LA PHYSIQUE QUANTIQUE À NOTRE ÉCHELLE

Roger Balian*

La mécanique quantique est née fortuitement, le 14 décembre 1900, d'une idée de Planck concernant la thermodynamique du rayonnement, problème considéré à l'époque comme l'un des derniers à résoudre pour parachever l'édifice de la physique. Il s'agissait d'un phénomène se manifestant clairement à l'échelle humaine, par exemple à travers la distribution en fréquences du rayonnement du Soleil et le fait que celui-ci nous envoie une lumière blanche. La théorie de Planck et Einstein a montré que le spectre lumineux émis par un corps chaud dépend crucialement de l'existence et de la valeur de la constante de Planck.

Cependant, durant une trentaine d'années, les développements considérables de la mécanique quantique se sont focalisés sur la physique atomique; ses progrès les plus en vue ont ensuite porté sur la physique moléculaire et la physique nucléaire. C'est pourquoi l'on a trop souvent tendance, encore aujourd'hui, à considérer qu'il s'agit d'une science ne concernant que l'échelle microscopique, c'est-à-dire des distances de l'ordre de la taille des atomes ou des noyaux. Ce

 $^{{}^*\} Service\ de\ Physique\ Th\'eorique,\ CEA\ Saclay,\ 91191\ Gif-Sur-Yvette\ Cedex.\ Membre\ de\ l'Acad\'emie\ des\ Sciences.$

préjugé est entretenu par le contenu des enseignements traditionnels, où la mécanique quantique apparaît dans le contexte de l'étude d'objets microscopiques ayant un petit nombre de constituants, tandis que les objets macroscopiques, à notre échelle, ne sont le plus souvent décrits en termes de leurs constituants élémentaires qu'à l'aide de la mécanique statistique classique. Une telle présentation est fallacieuse, car cette dernière ne rend compte que de certaines propriétés des gaz et des liquides. En réalité, comme nous allons le voir, la mécanique quantique est essentielle pour expliquer nombre de phénomènes macroscopiques, et la constante de Planck gouverne de façon cachée de nombreuses propriétés que nous pouvons quotidiennement observer.

1. La radioactivité

Parmi les phénomènes quantiques qui se manifestent à notre échelle, la radioactivité occupe une position singulière. Malgré la taille extraordinairement petite des noyaux atomiques (le milliardième de micron), nous savons facilement détecter, à l'aide de compteurs macroscopiques, le rayonnement émis par un seul noyau radioactif qui vient de se transmuter. Une telle observation est exceptionnelle à double titre.

D'une part, si nos sens nous permettent de percevoir presque directement un phénomène aussi microscopique que la transmutation d'un simple noyau, c'est parce que cette transformation s'accompagne d'une émission d'énergie considérable, de l'ordre d'un million de fois supérieure à l'énergie lumineuse émise par un atome thermiquement excité; les forces nucléaires mises en jeu ont, en effet, une intensité énorme comparée à celles des forces électromagnétiques qui régissent l'émission de la lumière. Cette disparité considérable conduisit d'ailleurs Marie Curie à se demander si la conservation de l'énergie ne devait pas être mise en question dans le phénomène de radioactivité. C'est grâce à la forte concentration de l'énergie

nucléaire qu'une quantité de chaleur de 1 kWh est libérée dans nos centrales à partir de 10 mg d'uranium, dans le Soleil à partir de 5 µg d'hydrogène, alors que le même effet nécessite la combustion de 100 g de pétrole; comme toute réaction chimique, ce dernier processus fait intervenir à l'échelle microscopique une énergie de nature électrique, beaucoup moins intense qu'une énergie nucléaire.

D'autre part, la radioactivité est le seul phénomène observable à notre échelle qui mette en évidence un aspect remarquable de la mécanique quantique, son caractère intrinsèquement probabiliste: un échantillon de matière radioactive donne naissance dans nos compteurs à des signaux aléatoires, émis successivement de manière imprévisible par tel ou tel des noyaux au moment de sa désintégration. Ce caractère probabiliste de la physique quantique est, pour tout autre phénomène, masqué à notre échelle par la loi des grands nombres, de même que le caractère discontinu de la matière (il faut beaucoup d'imagination pour concevoir qu'un millimètre cube d'air est constitué de 3·10¹⁶ molécules disposées au hasard). Pour la radioactivité, le hasard qui règne à l'échelle microscopique est perçu directement lors du comptage des particules émises.

2. QUELQUES ASPECTS FONDAMENTAUX DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE

Nous nous limiterons désormais aux phénomènes qui ne font pas intervenir les forces nucléaires, et laisserons de côté les effets de la pesanteur. Tous les corps qui nous entourent sont alors régis à l'échelle microscopique par les lois simples et unifiées suivantes. Leurs constituants élémentaires sont des électrons et des noyaux atomiques; ces constituants interagissent deux à deux par des forces électromagnétiques, principalement par la force de Coulomb proportionnelle à leurs charges, et ils obéissent aux principes de la mécanique quantique, dont nous allons rappeler plus loin quelques aspects qualitatifs.

Ces quelques lois permettent d'expliquer comment les électrons et noyaux s'organisent à l'échelle microscopique en atomes, en molécules électriquement neutres ou en ions chargés. Il est remarquable qu'elles suffisent aussi à fonder la théorie des matériaux macroscopiques, et qu'elles gouvernent sur le plan des principes les objets les plus complexes et même les organismes vivants. Cette conception réductionniste des objets macroscopiques s'est affirmée progressivement au cours du XX^e siècle. Certes, des propriétés nouvelles, totalement inattendues, imprévisibles a priori et souvent difficiles à expliquer a posteriori peuvent émerger à notre échelle en raison du très grand nombre de constituants élémentaires mis en jeu. Mais les lois fondamentales restent les mêmes pour tous les objets, quelle que soit leur taille.

Parmi ces lois, le fait que c'est la mécanique quantique et non la mécanique classique qui régit les structures et les comportements de tous les corps implique trois propriétés peu intuitives mais essentielles, la quantification, la délocalisation et l'indiscernabilité, que nous allons d'abord passer en revue et dont nous découvrirons ensuite les conséquences remarquables.

3. QUANTIFICATION

Planck avait découvert en 1900 que l'énergie d'un champ électromagnétique ne peut varier que par *quanta*, c'est-à-dire par valeurs discrètes et non continûment. Pour une onde de fréquence égale à v, cette seule variation possible d'énergie vaut hv, où $h=6,6\cdot 10^{-34}$ J s est la constante de Planck. Celle-ci est apparue ultérieurement comme une constante universelle et non comme une constante associée à la quantification des seules ondes électromagnétiques. En effet, alors que la mécanique classique autorise l'énergie d'un système à prendre n'importe quelle valeur supérieure au minimum du potentiel, la mécanique quantique, en accord avec l'expérience, implique que l'énergie de *tout* objet fini, comme une molécule constituée

d'électrons et de noyaux liés entre eux, ne peut prendre que certaines valeurs discrètes. Les énergies possibles sont déterminées uniquement par le nombre et la masse des constituants et leur expression fait intervenir la constante de Planck. Leur distribution a tendance à se densifier lorsque la taille du système augmente. Pour chacune d'entre elles, le système se trouve dans un certain état quantique caractérisé par la configuration des électrons et des noyaux. Ces états quantiques peuvent être dénombrés en rangeant les niveaux d'énergie par valeurs croissantes à partir de la plus basse.

