

# Est-ce que la symétrie totale stabilise les composés, les atomes, les noyaux et les systèmes sans couleur de quark ?

Autor(en): **Jørgensen, Christian K.**

Objektyp: **Article**

Zeitschrift: **Archives des sciences [1948-1980]**

Band (Jahr): **32 (1979)**

Heft 1-3

PDF erstellt am: **21.09.2024**

Persistenter Link: <https://doi.org/10.5169/seals-739904>

## **Nutzungsbedingungen**

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern. Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

## **Haftungsausschluss**

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

# EST-CE QUE LA SYMÉTRIE TOTALE STABILISE LES COMPOSES, LES ATOMES, LES NOYAUX ET LES SYSTÈMES SANS COULEUR DE QUARK ?

PAR

**Christian K. JØRGENSEN**<sup>1</sup>

---

## RÉSUMÉ

On analyse le sens dans lequel les systèmes électroniques sont constitués d'électrons; les noyaux résultent de protons et de neutrons; et les baryons sont constitués chacun de trois quarks. La tendance qui consiste à montrer la symétrie totale s'accroît quand le rapport entre l'énergie de liaison et la masse de repos des constituants augmente. On ne peut pas dire que tous les états ayant la symétrie totale représentent des couches complètes. La configuration prépondérante (qui est utilisée dans la chimie pour définir les états d'oxydation) est discutée.

## SUMMARY

The sense in which electronic systems consist of electrons; nuclei consist of protons and neutrons; and baryons consist of three quarks is analyzed. It is shown that the tendency toward total symmetry increases with the ratio between the binding energy and the rest mass of the constituents. Not all totally symmetric states can be said to correspond to closed shells, and the preponderant electron configuration (and its rôle in chemistry for defining oxidation states) is discussed.

Une bonne partie des questions les plus subtiles de la mécanique ondulatoire ne demande pas une approximation numérique d'un modèle de solution de l'équation de Schrödinger, mais une comparaison symphonique entre l'expérience et sa description théorique qui n'utilise pas les fractions décimales. La classification des niveaux  $J$  (nombre entier non-négatif pour un nombre pair d'électrons; et un nombre impair (positif) divisé par 2 pour un nombre impair d'électrons) dans les spectres d'entités monatomiques ( $M$ ,  $M^+$ ,  $M^{+2}$ , ...) a commencé avant 1925, et la mécanique ondulatoire n'a fait que rationaliser les règles déjà bien connues (Hund, 1927). Dans la plupart des systèmes monatomiques, le couplage de Russell et Saunders est une assez bonne approximation, et on peut introduire les nombres quantiques  $S$  (qui prend la même série de valeurs possibles que  $J$ ) et  $L$  (entier non-négatif) mais

---

<sup>1</sup> Département de Chimie minérale, analytique et appliquée, Université de Genève, 30, quai E. Ansermet, CH 1211 Genève 4.

d'une façon plus stricte, les seuls nombres quantiques absolus sont  $J$  et la parité (paire ou impaire) qui est la parité de la somme des  $l$  individuelles d'une configuration électronique. Dans un atome à plusieurs électrons, une configuration comme  $1s^2$  ou  $1s2p$  est une approximation, comme l'est aussi le couplage de Russell et Saunders. Dans les deux cas, on peut énumérer les niveaux ( $J$ , et parité) même si l'approximation n'est pas bonne; les difficultés pour prendre la configuration ou ( $S, L$ ) au sérieux n'empêchent pas les niveaux stationnaires de conserver leur nombre. Si la symétrie dévie un peu (Jørgensen, 1971) de la symétrie sphérique, le nombre de fonctions d'onde mutuellement orthogonales  $(2J + 1)$  ainsi que les  $(2S + 1)(2L + 1)$  états d'un terme ( $S, L$ ) de multiplet restent conservés.

Nous ne connaissons que des particules « élémentaires » qui suivent, soit la statistique de Fermi et Dirac (*fermions* qui produisent les nombres quantiques semi-entiers), soit la statistique de Bose et Einstein (*bosons* comme les photons et les pions). Le fait que les électrons sont des fermions empêche qu'un atome (avec un noyau, pour le moment considéré comme un point géométrique) possède la symétrie totale ( $J = S = L$  zéro, et parité paire) avec un électron ( $nl$ ). En effet,  $J = S = 1/2$  pour  $l$  nulle, tandis qu'un électron à  $l$  positive produit deux niveaux avec  $J = (l \pm 1/2)$  qui forment un terme ( $S = 1/2$  et  $L = l$ ). D'autre part, la symétrie totale de l'état fondamental des atomes gazeux des hélium, néon et palladium ne dépend pas de la question numérique de validité plus ou moins parfaite des configurations  $1s^2$ ;  $[10] = 1s^2 2s^2 2p^6$ ; et  $[46] = [36] 4d^{10}$  (nous mettons entre parenthèses rectangulaires le nombre  $K$  d'électrons dans une série isoélectronique de Kossel, cf. Jørgensen, 1978b). C'est un fait expérimental que les couches complètes, comme par exemple

