesseurs comme Schidlof. Alors que ce dernier espérait, comme on l'a vu, justifier la valeur de la constante h sur la base d'un mécanisme atomique décrit en termes classiques, Bohr renverse la perspective en prenant acte de l'existence du quantum d'action et de sa valeur h pour rendre compte de la structure de l'atome et dériver les propriétés de son spectre. Il fallait encore qu'il comprenne comment lier la constante de Planck au champ de ses recherches. De retour à Copenhague dès septembre 1912, Bohr ne prenait pas encore en considération ce que les données spectroscopiques pouvaient lui enseigner mais dès qu'il eut compris l'importance des formules établies par Balmer, Rydberg et Ritz, les pièces du puzzle commencent à s'assembler: "dès que je pris connaissance de la formule de Balmer, toute cette affaire devint claire" ¹⁶. Nous pouvons maintenant examiner les idées fortes du modèle de Bohr, non pas tant pour les découvrir (elles sont passées largement dans notre culture), mais pour examiner comment Bohr les exposa à l'origine dans sa publication ¹⁷. Pour un atome constitué d'une charge positive E autour de laquelle orbite une charge égale mais de signe opposé e , l'énergie totale est:

$$W = T + V = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{Ee}{r^2}$$

La condition de stabilité pour une orbite circulaire de rayon r et fréquence ν donne

$$\frac{mv^2}{r} = -\frac{Ee}{r^2} \Leftrightarrow m\omega^2 r = -\frac{Ee}{r^2},$$

et, pour l'atome d'hydrogène ($E = -e$),

$$m\omega^2 r = \frac{e^2}{r^2} \Rightarrow \omega^2 = \frac{e^2}{mr^3} = (2\pi\nu)^2.$$

Ainsi $W = -\frac{e^2}{2r}$, alors que $\nu^2 = -\frac{8W^3}{4\pi^2 e^4 m}$.

La donnée de l'énergie détermine donc entièrement l'orbite circulaire correspondante ¹⁸.

Mais comment faire entrer l'hypothèse des quanta, et la dimension de h , dans le problème de la structure de l'atome ? Certes, la quantification des échanges énergétiques entre la matière et le rayonnement doit avoir une conséquence au niveau de la structure atomique, mais comment faire le lien ? Bohr propose de considérer le processus de la formation de l'atome par la capture d'un électron par le noyau. Infiniment loin du noyau l'électron est libre, $W = 0$. Supposons qu'il soit capturé sur une orbite d'énergie W négative (état lié !). Par la conservation de l'énergie, une quantité d'énergie positive, $-W$, doit être libérée dans le processus: Bohr, suivant l'hypothèse quantique, suppose que c'est sous la forme d'un rayonnement d'un certain nombre τ (entier !) de quanta d'énergie. Il pose:

$$-W = \tau h \nu' \equiv \tau h \frac{\nu'}{2}, \quad (1)$$

avec la fréquence du quantum rayonné ν' posée égale à la moitié (!) de la fréquence de révolution mécanique de l'orbite de capture. L'hypothèse de Bohr fixe, parmi le continuum des énergies un nombre infini, mais néanmoins discret, d'entre elles :

$$-W = \frac{2\pi^2 e^4 m}{h^2} \frac{1}{\tau^2}. \quad (2)$$

La différence des énergies, pour deux nombres τ_1 et τ_2 donnés est alors :

$$\Delta W = -\frac{2\pi^2 e^4 m}{h^2} \left(\frac{1}{\tau_2^2} - \frac{1}{\tau_1^2} \right);$$

Si de tels processus de changement de niveau énergétique surviennent dans l'atome, on doit supposer, avec Bohr, qu'ils donnent lieu à une émission/absorption de quanta d'énergie de rayonnement électromagnétique de fréquence ν' donnée par la formule

$$h\nu' = -\Delta W = \frac{2\pi^2 e^4 m}{h^2} \left(\frac{1}{\tau_2^2} - \frac{1}{\tau_1^2} \right).$$

En posant $\tau_2 = 2$, et $\tau_1 = 3; 4; 5; \dots$ la formule ci-dessus reproduit les valeurs des fréquences des raies spectrales de la série de Balmer (1885) exprimée, dans la formule de Rydberg (1890), par:

$$\nu' = Rc \left(\frac{1}{\tau_2^2} - \frac{1}{\tau_1^2} \right).$$

Bohr avait donc réussi à obtenir la valeur de la constante de Rydberg R à partir de constantes élémentaires,

$$R = \frac{2\pi^2 e^4 m}{ch^3}.$$

Pour $\tau_2 = 3$, les fréquences correspondent à la série de Paschen (observée en 1908). La formule de Bohr permettait aussi de faire des prédictions: pour $\tau_2 = 1$ la série de Lyman (1913), pour $\tau_2 = 4$ la série de Brackett (1922) et pour $\tau_2 = 5$ la série de Pfund (1924). D'autres observations confirmaient encore toute la force de son modèle. Confronté à l'obser-

¹⁵ On the theory of the decrease of velocity of moving electrified particles on passing through matter, *Philosophical Magazine*, vol. 25 (1913), 10-31.

¹⁶ "As soon as I saw Balmer's formula, the whole thing was immediately clear to me", cité par Max Jammer, *The conceptual development of quantum mechanics*, McGraw Hill, 1966, p. 77.