La quantification des énergies et des états des atomes et des molécules s'observe directement grâce à l'étude de leur spectre d'émission ou d'absorption optique ou infrarouge : leur changement d'énergie ΔE par passage d'un état quantique à un autre s'accompagne de l'émission ou de l'absorption d'un quantum $hv = \Delta E$ d'énergie lumineuse ; l'observation de la fréquence v de ce rayonnement, bien définie, nous renseigne sur la différence d'énergie entre les deux états.

4. DÉLOCALISATION

Comme l'ont montré Louis de Broglie en 1923 et Erwin Schrödinger en 1926, toutes les particules élémentaires peuvent être représentées comme des ondes et sont donc délocalisées. Cet aspect de la mécanique quantique lui a valu aussi l'appellation de mécanique ondulatoire. Ainsi, tous les constituants élémentaires ont un double aspect de particules et d'ondes. En ce qui concerne le champ électromagnétique, cette dualité résulte de la quantification, qui permet d'interpréter le quantum d'énergie d'une onde de fréquence v comme une particule, le photon, dont hv est l'énergie cinétique, dont c est la vitesse, et dont hv/c est la quantité de mouvement. Symétriquement, les électrons et les noyaux, qui se propagent comme des particules, peuvent aussi présenter des comportements d'ondes. Par exemple, dans l'atome d'hydrogène, constitué d'un seul électron lié autour d'un proton (le noyau de cet atome), cet électron n'occupe pas une position

bien définie. Il se comporte, dans chacun de ses états quantiques possibles, comme une *onde stationnaire* concentrée dans une certaine région de l'espace autour du noyau. Il en est de même pour les électrons de tout atome ou de toute molécule, dont chacun se meut dans le potentiel électrique créé par les noyaux et les autres électrons (de même que l'électron de l'atome d'hydrogène se meut dans le potentiel coulombien du proton). C'est parce que les particules sont décrites par des ondes, d'extension finie, que, même dans l'atome d'hydrogène où il est seul, un électron se manifeste comme un nuage et non comme un objet ponctuel localisé.

5. Indiscernabilité

Enfin, lorsqu'un système physique comporte plusieurs particules identiques, *l'indiscernabilité* de celles-ci a, en mécanique quantique, des conséquences exprimées par le *principe de Pauli* (1925). Selon ce principe, il existe deux catégories de particules, les *fermions* et les *bosons*. Les fermions ont tendance à *s'exclure* mutuellement. C'est par exemple le cas des électrons, qui, même si l'on fait abstraction de leur répulsion coulombienne, s'évitent : il est interdit à deux électrons de se trouver au même point, ou encore de se trouver dans le même état quantique ou dans la même configuration. À l'inverse, les bosons, dont les photons ou les atomes d'hélium fournissent deux exemples, ont un comportement grégaire : ils tendent à *s'accumuler* dans le même état quantique. L'effet de l'indiscernabilité, de type répulsif pour les fermions, attractif pour les bosons, se superpose aux forces proprement dites entre particules.

Le formalisme mathématique de la mécanique quantique permet d'énoncer avec rigueur et dans un cadre unifié ces trois propriétés, quantification, délocalisation et indiscernabilité, d'en déduire numériquement les conséquences, et ainsi de vérifier expérimentalement la théorie avec une précision considérable dans de multiples circonstances. Nous nous bornerons ici à montrer qu'elles permettent

d'expliquer qualitativement un grand nombre de phénomènes macroscopiques, parfois inattendus.

6. Ordres de grandeur atomiques

Dans les atomes et les molécules, les électrons sont soumis à des effets antagonistes. D'une part, la force de Coulomb seule aurait tendance à précipiter ces électrons (chargés négativement) sur les noyaux (chargés positivement). Mais à l'inverse, le nuage formé par les électrons tend à s'étaler, en raison non seulement de leur répulsion coulombienne mutuelle, mais aussi de deux effets quantiques, leur caractère ondulatoire et le principe de Pauli. À température pas trop élevée, la structure d'un atome ou d'une molécule est déterminée par le fait que son énergie doit être minimale compte tenu de cette compétition. Il se réalise ainsi un équilibre où un tel objet microscopique a une taille et une énergie bien définies.

Sans qu'il soit nécessaire d'écrire les équations qui régissent cet équilibre, on peut trouver, par simple analyse dimensionnelle, l'ordre de grandeur de la taille des atomes. En effet, il est facile d'identifier les seules données ou constantes fondamentales mises en jeu dans le calcul : la charge électrique élémentaire $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ C qui caractérise les interactions mutuelles entre particules (avec la constante d'unités électrostatiques $\varepsilon_0 = 10^7/4\pi \ c^2 \ 8.85 \cdot 10^{-12} \ J^{-1} m^{-1} C^2$), la masse m =9,1·10⁻³¹ kg de l'électron qui caractérise sa dynamique, et la constante de Planck h qui intervient dans les effets quantiques tendant à étaler le nuage électronique. On ne peut former à partir de ces constantes qu'une longueur, le rayon de Bohr défini comme $\varepsilon_0 h^2 / \pi m e^2$ $0.5 \cdot 10^{-10}$ m = 0.5 Å. À un facteur numérique près, dont on s'attend à ce que le calcul fournisse une valeur ni très grande ni très petite, les tailles caractéristiques des atomes ou les distances entre noyaux dans les molécules sont donc de l'ordre de grandeur de l'angström, dixmillionième de millimètre, prévision de la microphysique en accord avec l'expérience.

De même, la seule énergie que l'on puisse former à l'aide des constantes fondamentales e, m et h régissant les structures atomiques est, à un facteur numérique près, l'énergie de liaison de l'atome d'hydrogène qui vaut $me^4/8\pi\epsilon_0h^2=2,2\cdot10^{-18}$ J. Une unité commode pour mesurer ces énergies apparaissant à l'échelle atomique est *l'électron-volt* (eV) qui vaut 1,6·10⁻¹⁹ J et qui représente l'augmentation d'énergie cinétique d'un électron accéléré par une force électromotrice de 1 V. Les énergies caractéristiques des atomes sont ainsi de l'ordre de grandeur de l'électron-volt. On vient de voir que l'énergie de liaison d'un électron par un proton pour former un atome d'hydrogène dans son niveau d'énergie le plus bas est de $2,2\cdot10^{-18}$ J = 13,6 eV. Dans une molécule, les niveaux d'énergie sont plus serrés parce que la masse des noyaux, plus grande que celle de l'électron, intervient aussi dans leur détermination : leurs écarts sont de l'ordre d'une petite fraction d'électron-volt.

Les tailles et les énergies des atomes ou des molécules sont évidemment trop faibles pour être directement observables à notre échelle. Mais, comme nous allons le montrer, leurs effets peuvent être amplifiés et rendus visibles grâce au nombre colossal d'atomes qui constituent les objets à notre échelle. Ainsi, une mole de matière, par exemple 18 g d'eau (${}^{1}\text{H}_{2}{}^{16}\text{O}$) ou 56 g de fer (${}^{56}\text{Fe}$), comprend un nombre de molécules égal au *nombre d'Avogadro N_A* = $6\cdot 10^{23}$ mol $^{-1}$.