$$K = 2, 10, 18, 28, 30, 36, 46, 48, 54, 68, 78, 80, 86, 100, \dots \quad (1)$$

sont plus stables dans le sens que, pour la même charge ionique  $z = (Z - K)$ , leur énergie d'ionisation  $I_{z+1}$  est nettement plus grande que pour  $(K + 1)$ . Cependant, eq. (1) n'est universellement valable qu'à partir de  $z = +3$ , tandis que les états fondamentaux montrent 38 exceptions pour  $z = +1$  (dont 28 avec *un* électron  $s$ ) et encore cinq pour  $z = +2$ . Par exemple, l'état fondamental de  $\text{Cu}^+$  et  $\text{Zn}^{+2}$  est bien  $[28] = [18] 3d^{10}$  mais l'état fondamental de l'atome du nickel ( $J = 4, S = 1$  et  $L = 3$ ) appartient à la configuration  $[18] 3d^8 4s^2$ , et si l'on considère les barycentres de configuration (l'énergie moyenne des 45 états de  $3d^8 4s^2$  ou 20 états de  $3d^9 4s$ ) la configuration la plus stable est  $[18] 3d^9 4s$ . Il n'y a pas de réponse simple à la question si  $3d$  ou  $4s$  est plus stable.  $4s$  est plus facile à ioniser, mais  $4s$  est servi avec un ou deux électrons dans l'atome neutre, en priorité avant  $3d$  (Jørgensen, 1979b).

Il ne faut pas faire une conversion qui consisterait à dire que, puisque tous les systèmes à couches complètes ont la symétrie totale, il serait aussi vrai que tous les états à symétrie totale sont particulièrement stables. Dans la situation contraire, une couche partiellement remplie avec 2, 4, 6, ... ou  $4l$  électrons, contient un ou

plusieurs états à symétrie totale qui sont plutôt les *moins* stables de la configuration. La théorie de Slater élaborée par Condon et Shortley (1953) et Racah (1949) explique les différences d'énergie entre les termes ( $S, L$ ) par une variation de la répulsion interélectronique (Jørgensen, 1962 et 1969) avec la valeur moyenne  $\langle r_{12}^{-1} \rangle$  la plus petite pour le terme de plus basse énergie. Cette explication peut être critiquée (Katriel et Pauncz, 1977) mais on peut néanmoins définir un paramètre  $D$  de couplage de spin qui, pour chaque valeur de  $l$ , est une combinaison linéaire des paramètres phénoménologiques de répulsion interélectronique (Jørgensen, 1962 et 1971) et en particulier, le barycentre de tous les états (d'une seule couche partiellement occupée) ayant une valeur de  $S$  donnée contient l'énergie  $-DS(S+1)$ . Cette expression rationalise la variation des énergies d'ionisation et d'excitation à d'autres configurations comme fonction du nombre d'électrons dans une couche p, d ou f ( $l = 1, 2, 3$ ) et elle rationalise aussi la règle de Hund suivant laquelle le terme fondamental a la plus *haute*  $S$  possible et combinée avec la plus haute  $L$  compatible avec cette valeur de  $S$ . Le paramètre  $D$  a l'ordre de grandeur 0.8 eV dans les groupes 3d et 4f et environ la moitié dans les groupes 4d, 5d et 5f.

La chimie des groupes de transition montre beaucoup d'analogies avec les spectres atomiques, tandis que les éléments non-transitionnels normalement forment des composés avec un nombre pair d'électrons, et diamagnétiques ( $S$  nulle) dans leur état fondamental. Cette idée est tellement ancrée chez les chimistes organiciens qu'ils définissent les « radicaux libres » comme espèces à  $S$  positive. Cela doit être une source de complexes pour les organiciens qu'ils sont obligés de respirer la molécule diatomique d'oxygène ayant  $S=1$  (triplet) dans son état fondamental (cela a été un des triomphes de la théorie des orbitales moléculaires d'expliquer cette situation, ce qui correspond aux deux électrons dans les deux orbitales moléculaires de même énergie, qui auront pu accommoder quatre électrons, comme elles font dans l'anion peroxyde diamagnétique). Il n'est pas du tout raisonnable de penser que  $N$  liaisons sont toujours formées par  $2N$  électrons (Jørgensen, 1971) mais il est certainement la grande majorité des composés en dehors des groupes de transition, qui ont  $S$  nulle. Dans les groupes 3d et 4f, les règles de Hund et l'énergie de couplage de spin  $-DS(S+1)$  jouent leur rôle pour stabiliser  $S=5/2$  dans les composés de manganèse(II) et fer(III) et  $S=7/2$  dans l'euporium(II), le gadolinium(III) et le terbium (IV). Il est intéressant que la série (1) donne les séries isoélectroniques de Kossel avec un grand nombre d'états d'oxydation (sept à treize) mais que les valeurs de  $K$  dérivées des composés à état d'oxydation défini (Jørgensen, 1969 et 1978b) sont néanmoins toutes connues entre  $K=19$  et 99. La série (1) ne donne pas toujours l'état d'oxydation le plus stable d'un élément; manganèse(II) est nettement plus fréquent que Mn(-III) et Mn(VII), et ruthénium(III) plus que Ru(-II) ayant  $K=46$  et Ru(VIII) à  $K=36$  (les gaz nobles ont leur  $K$  italiqués en série (1)). La distribution des 45 états de  $3d^8$  dans les composés du nickel(II) est un sujet de la théorie du « champ des ligands » mais il est clair depuis 1965 que leurs séparations d'énergie