¹⁷ On the constitution of atoms and molecules, *Philosophical Magazine*, vol. 26 (1913), 1-25, 476-502, 857-875.

¹⁸ En fait on peut montrer que le résultat s'applique aussi aux orbites elliptiques: leur grand axe $2r$ et la fréquence de rotation de l'électron ν sont déterminés par la donnée de l'énergie de l'orbite et ne dépendent pas de la valeur de l'excentricité.

vation par l'astronome Pickering d'une série de raies de l'hydrogène qui ne coïncidaient pas avec sa théorie, Bohr montrait ainsi brillamment qu'il s'agissait en fait du spectre de l'hélium ionisé.

Sa formule spectrale était donc un succès indéniable. Des étapes de son raisonnement laissaient cependant à désirer, à commencer par la relation (1): il s'agit d'un passage clé mais Bohr n'en donnait, initialement, pas de justification¹⁹. Certainement, la fréquence de quanta émis dépend de la fréquence de l'orbite de capture, mais c'est tout ce que l'on peut dire. Conscient de cette faiblesse, Bohr retourne sur cette question plus loin dans son article pour proposer une meilleure justification. Il commence par poser

$$-W = f(\tau)h\nu,$$

avec $f(\tau)$ une fonction, à ce stade arbitraire, de τ : L'adéquation avec la série de Balmer impose $f(\tau) = \alpha\tau$ (les fréquences dépendent de l'inverse carré d'un entier), Bohr considère alors le cas limite de deux orbites contiguës de l'atome, caractérisées par une "grande" valeur de τ , $\tau_2 = N-1$, et $\tau_1 = N$, avec $N \gg 1$.

La fréquence du quantum émis lors de la transition est:

$$\nu' = \frac{\pi^2 e^4 m}{2\alpha^2 h^3} \left(\frac{1}{(N-1)^2} - \frac{1}{N^2} \right) = \frac{\pi^2 e^4 m}{2\alpha^2 h^3} \left(\frac{2N-1}{N^2(N-1)^2} \right) \quad (3)$$

alors que les fréquences mécaniques du mouvement qui, d'après l'électrodynamique, sont aussi les fréquences du rayonnement classique sont:

$$\nu_N = \frac{\pi^2 e^4 m}{2\alpha^3 h^3 N^3}, \quad \nu_{N-1} = \frac{\pi^2 e^4 m}{2\alpha^3 h^3 (N-1)^3}.$$

Ces fréquences tendent l'une vers l'autre pour $N \rightarrow \infty$. Bohr fait alors remarquer qu'il semble plausible que la fréquence "quantique" de transition, au sens de (3), tende alors aussi vers cette valeur commune: en prenant la limite $N \rightarrow \infty$, et en demandant que $\nu' \simeq \nu_N \simeq \nu_{N-1}$ on déduit la valeur $\alpha = 1/2$. Le même raisonnement (en prenant $\alpha = 1/2$), appliqué aux orbites $\tau_2 = N-n$, et $\tau_1 = N$ donne, dans la limite $N \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} \nu' &= \frac{2\pi^2 e^4 m}{h^3} \left(\frac{1}{(N-n)^2} - \frac{1}{N^2} \right) = \frac{2\pi^2 e^4 m}{h^3} \left(\frac{2Nn - n^2}{N^2(N-n)^2} \right) \\ &\simeq \frac{4\pi^2 e^4 m}{h^3} \left(\frac{1}{N^3} \right) n \end{aligned}$$

alors que les fréquences classiques tendent vers :

$$\nu_N \simeq \nu_{N-n} = \frac{4\pi^2 e^4 m}{h^3 N^3}.$$

La fréquence du rayonnement émis lors de la transition coïncide donc, dans cette limite, avec la n -ième harmonique de la fréquence orbitale classique vers laquelle tendent ν_N et ν_{N-n} : $\nu' \simeq n\nu_N$.

Historiquement, on peut identifier ce raisonnement comme l'embryon du fameux "principe de correspondance" que Bohr utilisera plus tard à maintes reprises dans ses travaux et qui jouera un grand rôle dans la suite de la théorie quantique: on y postule un lien entre le comportement quantique

du système et son comportement classique dans la limite $\tau \rightarrow \infty$. Le "principe de correspondance", compris ainsi, sera l'un des piliers de la théorie quantique avant l'avènement de la mécanique quantique. Il faut noter que ce principe, du moins comme l'ont utilisé Bohr et ses disciples, ne correspond pas strictement à ce que nous entendons aujourd'hui par *principe de correspondance*: selon l'acceptation actuelle, le principe de correspondance permet de retrouver, au niveau formel, la physique classique à partir des expressions quantiques quand on fait tendre la constante de Planck vers 0, $h \rightarrow 0$: C'est certainement une manière de caractériser les rapports entre la théorie classique et quantique mais cette interprétation contemporaine ne coïncide pas avec le principe de correspondance tel qu'initié par Bohr qui avait, pendant les années initiales, une signification plus phénoménologique²⁰.