7. Physique quantique et chimie

Un premier exemple d'intervention de la constante de Planck à notre échelle est fourni par la valeur des chaleurs de réactions chimiques. C'est sous forme de réaction chimique que se manifeste à nous une transformation de molécules. À ce niveau microscopique, il s'agit d'un changement de l'état quantique d'objets formés par des noyaux entourés de nuages électroniques, éléments qui se réarrangent différemment par transfert de noyaux et d'électrons d'une molécule à l'autre. Ce changement s'accompagne d'une variation d'énergie,

d'une valeur bien définie puisque l'on passe d'un état quantique à un autre, de l'ordre de l'électron-volt pour chaque transformation élémentaire microscopique. Le nombre de ces transformations étant grand comme le nombre d'Avogadro, nous pouvons observer la variation d'énergie correspondante sous l'aspect d'une chaleur de réaction absorbée ou dégagée, bien définie, et dont l'ordre de grandeur est de N_A électron-volts par mole, c'est-à-dire 10⁵ J mol⁻¹ ou encore 20 kilocalories par mole dans l'unité couramment utilisée en chimie. Ce chiffre, que nous venons d'estimer à partir de la valeur des constantes fondamentales e, m et h, est conforme à l'expérience courante. Ainsi, la chaleur de combustion de l'hydrogène est d'environ 60 kilocalories par mole, ce qui forme 18 g d'eau; ce chiffre est comparable à la chaleur de combustion du pétrole qui, en unités d'économistes, vaut par définition 1 tep = 11 000 kilowatt-heures pour une tonne (nous avons indiqué plus haut que 100 g de carburant dégageaient environ 1 kWh).

En fait, ce n'est pas seulement la notion de chaleur de réaction, mais la chimie tout entière qui doit ses diverses caractéristiques à la physique quantique. Ainsi, l'existence même d'espèces chimiques bien caractérisées, est comme nous allons le montrer, un effet de la quantification.

Considérons d'abord un atome. Chaque électron y est soumis au potentiel électrique créé par le noyau central et par le nuage environnant que constituent les autres électrons. Dans ce potentiel, l'électron considéré ne peut, comme nous l'avons indiqué, occuper que des états quantiques bien définis, bien distincts les uns des autres. Chacun de ces états est non localisé; il constitue une onde stationnaire appelée orbitale. Cependant, l'isotropie du potentiel vu par l'électron, c'est-à-dire son invariance par rotation autour du noyau, permet de classer les orbitales: celles qui ne sont pas ellesmêmes isotropes se groupent en familles, à l'intérieur de chacune desquelles les orbitales se déduisent les unes des autres par rotation. Les orbitales d'une même famille ont évidemment des propriétés

semblables, et en particulier la même énergie. Ainsi, pour des raisons géométriques, les états quantiques que fournit la mécanique quantique pour chaque électron ne sont pas répartis au hasard, mais se groupent en paquets, appelés *couches*, dont les énergies sont égales ou plus généralement voisines. Les nombres d'états des couches atomiques successives d'énergies croissantes sont, en partant du bas, de 2, puis 8, puis encore 8, puis 18, etc., nombres « magiques » issus de la mécanique quantique et de la géométrie.

L'ensemble des électrons d'un atome forme un nuage, construit en les répartissant parmi les états quantiques dénombrés ci-dessus de telle sorte que l'énergie totale soit aussi basse que possible. Cependant, en vertu du principe de Pauli, les électrons s'excluent mutuellement : ils doivent tous occuper des états distincts. Pour un atome à N électrons, ces électrons s'empilent donc dans les N niveaux d'énergie les plus bas. Des différences qualitatives apparaissent alors en raison de la disposition en couches de ces niveaux. Pour les valeurs de N égales à 2 (hélium), ou 10 (néon), ou 18 (argon), ou 36 (krypton), etc., il se forme des édifices dont toutes les couches sont complètes, configurations particulièrement stables puisqu'elles ne peuvent être modifiées que par transfert d'un électron vers une couche plus élevée ; les corps formés par ces atomes sont les gaz inertes, n'ayant pratiquement aucune réactivité chimique en raison de cette stabilité. Les atomes pour lesquels N vaut 3 (lithium), ou 11 (sodium), ou 19 (potassium), etc., sont caractérisés par la présence, en dehors de couches complètes, d'un seul électron ; c'est celui-ci, moins lié que les autres, qui peut facilement changer d'état dans sa couche et qui gouverne les interactions de ces atomes avec d'autres. Leurs propriétés chimiques sont donc analogues : il s'agit des métaux alcalins. De même, les métaux ayant deux électrons en sus de couches complètes, le béryllium ₄Be, le magnésium ₁₂Mg, le calcium ₂₀Ca, etc., sont similaires. S'il manque un électron dans la dernière couche occupée, on obtient la famille des halogènes, le fluor ₉F, le chlore ₁₇Cl, le brome 35 Br, etc. L'ensemble des éléments se classe ainsi en fonction du nombre d'électrons situés dans la couche la plus élevée. Cette classification, découverte à notre échelle par Mendeleïev en 1869, n'a pu être comprise qu'à l'avènement de la mécanique quantique.

Les mêmes principes s'appliquent aussi aux *molécules*: ils ont permis d'expliquer la nature et les propriétés des liaisons chimiques entre éléments, les valences de ceux-ci, aussi bien que les mécanismes de réaction. La chimie repose ainsi sur la physique des molécules, ellemême tributaire de la mécanique quantique. On retrouve l'ordre de grandeur du rayon de Bohr pour les distances interatomiques à l'intérieur des molécules; par exemple, les atomes de carbone dans les molécules organiques en chaîne sont distants de 1,54 angström. Les types de liaisons dans les molécules, leur force, leurs angles sont gouvernés, comme les propriétés des atomes, par la conjonction de la mécanique quantique, de la géométrie et de l'interaction de Coulomb entre noyaux et électrons. La forme ainsi déterminée des molécules est en particulier cruciale pour les protéines car elle conditionne leurs fonctions biologiques, de sorte qu'en dernier ressort les mécanismes du vivant eux-mêmes font intervenir la physique quantique.

L'identification entre élément chimique et atome, entre espèce chimique et édifice moléculaire, nous paraît aujourd'hui évidente. Déjà, à la fin du XVIII^e siècle, les créateurs de la chimie quantitative en avaient l'intuition. L'observation de proportions définies pour les réactifs mis en jeu dans une réaction chimique s'explique en effet simplement dès qu'on admet que les corps purs sont constitués de molécules identiques et que celles-ci sont des assemblages d'atomes. Pourtant, cette idée a eu beaucoup de mal à s'imposer. Vers la fin du XIX^e siècle, Marcellin Berthelot interdisait à ses collaborateurs de représenter les corps organiques par des formules développées symbolisant la structure de leurs molécules. Encore en 1950, sans doute sous sa durable influence politique, les manuels de chimie des lycées se contentaient de mentionner qu'il existait une certaine « hypothèse atomique » susceptible d'expliquer les lois de la chimie macroscopique. La chimie quantique était cependant déjà très élaborée, puisque Heitler et London avaient élucidé, dès 1927 grâce à la physique quantique, comment le nuage électronique parvenait à lier deux atomes d'hydrogène en une molécule et qu'à leur suite Pauling et Slater avaient élaboré la théorie de la liaison covalente basée sur les orbitales électroniques.

8. GAZ ET LIQUIDES

Un gaz ou un liquide se présente à l'échelle microscopique comme une assemblée de molécules, dont les mouvements, désordonnés, sont bien décrits par les lois de la mécanique statistique classique : ces particules subissent des chocs mutuels, entre lesquels elles se déplacent à une vitesse de l'ordre de quelques centaines de mètres par seconde. Un effet tel que la pression, conséquence des chocs des molécules sur les parois comme l'avait déjà compris Daniel Bernoulli en 1738, s'explique donc sans recours à la mécanique quantique.

Celle-ci intervient cependant indirectement, car c'est elle qui détermine la taille des molécules. Cette taille, dont nous avons vu qu'elle était de l'ordre de quelques angströms, caractérise l'efficacité des collisions et conditionne donc les phénomènes qui en dépendent. En particulier, la dimension des molécules se reflète à notre échelle dans la viscosité et dans la conductibilité calorifique des fluides, conséquences des collisions dans un fluide en mouvement non uniforme ou à température non uniforme. Pour les gaz, Maxwell a montré que ces quantités sont inversement proportionnelles au carré de la taille des molécules (et proportionnelles à la racine carrée de la température).