ne sont pas expliquées par la (très petite) contribution non-sphérique (qui varie avec l'angle) du potentiel Madelung, mais plutôt par les effets de formation d'orbitales moléculaires anti-liantes, que l'on décrit dans le modèle de recouvrement angulaire (Jørgensen *et al*, 1963; Jørgensen 1965; Schäffer, 1968 et 1973; Smith, 1978). Dans le groupe 4f, les différences (moins que 0.1 eV) entre les sept énergies mono-électroniques sont si faibles que même les niveaux  $J$  de symétrie sphérique peuvent être clairement identifiés (Reisfeld et Jørgensen, 1977). Pour ce qui suit, il est utile de noter que la plus haute valeur de  $J$  connue dans la chimie est 8 dans les composés de holmium(III) qui ont le même état fondamental que  $\text{Dy}^{+2}$  et  $\text{Ho}^{+3}$  gazeux à  $K=64$  avec la configuration  $[54]4f^{10}$ . Pour comparaison, l'état fondamental de l'atome de dysprosium avec la configuration  $[54]4f^9 6s^2$  a aussi  $J=8$ . L'exemple illustre l'absence de l'influence des couches complètes comme l'orbitale 6s.

Le nombre quantique  $I$  pour les noyaux joue le même rôle que  $J$  dans les systèmes électroniques monatomiques. Cependant, les états excités des noyaux correspondent à deux mécanismes, des spectres de rotation (comme les molécules) avec l'énergie proportionnelle à  $I(I+1)$  et des configurations protoniques et neutroniques après le modèle de couches nucléoniques de Maria Goeppert-Mayer. On définit un entier positif  $A$  assez près du poids atomique (avec l'isotope carbone 12 comme étalon) et on dit que le noyau « consiste » en  $Z$  protons et en  $N=(A-Z)$  neutrons. Aussi bien pour  $Z$  que pour  $N$ , les valeurs 2, 8, 14, 20, 28, 50, 82, 126, 184, ... sont particulièrement stables, pour des raisons comparables, mais distinctes, de  $K$  dans la série (1). Même à haute  $Z$ , la répulsion entre les protons est une perturbation assez faible comparée avec la liaison nucléaire générale, mais il semble que  $Z=114$  et 164 pourront être plus stables que 126 et 184. L'état fondamental de tout noyau stable à  $Z$  pair et  $N$  pair est totalement symétrique, c'est-à-dire  $I$  nulle, ce qu'on pourrait comprendre comme l'état de rotation le plus stable, mais qui est assez différent de  $J$  dans les spectres atomiques.  $I$  de l'état fondamental peut être assez élevée quand  $Z$  et  $N$  les deux sont impairs ( $I=6$  pour le vanadium 50 et  $I=7$  pour le lutétium 176), mais de tels noyaux sont tous radioactifs (même s'ils existent en faible concentration dans les minerais) avec l'exception de deutérium, lithium 6 et azote 14 (ces trois noyaux ont  $I=1$ ) et bore 10 (avec  $I=3$ ). Quand  $Z$  est impair (mais  $N$  pair) la valeur de  $I$  de l'état fondamental correspond souvent au  $j$  du « dernier » proton ajouté dans le modèle de Maria Goeppert-Mayer, tandis que  $I$  pour  $N$  impair (et  $Z$  pair) indique le plus souvent  $j$  du « dernier » neutron.

De cette façon, les noyaux imitent les idées d'organiciens en ayant  $I$  nulle aussi souvent que c'est faisable. Non seulement les isotopes avec  $Z$  ou  $N$  (ou les deux, « noyaux doublement magiques ») correspondent aux couches complètes (par exemple hélium 4, oxygène 16, silicium 28, calcium 40 et 48, zirconium 90, plomb 208; et même, l'abondance cosmique du fer 56 est liée à la radioactivité du nickel 56 doublement magique) sont beaucoup plus abondants que les éléments voisins; mais avec l'exception de l'hydrogène (les étoiles ordinaires, comme le Soleil, tirent



leur production d'énergie à la fusion consécutive de quatre protons en hélium 4), les étoiles à neutron (densité  $10^{14}\text{g/cm}^3$  comme les noyaux, et  $N$  autour  $10^{57}$ ) et les trous noirs, la très grande majorité des noyaux dans l'Univers ont  $I$  nulle.