Malgré la réussite incontestable de son modèle, Bohr n'avait pourtant pas résolu dans son article fondateur le problème de la stabilité de l'atome. A vrai dire il ne le cherchait même pas. De fait, Bohr était convaincu que ce problème ne pouvait pas recevoir de solution dans le cadre de la physique classique et sa démarche l'illustre parfaitement. Fort d'avoir déduit le spectre de Balmer et surtout obtenu l'expression de la constante de Rydberg, Bohr postulait l'existence d'un ensemble dénombrable d'orbites stationnaires sur lesquelles l'électron, malgré son mouvement accéléré, ne rayonnait pas d'énergie: les orbites stationnaires étaient "en quelque sorte des lieux temporaires entre lesquels survient l'émission d'énergie correspondante aux différentes lignes spectrales"²¹.

Bohr déclarait, à propos de sa démarche, qu'il la considérait comme "préliminaire et hypothétique". En fait, elle était bien plus radicale: Bohr ne cherchait pas tant à masquer les difficultés de son modèle par ses succès mais, au contraire, il les exacerbait, aspirant ainsi à mettre le plus clairement possible en exergue les contradictions que sa démarche entretenait avec la physique classique. On retrouve là une autre caractéristique de ce que Bohr allait par la suite apporter à la théorie quantique: alors que d'autres (Einstein) refusaient d'abandonner le cadre épistémologique de la physique classique, Bohr, avec son interprétation de la mécanique quantique, devenait le champion de la rupture.

4 Comment généraliser le modèle de Bohr ?

L'approche de Bohr à l'explication du spectre de l'hydrogène fut immédiatement acclamée par la communauté. On se souvient en particulier de la déclaration d'Einstein qui avait salué le travail de Bohr comme "une immense prouesse"²². Il est instructif de comparer le modèle de Bohr avec la loi de Planck: dans les deux cas, les résultats ne fu-

²⁰ Savoir utiliser le principe de correspondance comme le comprenait Bohr exigeait passablement d'intuition dans la situation concrète à laquelle on faisait face. Il n'est pas étonnant qu'en fin de compte ceux qui savaient le manier formaient un cercle dont Bohr était le centre, un cercle où il n'était pas facile d'entrer. Le jeune Louis de Broglie allait l'apprendre à ses dépens dans un de ses premiers travaux, voir J. Lacki, Niels Bohr, article dans le *New Dictionary of Scientific Biography*, Charles Scribner's Sons, 2008.

²¹ "On the spectrum of hydrogen", in: Niels Bohr, *The theory of Spectra and Atomic Constitution*, Cambridge University Press, 1922, p. 107.

²² Voir Max Jammer, *The Conceptual Development of Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, 1966, p. 86.

¹⁹ On peut cependant considérer la moyenne du mouvement avant la capture (mouvement libre avec $\nu = 0$), et du mouvement circulaire après capture, de fréquence ν . Bien sûr, cette justification est totalement *ad hoc*.

rent acceptés que grâce à leur portée phénoménologique. La loi de Planck s'imposait par son adéquation avec les mesures du rayonnement de cavité et en aucune manière par son assise "théorique" (la quantification des énergies des résonateurs) dont on s'était, initialement, méfié. De même, la démarche de Bohr trouva grâce aux yeux de ses contemporains par son adéquation à la formule de Rydberg et la théorie des spectres, cela malgré les violations patentées de la physique classique que son modèle impliquait.

Le succès de Bohr appelait à appliquer sa démarche à d'autres atomes (autres que ceux qui pouvaient se ramener au cas de l'hydrogène, comme l'hélium ionisé), mais un problème se posait immédiatement. Le cas considéré par Bohr est trop particulier: son approche repose entièrement sur le fait que la donnée de l'énergie W définit univoquement les caractéristiques de l'orbite (son rayon et sa fréquence). La quantification des valeurs de l'énergie permet de sélectionner ainsi des orbites "permises" dans le continu des configurations classiquement possibles. Dans une situation plus complexe (à commencer par le cas immédiatement suivant des orbites elliptiques) d'autres caractéristiques du mouvement interviennent et les valeurs des paramètres associés ne peuvent être fixées par la seule donnée de l'énergie (il y a dégénérescence).

Il est remarquable que l'article fondateur de Bohr indiquait (certes, *a posteriori*) la voie à suivre. Bohr y remarquait vers la fin qu'il est possible de caractériser les orbites stationnaires d'une autre manière: elles correspondent à une restriction des valeurs du moment cinétique \mathbf{L} . Dans le type de mouvement considéré par Bohr, l'énergie totale est

$$W = -\frac{e^2}{2r} = -T$$

et comme $T = |\mathbf{L}|\pi\nu$, quantifier l'énergie revient à quantifier les valeurs du moment cinétique:

$$|\mathbf{L}| = \tau \frac{h}{2\pi} \quad (4)$$

C'était la clé de la généralisation mais il fallait franchir encore quelques étapes. Pour commencer, la quantification du moment cinétique (4) peut recevoir une expression plus générale: dans les coordonnées polaires φ et r , l'hamiltonien de l'atome (en négligeant le mouvement de son noyau) est:

$$H = T + V = \frac{p_\varphi^2}{2(mr^2)} - \frac{e^2}{r^2};$$

La coordonnée φ est cyclique, et ainsi le moment conjugué $p_\varphi = \tau h/2\pi$ est une quantité conservée du mouvement. On peut poser, en intégrant sa valeur sur une période du mouvement orbital,

$$\oint p_\varphi d\varphi = p_\varphi \oint d\varphi = \tau \frac{h}{2\pi} 2\pi = \tau h.$$

