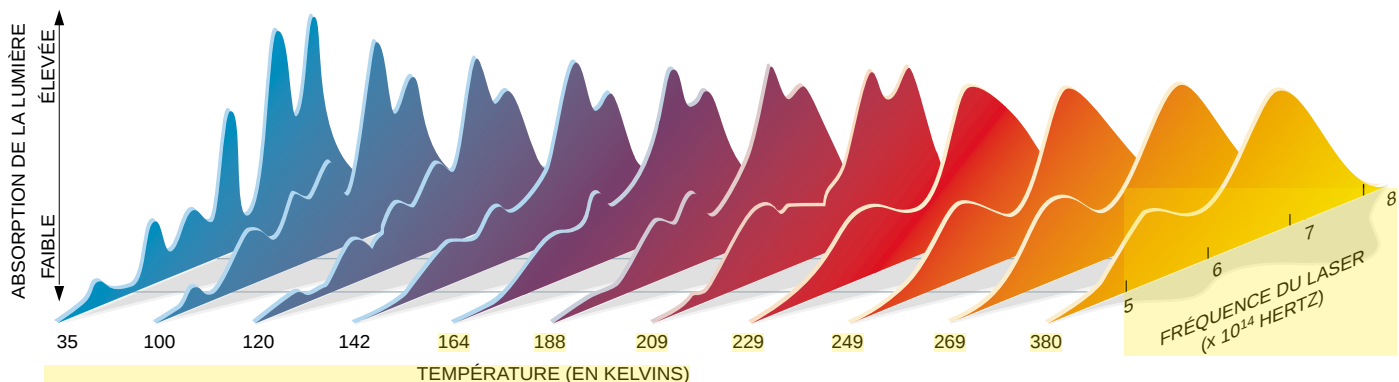




Arthur Christie, d'après M. Schmidt et H. Haberland

4. L'ABSORPTION DE LA LUMIÈRE LASER par les agrégats de sodium révèle que leur structure dépend de leur température de formation. À basse température, l'absorption varie beaucoup avec la fréquence (*en bleu*), une caractéristique de l'absorption par des molé-