On peut se poser la question de savoir dans quel sens un noyau *consiste* en  $Z$  protons et en  $N$  neutrons. Cela n'est pas uniquement l'argument technique qui traite le nombre d'un type d'objet, comme  $K$ ,  $Z$  ou  $N$ , dans la mécanique ondulatoire où se glissent lentement des notions anciennes de moutons sur un champ vers une cardinalité d'un ensemble sans possibilité d'agrafer un nombre ordinal sur chaque membre individuel. Il y a aussi la chaleur de formation d'un noyau à partir de protons et neutrons qui, la plupart du temps, diminue la masse de repos 0.8%. Les chimistes escamotent ce problème en utilisant le carbone 12 (déjà très typique du point de vue de la stabilité nucléaire) comme standard. La somme des poids atomiques de 90 protons et 142 neutrons est 234, deux unités plus que  $A$  pour thorium 232. On peut comparer cette différence avec le poids atomique 0.05 de 90 électrons. Dans la très bonne approximation  $Z^2 \cdot 4$  rydberg (proposée par Gombas et Gaspar) pour l'énergie de liaison de  $Z$  électrons avec un noyau de numéro atomique  $Z$ , le thorium est allégé de la masse de repos de 1.2 électrons, tandis que les liaisons chimiques modifient au plus la masse de l'atome autour de  $10^{-10}$  (avec l'exception de la combinaison de deux atomes d'hydrogène qui diminue la masse de repos de  $2 \cdot 10^{-9}$ ).

Jusqu'en 1977, on pouvait penser qu'il n'y avait pas une différence conceptuelle entre les composés qui résultent d'atomes que l'on peut régénérer avec  $10^{-10}$  de la masse de repos, et les noyaux qui coûtent de l'ordre de grandeur de  $10^{-2}$  à récupérer sous forme de protons et de neutrons. La nouvelle situation qui posera les noyaux dans une catégorie intermédiaire entre les atomes et les baryons, est qu'il n'est plus exclu que les *quarks* introduits par Gell-Mann en 1964 puissent exister isolés. Par lévitation magnétique des billes ( $10^{-4}\text{g}$ ) de niobium métallique (dans son état super-conducteur), Fairbank pense avoir obtenu des indications de charges électriques d'un tiers de proton ( $e/3$ ) qui peuvent s'expliquer par la présence d'un quark (ou un anti-quark) supplémentaire lié à un sur  $10^{18}$  noyaux de niobium 93, ou si l'on préfère, sur un sur  $10^{20}$  nucléons. Il est probable qu'une telle concentration faible de quarks non-combinés est d'origine primordiale (de singularité traversée par l'Univers il y a environ  $10^{10}$  ans) mais comme on a compilé (Jørgensen, 1978a) la plupart des autres recherches (négatives) suggèrent des concentrations beaucoup plus faibles, comme  $10^{-20}$  ou  $10^{-23}$  des nucléons (6 quarks per g) au plus. Les deux types de résultats ne sont pas complètement incompatibles; De Rujula *et al.* (1978) soulignent que les faibles concentrations de quarks (qui ne sont pas combinés trois par trois dans les nucléons) sont chimiquement concentrés (par effets cinétiques et par équilibre thermodynamique, Jørgensen, 1978a) sur certains éléments. La première conséquence est que le système périodique contiendrait des nouveaux « éléments » intercalés avec charges nucléaires ( $Z + 1/3$ ) et ( $Z + 2/3$ ).

L'opinion sur les quarks évolue très rapidement pour le moment (Mulvey, 1979; Marciano et Pagels, 1979). Il semble certain qu'il « existe » les quatre