Un autre phénomène, directement visible, où se manifeste la dimension des molécules est la diffusion de la lumière. C'est la taille des molécules d'azote et d'oxygène constituant l'atmosphère, ainsi que la valeur de leurs niveaux d'énergie, qui déterminent la manière dont elles diffusent la lumière du Soleil. C'est parce que les rayonnements de plus courte longueur d'onde sont plus fortement diffusés

que le ciel nous envoie une lumière bleue, manifestation à notre échelle de la physique moléculaire.

Les niveaux d'énergie des molécules influent sur les propriétés thermodynamiques des gaz qu'elles constituent. L'échauffement d'un gaz, caractérisé par sa *chaleur spécifique*, traduit à notre échelle non seulement l'augmentation de l'énergie cinétique de ses molécules, mais aussi un phénomène quantique, leur passage d'un niveau d'énergie à un autre plus élevé.

Même pour les gaz rares, dont les atomes se comportent comme des points matériels sans structure, la mécanique quantique joue un rôle en thermodynamique. Le troisième principe, ou principe de Nernst, permet de fixer la constante additive de l'entropie (celle-ci n'est définie qu'à une constante additive près par le deuxième principe). Tout système macroscopique possède ainsi une entropie absolue, qui s'annule lorsque la température tend vers zéro. Pour un gaz rare, la physique statistique quantique permet de calculer l'entropie absolue en fonction de la température et de la pression. Son expression contient la constante de Planck et elle est en accord avec les expériences de calorimétrie.

9. Solides

À une température suffisamment basse ou à une pression suffisamment haute, les matériaux deviennent solides. Les distances entre constituants élémentaires sont alors de l'ordre de l'angström. On déduit par exemple de la densité du fer (56Fe), 7,8 g/cm³, que le volume moyen occupé par chaque atome est de (2,3 Å)³. Comme ces distances sont de l'ordre des tailles atomiques typiques, les atomes ou les molécules d'un solide sont fortement perturbés par leurs voisins, très proches, et ils peuvent même perdre leur individualité. Lorsque le solide résulte de la cristallisation d'un gaz constitué de molécules, celles-ci sont non seulement déformées mais souvent dissociées. Un

cristal de sel, par exemple, ne contient pas de molécules de chlorure de sodium NaCl, mais des ions Na⁺ et Cl⁻ alternativement disposés aux nœuds d'un réseau cubique sans être appariés.

Par ailleurs, les mouvements des molécules, qui dans les gaz et les liquides étaient régis par la mécanique classique, n'existent pratiquement plus dans les solides, où les noyaux s'écartent peu de leurs positions d'équilibre.

La description microscopique d'un solide repose donc entièrement sur la mécanique quantique. En fait, on peut considérer un morceau de matériau solide comme une gigantesque molécule de dimension macroscopique, comportant des milliards de milliards de noyaux atomiques et d'électrons. Cet édifice est, comme un atome ou une molécule, régi par la compétition entre interaction coulombienne, qui tend à lier les électrons aux noyaux tout en écartant les particules de même charge, et par les principes de la mécanique quantique, selon lesquels les électrons tendent à s'étaler pour former un nuage et s'excluent mutuellement : un solide est un objet quantique macroscopique.

Là encore, les seuls paramètres en jeu sont la charge élémentaire e, la constante de Planck h et la masse m de l'électron (ainsi que les masses des noyaux). Il n'est donc pas surprenant de retrouver, en physique des solides, les ordres de grandeur atomiques. Ainsi, comme dans les molécules, les distances entre noyaux sont de l'ordre de quelques angströms, ce qui explique pourquoi les densités des solides ne diffèrent pas considérablement les unes des autres. Leurs écarts reflètent en général plus la variation des masses atomiques que celle des distances interatomiques.

L'énergie de liaison d'un atome ou d'une molécule est remplacée ici par *l'énergie de cohésion* du solide, dont l'ordre de grandeur est encore une fraction d'électron-volt par atome. On peut l'estimer par exemple pour la glace. Afin de libérer cette énergie pour une masse de

1 kg de glace, il faut la faire fondre (ce qui nécessite 80 kcal), puis la porter à 100 °C (100 kcal), enfin la faire bouillir (550 kcal); il convient de retrancher de cette quantité de chaleur totale l'écart d'énergie cinétique des molécules entre les phases vapeur et solide (50 kcal). On trouve en définitive 2,8·10⁶ J kg⁻¹, c'est-à-dire 0,5 eV par molécule d'eau, ordre de grandeur qui confirme l'origine quantique de l'énergie de cohésion.

Dans un solide comme dans une molécule, les noyaux occupent des emplacements à peu près fixes, disposés plus ou moins irrégulièrement pour des solides amorphes comme les verres, ou au contraire en réseau régulier pour les solides cristallins. Des formes géométriques régulières apparaissaient déjà dans les molécules, tétraèdre pour le méthane CH_a , hexagone pour le benzène C_6H_6 . Dans les cristaux, la régularité est extrême, au point de devenir évidente à notre échelle : leur forme même reflète celle du réseau microscopique. Un cristal cubique de gros sel de 1 mm de côté n'est en effet rien d'autre qu'un empilement de mailles cubiques élémentaires de 2,9 angströms de côté, aux sommets desquelles sont rangés en alternance les noyaux de sodium et de chlore. L'ordre de cette configuration est remarquable, puisque entre les deux faces opposées du cristal s'accumulent 3,5 millions de plans équidistants répétant le même motif. Cette manifestation macroscopique de la physique quantique mérite d'autant plus d'être soulignée que la banalité de l'observation d'un cristal n'incite pas à imaginer l'origine microscopique de sa structure.

Les atomes d'un solide peuvent vibrer autour de leurs positions d'équilibre situées aux nœuds du réseau cristallin. Cependant, le fait que ces oscillations sont régies par la mécanique quantique et non par la mécanique classique implique que les énergies correspondantes sont quantifiées, ne pouvant varier que par valeurs discrètes (ou quanta). La propagation du son dans un solide constitue ainsi un processus quantique. De même que les ondes électromagnétiques dans le vide, les ondes acoustiques dans les solides présentent un

double caractère ondulatoire et corpusculaire : les quanta d'énergie, dénommés phonons par analogie avec les photons, se comportent comme des particules qui se propagent à la vitesse du son et ont (comme pour le champ électromagnétique) une énergie hv où v est la fréquence de la vibration. L'énergie d'une onde sonore transportée par *n* phonons est alors égale à *nh*v. Une conséquence macroscopique de cette quantification des vibrations atomiques est la forme de la chaleur spécifique des solides en fonction de la température. Une élévation de température excite des ondes acoustiques, autrement dit elle crée des phonons, et fait ainsi croître l'énergie en absorbant de la chaleur. Cependant, ce processus est entravé par la nécessité de fournir une énergie minimale hv pour faire vibrer le cristal, apport d'autant plus difficile que la température est plus basse. La théorie des phonons, élaborée par Einstein dès 1907, permet d'expliquer à partir de cette idée pourquoi la chaleur spécifique s'annule à basse température, premier succès de la théorie quantique des solides encore dans les limbes à l'époque; la mécanique statistique classique prévoyait qu'elle devait être constante.

