

# La physique de la matière condensée va-t-elle redécouvrir l'espace?

Michel Peyrard  
Institut Universitaire de France  
Ecole Normale Supérieure de Lyon  
46 allée d'Italie, 69364 Lyon Cédex 07

## 1 Introduction.

A Toulouse, cité de l'espace, il aurait peut-être été bon de parler de l'espace considéré à l'échelle astronomique. C'est à une toute autre échelle que cet article s'intéresse puisqu'il s'agit de la matière vue au niveau microscopique des atomes et des molécules.

Cette échelle est si petite que l'on ne peut y observer directement les objets. On a donc recours à des méthodes indirectes qui ont conduit naturellement les physiciens du solide à une vision de l'espace qui n'est pas celle de l'espace ordinaire. La physique des solides travaille traditionnellement dans un espace "dual" de notre espace habituel, appelé aussi espace réciproque. La notion de position absolue n'y existe pas, les longueurs ne sont pas des distances mais au contraire leurs inverses; l'unité est le mètre<sup>-1</sup> et non le mètre. Mais cette vision de l'espace est en train de changer, d'une part grâce au progrès des techniques qui commencent à permettre l'observation directe à l'échelle atomique, mais aussi en raison des développements de la théorie qui a mis en évidence les limites des descriptions dans l'espace réciproque et introduit de nouveaux concepts qui redonnent un sens à l'espace réel au niveau microscopique.

La première partie montre comment la physique des solides a été conduite naturellement à introduire une description de la matière utilisant l'espace réciproque. Nous nous appuyons pour cela sur quelques expériences simples utilisant des "modèles de solides". La seconde partie indiquera les succès de la vision dans l'espace réciproque mais montrera aussi comment elle a pu retarder la compréhension de certains phénomènes. Nous verrons enfin dans une dernière partie quels concepts émergent actuellement et comment ils s'appliquent aux solides mais peut-être plus encore aux macromolécules biologiques et pourquoi ils aideront peut-être à comprendre certains mécanismes fondamentaux de la vie comme la transcription de l'ADN.

## 2 La vision traditionnelle de l'espace en physique des solides: l'espace réciproque.

Dans leur grande majorité les solides sont des cristaux. Un bloc de fer ne correspond peut-être pas à l'image que l'on se fait d'habitude d'un cristal qui fait plutôt penser à la transparence d'un diamant ou aux formes régulières d'un quartz. Il est pourtant constitué d'un assemblage de micro cristaux qui sont des empilements d'atomes placés sur un réseau parfaitement régulier. Les dimensions de la maille élémentaire d'un tel cristal sont si petites,

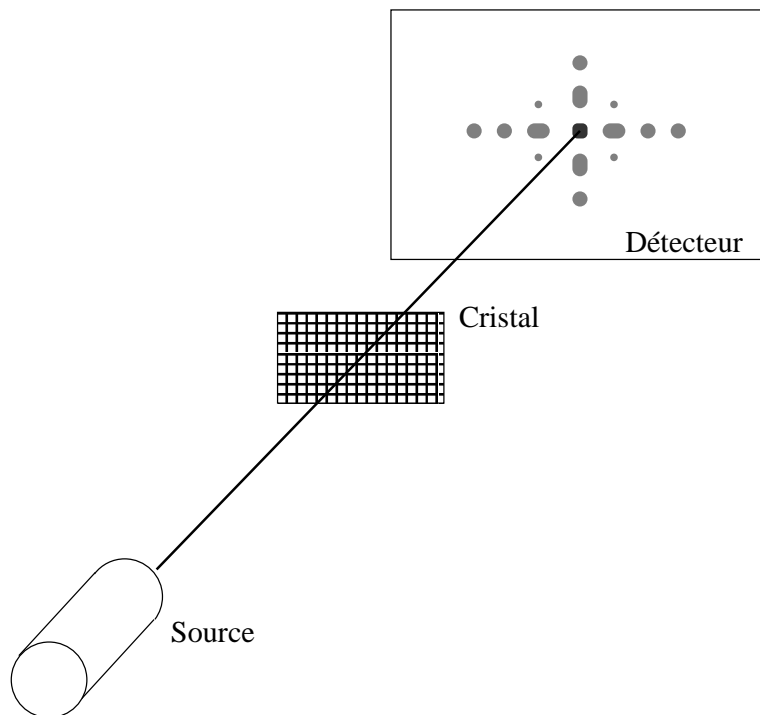


FIG. 1 – Représentation schématique d'une expérience de diffraction par un cristal.

de l'ordre de l'angström, soit du dix milliardième de mètre, que même dans un micro cristal de quelques microns de côté les alignements réguliers d'atomes s'étendent sur plusieurs dizaines de milliers d'atomes dans chaque direction. Les dimensions si faibles des mailles cristallines les ont rendues très longtemps inaccessibles à l'observation directe, mais la régularité des structures cristallines peut être mise à profit pour déterminer néanmoins avec une très grande précision la structure microscopique d'un solide.