Il semble donc que la quantification des orbites de Bohr revienne en quelque sorte à quantifier la valeur des intégrales du type

$$\oint p dq = \tau h.$$

Que signifient ces intégrales ? Que faut-il faire quand on a plusieurs degrés de liberté ? Ces conditions sont-elles invariantes (conduisent-elles à la même quantification) sous les changements de coordonnées ? Les chemins d'intégration généralisant les orbites circulaires sont-ils clairement définis ? Autant de questions qui seront résolues dans les années qui suivent. L'approche générale qui en ressortira permettra de quantifier une classe générale de systèmes intégrables, les systèmes *multiplement périodiques*. Ce sera l'oeuvre de Bohr, d'Arnold Sommerfeld, et de tous ceux qui, tels Paul Epstein ou Karl Schwarzschild, reconnaîtront l'intérêt d'importer, dans la jeune théorie quantique, les méthodes de la mécanique... céleste.

5 Au-delà de Bohr: quantification de l'espace de phase et invariants adiabatiques

L'application de l'idée de quanta d'énergie à la structure de l'atome par Bohr contredisait aussi bien la mécanique classique que l'électrodynamique. En fait, avant même que Bohr ne remette en cause les deux théories classiques, certains avaient essayé d'obtenir la loi de Planck à partir d'un raisonnement contredisant la physique classique. Dans une communication au congrès Solvay de 1911, Planck, ayant renoncé à l'espoir d'une justification classique à sa loi, posait les premiers pas. Suivant la formulation par Gibbs en 1900 d'une "mécanique statistique" inspirée par les travaux de Boltzmann, la probabilité $P(p; q)$ de trouver un système, décrit par ses coordonnées généralisées q_i et les moments conjugués p_i ($i = 1, \dots, f$ parcourt le nombre total de degrés de liberté) dans le volume infinitésimal $dpdq \equiv \prod_{i=1}^f dp_i dq_i$, centré sur le point (p, q) de l'espace de phase, est donnée par

$$P(p, q) = \frac{\exp\left(\frac{-H(p, q)}{kT}\right)}{\int dpdq \exp\left(\frac{-H(p, q)}{kT}\right)} dpdq,$$

où $H(p, q)$ est la valeur de l'hamiltonien H : Pour un oscillateur harmonique unidimensionnel de fréquence propre ν ,

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + 2\pi^2 \nu^2 m q^2$$

et le calcul de son énergie moyenne donne alors

$$\bar{E} = \int \int dpdq P(p, q) H(p, q) = kT.$$

Pour éviter cette conclusion qui mène fatalement à la loi de Rayleigh et sa "catastrophe ultraviolette", Planck montrait qu'en suivant les préceptes de la mécanique statistique on pouvait obtenir l'expression voulue par sa loi,

$$\bar{E} = \frac{h\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1},$$

si l'on faisait l'hypothèse de restreindre les valeurs permises pour l'énergie des oscillateurs aux seuls multiples entiers de la constante h : $E = 0, h\nu, 2h\nu, \dots, nh\nu, \dots$

$$\bar{E} = \frac{\sum_n nh\nu \exp\left(\frac{-H(p,q)}{kT}\right)}{\sum_n \exp\left(\frac{-H(p,q)}{kT}\right)} = \frac{h\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1}.$$

Planck allait, dans ce raisonnement, plus loin que ce qu'il avait avancé lors de la première justification de sa loi en 1900: la quantification de l'énergie de l'oscillateur renvoyait à une raison plus fondamentale, la *quantification* de son espace de phase. En effet, pour une énergie donnée E de l'oscillateur, son mouvement est représenté dans l'espace de phase par une ellipse de demi-axes $a = \sqrt[2]{2E/4\pi^2\nu^2 m}$, $b = \sqrt[2]{2mE}$. La surface de cette ellipse est donnée par:

$$S_E = \pi ab = \sqrt[2]{2E/4\pi^2\nu^2 m} \sqrt[2]{2mE} = \frac{E}{\nu}.$$

Ainsi, si on suppose que ces ellipses sont distribuées de manière discontinue, en découpant des surfaces intermédiaires de valeur $S = S_{E_n} - S_{E_{n-1}} = h$, alors les énergies des oscillateurs ne peuvent prendre que les valeurs données par les multiples entiers de $h\nu$. Planck proposait donc de voir la quantification de l'énergie des oscillateurs (unidimensionnels) comme résultant d'un principe plus fondamental, celui d'une discrétisation de l'espace de phase, en "cellules" de taille

$$\int_E^{E+\epsilon} dpdq = h.$$

L'existence d'une taille minimale aux cellules de l'espace de phase défiait toute compréhension classique: h a en effet la dimension d'une [action] = [energie] [temps]. Il n'existe cependant aucune loi de conservation de l'action: on ne voyait ainsi pas comment cette discrétisation de cellules pouvait "se maintenir" dans le temps. Cela n'était pas pour décourager Planck qui généralisait en 1915 sa discrétisation de l'espace de phase de l'oscillateur unidimensionnel à des systèmes à f degrés de liberté en considérant des hypersurfaces découpant des portions de l'espace de phase en des éléments de volume $(h)^f$.

