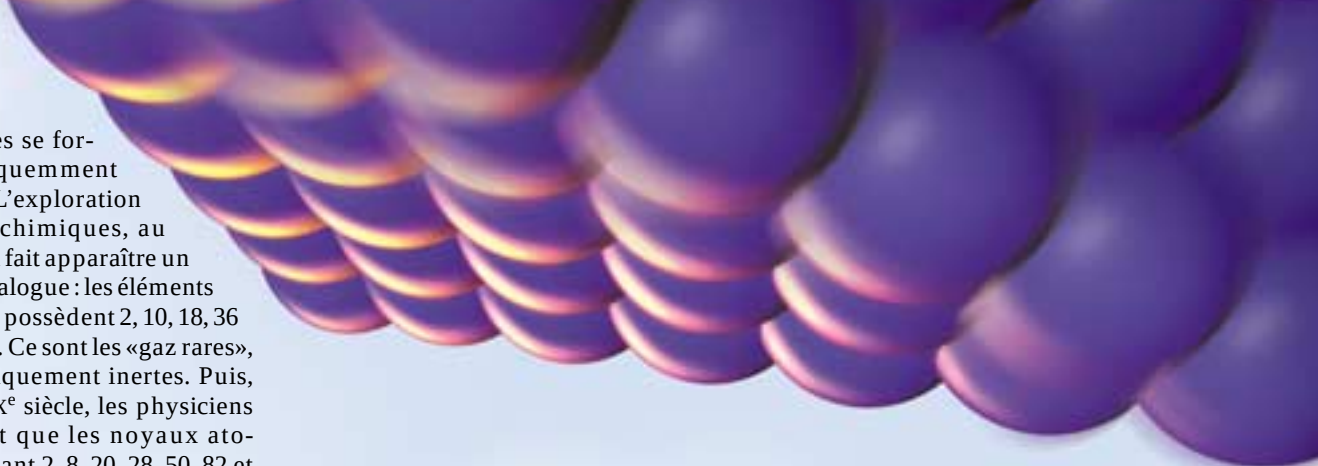
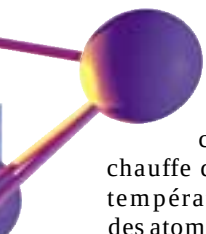




certaines tailles se forment plus fréquemment que d'autres. L'exploration des éléments chimiques, au siècle dernier, a fait apparaître un phénomène analogue : les éléments les plus stables possèdent 2, 10, 18, 36 ou 54 électrons. Ce sont les «gaz rares», qui sont chimiquement inertes. Puis, au cours du XX^e siècle, les physiciens ont découvert que les noyaux atomiques contenant 2, 8, 20, 28, 50, 82 et 126 protons ou neutrons sont également exceptionnellement stables. Pour cette raison, ces noyaux sont dits «magiques». Le noyau du plomb, qui contient 82 protons, est «magiquement stable», et la forme de cet élément contenant 126 neutrons est «doublement magique».

Stabilité magique



Les agrégats métalliques peuvent être également magiques. En 1984, des physiciens de l'Université de Berkeley ont étudié des agrégats formés à partir de sodium métallique chauffé. Ils ont observé que les agrégats à 8, 20, 40 ou 58 atomes sont beaucoup plus nombreux que les autres. Cette abondance est due à leur exceptionnelle stabilité.

Aujourd'hui les physiciens savent que, quand on chauffe des agrégats instables à une température suffisante, ils perdent des atomes et se transforment en agrégats plus petits et plus stables. Pour les agrégats stables de sodium chaud, la séquence des nombres magiques continue avec 92, 138, 198, 344, 442, 554... Les agrégats de sodium (et de plusieurs autres métaux) contenant ce nombre d'atomes demeurent stables même lorsqu'ils sont chauffés jusqu'à devenir des gouttelettes liquides.

Pourquoi ces nombres ? Parce que les électrons de liaison ne peuvent avoir que certaines énergies.

Dans les atomes isolés, les électrons surnuméraires par rapport au nombre d'électrons des gaz rares sont faiblement liés et

s'éloignent facilement de l'atome. Ces électrons «de valence» sont responsables des différentes propriétés chimiques des éléments.

Dans un agrégat métallique (ou dans un morceau de métal plus gros) les électrons de valence ne restent pas attachés à leur atome d'origine, mais se déplacent librement entre les atomes : ils sont délocalisés. Néanmoins, ils demeurent à l'intérieur ou à proximité de l'agrégat, parce qu'ils sont attirés par les charges devenues positives des atomes qu'ils quittent (sans les électrons de valence, les charges positives du noyau ne sont plus équilibrées par un nombre égal de charges négatives, et l'atome, précédemment neutre, devient un ion positif).

Pour comprendre pourquoi un agrégat particulier est stable, les physiciens devraient calculer la configuration détaillée de tous les ions internes et de tous les électrons de valence. Le calcul de cette configuration est difficile, mais on obtient de bons résultats en modélisant un agrégat métallique par une «gelée» homogène, chargée positivement et capable d'attirer les électrons de valence.