Mentionnons aussi, parmi les phénomènes macroscopiques expliqués par la théorie quantique des solides, leur dilatation lorsqu'on les chauffe et leur élasticité ou leur déformation lorsqu'on leur applique des contraintes. Ces phénomènes sont associés à la variation de l'énergie de cohésion, soit lorsque la taille des mailles cristallines augmente parce qu'une élévation de température amplifie les vibrations des atomes, soit lorsque des forces écartent ces mailles de leur forme d'équilibre.

10. MÉTAUX ET ISOLANTS

Nous venons de passer en revue quelques propriétés macroscopiques des solides associées à la position et au mouvement de leurs noyaux atomiques. D'autres propriétés quantiques importantes sont associées à leurs électrons, plus légers et mobiles. Afin de les expliquer, reprenons l'analogie entre la théorie des solides et celle des atomes et molécules. Pour tous ces systèmes, chaque électron se déplace dans un potentiel coulombien créé par les noyaux et par le nuage formé par les autres électrons. Dans un atome, les états quantiques d'un électron soumis à ce potentiel étaient des orbitales, ondes plus ou moins étalées autour du noyau; il leur correspondait des énergies formant un spectre discret mais dont les valeurs étaient groupées en paquets : les couches. Dans un solide cristallin, les noyaux sont disposés en un réseau régulier, de sorte que le potentiel vu par chaque électron est périodique dans l'espace. Cette propriété géométrique remplace l'invariance par rotation des atomes, qui permettait d'expliquer l'existence des couches, et elle a aussi des conséquences physiques remarquables. Elle simplifie le problème et permet de le résoudre malgré le nombre immense de particules avec lesquelles l'électron interagit dans le cristal. On trouve ainsi des caractéristiques quelque peu analogues à celles d'un électron dans un atome. Les orbitales, états quantiques dans lesquels pouvait se placer chaque électron de l'atome, sont remplacées par des ondes, les ondes de Bloch, étalées dans tout le cristal et modulées par le réseau des noyaux atomiques. De même que les énergies des orbitales étaient organisées en couches, celles des ondes de Bloch sont groupées dans des intervalles, nommés bandes permises, séparés par d'autres intervalles, nommés bandes interdites, à l'intérieur desquels il n'existe aucune valeur possible pour les énergies de l'électron. Cependant, alors que chaque couche rassemblait un petit nombre d'orbitales, chaque bande permise comporte un nombre considérable de niveaux d'énergie, comparable au nombre d'atomes dans le cristal. Bandes permises et bandes interdites ont des largeurs allant d'une fraction d'électron-volt à quelques électrons-volts.

Les propriétés électroniques sont conditionnées par cette structure du spectre d'énergie des ondes de Bloch que chaque électron peut occuper, structure caractérisée par l'alternance de bandes permises, rassemblant de manière dense les niveaux d'énergie possibles, et de bandes interdites, où aucun électron ne peut accéder. Le caractère ondulatoire de la physique quantique se manifeste à travers les ondes de Bloch des bandes permises, dont la longueur d'onde peut varier quasi continûment; son caractère discret se manifeste à travers l'existence de bandes interdites.

Comme dans un atome, si la température n'est pas trop élevée, les N électrons du cristal se disposent de telle sorte que leur énergie totale soit minimale. Cependant, en vertu du principe d'exclusion de Pauli, chaque onde de Bloch ne peut accueillir plus d'un électron. Les N électrons s'empilent donc dans les N niveaux de plus basse énergie, depuis la valeur la plus faible possible, au bas de la bande la plus profonde, jusqu'à une valeur maximale dénommée niveau de Fermi. Les niveaux d'énergie situés au-dessous du niveau de Fermi sont donc tous occupés, ceux situés au-dessus sont tous vides. Deux situations, qualitativement différentes, peuvent alors se présenter.

- (i) Si les N électrons remplissent exactement les quelques bandes les plus profondes, le niveau de Fermi est situé dans la bande interdite suivante. Cette situation caractérise les isolants. On désigne dans ce cas sous le nom de bande de valence la dernière bande pleine audessous du niveau de Fermi, de bande de conduction la première bande permise vide au-dessus. La bande de valence et la bande de conduction sont séparées par une bande interdite, dont la largeur Δ mesure une lacune (un « gap ») dans les énergies possibles d'un électron. Cette situation ressemble à celle d'un atome de gaz rare, dont les couches les plus profondes sont complètement occupées par des électrons. Par ailleurs, la mécanique quantique implique que les électrons d'une bande pleine se comportent de la même façon que si chacun d'eux était localisé au voisinage d'un noyau ou entre deux noyaux. Un isolant peut donc être décrit comme un matériau dont tous les électrons sont localisés.
- (ii) Le cas contraire, où au-dessus d'un certain nombre de bandes complètement pleines la dernière n'est occupée que *partiellement*, caractérise les *métaux*. Le niveau de Fermi est alors situé dans cette

bande permise, que l'on nomme encore bande de conduction; il traverse une partie dense du spectre d'énergie. Ainsi, alors que les électrons des bandes pleines sont localisés comme dans un isolant, les électrons de la bande de conduction d'un métal occupent des ondes de Bloch semblables à des ondes planes. Ils se comportent comme un gaz occupant tout le volume du matériau et s'y déplaçant librement, compte tenu des contraintes imposées par leur nature de fermions.

Cette distinction entre métaux et isolants fait intervenir les trois aspects de la physique quantique que nous avons soulignés plus haut : la quantification des niveaux d'énergie, le comportement ondulatoire des électrons, et le principe de Pauli qui interdit à plus d'un électron d'occuper chaque état quantique. Le contraste entre métaux et isolants est, de fait, l'une des manifestations les plus spectaculaires de la mécanique quantique à notre échelle. En effet, la résistivité électrique est la propriété des matériaux qui peut le plus varier, d'un facteur 10²³ lorsque l'on compare un bon conducteur comme le cuivre à un bon isolant. Ce rapport est plus grand que le rapport entre la distance Terre–Soleil et la taille d'un atome!

Afin d'expliquer cette différence capitale, notons que la production d'un courant électrique, qui est la mise en mouvement des électrons par un champ électrique, suppose évidemment une modification de l'état du nuage électronique. Or, selon le principe de Pauli, une telle modification implique l'excitation d'électrons, portés depuis des niveaux occupés, au-dessous du niveau de Fermi, vers des niveaux vides, au-dessus. Dans un conducteur, ce transfert est facile : il suffit de fournir une énergie infinitésimale à un électron de la bande de conduction situé immédiatement au-dessous du niveau de Fermi pour le faire passer juste au-dessus (souvenons-nous que pour un métal, le niveau de Fermi est immergé dans une partie quasi continue du spectre). La résistivité est donc nulle dans ce modèle théorique. La faible résistivité que présentent en réalité les métaux est due à la présence d'impuretés ou de défauts du réseau cristallin, sur lesquels des électrons peuvent se diffuser, ce qui freine leur transport. Il est

remarquable qu'un électron puisse traverser librement un métal parfaitement cristallisé, sans être gêné par les innombrables noyaux qu'il rencontre. C'est encore une conséquence de la mécanique quantique, où les électrons de conduction sont décrits comme un gaz dont chaque particule occupe une onde de Bloch s'étendant sur tout le cristal.