Une autre inspiration allait pendant ce temps compléter les spéculations de Planck. Peu de temps après Bohr et son article fondateur, Sommerfeld suggérait comment il fallait le généraliser. Le Danois avait, comme on l'a vu, remarqué que la condition définissant les orbites permises (états stationnaires) était équivalente à la quantification du moment cinétique en unités de $h/2\pi$:

$$|\mathbf{L}| = \tau \frac{h}{2\pi}.$$

Sommerfeld reprenait cette condition en termes de l'intégrale (prise sur une orbite) déjà vue:

$$\oint p_\varphi d\varphi = \tau h$$

où le moment p_φ est conjugué à la coordonnée angulaire φ paramétrant la trajectoire de l'orbite. Participant tout comme Planck au premier congrès Solvay ²³, Sommerfeld

²³ Il y avait fait une contribution importante en essayant de rattacher les discontinuités quantiques à un principe plus fondamental et plus général, celui de la quantification de l'intégrale d'action de Hamilton, $S = \int L dt$. Sa démarche s'inscrivait bien dans la direction que prenait alors la physique

connaissait bien les réflexions de Planck sur les cellules élémentaires de l'espace de phase. Dans les coordonnées canoniques φ et p_φ , les mouvements permis correspondent aux segments droits données par $p_\varphi = \tau h/2\pi$, φ variant entre $-\pi$ et π , et on peut reprendre tout le raisonnement de Planck pour retrouver ainsi le résultat de Bohr. Sommerfeld en venait à penser que la quantification des orbites de Bohr avait pour justification plus fondamentale la quantification des valeurs des intégrales de la forme:

$$\oint p dq = \tau h.$$

Il proposa fort logiquement de généraliser la démarche de Bohr, pour un nombre de degrés de liberté f , par la considération de f conditions de quantification (les p_i sont conjugués aux q_i):

$$\oint p_i dq_i = \tau_i h, \quad i = 1, \dots, f \quad (5)$$

Des propositions similaires étaient à l'époque avancées par Wilson et Ishiwara ²⁴, mais l'affaire était loin d'être aussi simple. Il fallait encore savoir sur quel contour il convenait d'intégrer ²⁵ et par ailleurs il n'était pas sûr que les f conditions étaient *toutes* réellement pertinentes. C'est ce que Sommerfeld apprit à ses dépens en essayant de généraliser les orbites de Bohr à des ellipses dans l'espoir d'expliquer la structure fine du spectre de l'hydrogène. Dès 1891 on savait, grâce aux observations de Michelson ²⁶, que le spectre de Balmer n'était pas constitué de lignes simples, mais de doublets ²⁷. Sommerfeld espérait arriver à expliquer cette "structure fine" de la série de Balmer en termes de transitions entre des états stationnaires supplémentaires. En travaillant avec deux conditions pour l'angle φ et le rayon r et en introduisant deux nombres quantiques ²⁸ k et n' :

$$\oint p_\varphi d\varphi = kh, \quad \oint p_r dr = n'h,$$

Sommerfeld obtenait pour les valeurs de l'énergie:

quantique: il ne s'agissait plus de dériver l'existence du quantum d'action h d'une physique classique mais de prendre acte de sa fondamentale importance et de repenser en conséquence les principes mécaniques et électrodynamiques de la physique. C'est exactement ce qui fit également Bohr.

²⁴ W. Wilson, The quantum theory of radiation and line spectra, *Philosophical Magazine*, vol. 29 (1915), 795-802 ; J. Ishiwara, Die universelle Bedeutung des Wirkungsquantums, *Tokyo Sugaku Buturiggakawi Kizi*, vol. 8 (1915), 106-116. Les deux démarches se proposaient de parvenir à un traitement unifié de la quantification du résonateur de Planck et de l'atome de Bohr. Pour plus d'informations voir M. Jammer, *op. cit.*, p.91-93.

²⁵ La question revêtait toute son importance surtout dans le cas de trajectoires non-fermées, ainsi les orbites paraboliques et hyperboliques du problème de Kepler. Le cas des orbites circulaires ou elliptiques de ce problème, ainsi que le cas de l'oscillateur harmonique présentaient une évidente périodicité qui fournissait la réponse.

²⁶ A. A. Michelson, On the application of interference-methods to spectroscopic measurements, *Philosophical Magazine*, vol. 31 (1891), 338-346, aussi vol. 34 (1892), 280-299.

²⁷ Il est à ce propos remarquable que la structure en doublet du spectre n'ait pas empêché l'acceptation des conclusions de Bohr: techniquement parlant, le modèle de Bohr était falsifié par cette "structure fine" du spectre. Ce n'est cependant pas la première fois où une découverte était acceptée alors qu'elle était, platement, réfutée par les données expérimentales: l'histoire et la philosophie des sciences en ont pris toute la mesure dans leurs critiques de la philosophie de la réfutation prônée par Popper.

²⁸ Le terme de "nombre quantique" provient de fait de Sommerfeld: dans son article fondateur Bohr ne faisait encore référence qu'à des "entiers".

$$W = -\frac{2\pi^2 e^4 m}{h^2} \frac{1}{(k+n')^2}.$$

Comme on le voit par comparaison avec (2), Sommerfeld n'obtenait rien de plus que ce qui était déjà prédit avec les orbites circulaires de Bohr. Bien sûr, ses orbites étaient plus générales que celles de Bohr (elles décrivaient des ellipses avec comme rapport du petit au grand demi-axes $\frac{b}{a} = \frac{k}{k+n'}$), mais leurs énergies étaient dégénérées: elles ne dépendaient que de la somme des nombres quantiques $k+n'$: Nullement découragé par ce résultat, Sommerfeld passait à un traitement dans les trois dimensions de l'espace, avec une quantification du plan des orbites, en imposant (dans les coordonnées polaires) les conditions de quantification:

$$\oint p_\varphi d\varphi = n_1 h, \quad \oint p_r dr = n' h, \quad \oint p_\theta d\theta = n_2 h,$$

mais il n'obtenait, encore une fois, que les mêmes énergies que Bohr, avec encore une plus grande dégénérescence.