Pour cela on utilise des expériences de diffraction des rayons X ou des neutrons<sup>1</sup> dont le principe est schématisé sur la figure 1. Le cristal est illuminé par une onde qui est diffusée dans des directions bien déterminées par les atomes qui le composent et donne sur un détecteur une figure composée de taches dont la position et l'intensité permettent de déterminer l'arrangement des atomes.

La figure 2 permet de comprendre le principe de l'expérience. On constate que, pour une distance donnée entre les deux atomes qui diffusent, dans certaines directions de diffusion on obtient deux ondes en phase, ce qui donnera une intensité non nulle, et dans d'autres deux ondes en opposition de phase et il n'y aura pas d'intensité dans cette direction car les deux amplitudes se retranchent. Comme le cristal est un milieu régulier, le même phénomène se répète avec tous les couples d'atomes voisins et le rayonnement n'est diffusé par le matériau que dans des directions bien spécifiques. On observe sur le récepteur un ensemble de taches qui constituent *l'image de diffraction du cristal*. Cette image de diffraction, qui permet de

1. Les neutrons sont des particules, mais, comme le montre la mécanique quantique ils présentent également des propriétés ondulatoires et on peut analyser la diffraction des neutrons de la même manière qu'on le fait pour les rayons X.

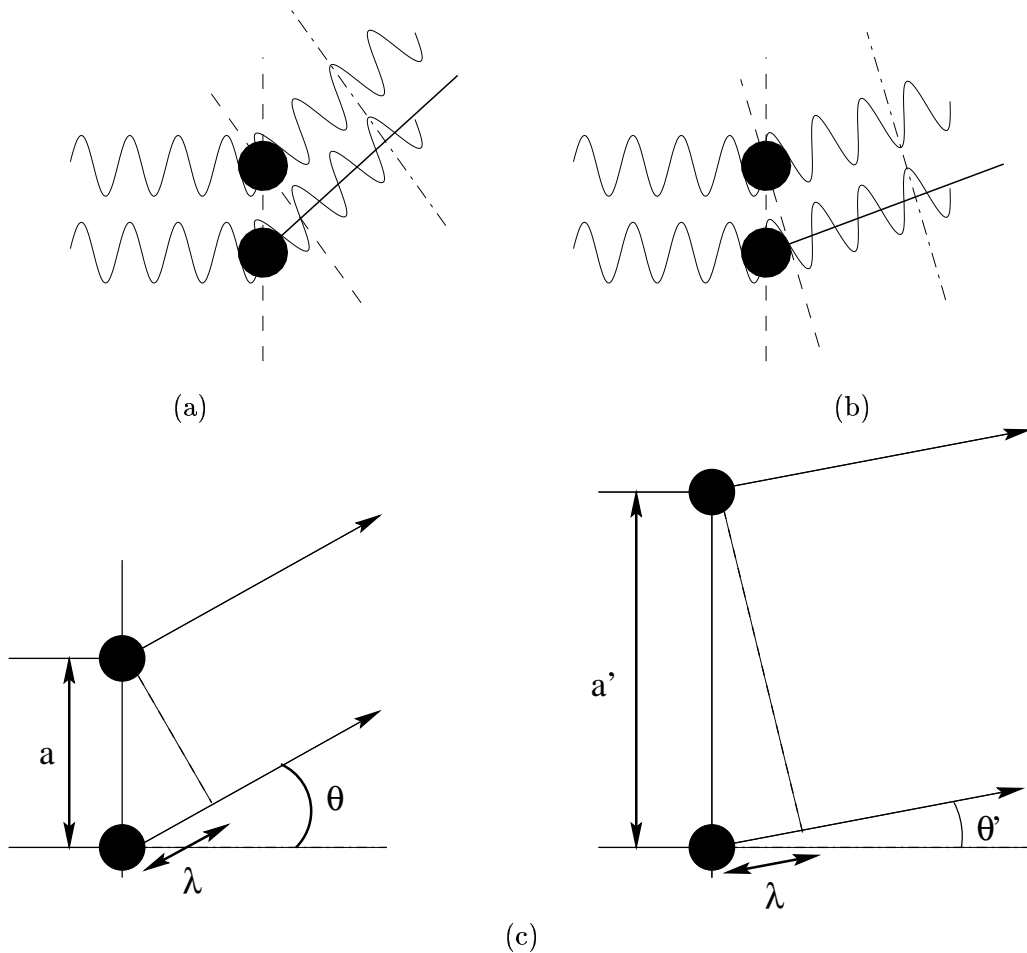


FIG. 2 – Principe d'une expérience de diffraction par un cristal. Dans le cas (a) la direction d'observation est telle que les deux ondes diffusées sont en phase. Les amplitudes des deux ondes s'ajoutent. Il y aura une onde diffractée dans cette direction. Dans les cas (b) la direction de diffraction est telle que les deux ondes sont en opposition de phase. Les amplitudes se retranchent et l'intensité totale sera nulle dans cette direction. La figure (c) montre que si la distance entre les atomes augmente, pour obtenir la même différence de chemin entre les ondes diffusées par les deux atomes, l'angle de diffraction diminue. Les taches de diffraction seront plus rapprochées sur le récepteur et la figure de diffraction sera donc plus petite. Cette observation montre que les distances dans le réseau réciproque évoluent comme à l'inverse des longueurs réelles.