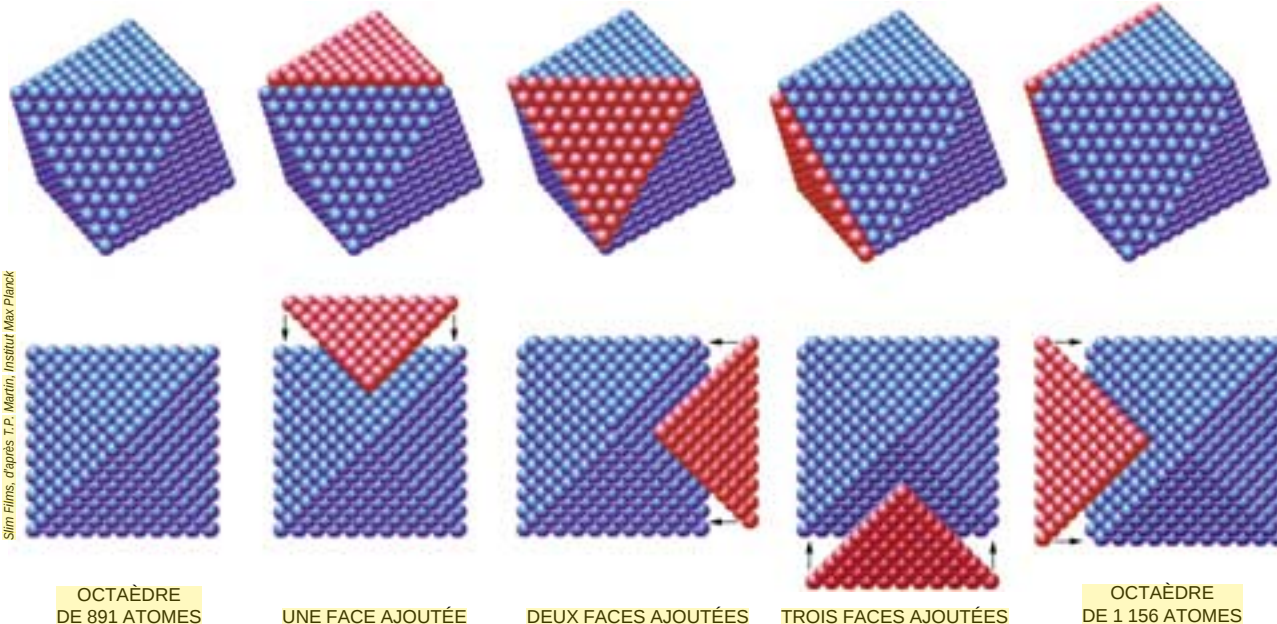
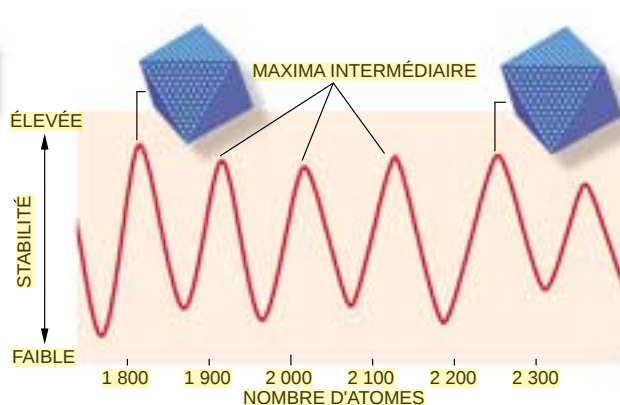
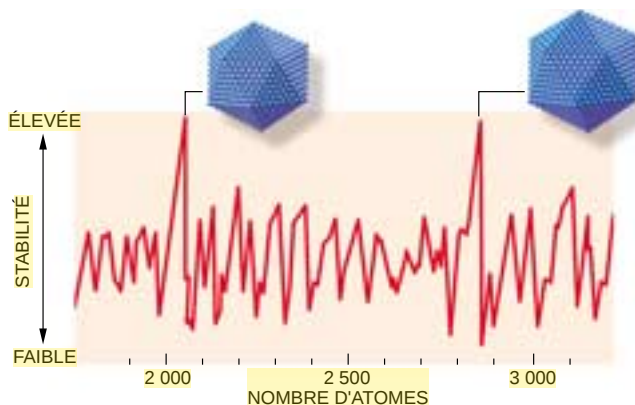
cules. À mesure que la température augmente, le spectre devient plus régulier, avec seulement deux gros renflements (*en orange*) : c'est l'indication que les agrégats sont «liquides», dépourvus de structure interne.

L'assemblage des atomes dans les agrégats froids

Les physiciens expliquent la stabilité exceptionnelle des agrégats métalliques froids à l'aide de la géométrie. Les agrégats froids de sodium, par exemple, sont particulièrement stables lorsque les atomes se disposent sous la forme d'icosaèdres, des polyèdres à 20 faces (*à gauche*).

La stabilité d'agrégats froids d'atomes d'aluminium assemblés en minuscules octaèdres est plus difficile à expliquer. Elle est

importante lorsque les atomes forment des octaèdres réguliers (*à droite*), mais des maxima se produisent également pour des octaèdres irréguliers : on suppose que la stabilité est également accrue lorsque les atomes ne couvrent qu'une seule des faces d'un octaèdre (*parties colorées en rouge, ci-dessous*). Comme l'ajout d'une quatrième face conduirait à un octaèdre parfait, on s'attend à ne trouver que trois maxima intermédiaires de stabilité, ce qui est le cas.



Slim Films, d'après T.P. Martin, Institut Max Planck

Récemment, des physiciens de l'Université de Fribourg ont observé une transition de phase un peu différente, mais non sans rapport. Pour mieux contrôler la température de petits agrégats de sodium, ils les ont étudiés dans de l'hélium gazeux dont ils savaient ajuster la température avec précision. Dans ce mélange d'atomes d'hélium et d'agrégats de sodium, de nombreuses collisions se produisent. Toutefois, l'hélium étant chimiquement inerte, la structure des agrégats n'est pas modifiée, tout au moins à des températures modérées. L'hélium est donc un milieu où un équilibre thermodynamique s'établit.