Ce n'est que quand Sommerfeld décida de traiter le problème en tenant compte de la relativité qu'il réussit à lever la dégénérescence des énergies avec, comme expression pour celles-ci, à l'ordre carré de la constante de la structure fine $\alpha \equiv \frac{2\pi e^2}{hc}$,

$$W = \frac{-2\pi^2 e^4 m}{h^2} \left[\frac{1}{(k+n')^2} + \frac{\alpha^2}{(k+n')^4} \left(\frac{n}{k} - \frac{3}{4} \right) \right].$$

Le traitement relativiste de Sommerfeld apportait une réponse remarquable au problème de la structure fine. Les errements de sa démarche illustraient cependant que l'on ignorait encore ce que devaient être précisément les règles de quantification: la prescription (5) ne devait manifestement pas être toujours appliquée telle quelle, des conditions supplémentaires pouvaient intervenir. Deux développements allaient apporter des réponses décisives: ils convergèrent rapidement vers un aperçu unique aux assises formelles bien précises.

Le premier développement interrogeait la signification des conditions de quantification. On allait comprendre que la forme de ces conditions n'était pas arbitraire et renvoyait à un principe plus profond. C'était, suite aux travaux pionniers de Boltzmann, Clausius, Helmholtz et Hertz, et l'apport décisif, au XXe siècle de Rayleigh et surtout d'Ehrenfest, la reconnaissance du "principe adiabatique"²⁹. Les origines de ce principe remontent à l'étude des liens entre le second principe de la thermodynamique et les lois de la mécanique³⁰. Boltzmann considérait dans ce contexte le problème de savoir comment, pour un système obéissant au principe de moindre action et suivant une trajectoire périodique de période $\tau = 1/\nu$, une variation de son énergie cinétique dE se répercutait sur les détails de son mouvement. Il identifiait ainsi, pour la condition $dE = 0$, un

²⁹ Voir Max Jammer, *op. cit.*, p. 97-101.

³⁰ L. Boltzmann, Ueber die mechanische Bedeutung der zweiten Hauptsatzes der Wärmetheorie, *Wiener Berichte*, vol. 53 (1866), 195-220 ; R. Clausius, Ueber die Zurückführung des zweiten Hauptsatzes der mechanischen Wärmetheorie auf allgemeine mechanistische Principien, *Poggendorf's Annalen der Physik*, vol. 142 (1871) 433-461.

"invariant adiabatique" donné par le rapport $\frac{\bar{E}_{cin}}{\nu}$. Ce cours d'idées allait culminer, un demi-siècle plus tard, avec Paul Ehrenfest qui, en définissant le cadre général des transformations "adiabatiques", permettait de saisir la signification des conditions de quantification de Bohr-Sommerfeld. L'année même du modèle de Bohr, Ehrenfest, ayant pris la succession de Lorentz à Leyde, expliquait que, pour un système décrit par des coordonnées généralisées q_1, q_2, \dots, q_f dépendantes d'un certain nombre de paramètres a_1, a_2, \dots qui peuvent varier (infiniment) lentement, on pouvait considérer des transformations "adiabatiques" qui relient un mouvement paramétrisé par les valeurs a_1, a_2, \dots à un autre paramétrisé par a'_1, a'_2, \dots . Ehrenfest établissait alors que, pour un mouvement "permis" (stationnaire au sens de Bohr), caractérisé par des a_1, a_2, \dots les seuls autres mouvements permis étaient liés au mouvement initial par des transformations adiabatiques³¹. Avec son principe adiabatique, Ehrenfest faisait d'une observation deux coups: il justifiait la possibilité d'imposer des conditions de quantification à des situations classiques caractérisées par des paramètres variant lentement dans le temps, mais il indiquait aussi (et surtout) la voie vers la quantification de systèmes arbitraires pourvu que leurs mouvements puissent être liés, adiabatement, à des mouvements de systèmes aux conditions de quantification connues. De fait, les intégrales de Bohr-Sommerfeld (5), identifiées comme des invariants adiabatiques³², expliquaient le sens des conditions de quantification.

Il fallut encore une autre avancée pour éclairer d'avantage le sens théorique des procédures de quantification et pour les rendre applicables plus largement. La solution allait passer par un savoir dont les physiciens jusque là, n'étaient pas familiers.

6 Au-delà de Bohr: systèmes multiples périodiques, mécanique céleste et atomes

L'autre front sur lequel s'est joué le progrès des idées initiées par Bohr concernait la question de l'expression formelle des intégrales (5). Les démarches infructueuses de Sommerfeld indiquaient, comme on l'a vu, que le nombre des conditions de quantification pouvait être inférieur au nombre de degrés de liberté. Par ailleurs, il restait aussi la question des contours sur lesquels il fallait calculer ces intégrales, question qui renvoyait à celle, plus délicate et profonde, du choix des coordonnées dans lesquelles il fallait imposer ces conditions. Les réponses furent obtenues dans le cadre d'un approfondissement de la question en termes de la mécanique analytique de Lagrange et de Hamilton. Les physiciens de l'époque n'en étaient pas familiers: l'étude des techniques avancées de la mécanique analytique était alors plus l'apanage des astronomes et

³¹ P. Ehrenfest, Adiabatische Invarianten und Quantentheorie, *Annalen der Physik*, vol. 51 (1916), 327-352 ; aussi *Collected Scientific Papers*, M. J. Klein (ed.), North-Holland, 1959, p 378-399.