reconstituer les positions relatives des atomes, donne une vision de la matière qui n'est pas celle de l'espace réel auquel nous sommes habitués. Les directions des rayons qui forment les taches de diffraction sont définies par des vecteurs  $\vec{k}$  qui joignent les noeuds d'un réseau appelé *réseau réciproque*, qui est différent du réseau réel. Cet espace réciproque, que les mathématiciens appellent *l'espace dual* de l'espace réel, ne contient pas l'information sur la position absolue d'un atome. Seules leurs positions *relatives* interviennent. C'est pourquoi, dans l'expérience de diffraction, on peut déplacer le cristal dans le faisceau sans changer l'image de diffraction. Il y a bien d'autres différences entre l'espace réel et l'espace réciproque. Ainsi, comme le montre la figure 2(c), si la dimension de la maille cristalline augmente, les taches se rapprochent sur le récepteur, la dimension de l'image de diffraction diminue. Dans le réseau réciproque les distances entre les noeuds ne sont pas des longueurs mais *l'inverse de longueurs* (l'unité est le mètre<sup>-1</sup> et non le mètre). Un objet quelconque peut être examiné soit du point de vue de l'espace réel où il aura par exemple une dimension  $\Delta x$ , soit du point de vue de l'espace réciproque dans lequel sa dimension sera  $\Delta k$ . Ces deux quantités sont reliées par une "relation d'incertitude"  $\Delta x \times \Delta k \geq 1/4\pi$  qui implique que tout ce qui est bien localisé dans l'espace réel est très étendu dans l'espace réciproque, et vice-versa.

Ainsi la détermination expérimentale de la structure des matériaux conduit naturellement les physiciens du solide à une vision de l'espace, différente de notre vision habituelle, qui influence la description théorique de tous les phénomènes microscopiques. Par exemple lorsqu'on étudie la dynamique du cristal, la théorie des vibrations des atomes autour de leurs positions d'équilibre s'exprime simplement dans l'espace réciproque. Mathématiquement cet espace réciproque est le *transformé de Fourier* de l'espace réel. Or les équations qui décrivent les *petits mouvements* des atomes sont des équations linéaires qui se résolvent aisément en effectuant une transformation de Fourier. Les solutions élémentaires sont des ondes dont le vecteur d'onde  $\vec{k}$  est défini dans l'espace réciproque. La grandeur qui intervient dans le calcul est la différence de phase entre les mouvements de deux atomes. Comme dans le cas de la diffraction des rayons X, ce sont les positions relatives des atomes qui interviennent et là encore la notion de position absolue dans l'espace n'intervient pas. Les ondes de vibration, qui sont localisées dans l'espace réciproque, sont infiniment étendues dans l'espace réel. Pour se convaincre de la validité de cette description, il suffit de considérer un modèle simple de réseau atomique constitué par une chaîne d'oscillateurs couplés. Si on excite localement ce système on constate rapidement la formation d'une onde d'oscillation qui s'étend à l'ensemble du réseau. (Fig. 3).

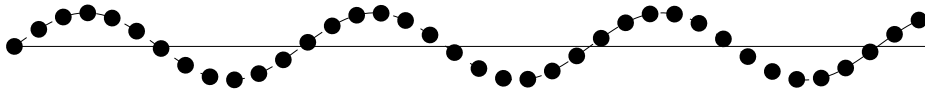


FIG. 3 – Aspect de l'onde de vibration observée quand on excite localement une chaîne d'oscillateurs harmoniques couplés qui constitue un modèle simplifié de réseau cristallin à une dimension. Le mouvement initié localement se propage rapidement à l'ensemble du réseau sous forme d'une onde dont le vecteur d'onde appartient au réseau réciproque.

Un autre grand domaine de la théorie des solides est l'étude des électrons dans les cris-

taux. Leurs états d'énergie déterminent les propriétés électriques des matériaux: aura-t-on un isolant, un conducteur, un semi-conducteur? L'étude des états électroniques se fait par la mécanique quantique et repose sur le théorème de Bloch qui montre que les énergies des électrons appartiennent à des bandes d'énergies permises dont les valeurs  $E(\vec{k})$  s'expriment en fonction de vecteurs  $\vec{k}$  situés dans l'espace réciproque. Une fois encore la vision du théoricien des solides est ainsi orientée naturellement vers l'espace réciproque.

### 3 Succès et difficultés de la vision dans l'espace réciproque.

Les raisonnements fondés sur l'espace réciproque, qui sous-tendent une très large part de la physique des solides, ont conduit à des succès considérables qui ont même bouleversé la vie de tous. Sans la théorie des bandes d'énergie électronique dans les solides, il n'y aurait pas de transistor, pas d'ordinateur, et notre société serait sans doute bien différente.