Au contraire, dans un isolant, toute modification du nuage électronique nécessite l'apport d'une quantité d'énergie au moins égale à Δ puisqu'il faut au mieux transférer un électron depuis le sommet de la bande de valence jusqu'au fond de la bande de conduction. Dans ce modèle idéal, les électrons sont donc insensibles à un champ électrique pas assez fort pour leur communiquer l'énergie Δ , de sorte que la conductivité est nulle. Le champ doit dépasser un certain seuil, fonction croissante de Δ , pour qu'un courant significatif parvienne à traverser l'isolant, ce qui correspond au « claquage » de celui-ci. L'impossibilité de transporter des charges sous faible champ correspond bien à l'image donnée ci-dessus pour un isolant, matériau dont tous les électrons sont figés dans des états quantiques localisés. La faible conductivité que présente en réalité un isolant à température ordinaire provient de ce que l'énergie totale ne prend pas la valeur la plus basse possible. Un petit nombre d'électrons est en effet thermiquement excité depuis la bande de valence jusque dans la bande de conduction. Ces électrons sont susceptibles de changer d'état quantique à l'intérieur de cette bande grâce à l'apport d'une énergie infinitésimale, et peuvent donc être mis en mouvement sous l'effet d'un faible champ.

L'aspect même des cristaux isolants, qui contraste avec celui des conducteurs, a la même explication. De tels cristaux, par exemple le quartz ou le diamant, sont transparents. La lumière ne peut en effet interagir avec leurs électrons, dès lors que les photons qui la constituent n'ont pas une énergie suffisante pour être absorbés par des électrons; cette absorption n'est possible que si l'énergie hv d'un photon (où v est sa fréquence) dépasse la largeur Δ de la bande

interdite. Or, l'énergie des photons du visible va de 1,5 eV (rouge) à 3 eV (bleu). Dès lors que Δ est supérieur à 3 eV, toutes les radiations lumineuses traversent donc librement le cristal. À l'inverse, *l'éclat métallique* de l'argent ou du cuivre est dû à la facilité avec laquelle les électrons de la bande de conduction peuvent absorber ou émettre des photons. Cela empêche ces derniers de pénétrer dans le matériau, de sorte que la lumière est totalement réfléchie.

Un métal et un isolant sont tous deux des objets quantiques macroscopiques, mais ce sont des aspects complémentaires de la mécanique quantique qui s'v manifestent. Dans les métaux, c'est le caractère ondulatoire et délocalisé des électrons de la bande de conduction qui domine ; ils se comportent comme un gaz d'électrons libres. Mais il s'agit d'un gaz quantique où le principe de Pauli et la notion de niveau de Fermi jouent un rôle essentiel. Par exemple, l'énergie des électrons est une centaine de fois plus élevée que s'il s'agissait de particules à température ordinaire obéissant aux lois de la mécanique classique. Dans les isolants, les propriétés sont gouvernées par l'existence de la bande interdite qui rend difficile l'excitation des électrons. Cette lacune dans le spectre est une manifestation macroscopique de la quantification des niveaux d'énergie, séparés comme dans les objets microscopiques par des intervalles de l'ordre de l'électron-volt. La rigidité du nuage d'électrons d'un isolant s'apparente, comme on l'a vu, à celle des électrons d'un atome de gaz rare ; le nuage, figé, réagit peu aux sollicitations externes, électriques ou lumineuses pour l'un, chimiques pour l'autre.

11. ÉLECTRONIQUE

Toute la physique contemporaine des matériaux, dont les applications ont envahi notre vie quotidienne, repose sur la physique quantique. En particulier, la possibilité de contrôler le comportement des électrons dans les solides, décrits en première approximation par

la théorie des bandes que nous venons d'esquisser, a permis de développer les technologies de l'électronique. Les matériaux de base de celle-ci sont (à côté de métaux conducteurs et d'oxydes isolants) des *semi-conducteurs* comme le silicium.

Il s'agit d'isolants dont la largeur Δ de la bande interdite est assez faible ($\Delta=1,12$ eV pour le silicium) et dans lesquels on a incorporé de façon contrôlée par « dopage », c'est-à-dire par migration à chaud, une faible proportion d'impuretés actives. La présence par exemple de traces de phosphore, donneur d'électrons, dans le silicium, modifie radicalement les propriétés de celui-ci ; elle permet en effet d'injecter au fond de la bande de conduction, qui aurait été pratiquement vide s'il avait été pur, des électrons susceptibles d'être mis en mouvement par un faible champ. Un tel matériau est appelé semi-conducteur de *type n* (car les électrons mobiles ont une charge négative). Dans les semi-conducteurs de *type p*, comme le silicium dopé avec un peu d'aluminium, accepteur d'électrons, c'est au contraire au sommet de la bande de valence, normalement pleine pour le silicium pur, qu'il manque des électrons ; les états quantiques devenus vacants dans cette bande permettent aux électrons restants de devenir mobiles.

Les composants électroniques sont des assemblages de matériaux différents, en particulier de semi-conducteurs des deux types, agencés de manière à assurer toutes sortes de fonctions. Par exemple, une diode, constituée par une jonction de deux semi-conducteurs de types p et n, laisse passer préférentiellement le courant dans le sens de p vers n. Une diode électroluminescente est un dispositif qui permet d'émettre des signaux dans l'infrarouge ou d'afficher des indications optiques : c'est encore une jonction où le passage d'un courant de p vers p entraîne une désexcitation d'électrons de conduction arrivant du côté p qui tombent sur des états de la bande de valence du côté p; cette désexcitation s'accompagne de l'émission d'une énergie p0 sous la forme d'un photon de fréquence p1 égale à p2 dans l'infrarouge ou le visible. Un p3 transistor permet soit d'amplifier un courant, soit de contrôler le passage d'un courant dans un circuit grâce à l'application

d'un faible potentiel. Il est remarquable que Bardeen, Brattain et Schockley n'aient pu inventer ce dispositif en 1947 qu'après avoir élucidé la structure microscopique quantique des semi-conducteurs.

12. ÉLECTROTECHNIQUE

Non seulement l'électronique, mais aussi la majorité des technologies de l'énergie sont, de manière cachée, tributaires de la physique quantique. Nous avons signalé ce point à propos de l'énergie nucléaire, ainsi que des carburants (à travers la chimie). La physique quantique des solides intervient dans un grand nombre d'autres questions d'énergétique.

La production d'électricité à partir du rayonnement solaire utilise des *photopiles*, autres dispositifs à base de semi-conducteurs. Une pile solaire est constituée de deux lames minces de semi-conducteurs de type n et p accolées et reliées par un circuit extérieur. Les photons provenant du Soleil peuvent être absorbés à l'interface en excitant des électrons depuis la bande de valence du côté p vers la bande de conduction du côté p. Grâce aux propriétés de la jonction, cela envoie dans le circuit un courant dirigé depuis la lame p vers la lame p. Ce processus est l'inverse de celui qui est mis en œuvre dans les diodes électroluminescentes.

La production d'électricité à partir d'énergie mécanique repose sur l'emploi d'alternateurs. Le transport de l'électricité sur de grandes distances au prix de pertes d'énergie par effet Joule acceptables (10 % en France) n'est possible que grâce à l'emploi de lignes à haute tension, de sorte que les transformateurs sont indispensables au transport de l'énergie. Enfin, nous avons besoin de moteurs pour produire de l'énergie mécanique à partir d'électricité. Le fonctionnement des alternateurs, des transformateurs et des moteurs

[–] Voir « Physique fondamentale et énergétique : les multiples visages de l'énergie » par R. Balian, dans les compte rendus de la première école d'été e2phy, « L'énergie sous toutes ses formes : données scientifiques, contraintes, enjeux », 2001 ; diffusé sur Internet (http://e2phy.in2p3.fr) et par le rectorat de Caen.

nécessite des flux magnétiques élevés, produits par des bobinages à noyau de fer. C'est le ferromagnétisme de ce dernier qui renforce le flux. Tout le développement de l'électrotechnique réalisé aux XIX^e et XXe siècles s'appuie donc sur l'existence du ferromagnétisme. Or, l'existence même de matériaux magnétiques, dont l'aimantation s'interprète à l'échelle microscopique comme une circulation de petits courants en boucles fermées, est une nouvelle manifestation macroscopique remarquable de la mécanique quantique. En effet, selon le théorème de Bohr et van Leeuven, aucune propriété magnétique ne pourrait exister si les constituants élémentaires de la matière obéissaient aux lois de la physique classique, car la distribution des positions et des vitesses de ces constituants à l'équilibre thermique serait alors indépendante de tout champ magnétique appliqué. La mécanique quantique permet au contraire à des champs magnétiques d'engendrer une aimantation. De plus, elle impose aux électrons et aux noyaux atomiques de manifester une forme particulière de rotation sur eux-mêmes et, par suite, un moment magnétique intrinsèque susceptible de s'orienter. Cependant, l'explication du ferromagnétisme de métaux comme le fer n'a rien d'intuitif. Elle combine le moment magnétique intrinsèque pour l'électron avec d'autres effets quantiques, en particulier le principe de Pauli et la théorie des bandes, et doit aussi prendre en compte les interactions entre électrons.