$$u(2e/3) \quad d(-e/3) \quad s(-e/3) \quad c(2e/3)$$

prononcés en Anglais up, down, strange et charm, ainsi que leurs quatre anti-quarks à charge opposée; et il semble assez plausible qu'il y ait deux autres,  $b(-e/3)$  et  $t(2e/3)$ . Les trois types (« flavours » en Anglais)  $u$ ,  $d$  et  $s$  expliquent à merveille les huit baryons à  $I = 1/2$  comme le proton (masse de repos équivalent à 938.26 MeV), le neutron (939.55 MeV),  $\Lambda^+$  (1115.6),  $\Sigma^+$  (1189.4),  $\Sigma^0$  (1192.5),  $\Sigma^-$  (1197.3),  $\Xi^0$  (1315) et  $\Xi^-$  (1321.3) ainsi que les dix baryons à  $I = 3/2$  distribués entre (le porteur  $uuu$  de  $+2e$ )  $\Delta^{++}$  (1236) et  $\Omega^-$  (1673 MeV). Puisque la constitution du proton est  $uud$  et du neutron  $udd$  (le baryon  $\Lambda^+$   $uus$ ) on peut penser que les noyaux ordinaires ont leurs propriétés déterminées avant tout par les deux types de quark  $u$  et  $d$ . Il est curieux de noter que la « structure du proton » était encore hautement hypothétique en 1974 (Feynman, 1974) même si le moment magnétique du neutron a toujours inspiré une saine méfiance, tandis qu'en 1979, le caractère de particule élémentaire du proton semble définitivement abandonné (Mulvey, 1979). Tandis que le neutron libre est radioactif avec  $t_{1/2}$  12 minutes et  $\Lambda$  avec  $2.10^{-10}$  sec., la limite inférieure pour le proton est  $10^{30}$  ans. Il est assez difficile (Gell-Mann *et al.*, 1978) de protéger le proton contre la déviation de la règle de « conservation du nombre des baryons » qui consistera en une formation de trois leptons (les neutrinos, électrons, muons (105.66 MeV), qui ne sont ni des mésons ni des baryons) pour une vie moyenne supérieure à  $10^{33}$  ans. Il est difficile de prévoir quelle influence la formation de noyaux aura sur cette dissolution radicale des protons et neutrons; d'un côté, il y a marginalement moins d'énergie produite par la dissociation, mais il y a peut-être des voies de réaction beaucoup plus rapides et nombreuses. La désintégration d'un neutron dans le béryllium 9 pourrait produire 2  $\alpha$  ultrarapides. Howard Georgi m'a suggéré en juillet 1979 que la fission d'un noyau lourd (comme le bismuth 209) consécutif à la désintégration d'un proton ou d'un neutron « intérieur » sera peut-être plus caractéristique.

A un certain moment (Drell, 1978) on a imaginé que la composition du baryon en trois quarks ne donnait pas l'aspect (presque de chimie analytique) qu'on pourrait *diviser* le baryon en trois quarks. En effet, on n'a jamais réussi une expérience de haute énergie, où une collision entre deux particules a libéré un quark. On a généralisé la quasi-certitude que les forces entre deux quarks sont assez constantes dans un interval de courtes distances, à une hypothèse où l'énergie potentielle est proportionnelle à la distance (et non pas inversement proportionnelle comme pour l'interaction électrostatique). Il est difficile de croire que cette situation continue pour de très longues distances, et il semble plus attirant de penser que le quark libre possède une très grande masse de repos (peut-être entre 2 et 20 unités (931.48 MeV) de poids atomique). Autrement, l'on pourrait argumenter avec Capra (1979) que les quarks ne sont pas du tout des particules, mais que la Nature laisse des réactions possibles

les imiter. Mais, si le quark isolé est concevable, les deux exemples (2 ou 20 GeV) correspondent à une libération de 83 à 98% de la masse de repos de trois quarks quand ils se combinent dans un proton ou un neutron. Il est assez difficile de dire que les noyaux sont constitués de nucléons, ou cette figure est légèrement inférieure à 1%, et de dire en même temps que les nucléons ne sont pas constitués de trois quarks.

Une complication très importante est le nombre quantique *couleur* qu'il est nécessaire d'introduire pour assurer l'anti-symétrie de Pauli, si les quarks sont des véritables fermions. Il est possible (Gell-Mann *et al.*, 1978) que l'on puisse réussir à n'utiliser que quatre couleurs, la symétrie totale « grise » des baryons et noyaux ordinaires, et « rouge », « jaune » et « bleu » qui donne « gris » quand chacun des trois quarks porte chacune des couleurs non-grises. Les mésons (dont le plus léger est le pion neutre, 134.96 MeV, suivi du pion positif ou négatif, 139.57 MeV) sont considérés comme l'adduct d'un quark et un anti-quark. En effet, une riche faune de mésons peuvent être catalogués, comme les baryons (Feynman, 1974). On pourrait s'imaginer que les quatre couleurs sont isomorphes avec le Vierergruppe de Klein, qui est aussi isomorphe avec les groupes ponctuels  $D_2$ ,  $C_{2v}$  et  $C_{2h}$  (Jørgensen, 1971) et que, par exemple, un quark rouge et un anti-quark rouge donnent un adduct gris tandis que deux quarks de couleurs différentes donnent la troisième couleur non-grise. Cependant, on est presque unanime pour penser que les anti-quarks ont des anti-couleurs, comme « vert », « violet » et « orange » et qu'un méson gris résulte, par exemple, d'un quark rouge et d'un anti-quark vert. Personnellement, je ne trouve pas convaincant l'argument selon lequel l'isomorphie avec le Vierergruppe de Klein rendra l'adduct de deux quarks de même couleur grise, et qui ne correspond pas à des entités observables. L'exemple des niveaux  $J$  de symétrie totale d'un atome, qui peuvent être de très haute énergie, comme ils peuvent représenter des niveaux fondamentaux nettement isolés, montre bien que, même si toutes les particules observables sont grises, cela n'est peut-être pas le fait de tous les états gris, qui sont très stables.