La théorie de la supra-conductivité à basse température, qui a valu le prix Nobel à Bardeen, Cooper et Schrieffer en 1972 est une démonstration remarquable du sens physique de l'espace réciproque. Elle montre que des électrons dont les fonctions d'ondes sont indexées par deux vecteurs opposés de l'espace réciproque forment des paires, appelées paires de Cooper, qui peuvent ensuite se condenser en un état cohérent dans lequel le matériau est supra-conducteur. Cette théorie est remarquablement vérifiée par l'expérience.

En dépit de ses succès incontestables la description dans l'espace réciproque a parfois conduit les physiciens du solide à des blocages qui ne se résolvent que si l'on revient à l'espace réel. La supra-conductivité à haute température, dont la découverte a valu le prix Nobel à Bednorz et Müller en 1987 résiste actuellement à toutes les analyses théoriques mais il semble de plus en plus probable que la solution de ce problème fera intervenir des excitations localisées dans l'espace réel et non dans l'espace réciproque. Philip Anderson<sup>2</sup> a écrit à ce sujet "il est temps que nous ouvrons notre esprit à d'autres méthodes de pensée".

Un autre exemple particulièrement caractéristique des blocages que peut engendrer un raisonnement exclusif dans l'espace réciproque est le "*paradoxe de Fermi-Pasta-Ulam*" qui est resté incompris pendant 10 ans jusqu'à ce que l'on examine le problème dans l'espace réel.

Le problème a été posé par une des premières expériences numériques au monde, effectuée en 1955 sur le "MANIAC", premier ordinateur construit à Los Alamos. E. Fermi, J. Pasta and S. Ulam ont voulu profiter de ce nouvel outil pour observer un des résultats classiques de la physique statistique, l'équipartition de l'énergie. Comme nous l'avons indiqué précédemment, les solutions élémentaires des équations décrivant les petites vibrations des atomes d'un solide sont des ondes planes, appelées "modes propres", caractérisées par un vecteur de l'espace réciproque. A la limite des très faibles amplitudes les équations du mouvement sont linéaires, ce qui signifie que la somme de deux solutions est aussi une solution. Dans ce cas les modes sont totalement indépendants les uns des autres, leur excitation simultanée constituant une simple superposition. Mais les matériaux réels ne sont jamais décrits par des équations linéaires. L'approche conventionnelle consiste à conserver la description en modes, c'est à dire à raisonner dans l'espace réciproque, mais en tenant compte du fait que les modes ne sont plus indépendants. Si l'on excite sélectivement l'un d'entre eux, il transmet progressivement une partie de son énergie à d'autres modes et la physique statistique prévoit que, lorsque l'équilibre est atteint, on a une équipartition de l'énergie entre tous les modes. Fermi,

---

2. Prix Nobel de Physique en 1977

Pasta et Ulam ont voulu voir comment se faisait l'évolution vers cette équipartition en simulant numériquement la dynamique d'une chaîne de 64 particules interagissant selon un potentiel anharmonique qui conduit à des équations non-linéaires couplant les modes. Ils ont placé l'énergie initiale dans un mode de Fourier particulier, et ont étudié la façon dont elle se distribuait par la suite. A leur grande surprise, après une première phase durant laquelle l'énergie a commencé à se répartir sur différents modes de Fourier, elle est revenue en totalité dans le mode initial, reconstituant l'état de départ. En poursuivant le calcul plus longtemps, on observe des récurrences successives de l'état initial sans évolution vers l'équipartition de l'énergie.

Ce résultat numérique a suscité beaucoup de recherches car il semblait contradictoire avec les fondements de la physique statistique. Pendant près de 10 ans il est resté mystérieux, d'où le nom de "Paradoxe FPU" (pour Fermi-Pasta-Ulam), car toutes les analyses étaient effectuées dans l'espace réciproque. En 1964 Zabusky et Kruskal ont eu l'idée de représenter les résultats de simulation dans l'espace réel. L'origine du paradoxe leur est immédiatement apparue car la figure montrait que l'onde initiale, étendue à l'ensemble du réseau, évoluait vers des *modes localisés dans l'espace réel* (et donc de structure très complexe dans l'espace de Fourier car ils y sont très étendus) qui étaient exceptionnellement stables. Ces "ondes solitaires" (au sens où, au lieu d'une ondulation qui se répète, elles ne comportent qu'un seul maximum) ont été appelées *solitons* par Zabusky et Kruskal car elles sont extrêmement stables, se propagent en conservant un profil constant, et se comportent comme des quasi-particules qui entrent en collision sans se détruire. La récurrence de FPU se produit simplement quand ces quasi-particules, après de multiples allers et retours le long du réseau, se retrouvent dans la même position qu'à l'instant initial. Pour étudier théoriquement les solitons il faut renoncer complètement à la description en modes de Fourier car il faudrait une infinité de modes pour décrire une onde solitaire, et travailler dans l'espace réel. Cette découverte a donné naissance à toute une branche des mathématiques appliquées et on a appris à déterminer quels sont les systèmes qui peuvent présenter ces ondes solitaires. Fermi, Pasta et Ulam, en choisissant leur modèle, avaient trouvé l'un d'eux!