Les énergies des électrons de valence sont quantifiées, c'est-à-dire que leurs énergies ont des valeurs déterminées, jamais des valeurs intermédiaires. En outre, dans un agrégat métallique tout comme dans un atome, les énergies accessibles ne sont pas espacées régulièrement, mais groupées en paquets de niveaux proches, séparés par de grands espaces. Pour des raisons historiques, ces paquets de niveaux d'énergie sont nommés couches électroniques, bien que les électrons ne soient pas phy-

siquement dans des couches. Le nombre d'électrons que peut contenir chaque couche est limité et, lorsqu'une couche est pleine, l'atome ne réagit pas avec les autres atomes. Les atomes dont les couches sont entièrement remplies sont ainsi particulièrement stables.

Dans les agrégats métalliques, les nombres magiques correspondent au nombre d'électrons de valence qui remplissent complètement une ou plusieurs couches et rendent ces agrégats stables (le même phénomène préside à la stabilité des noyaux atomiques : lorsque les protons et les neutrons remplissent complètement une couche, le noyau est stable).

Les agrégats métalliques les plus stables sont quasi sphériques ; les autres sont étirés ou aplatis, comme des crêpes ou des ballons de rugby, voire des poires, des citrons, des diamants ; parfois même, ils ne présentent aucune symétrie. Dans tous les cas, la forme est celle pour laquelle l'énergie totale de l'agrégat est minimale. Comme le même phénomène de déformation se retrouve à propos des noyaux atomiques, les physiciens des agrégats ont repris certains outils théoriques utilisés en physique nucléaire.

La mécanique quantique décrit parfaitement les couches électroniques des agrégats et les nombres magiques qui leur correspondent. Cette théorie est peu intuitive, mais on peut comprendre l'existence des nombres magiques en se fondant uniquement sur les concepts classiques, qui s'appliquent aux objets macroscopiques.

On doit alors utiliser la théorie des orbites périodiques, mise au point au début des années 1970 pour établir une passerelle entre la mécanique quantique et la mécanique classique. À l'aide de cette théorie, on détermine les énergies des principales couches dans un système contenant des électrons ou d'autres petites particules.



1. LORSQUE DU MÉTAL EST VAPORISÉ dans une longue tuyère où règne le vide, les agrégats métalliques créés peuvent être de petites molécules avec des liaisons rigides, de gros agrégats d'atomes qui s'empilent en polyèdres réguliers, ou bien des «gouttes liquides». Au cours d'expériences différentes, on obtient ces différentes variétés en abondance.

Supercouches

Comment appliquer cette théorie aux agrégats ? Un gros agrégat métallique peut être considéré comme une sphère creuse contenant des électrons de valence qui se déplacent à vitesse constante le long de lignes droites. Ces électrons rebondissent sur la surface interne de la sphère avec un angle de réflexion égal à l'angle d'incidence, à la façon d'ondes lumineuses réfléchies par un miroir. Ce modèle simple suffit, parce que les électrons de valence se déplacent librement à l'intérieur de l'agrégat sans pouvoir s'en échapper.

Les particules à l'intérieur d'une cavité sphérique ont des trajectoires périodiques : elles vont et viennent le long d'un diamètre ou se déplacent selon des polygones réguliers. En tenant uniquement compte des orbites périodiques les plus courtes et les plus fréquentes, les physiciens calculent une valeur approchée de la répartition des niveaux d'énergie permis. Les trois orbites les plus courtes sont les diamètres, les triangles équilatéraux et les carrés, mais, pour des raisons géométriques, les diamètres sont assez rares.

En n'utilisant que des trajectoires triangulaires ou carrées, on calcule une répartition des niveaux d'énergie que l'on peut qualifier, en un sens, de périodique : en fonction de l'énergie, les niveaux d'énergie permis sont régulièrement espacés. Cependant, la périodicité n'a pas une valeur unique : deux périodes coexistent qui correspondent aux deux orbites dominantes (triangle et carré). De même que deux ondes sonores de fréquences proches interfèrent et produisent des battements de fréquence inférieure, les deux

ensembles de couches interfèrent pour produire des regroupements des niveaux d'énergie, nommés supercouches (voir la figure 2).

En principe, les supercouches devraient également exister dans les noyaux atomiques, mais on ne les y observe pas, car les noyaux ne sont jamais assez gros : il faut 800 à 1 000 particules pour produire la première supercouche d'énergie, alors que le plus gros noyau jamais créé ne contient pas plus de 200 neutrons et de 120 protons. En 1991, des physiciens de l'Institut Niels Bohr de Copenhague et de l'Institut Max Planck de Stuttgart ont découvert des supercouches dans des agrégats chauds de sodium. Peu après, des chercheurs du Laboratoire Aimé Cotton, à Orsay, ont détecté des supercouches dans des agrégats de lithium, tandis que des physiciens de l'Université de Lyon-I en ont trouvé dans des agrégats de gallium.