Il faut rendre un des arguments un peu plus quantitatif, si l'on estime, par exemple, la masse de repos des quarks  $u$  et  $d$  comme 5 unités de poids atomiques. Le proton  $uud$  et le neutron  $udd$  montrent alors une énergie de liaison de 14 unités. Le pion positif, qui consiste en un quark  $u$  et un anti-quark  $d$  montre une énergie de liaison 9.86 unités, presque'autant que l'annihilation mutuelle d'un quark et un anti-quark. L'adduct de deux quarks peut facilement avoir une énergie de liaison de 5 unités sans être facilement détectable. En particulier, un tel adduct est énergétiquement instable relativement à un nucléon et un anti-quark si son énergie de liaison est inférieure à 4 unités. Si le nucléon et l'anti-quark peuvent rester ensemble avec une énergie de liaison  $\kappa$ , le résultat devient  $(4 + \kappa)$ , et on commence alors à discuter pour savoir si un anti-quark libère des « diquarks » d'un nucléon. De Rujula *et al.* (1978) pensent qu'un seul quark, non seulement de charge négative, mais aussi positive, est lié très fort, aussi bien à un nucléon qu'à un noyau jusqu'à une certaine limite de  $A$ . Il semble que 13 quarks d'un système coloré (non-gris) formé d'un noyau



hélium 4 et un quark se comportent d'une façon très différente des 12 quarks d'une particule  $\alpha$  ordinaire.

Pour les chimistes, la physique des hautes énergies peut sembler assez ésotérique, mais les progrès les plus récents dans la compréhension de la structure des baryons illustrent une complémentarité que l'on n'avait pas tellement remarqué avant, entre synthèse et analyse, entre « moyens de formation » et « réactions dissociatives ». Il est clair que Lavoisier peut récupérer les atomes d'un composé, parce que cela ne coûte au pire que  $10^{-10}$  de la masse de repos comme énergie endothermique. Dans le noyau, il se faufile déjà le paradoxe bien connu du dessin des deux visages en profile ou une vase centrale: est-ce que la particule  $\alpha$  (hélium 4) qui, après tout, se forme spontanément dans la radioactivité des éléments de  $Z$  supérieurs à 83 (et  $Z$  autour de 60 si  $N=84$ ) et qui forme les huit noyaux très stables carbone 12 à calcium 40 par « oligomérisation », et qui est un boson à symétrie totale ( $I$  nulle), serait plus *simple* qu'un proton? Quelle est la réaction la plus importante: que l'on puisse casser hélium 4 en quatre nucléons, ou que l'on puisse le former avec deux protons et deux neutrons? La longue tradition chimique, et le fait que l'Univers contienne plus d'hydrogène 1 que tout autre isotope, rend la deuxième formulation plus évidente. Mais, si l'on transpose ce problème aux quarks, est-ce que l'on casse un proton en trois quarks (par exemple en l'exposant à la singularité gravitationnelle d'un trou noir) ou est-ce que l'on forme un proton de trois quarks?

Il n'y a pas de réponse impérative à ce type de question, mais il est important de réfléchir pourquoi la Nature est très tolérante envers de larges déviations de la symétrie totale, quand le rapport  $R$  entre énergie de liaison et masse de repos est très faible, mais déjà moins tolérante dans les noyaux avec  $R=0.008$ , tandis que  $R$  supérieur à 5 dans les baryons (relativement aux quarks) correspond à la couleur « grise » (de symétrie totale) tellement uniforme que l'on n'est pas encore sûre d'avoir observé même un seul système non-gris.

La mécanique ondulatoire a résolu l'antinomie entre les fonctions continues de Heraclite et les « atomes » de Démocrite; aucun des deux extrêmes n'avait raison. Il est fort possible que nous venions de vivre la résolution d'une deuxième antinomie entre ceux qui cherchent les constituants des constituants (et les poux des poux) et ceux qui prétendent que l'on fabrique des constituants avec nos interventions. Si un quark est constitué de 7 « quips » mais si  $R=10^6$ , on ne rencontre pas de vrai cercle vicieux de régression, mais plutôt une façon élégante de la Nature de nous faire une plaisanterie.

Pour revenir aux systèmes électroniques, la configuration électronique joue un rôle assez ambigu (Jørgensen, 1962 et 1978b) parce que la fonction d'onde est assez loin d'un déterminant anti-symétrisé pour quelques électrons, et l'énergie de corrélation (qui est approximativement proportionnelle avec  $Z^{1.2}$  et, de cette façon avec la racine carrée de l'énergie totale) est supérieure à l'énergie de l'ionisation

de tous les atomes neutres à partir du sodium ( $Z=11$ ). La bonne classification des niveaux d'énergie, qui servent dans la *configuration prépondérante* (Jørgensen, 1969) à définir les *états d'oxydation* est la plus nette dans les lanthanides (Reisfeld et Jørgensen, 1977) où, même dans les éléments et alliages métalliques, on peut reconnaître les  $(2J+1)$  états du niveau fondamental (Wallace *et al.*, 1977) et la structure des configurations  $4f^{q-1}$  obtenues par ionisation dans les spectres photo-électroniques (Jørgensen, 1975; Campagna *et al.*, 1976). La caricature de cette validité de classification pragmatique est représentée par les couches nucléoniques, et pourtant, cela marche.