## 4 Retour à l'espace réel: les modes localisés dans les solides et les macromolécules biologiques.

Le paradoxe FPU est très intéressant d'un point de vue théorique mais il reste marginal en physique des solides car, pour qu'un système ait des solutions de type soliton à profil constant, il faut qu'il réponde à des conditions sélectives, et en particulier qu'il soit unidimensionnel. Ce qui est possible sur la chaîne de particules choisie par Fermi, Pasta et Ulam car ils ne disposaient que d'un ordinateur bien moins performant qu'une calculatrice d'aujourd'hui, n'est plus valable dans le réseau tridimensionnel d'un cristal, sauf lorsqu'on se place volontairement dans des conditions très particulières.

Doit-on en conclure que la description des solides dans l'espace réciproque l'a finalement emporté définitivement? Ce serait un peu hâtif car la découverte des solitons a introduit de nouveaux concepts, et conduit à de nouvelles découvertes, de portée bien plus générale que les solitons du modèle FPU, en physique du solide et des macromolécules. C'est de ces nouveaux objets que je veux vous parler dans la dernière partie. Nous verrons en particulier que Fermi, Pasta et Ulam n'avaient pas tort de se poser des questions sur la notion d'équipartition d'énergie.

Il y a une dizaine d'années, on s'est aperçu que les réseaux non-linéaires ont des solutions oscillantes localisées, qui sont solutions exactes des équations du mouvement, et existent dans une très large variété de systèmes, y compris les réseaux tridimensionnels. Contrairement aux solitons de FPU ces "modes localisés intrinsèques" sont très généraux. De plus, nous avons montré qu'ils peuvent se former spontanément dans de nombreux systèmes pourvu qu'on fournisse assez d'énergie, même si cette énergie est initialement injectée sous une forme non localisée, de sorte qu'ils sont susceptibles d'être présents dans une large variété de systèmes physiques, et en particulier les macromolécules biologiques.

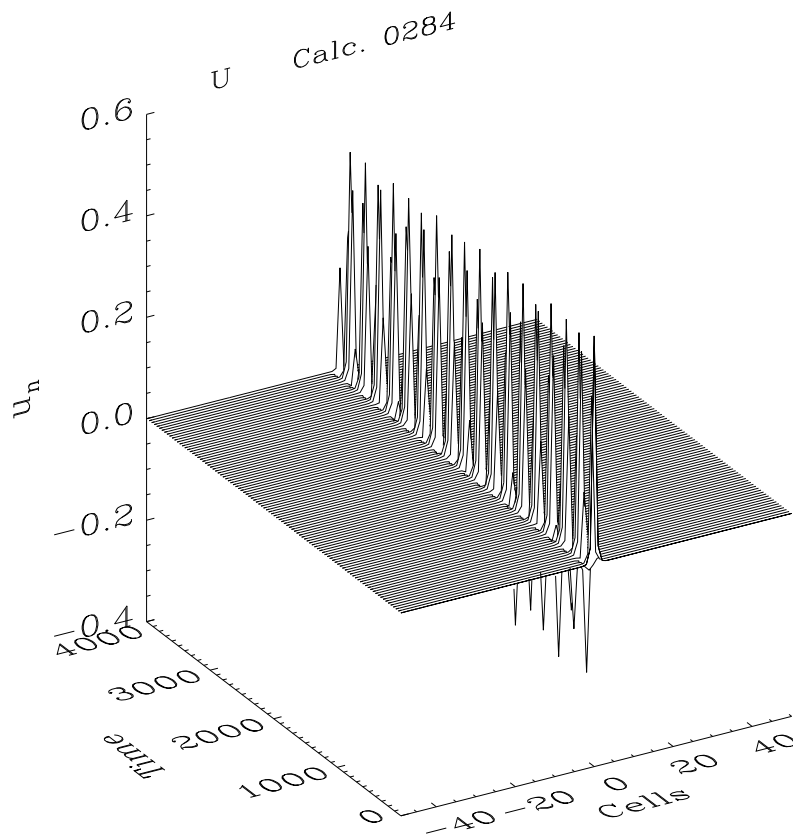


FIG. 4 – *Dynamique d'une chaîne d'oscillateurs non-linéaires excitée localement. La figure représente selon l'axe vertical le déplacement des atomes à différents instants. Contrairement au cas des oscillateurs harmoniques représenté sur la figure 3, on constate que le mouvement reste localisé dans l'espace.*