Nous avons vu que la physique quantique expliquait l'existence et les propriétés des métaux, bons conducteurs grâce auxquels l'énergie électrique se transporte facilement. Elle est également sous-jacente, par l'intermédiaire de l'électrochimie, au stockage d'énergie électrique dans des piles ou des accumulateurs. Lorsqu'une pile est neuve ou qu'un accumulateur est chargé, ce système contient à l'échelle microscopique des ions qui se maintiennent dans un état excité métastable à condition que le circuit électrique reliant les deux bornes soit ouvert. La fermeture de ce circuit, en permettant à des électrons d'y circuler d'une borne à l'autre, provoque à l'intérieur du générateur une réaction chimique qui aboutit à la désexcitation des ions vers un

état plus stable. L'énergie libérée par cette désexcitation est emportée par les électrons dans le circuit, et s'observe ainsi à notre échelle sous forme électrique. L'origine quantique du phénomène est corroborée par la valeur de la force électromotrice d'un élément de batterie, dont l'ordre de grandeur est le volt : comme pour beaucoup de phénomènes examinés plus haut, la différence d'énergie entre l'état stable et l'état métastable est pour un processus microscopique élémentaire de l'ordre de l'électron-volt, ce qui implique que la variation du potentiel électrique d'un électron est de l'ordre du volt lorsqu'il passe d'une borne à l'autre (selon la définition même de l'électron-volt comme unité d'énergie). Le même argument permet aussi de comprendre l'ordre de grandeur de la capacité des batteries du commerce, en notant que pour chaque ion, l'énergie stockée n'est autre que la différence entre niveaux d'énergie stable et métastable.

13. Lasers, superfluidité et supraconductivité

Nous avons jusqu'ici passé en revue des conséquences macroscopiques du principe de Pauli pour les électrons, particules qui s'excluent mutuellement car ce sont des *fermions*. Nous avions signalé auparavant l'existence d'un autre type de particules, les *bosons*, qui, selon le principe de Pauli, tendent au contraire à se trouver dans le même état.

Les photons sont des bosons, et leur tendance grégaire est mise à profit pour construire les lasers. Dans un faisceau laser, tous les photons ont même direction, même fréquence v et donc même énergie E=hv: ils se trouvent dans un même état quantique, caractérisé par l'onde électromagnétique qui se propage le long du pinceau. Leur production collective est facilitée par le mécanisme d'émission stimulée, découvert par Einstein. Lorsqu'un électron descend d'un niveau d'énergie à un autre en perdant l'énergie E, un photon de fréquence v=E/h est créé. Le caractère bosonique du photon se traduit par le fait paradoxal que sa probabilité d'être émis

dans un état quantique donné est d'autant plus grande que cet état est déjà occupé par d'autres photons; elle est proportionnelle au nombre de ceux-ci. Cet effet permet ainsi d'accumuler un nombre macroscopique de photons dans le même état, et donc de concentrer une forte énergie dans le pinceau laser.

Les atomes d'hélium se comportent, en raison de leur grande stabilité, comme des corpuscules ponctuels sans structure interne, qui se trouvent être des bosons. Si on laisse de côté leurs interactions mutuelles, les paramètres en jeu sont la température T du fluide, sa densité (caractérisée par le nombre *n* d'atomes par unité de volume) et la masse M de chaque atome (tirée de la masse atomique 4 g mol⁻¹ de l'hélium). En combinant ces grandeurs avec les constantes fondamentales en jeu, la constante de Planck h et la constante de Boltzmann $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ J K⁻¹, on ne peut construire que la seule quantité sans dimension $h^2 n^{3/2} / MkT$. Ce nombre croît avec h, c'est-à-dire avec le caractère quantique du fluide. Tant qu'il est petit, c'est-à-dire lorsque la température dépasse quelques kelvins, l'hélium se comporte comme un fluide classique. Cependant, on observe qu'au-dessous de 2,18 K il passe dans une nouvelle phase, l'hélium II, liquide quantique ayant des propriétés étranges qui reflètent à notre échelle la nature bosonique de ses atomes. L'hélium II est d'abord superfluide, c'est-àdire qu'il s'écoule avec une viscosité nulle. Sa conductibilité calorifique est 1 000 fois supérieure à celle du cuivre à température ordinaire. On peut aussi y mettre en évidence des effets d'interférences, comme si le fluide se propageait à la manière d'une onde. Ces phénomènes proviennent du fait que les atomes d'hélium, qui sont des bosons, ont tendance à s'accumuler à basse température dans les états quantiques d'énergie minimale, qui sont des ondes occupant tout le volume offert au fluide. La viscosité nulle et la forte conductibilité traduisent à notre échelle la délocalisation des atomes dans ces états quantiques. Là encore, deux aspects de la mécanique quantique se conjuguent, la nature ondulatoire des atomes d'hélium et leur caractère de bosons.

Un phénomène apparenté à la superfluidité de l'hélium est l'apparition de la supraconductivité dans divers matériaux au-dessous d'une certaine température critique, par exemple 7,2 K pour le plomb, 1,2 K pour l'aluminium. Dans les métaux supraconducteurs, l'existence de la surface de Fermi renforce les interactions entre électrons, de sorte qu'ils se lient en paires. Ces paires d'électrons ont un comportement analogue à celui de bosons (bien que les électrons qui les constituent soient des fermions), de sorte que l'on observe dans les supraconducteurs des effets quantiques macroscopiques remarquables, analogues à ceux existant dans l'hélium II. La résistivité s'annule brusquement lorsque la température descend audessous de la température critique, de sorte qu'un courant induit dans une boucle de fil fermée peut y rester piégé pendant des heures. Un champ magnétique ne pénètre pas à l'intérieur d'un échantillon supraconducteur, à moins qu'il ne dépasse un certain seuil où la supraconductivité disparaît. Des effets ondulatoires peuvent être produits, comme l'interférence de deux courants ou la création de courants alternatifs sous l'effet d'une tension continue. La théorie de la supraconductivité est difficile : alors que le phénomène a été découvert expérimentalement pour des métaux par Kamerlingh Onnes en 1911, il n'a été expliqué par Bardeen, Cooper et Schrieffer qu'en 1957; plus récemment, Bednortz et Müller ont trouvé que certains oxydes devenaient supraconducteurs à des températures plus élevées que les métaux, nouveau phénomène quantique macroscopique pas encore complètement élucidé.

