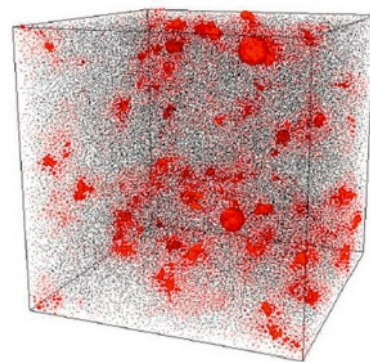


LA CHALEUR SPÉCIFIQUE DU VERRE

Le transport de la chaleur est l'une des propriétés élémentaires de la matière. De façon générale, il est contrôlé par la chaleur spécifique (aussi nommée « capacité thermique massique »). Une grande chaleur spécifique signifie qu'une grande quantité d'énergie peut être stockée au prix d'une faible augmentation relative de la température. Il s'agit d'une grandeur importante car directement reliée à la dissipation d'énergie dont les conséquences technologiques sont importantes, notamment pour la stabilité des qubits des ordinateurs quantiques. Depuis les travaux de Peter Debye et d'Albert Einstein, au début du xx^e siècle, nous possédons une théorie de la chaleur spécifique dans les cristaux périodiques. Elle est fondée sur la quantification des excitations élémentaires harmoniques du réseau cristallin et prédit, à basse température autour de 1 kelvin ($-272\text{ }^{\circ}\text{C}$), une dépendance cubique avec la température. Mais dans les verres, l'évolution est linéaire avec la température. Aux plus faibles températures, le verre possède donc une chaleur spécifique plus grande qu'un solide cristallin, suggérant l'existence dans le verre d'excitations distinctes,

encore mal comprises. Dans les années 1970, Phil Anderson et ses collègues ont proposé un modèle empirique qui attribue ce comportement à l'existence d'une famille de défauts localisés qu'ils nomment « systèmes à deux niveaux » et dont le comportement quantique expliquerait les observations. Des expériences réalisées par Miguel Ramos, de l'université de Madrid, et Frances Hellman, de l'université de Berkeley, sur des films amorphes ultrastables indiquent que la concentration de ces systèmes à deux niveaux est fortement diminuée pour des verres ultrastables. En 2020, Camille Scalliet, Ludovic Berthier et leurs collègues ont étayé ces résultats expérimentaux par des simulations numériques dans lesquelles ils ont identifié pour la première fois les systèmes à deux niveaux directement à l'échelle moléculaire (*en rouge sur la figure ci-contre*). De plus, en variant systématiquement la stabilité de leurs verres numériques, ils ont démontré une diminution drastique de la quantité de systèmes à deux niveaux pour des verres de plus en plus stables. L'ensemble de ces résultats suggère que la chaleur spécifique des verres quasi idéaux peut

devenir aussi faible que dans un cristal parfait. Par conséquent, la dissipation d'énergie dans ces matériaux est considérablement réduite. Cependant, de façon surprenante, les mesures de Miguel Ramos dans l'ambre géologique, dont on considère que la structure se stabilise au cours de millions d'années, indiquent que la dissipation d'énergie n'est pas sensiblement réduite par rapport à de l'ambre jeune. Ce résultat étonnant reste donc à comprendre, et l'ambre reste donc une énigme à résoudre.



la température de Kauzmann, et qu'ils sont donc très proches de la limite du verre idéal.

Depuis 2007, de nombreux travaux ont établi l'utilité de ces matériaux ultrastables pour plusieurs applications technologiques de grande ampleur. Ainsi les écrans des smartphones de la marque Samsung ont-ils intégré la technologie OLED (diode électroluminescente organique) dont une partie des constituants sont des verres synthétisés par dépôt de vapeur. En 2017, une équipe de l'université de Barcelone a montré comment la technique découverte par Mark Ediger augmente la luminosité et la durée de vie des écrans OLED de plus de 15%. Les films ultrastables sont aussi plus résistants aux dégradations dues à l'exposition à la lumière. Leurs performances accrues sont un indice fort que ces verres ont accédé à une bien meilleure configuration désordonnée.

DES VERRES ULTRASTABLES

Expérimentalement, il est encore difficile de trouver des preuves directes de la transition de phase vers le verre idéal, mais la synthèse de films amorphes ultrastables permet d'en obtenir des traces indirectes convaincantes. Ainsi, après un réchauffement instantané, ces films vitreux redeviennent liquides du fait d'une dynamique qui est en tout point similaire à celle de la fusion d'un solide cristallin en un liquide (comme la fusion de la

BIBLIOGRAPHIE

C. Scalliet et al., **Depletion of two-level systems in ultrastable computer-generated glasses**, *Physical Review Letters*, 2020.

G. Parisi et al., **Theory of simple glasses : exact solutions in infinite dimensions**, Cambridge University Press, 2020.

L. Berthier et al., **Configurational entropy of glass-forming liquids**, *Journal of Chemical Physics*, 2019.

A. Ninarello et al., **Models and algorithms for the next generation of glass transition studies**, *Physical Review X*, 2017.

L. Berthier et M. D. Ediger, **Facets of glass physics**, *Physics Today*, 2016.

S. F. Swallen et al., **Organic Glasses with exceptional thermodynamic and kinetic stability**, *Science*, 2007.

glace au-dessus de $0\text{ }^{\circ}\text{C}$). Cette analogie renforce encore l'idée que la phase vitreuse ultrastable constitue quasiment une phase amorphe de la matière à part entière, et ne se comporte pas simplement comme un liquide dont la dynamique serait très lente.

La simulation numérique représente un autre outil de choix pour étudier la transition vitreuse. Ce domaine a lui aussi connu des avancées importantes au cours des dernières années. Cette approche offre l'avantage de proposer des modèles simplifiés de la réalité, mais où chaque paramètre est parfaitement contrôlé. Surtout, la simulation numérique permet d'avoir une résolution physique à l'échelle atomique tout en étudiant aussi le comportement macroscopique de ces matériaux.

Jusqu'en 2016, les techniques de simulation pour reproduire la physique de la transition vitreuse faisaient face à un obstacle majeur. Les temps de calcul étaient si considérables que les vitesses de refroidissement accessibles en un temps de simulation raisonnable étaient environ cent millions de fois plus importantes que dans les expériences. Une telle différence de huit ordres de grandeur entre la préparation des verres simulés et les verres expérimentaux implique que la simulation produisait des verres bien moins stables que dans les expériences classiques, elles-mêmes bien loin du verre idéal...