Les propriétés des modes localisés par effet non-linéaire sont assez étonnantes, comme on peut s'en convaincre en expérimentant avec une chaîne de pendules couplés. Si l'on excite localement la chaîne avec une très faible amplitude, on voit se former des ondes analogues à celles de la figure 3 et l'énergie se répand rapidement à l'ensemble de la chaîne. Si on recommence l'expérience en *augmentant* très fortement l'énergie injectée localement en donnant à l'un des pendules une amplitude très grande, on constate que les pendules éloignés reçoivent *beaucoup moins d'énergie* que dans l'expérience précédente. Le mouvement reste

parfaitement localisé autour du site d'excitation comme le montre la figure 4. Ce résultat qui contredit l'intuition se comprend pourtant très bien si l'on songe que la caractéristique d'un oscillateur anharmonique est d'avoir une fréquence qui dépend de son amplitude. Ainsi, si l'on excite très faiblement l'oscillateur central, sa fréquence reste pratiquement identique à la fréquence propre de vibration de ses voisins encore au repos et son mouvement se transmet donc aisément à son voisinage. Comme nous le verrons à plusieurs reprises, la sociologie des oscillateurs n'est pas très différente de celle des humains: si on les sollicite dans le sens qui correspond à leur penchant naturel, ils répondent! Si au contraire on donne une très grande amplitude à l'oscillateur central, sa fréquence s'écarte fortement de la fréquence propre de ses voisins encore au repos et il n'est pas efficace pour les entraîner dans le mouvement.

Ainsi l'existence du mode localisé, qui particularise une région de l'espace réel, est associée à la présence d'un *désordre dynamique* dans la chaîne de pendules. Les pendules, qui sont pourtant physiquement identiques, prennent des propriétés différentes s'ils ont des mouvements différents. Dans ce cas la description dans l'espace réciproque n'est plus adaptée. Rappelons nous que la régularité du réseau cristallin était un élément important de l'interprétation de l'expérience de diffraction qui introduisait le réseau réciproque. Si cette régularité est brisée, même seulement de manière dynamique, l'espace réciproque n'est plus l'espace qui convient pour analyser les mouvements. Cette approche intuitive se retrouve aussi au niveau mathématique lorsqu'on résout les équations du mouvement de la chaîne de pendules. A partir du moment où des mouvements de grande amplitude interviennent la description par transformation de Fourier (passage à l'espace réciproque) ne s'applique plus. Dans les solides cristallins très rigides il est difficile d'atteindre des amplitudes assez grandes pour que les effets anharmoniques deviennent importants et c'est pourquoi la physique des solides a pu se contenter pendant longtemps des descriptions en modes de Fourier. Les modes localisés ont d'autant plus de chance de se former que l'on a affaire à des matériaux très déformables, comme les cristaux plastiques (matériaux organiques à liaisons faibles) ou les macromolécules biologiques.

Dans l'expérience décrite précédemment on forme un mode localisé en excitant un oscillateur particulier. Ce qui est possible sur un modèle macroscopique est beaucoup plus difficile au niveau des atomes. On pourrait donc penser qu'il sera difficile d'observer ces modes particuliers à l'échelle atomique. En fait il n'en est rien car les modes localisés se forment *spontanément* à partir d'une distribution d'énergie étendue spatialement comme le montre la figure 5 qui représente par une échelle de gris la densité locale d'énergie dans une chaîne de 256 oscillateurs non linéaires. Initialement (bas de la figure) l'énergie est uniformément répartie, et c'est pourquoi on observe une teinte grise unie. On constate qu'en peu de temps la densité d'énergie perd son uniformité. En se déplaçant le long de la chaîne on observe une succession de zones alternativement plus sombres et plus claires. Ce phénomène est appelé "instabilité modulationnelle" et correspond au fait que l'onde ne reste pas strictement plane. Elle se module spontanément et présente des régions où l'amplitude dépasse l'amplitude initiale. La même observation peut être faite avec la chaîne de pendules si au lieu d'exciter un seul pendule on les écarte tous de la même quantité par rapport à la verticale avant de les lâcher. Les régions ayant pris une plus grande amplitude représentent en quelque sorte des "germes" de modes localisés. On constate qu'elles se déplacent dans le système et parfois entrent en collision (rencontre de deux lignes grises sur la figure). Au cours de ces interactions, on note que le monde des oscillateurs non-linéaires est aussi impitoyable pour les faibles que le nôtre: lorsque deux modes localisés d'amplitudes différentes se rencontrent, après leur séparation le plus grand a pris un peu d'énergie au plus petit, le riche est un peu plus riche, et le pauvre un