³² Adiabatische Invarianten und Quantentheorie, *op. cit.*, p. 338. En particulier on constate facilement que la quantification initiale du moment cinétique par Bohr est celle d'un invariant adiabatique puisque

$$\oint p_\varphi d\varphi = 2\pi m v r = 2 \frac{\bar{E}_{cin}}{\nu}.$$

des mathématiciens³³. Ces techniques s'avèrent pour tant cruciales pour parvenir à une compréhension approfondie des principes de quantification initiés par Bohr et généralisés par Sommerfeld. L'observation essentielle était le rôle joué par une classe distinguée de systèmes exactement intégrables, ceux pour lesquels l'équation de "Hamilton-Jacobi" pouvait être résolue par séparation. L'histoire commence au XIXe siècle avec Carl Jacobi et son étude du problème de Kepler: il montra que l'équation à laquelle il associe aujourd'hui son nom pouvait être dans ce cas "séparée"³⁴. L'étude des conditions assurant l'existence de telles coordonnées séparatrices et de leur unicité avait depuis occupé nombre des travaux de mathématique et de mécanique rationnelle. On allait montrer ainsi que les systèmes dont la dynamique pouvait être résolue par séparation de variables étaient "multiplement périodiques": la réalité de leur mouvement (rendue explicite dans les coordonnées appropriées) était celle d'une superposition de mouvements périodiques en analogie avec les figures de Lissajous³⁵. Les coordonnées séparatrices permettaient de définir à leur tour un nouveau jeu de coordonnées, connues, depuis des décennies, en astronomie, mais dont l'utilité allait maintenant se révéler aussi aux physiciens de l'atome, les coordonnées *action-angle*. Permettant, en mécanique céleste, un calcul aisé des périodes de révolution, les coordonnées action-angle allaient s'avérer aussi de première importance pour la théorie de la quantification: les travaux de Paul Epstein et de Karl Schwarzschild faisaient comprendre que les intégrales de Sommerfeld (5), calculées sur une période du mouvement sous-jacent, correspondaient précisément aux valeurs (conservées) des variables d'action associées³⁶: dans les variables action-angle l'Hamiltonien du système ne dépend pas des variables d'angle (celles-ci sont toutes cycliques), mais que des variables d'action dont la quantification est, par conservation, préservée dans le temps. La théorie des systèmes multiplement périodiques permettait aussi de répondre à la question du nombre de conditions de quantification que l'on devait imposer: tout dépendait de la possible commensurabilité des fréquences des mouvements périodiques sous-jacents: en cas des périodes commensurables, il y avait dégénéres-

cence et le nombre de variables d'action indépendantes était alors inférieur au nombre des degrés de liberté.

L'apport des techniques de la mécanique céleste et en particulier du formalisme des variables action-angle fut déterminant: l'analogie de l'atome comme un micro-système planétaire allait être plus qu'une métaphore: elle allait permettre de donner un cadre précis à la quantification de systèmes plus généraux que l'atome d'hydrogène. Les résultats de Schwarzschild et Epstein furent rapidement généralisés par Bohr, Born etc. en un formalisme aux règles sûres³⁷: les travaux, qui, sur une dizaine d'années, séparent le modèle atomique de Bohr de la mécanique matricielle de Heisenberg allaient en être entièrement tributaires. Face à une situation atomique, le physicien quantique l'approximait (au sens de la théorie des perturbations) par un système multiplement périodique qui lui permettait de poser la quantification des variables d'action associées. Il déduisait l'information sur les fréquences des raies spectrales et leurs intensités (relatives) en étudiant le développement en série multiple de Fourier reflétant les périodicités sous-jacentes: pour toute grandeur physique O d'un tel système, son évolution dans le temps t est donnée par l'expression:

$$O(t) = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_g = -\infty}^{\infty} O_{n_1, n_2, \dots, n_g}(J_1, J_2, \dots, J_g) \cdot \exp 2\pi i (\nu_1 n_1 + \nu_2 n_2 + \dots + \nu_g n_g) t. \quad (6)$$

Dans la formule ci-dessus le nombre de couples de variables action-angle, g , n'est pas nécessairement, on le sait déjà, le nombre de degrés de liberté f du système: il peut y avoir dégénérescence, auquel cas $g < f$: c'est ce qui se passe dans le problème de Kepler traité par Sommerfeld. Les coefficients de Fourier O_{n_1, n_2, \dots, n_g} , fonctions des variables quantifiées d'action $J_1 = \tau_1 h$, $J_2 = \tau_2 h$, ..., $J_g = \tau_g h$, paramétrant les orbites stationnaires, permettent de déduire les intensités des raies alors que l'information sur leurs fréquences exige de faire usage du principe de correspondance³⁸. Ce formalisme, directement issu de la généralisation du modèle de Bohr et que nous dirions aujourd'hui (au mieux) "semi-classique", allait faire l'affaire pendant une dizaine d'années: les historiens de la physique le taxent de "vieille théorie quantique" pour souligner son caractère provisoire avant que ne fut établie la mécanique quantique. Son intérêt historique, malgré sa nature éphémère, est considérable: Heisenberg s'appuya directement sur son contenu formel pour poser les bases de la mécanique matricielle (première forme de