Les physiciens ont étudié la manière dont les agrégats de sodium d'une taille donnée absorbent la lumière d'un faisceau laser : l'absorption de la lumière en fonction de la fréquence du laser – ce que l'on nomme le spectre d'absorption – renseigne sur l'état physique des particules éclairées. Ils ont observé que le spectre de molécules froides et solides diffère de celui que l'on obtient pour des gouttelettes chaudes et liquides. À une température inférieure à -173°C , le spectre comporte plusieurs pics étroits, ce qui est caractéristique d'une molécule rigide. Aux températures supérieures à 107°C , le spectre possède uniquement deux renflements, dont les maxima se trouvent à des fréquences prévues par la théorie de la «gelée» sans structure.

Pour les agrégats les plus petits, dont la structure interne est importante, on peut calculer rigoureusement, à l'aide de la mécanique quantique, le comportement de tous les électrons de chaque atome. Ces calculs révèlent la structure moléculaire de ces agrégats et expliquent de façon précise leur stabilité. Dans le cas des agrégats plus gros, contenant une

centaine d'atomes ou même davantage, de tels calculs sont excessivement longs, et les physiciens utilisent le modèle de la gelée. Pour les agrégats de plusieurs milliers d'atomes, les physiciens doivent renoncer à la mécanique quantique et employer la théorie simplifiée des orbites périodiques, à moins qu'ils ne s'en remettent à l'information indirecte que donnent les nombres magiques obtenus expérimentalement, à partir de la mesure de la proportion des agrégats produits suivant leur taille (les plus abondants étant les plus stables).

Depuis 1984, les physiciens ont parcouru un long chemin dans la compréhension et l'application des nombres magiques aux agrégats métalliques. Des agrégats icosaoédriques de sodium contenant jusqu'à 21 000 atomes ont été fabriqués. Pourtant, la structure cristalline du sodium solide n'est pas l'icosaèdre, car aucun matériau solide ne peut être construit en empilant des icosaèdres : de même que des tuiles pentagonales ne couvrent pas parfaitement un plan, sans vides ni chevauchements, les icosaèdres n'ont pas la symétrie qui permet de remplir entièrement l'espace. Pour cette raison, même les plus gros agrégats de sodium fabriqués à ce jour n'ont pas une organisation de leurs atomes semblable à celle que l'on trouve dans le sodium solide.

Si les physiciens ont obtenu une foule d'informations sur les agrégats métalliques et sur les nombres magiques qui assurent leur stabilité, ils ignorent toujours la réponse à cette question fondamentale : à quel moment et comment la transformation entre un agrégat et un solide massif se produit-elle ? Les agrégats métalliques constituent un étrange arrangement de la matière qui réserve certainement bien des surprises.

Matthias BRACK est professeur de physique théorique à l'Université de Ratisbonne, en Allemagne.

Pierre JOYES, *Les agrégats inorganiques élémentaires*, éditions de physique, 1990.

Sven BJØRNHOLM, *Clusters, Condensed Matter in Embryonic Form*, in *Contemporary Physics*, vol. 31, n° 5, pp. 309-324, septembre 1990.

M.L. COHEN et W.D. KNIGHT, *The Physics of Metal Clusters*, in *Physics Today*,

vol. 43, n° 12, pp. 42-50, décembre 1990.

Walt A. de HEER, *The Physics of Simple Metal Clusters : Experimental Aspects and Simple Models*, in *Reviews of Modern Physics*, vol. 65, n° 3, 1^{ère} partie, pp. 611-676, juillet 1993.

Matthias BRACK, *Self-Consistent Jellium Model and Semiclassical Approaches*, in *Reviews of Modern Physics*, vol. 65, n° 3, 1^{ère} partie, pp. 677-732, juillet 1993.

T.P. MARTIN, *Shells of Atoms*, in *Physics Reports*, vol. 273, n° 4, pp. 199-242, août 1996.