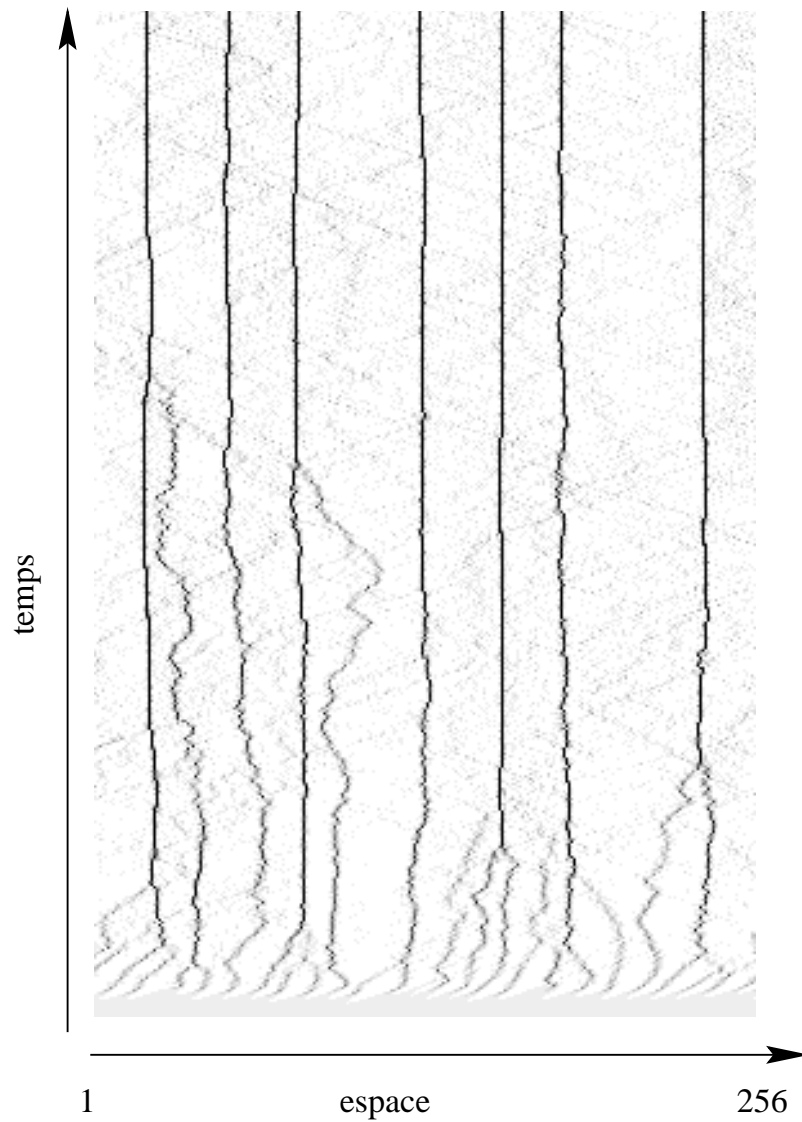


FIG. 5 – Evolution temporelle de la densité d'énergie dans une chaîne d'oscillateurs anharmoniques excitée par une onde plane. L'axe horizontal correspond à l'espace et l'axe vertical au temps, l'instant initial étant au bas de la figure. La densité d'énergie est représentée par une échelle de gris, les valeurs les plus sombres correspondant à une énergie élevée. Initialement on part d'une énergie moyenne répartie uniformément (gris unis) et on voit se former des zones où la densité d'énergie devient très élevée (traces noires).

peu plus pauvre! Il s'agit d'un effet statistique. Il arrive que le plus petit gagne de l'énergie mais c'est un événement rare. Et si le phénomène se répète, les riches deviennent de plus en plus riches. C'est exactement ce que l'on constate sur la figure 5. On observe des lignes noires qui correspondent à des modes localisés de très grande amplitude, ayant donc une très grande densité d'énergie, sur un fond clair correspondant à une densité d'énergie très faible.

Il y a cependant une morale à cette histoire. Nous avons en effet indiqué que c'était la non-linéarité, associée aux grandes amplitudes, qui était responsable de la localisation. C'est pourquoi, en même temps que certains modes deviennent de plus en plus intenses, ils deviennent de plus en plus étroits. Au lieu de couvrir un grand nombre de sites et donc de moyenniser les irrégularités qui proviennent du fait qu'ils se déplacent sur un réseau discret et non dans un milieu continu, les modes de plus grande amplitude deviennent si étroits qu'ils finissent par être piégés par la discrétisation du réseau. C'est pourquoi, sur la figure 5, les lignes les plus sombres deviennent exactement verticales en haut de la figure (pour les temps longs). Les échanges d'énergie entre modes localisés cessent car ils ne se rencontrent plus et l'autolocalisation de l'énergie ne conduit pas à la formation d'un mode localisé unique, d'amplitude très grande, mais simplement à la formation d'un petit nombre de modes isolés les uns des autres.

Cette tendance à l'autolocalisation de l'énergie, que nous avons décrite sur l'exemple particulier d'une chaîne d'oscillateurs, est un phénomène très général. On l'observe également dans des réseaux à deux ou trois dimensions, ayant une structure complexe dans chaque maille, et non seulement pour des oscillations mais aussi en présence de mouvement de rotation, comme dans les cristaux plastiques.