14. CARACTÈRE EXTENSIF DE LA MATIÈRE

La mécanique quantique joue un rôle essentiel mais caché dans une propriété physique dont nous ne sommes guère conscients tellement nous y sommes habitués : le fait même que la matière est macroscopiquement continue et homogène à l'équilibre thermodynamique. En effet, il est remarquable que, malgré l'existence de forces attractives entre ses constituants, la matière ne s'effondre pas sur elle-même. Considérons par exemple un simple atome d'hydrogène. En mécanique classique, son énergie ne serait pas bornée inférieurement car l'électron pourrait se rapprocher indéfiniment du proton. Cela empêcherait l'établissement d'un équilibre thermique pour l'atome. La mécanique quantique impose un certain étalement à l'onde formée par l'électron, ce qui implique que l'énergie est toujours supérieure ou égale à –13,6 eV.

De plus, la matière à notre échelle est extensive : dans des conditions fixées de température et de pression, le volume, l'énergie interne et l'entropie d'un échantillon de matière de 2 kg sont deux fois plus grands que ceux d'un échantillon de 1 kg; ils ne dépendent pas de la forme de l'échantillon. C'est un problème théorique important que de démontrer cette propriété en partant de notre connaissance de la constitution microscopique du matériau, assemblée d'électrons et de noyaux atomiques en interaction colombienne. La résolution de ce problème est difficile, comme le suggère le fait qu'un matériau non neutre électriquement n'est pas extensif. De même, l'existence de forces de gravitation empêche la matière stellaire d'être extensive : le volume des étoiles de même type n'est pas proportionnel à leur masse. L'explication du caractère extensif de la matière utilise deux aspects de la mécanique quantique. L'étalement du nuage électronique assure, comme dans un atome, une molécule ou un ion, que le matériau ne peut se contracter au-delà d'une certaine limite et que son énergie est supérieure à une certaine valeur minimale. Mais il reste à comprendre, tout au moins pour un matériau électriquement neutre, pourquoi cette valeur est proportionnelle au nombre des constituants élémentaires lorsque l'échantillon est macroscopique. De fait, cette propriété ne serait pas vraie si ces constituants élémentaires, noyaux atomiques et électrons, étaient des bosons. Heureusement, les électrons au moins sont des fermions. (Les noyaux sont des bosons ou des fermions selon que le nombre des protons et neutrons qui les constituent est pair ou impair.) De ce fait, ils ont tendance à s'éviter, propriété cruciale qui permet au matériau d'être extensif. En dernier

ressort, la matière n'est extensive que grâce au principe de Pauli pour les électrons.

15. ASTROPHYSIQUE

Fondement de la microphysique, omniprésente à notre échelle quoique de façon souvent cachée, la mécanique quantique se manifeste aussi à l'échelle stellaire. Les quatre interactions fondamentales, gravitationnelle, électromagnétique, nucléaire forte et nucléaire faible, sont à l'œuvre dans une étoile, objet hors d'équilibre ne serait-ce que parce qu'il rayonne en perdant de l'énergie. Le Soleil et les étoiles de même type restent cependant dans un régime quasi stationnaire durant plusieurs milliards d'années, sous l'effet de deux phénomènes antagonistes. La gravitation tend à les faire se contracter sous l'effet de leur propre poids. La matière résiste malgré tout à l'écrasement grâce à l'existence au cœur de l'étoile d'une chaudière nucléaire, qui maintient à l'intérieur une température et donc une pression élevées, et qui est la source du rayonnement. La mécanique quantique intervient pour réguler les réactions nucléaires de fusion de l'hydrogène dans le cœur de l'étoile, ce qui lui permet de rayonner de manière stable pendant une très longue période. C'est aussi la physique quantique qui détermine la forme du rayonnement émis ; c'est d'ailleurs la recherche de l'explication de cette forme qui, comme nous l'avons mentionné dans l'introduction, est à l'origine de la découverte de la mécanique quantique.

Lorsque que l'étoile vieillit, le carburant nucléaire (les noyaux d'hydrogène qui se transforment en noyaux d'hélium et éventuellement ces derniers qui fusionnent aussi si la température est suffisante) s'épuise. La pression due à l'agitation thermique de la matière de l'étoile (électrons, protons et noyaux tels que ceux d'hélium, de carbone et d'oxygène formés par fusion) ne suffit alors plus à contrebalancer les forces de pesanteur exercées par les couches

 $^{-\} Voir\ «\ Stars\ and\ statistical\ physics: a\ teaching\ experience\ »\ par\ R.\ Balian\ et\ J.-P.\ Blaizot,\ American\ Journal\ of\ Physics,\ {\bf 67},\ 1999,\ 1189-1206.$

externes de l'étoile; celle-ci s'effondre sur elle-même. Les étoiles ayant des masses de l'ordre de celle du Soleil deviennent alors des naines blanches, objets stellaires très denses puisque leur taille est de l'ordre de celle de la Terre. Les naines blanches sont des objets quantiques macroscopiques. En effet, ce qui les empêche de se contracter indéfiniment, c'est (encore !) le principe de Pauli pour les électrons, qui, avec les protons restants et les noyaux légers formés, constituent la matière de ce type d'étoiles. Le fait que les électrons s'excluent mutuellement dans l'espace engendre une pression quantique suffisamment forte pour équilibrer la gravité; la contribution de l'agitation thermique à la pression est négligeable.

L'effet de la gravitation est beaucoup plus fort encore dans les étoiles ayant des masses supérieures à dix fois celle du Soleil. Lorsque le carburant nucléaire y est épuisé, la pression due à la haute température et la pression quantique due au caractère fermionique des électrons ne suffisent plus à empêcher l'implosion engendrée par la très forte pesanteur. Tandis que les couches externes, considérablement échauffées par cette libération d'énergie gravitationnelle, sont violemment éjectées, phénomène que l'on observe comme une gigantesque explosion appelée supernova, la partie interne est brutalement comprimée au point d'atteindre une densité comparable à celle d'un noyau atomique : une masse comparable à celle du Soleil s'y concentre dans une sphère de l'ordre de 10 kilomètres de rayon. Les électrons et protons fusionnent alors pour former des neutrons, de sorte que ces objets sont des étoiles à neutrons. C'est à nouveau le principe de Pauli qui limite la contraction gravitationnelle dans ces étoiles, mais cette fois, les fermions qui produisent la pression quantique sont les neutrons.

16. Conclusion

Les nombreux phénomènes que nous avons passés en revue montrent que la mécanique quantique ne concerne pas seulement la microphysique mais qu'elle a aussi des implications profondes sur bien des faits observés à notre échelle. C'est pourquoi on doit considérer comme l'un des grands progrès de la science du XX^e siècle le développement de la physique statistique quantique, théorie générale permettant d'appliquer la mécanique quantique à des systèmes macroscopiques; les méthodes probabilistes qu'elle utilise sont nécessitées par le maniement d'un très grand nombre de constituants élémentaires. Elle conduit à des prévisions quantitatives confirmées avec une précision remarquable par l'expérience. Plus qu'un simple chapitre de la physique, la mécanique quantique est ainsi devenue une discipline servant de base à de nombreuses branches de la science et de la technologie. Ainsi, elle a permis de déduire de la microphysique les « principes » de la thermodynamique qui apparaissaient au début du XX^e siècle comme les fondements autonomes de cette science. Même si pour l'étude de tel ou tel objet macroscopique il est presque toujours plus expéditif de la courtcircuiter par des théories empiriques spécifiques - par exemple, équations de Navier-Stokes pour la dynamique des fluides, lois de Descartes pour l'optique, ou loi d'Ohm pour les courants électriques - elle est sous-jacente à la compréhension de l'origine, de la signification et des limitations de ces théories. C'est à travers elle que se manifestent, à toutes les échelles supérieures aux tailles des novaux, l'unité et la simplicité des lois fondamentales de la Nature.