³³ Tout cela a à faire avec l'émergence à cette époque d'une nouvelle figure, celle du physicien théoricien, conquérant son autonomie par rapport aux préoccupations expérimentales de ses collègues, et prenant possession, au nom de sa démarche propre, de ce qui était encore dévolu à la physique mathématique, aux mathématiques, et à l'astronomie. Voir à ce sujet l'ouvrage incontournable de Christa Jungnickel and Russel McCormach, *Intellectual Mastery of Nature: Theoretical Physics from Ohm to Einstein*, vol. I : *The Torch of Mathematics, 1800-1870*, University of Chicago Press, 1990.

³⁴ C. G. Jacobi, *Vorlesungen über Dynamik*, Reimer, 1866, pp. 183-198. Pour un traitement moderne, voir par exemple H. Goldstein, *Classical mechanics*, Addison-Wesley, 1950, ou, pour plus de détails et un traitement plus mathématique, H. Rund, *The Hamilton-Jacobi theory in the calculus of variations*, Van Nostrand, 1966.

³⁵ O. Staude, Ueber eine Gattung doppelt reell periodischer Funktionen zweier Veränderlicher, *Mathematische Annalen*, vol. 29 (1887), 468-485; P. Stäckel, Ueber die Integration der Hamilton-Jacobischen Differentialgleichung mittels der Separation der Variablen, *Mathematische Annalen*, vol. 42 (1893), 545-563, et références y contenues. Voir aussi M. Jammer, *op. cit.*, p. 102.

³⁶ K. Schwarzschild, Zur Quantenhypothese, *Berliner Berichte*, 1916, 548-568 ; P. S. Epstein, Zur Theorie des Starkeffektes, *Annalen der Physik*, vol. 50 (1916), 489-520 ; Zur Quantentheorie, *Annalen der Physik*, vol. 51 (1916), 168-188.

³⁷ N. Bohr, On the application of the Quantum Theory to atomic structure, *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* (supp.), 1924 ; M. Born, *Vorlesungen über Atommechanik*, Berlin: Springer, 1925.

³⁸ Le principe de correspondance permettait de relier, dans l'expression (6), l'exposant de l'exponentielle fait d'une somme linéaire d'harmoniques des fréquences fondamentales $\nu_j = \partial H / \partial J_j$ aux fréquences de transition quantiques, $\nu(n; m) = (E(n) - E(m)) / h$ entre deux niveaux stationnaires d'énergie $E(n)$, $E(m)$; pour plus de détails, voir Jan Lacki, From matrices to Hilbert spaces: the quest of the final formalism, in *The Discovery of Quantum Mechanics*, H.-Ch. Dehne, G. Drews, H. Mais, H. Rechenberg (éds), Hamburg : proceedings DESY, 2000, p. 41-92 ; Early Axiomatizations of Quantum Mechanics : Jordan, von Neumann and the continuation of Hilbert's program, *Archive for the History of Exact Sciences*, vol. 54 (2000), p. 279-318 ; Observability, Anschaulichkeit and Abstraction. A journey into Werner Heisenberg's science and philosophy, in *100 Years Werner Heisenberg - Works and Impact*, A. von Humboldt Foundation, numéro spécial de *Fortschritte der Physik*, Luest, D. et al. (éds), vol. 50 (2002), No 5-7, p. 440-458.

la mécanique quantique). La "vieille théorie quantique" fut ainsi une étape essentielle sur le chemin de la formulation de la mécanique quantique: pour comprendre pourquoi, il suffit de se pencher sur la structure des termes de la série (6): les coefficients de Fourier O_{n_1, n_2, \dots, n_g} renvoient à deux jeux d'entiers, le premier donnant les valeurs des variables d'action de l'orbite stationnaire sous examen, $J_i = \tau_i h$, le second (les n_j) indiquant l'ordre harmonique (multiple) du terme considéré. On le voit, ces coefficients de Fourier peuvent être rassemblés en un tableau de nombres: après un changement adéquat d'indices de sommation les deux jeux d'entiers peuvent être vus (lignes et colonnes) comme paramétrant des paires d'états stationnaires discrets, plus précisément comme référant aux processus de transition

entre de tels états ³⁹. Ce sont, de fait, les tableaux des nombres dont Heisenberg, grand expert de la "vieille théorie quantique" fera, en été 1925, la base d'un nouveau formalisme, celui d'une mécanique matricielle. Quelques mois plus tard Schrödinger proposait sa mécanique ondulatoire; à peine une année plus tard la synthèse de la mécanique matricielle et de la mécanique ondulatoire débouchait sur la "théorie des transformations" de Jordan et Dirac dont Johann (bientôt John) von Neumann allait préciser le cadre mathématique (la théorie de l'espace de Hilbert) ⁴⁰. "Notre" mécanique quantique était née.

³⁹ Il faut à ce stade faire usage du principe de correspondance, voir les références de la note précédente.

⁴⁰ Voir les références citées dans les notes plus haut.