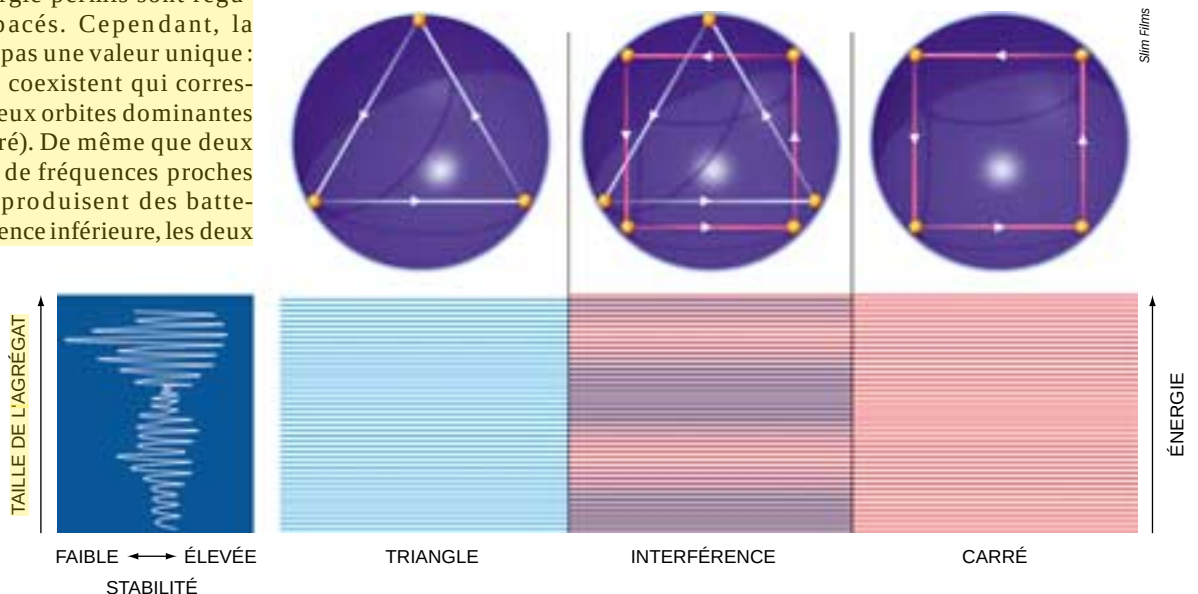
La théorie des orbites périodiques prévoit que la racine cubique des nombres magiques (approximativement, le rayon de l'agrégat) croît d'une même quantité d'une couche à la suivante. Effectivement, quand on représente la racine cubique des nombres magiques trouvés pour plusieurs agrégats métalliques chauds en fonction du nombre de couches, on obtient une

droite dont la pente est égale à 0,61 (voir la figure 3). Ce résultat expérimental est en accord à un pour cent près avec le calcul théorique effectué pour la cavité sphérique (0,603). Le calcul informatique qui utilise le modèle de la gelée et les règles de la mécanique quantique prédit exactement la même pente (pour les agrégats comprenant plus de quelques milliers d'atomes, le temps de calcul informatique est toutefois trop long).

Polyèdres parfaits

Platon pensait que les constituants ultimes de la matière avaient la forme des cinq polyèdres réguliers (cube, tétraèdre, octaèdre, icosaèdre et dodécaèdre). Pour les agrégats métalliques froids, il n'était pas très loin de la réalité : lorsque de nombreux atomes métalliques (plus de 1 000) s'assemblent lentement, à des températures relativement basses, ils s'empilent de manière compacte, comme des oranges sur un étalage, et forment des solides de forme régulière. Les physiciens déduisent la configuration de ces agrégats froids en observant comment leur stabilité dépend de leur taille.

Cette relation entre la forme et la stabilité est apparue en 1991, lorsque des physiciens de Stuttgart ont produit des atomes de sodium qu'ils



2. DANS LA THÉORIE DES ORBITES PÉRIODIQUES, on considère que les agrégats métalliques forment des sphères creuses contenant des électrons qui rebondissent sur les parois (en haut). À l'aide de cette théorie, les physiciens calculent les niveaux d'énergie approximatifs des électrons (barres horizontales sur les trois diagrammes en bas, à droite). Les deux trajectoires périodiques principales (triangles et carrés) interfèrent pour former des

ensembles de couches nommées supercouches (bandes alternativement claires et sombres dans le diagramme central). À partir de la figure d'interférence calculée pour une taille d'agrégat donnée, on calcule la stabilité de l'agrégat. En répétant ce calcul en fonction de la taille, on obtient le diagramme de gauche, dans lequel le regroupement des niveaux d'énergie apparaît. Deux supercouches sont ainsi visibles.