Si l'on demande quel est le critère pour la symétrie totale, on pense en premier au fait que les configurations électroniques, aussi bien dans les systèmes à un qu'à plusieurs noyaux, contiennent normalement une configuration qui est nettement dominante comme l'amplitude carrée dans la fonction d'onde (à l'exception des cas un peu pathologiques comme les deux configurations d'orbitales moléculaires, qui contribuent chacune à 50% de deux atomes d'hydrogène à longue distance considérés dans la symétrie (ici irrelevante) linéaire). On pourrait alors dire que si la configuration prédominante est à couches complètes, on a un système stable. Cependant, cela n'est pas vrai pour  $[18] 3d^{10}$  de l'atome du nickel, ni du premier état singulet d'un complexe de fer (II) à  $S=2$  comme état fondamental. Il est probable qu'il faut accepter (et approfondir l'analyse) du fait que les états à symétrie totale tombent en deux catégories, ceux, isolés, du genre couche complète, et ceux au milieu d'autres niveaux, du genre « résultat alternatif d'une ou plusieurs couches partiellement remplies ». Il est remarquable que la structure du Tableau Périodique (Jørgensen, 1979a et 1980) trouvé par l'induction par les chimistes soit intimement liée au fait que les couches complètes représentent l'élément neutre du couplage vectoriel de Hund.

C'est utile pour les chimistes de considérer d'une façon simultanée les propriétés d'un ensemble d'états à basse énergie (quand l'état fondamental n'est pas isolé; il peut d'ailleurs l'être, sans posséder la symétrie totale et ne pas être dégénéré dans les groupes ponctuels non-sphériques, même si c'est très rare sinon inexistant dans les composés d'éléments transitionnels) et ainsi obtenir les arguments pour une configuration prépondérante, sans se restreindre aux calculs approximatifs d'un seul état.

## ADDENDA

Ce texte est basé sur une conférence invitée au *X<sup>e</sup> Congrès des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine* organisé du 25 au 27 septembre 1979 dans le cadre du centenaire de l'Ecole de Chimie de l'Université de Genève par M. Jacques Weber et M. Laurens Jansen.

*Addenda.* Le 10 septembre 1979, Harari (1979) et Shupe (1979) ont indépendamment publié un modèle de composants (en commun) des quarks et des leptons. Harari

nomme ces entités *rishons*, il existerait seulement deux (T, charge  $e/3$ ) et (V, neutre) et leurs deux anti-particules  $\bar{T}(-e/3)$  et  $\bar{V}$  (neutre aussi). Shupe utilise le mot *quips* que j'avais proposé pour l'autre type à charge encore plus faible (par exemple  $e/21$ ). Les fermions les plus simples consistent en trois rishons. Le positron (TTT) et le neutrino (VVV) contiennent trois rishons identiques. Les trois couleurs viennent des dégénérescences de (TTV) pour le quark  $u$ , et (TVV) pour l'anti-quark  $\bar{d}$ . Il faudra trouver les raisons pour lesquelles (VVV) n'a pas de masse de repos (et se déplacent donc avec la vitesse  $c$  vue par tous les observateurs) tandis que (TTT) et l'électron ( $\bar{TTT}$ ) ont le poids atomique 0,00054858, plusieurs milliers de fois plus petit que (TTV) et ( $\bar{TVV}$ ), les constituants des protons et neutrons. Comme Shupe le souligne, il n'est pas clair si les photons se forment d'un quip et un anti-quip, ou plutôt de trois quips et trois anti-quips (comme les mésons). La réaction très lente de dismutation  $2(\text{TTV}) \Rightarrow (\text{TVV}) + (\text{TTT})$  contribue à la durée finie du proton. On peut noter que les seuls nombres d'objets  $q$  qui sont identiques avec leur nombre de relations (comme leurs distances mutuelles) sont  $q=0$  et 3. Un atome neutre « contiendrait »  $(6Z + 3N)$  rishons, mais  $(6Z + 6N)$  anti-rishons.

Si ce modèle est viable, l'avantage principal est une explication des *générations* de quarks et leptons plus en plus massifs, la première génération étant le positron, le neutrino,  $u$  et  $\bar{d}$ , et la deuxième le muon, son neutrino muonique,  $s$  et  $c$  (et leurs anti-particules). Les rishons ou quips ne sont pas eux-mêmes porteurs de masse de repos, qui est concentrée dans les champs de l'interaction presque ponctuels, qui doivent aussi protéger cinétiquement contre la recombinaison (l'annihilation) des rishons et anti-rishons.

#### BIBLIOGRAPHIE

- CAMPAGNA, M., G. K. WERTHEIM et E. BUCHER (1976) — Spectroscopy of homogeneous mixed valence rare earth compounds. *Structure and Bonding*, 30, pp. 99-140.
- CAPRA, F. (1979) — Quark physics without quarks — Review of recent developments in S-matrix theory. *Amer. J. Phys.*, 47, pp. 11-23.
- CONDON, E. U. and G. H. SHORTLEY (1953) — Theory of Atomic Spectra. Cambridge University Press.
- DE RUJULA, A., R. C. GILES, and R. L. JAFFE (1978) — Unconfined quarks and gluons. *Phys. Rev.*, D17, pp. 285-301.
- DRELL, S. D. (1978) — When is a particle? *Physics Today*, 31 (June 1978) pp. 23-32.
- FEYNMAN, R. P. (1974) — Structure of the proton. *Science*, 183, pp. 601-610.
- GELL-MANN, M., P. RAMOND and R. SLANSKY (1978) — Color embeddings, charge assignments, and proton stability in unified gauge theories. *Rev. Mod. Phys.*, 50, pp. 721-744.
- HARARI, H. (1979) — A schematic Model of Quarks and Leptons. *Physics Letters*, 86B, pp. 83-86.
- HUND, F. (1927) — Linienspektren und Periodisches System der Elemente. Julius Springer, Berlin.
- JØRGENSEN, C. K. (1962) — Orbitals in Atoms and Molecules. Academic Press, Londres.
- JØRGENSEN, C. K., R. PAPPALARDO and H. H. SCHMIDTKE (1963) — Do the « ligand field » parameters in lanthanides represent weak covalent bonding? *J. Chem. Phys.*, 39, pp. 1422-1430.
- JØRGENSEN, C. K. (1965) — Orbitales moléculaires dans les chromophores minéraux et paramètres angulaires  $\Xi$  de liaison covalente. *J. Physique*, 26, pp. 825-840.
- JØRGENSEN, C. K. (1969) — Oxidation Numbers and Oxidation States. Springer-Verlag, Berlin.

- JØRGENSEN, C. K. (1971) — Modern Aspects of Ligand Field Theory. North Holland Publ. Co., Amsterdam.
- JØRGENSEN, C. K. (1975) — Partly filled shells constituting anti-bonding orbitals with higher ionization energy than their bonding counterparts. *Structure and Bonding*, 22, pp. 49-81.
- JØRGENSEN, C. K. (1978a) — Predictable quarkonium chemistry. *Structure and Bonding*, 34, pp. 19-38.
- JØRGENSEN, C. K. (1978b) — Kossel isoelectronic series and photoelectron spectra. *Advances in Quantum Chemistry*, 11, pp. 51-91.
- JØRGENSEN, C. K. (1979a) — The periodic table and induction as basis of chemistry. *J. chim. physique* (76, pp. 630-635).
- JØRGENSEN, C. K. (1979b) — The persistence of p, d, f and g orbitals in compounds. *Israeli Journal of Chemistry* (sous presse).
- JØRGENSEN, C. K. (1980) — Lanthanides and Elements from Thorium to 184 (sous préparation). Academic Press, Londres.
- KATRIEL, J. and R. PAUNCZ (1977) — Theoretical interpretation of Hund's rule. *Advances in Quantum Chemistry*, 10, pp. 143-187.
- MARCIANO, W. and H. PAGELS (1979) — Quantum chromodynamics. *Nature*, 279, pp. 479-483.
- MULVEY, J. (1979) — The new frontier of particle physics. *Nature*, 278, pp. 403-409.
- RACAH, G. (1949) — Theory of complex spectra IV. *Phys. Rev.*, 76, pp. 1352-1365.
- REISFELD, R. and C. K. JØRGENSEN (1977) — Lasers and Excited States of Rare Earths. Springer Verlag, Berlin.
- SCHÄFFER, C. E. (1968) — A perturbation representation of weak covalent bonding. *Structure and Bonding*, 5, pp. 68-95.
- SCHÄFFER, C. E. (1973) — Two symmetry parameterizations of the angular-overlap model of the ligand field. *Structure and Bonding*, 14, pp. 69-110.
- SHUPE, M. A. (1979) — A composite model of leptons and quarks. *Physics Letters*, 86B, pp. 87-92.
- SMITH, D. W. (1978) — Applications of the angular overlap model. *Structure and Bonding*, 35, pp. 87-118.
- WALLACE, W. E., S. G. SANKAR and V. U. S. RAO (1977) — Crystal field effects in rare-earth intermetallic compounds. *Structure and Bonding*, 33, pp. 1-55.