Si l'on repense à l'équipartition de l'énergie que voulaient vérifier Fermi-Pasta-Ulam, on peut se demander ce qu'il en est ici puisque, au lieu d'avoir une évolution vers une situation où l'énergie se répartit uniformément entre les degrés de liberté, on trouve au contraire qu'elle tend spontanément à se localiser. Faut-il renoncer à ce résultat fondamental de la physique statistique? La réalité est plus complexe que cette discussion ne pourrait le laisser penser car, dans la simulation numérique présentée sur la figure 5 on ne considère pas un système en équilibre statistique, en contact avec un thermostat qui contrôle sa température. On part d'une situation très spécifique, et on regarde évoluer un système totalement découplé de tout environnement extérieur. Il existe cependant des situations réelles où l'on doit s'interroger sur l'équipartition de l'énergie. La figure 6 présente l'une d'elles. Il s'agit de la dénaturation thermique de l'ADN.

La célèbre découverte de la structure en double hélice de l'ADN par Watson et Crick en 1953, a attiré l'attention sur la relation structure-fonction en biologie moléculaire. On sait maintenant que la structure ne suffit pas. La dynamique est également très importante. Si elle était purement statique, la structure en double hélice empêcherait la lecture du code génétique puisque les paires de bases qui codent l'information sont situées à l'intérieur de la molécule, et donc inaccessibles pour la réaction chimique. C'est peut-être cette constatation qui avait conduit Pauling à proposer une structure de l'ADN qui s'est révélée incorrecte, dans laquelle les bases étaient à l'extérieur. Pour lire le contenu d'un gène, il faut ouvrir localement l'ADN. Il est tentant pour le physicien d'essayer de comprendre le mécanisme de la transcription à l'échelle microscopique, mais c'est un problème difficile car il est contrôlé par une enzyme de structure elle-même très complexe. La première étape consiste à étudier la dynamique de l'ADN seul, qui est déjà très intéressante. On sait que, à la température physiologique, la molécule "respire", c'est à dire que les paires de bases s'ouvrent temporairement localement.

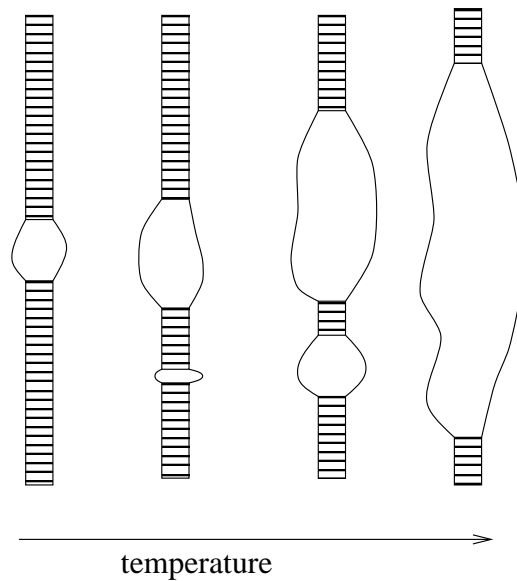


FIG. 6 – Représentation schématique de la dénaturation thermique de la double hélice d’ADN. Liaisons entre les deux bases d’une paire de Watson-Crick sont représentées par les segments horizontaux. Les brins sucre-phosphate sont représentés par de simples lignes. L’ouverture de l’hélice débute localement avant d’envahir la totalité de la molécule quand on augmente la température.

On peut observer ce phénomène par spectroscopie et surtout par ses conséquences chimiques comme l’échange hydrogène-deutérium qui devient possible pour les atomes d’hydrogène qui sont engagés dans des liaisons entre les deux bases d’une paire de Watson-Crick, ou le piégeage de petites molécules à l’intérieur de la structure de l’ADN quand les bases se referment. Ce piégeage est mis à profit pour colorer l’ADN et permettre son observation en microscopie, mais il correspond aussi à la création d’un défaut dans le code génétique et est probablement à l’origine du pouvoir carcinogène de certains composés. Une autre observation intéressante est le comportement de l’ADN à haute température (vers 70° C). On observe une dénaturation thermique qui conduit à la séparation des deux brins. Elle ne se produit pas de manière homogène mais commence localement. On observe d’abord la formation de petites régions ouvertes, appelées “bulles de dénaturation”, qui grandissent, envahissent toute la molécule et conduisent finalement à la séparation complète des deux brins selon le scénario schématisé sur la figure 6. Ce phénomène est observé même avec des ADN artificiels dans lesquels toutes les paires de bases sont identiques. Pour un physicien du solide, cette dénaturation est très analogue à la transition de phase de fusion d’un cristal, qui conduit à la destruction du réseau, mais il s’agit de *fusion à une dimension*. Le fait qu’elle débute localement fait jouer un rôle particulier à *l’espace réel*, ce qui est difficile à comprendre avec les descriptions habituelles de la dynamique qui s’appuient sur les modes normaux paramétrés dans l’espace réciproque. Si on pense aux modes localisés non linéaires, la difficulté disparaît.

On peut s’en rendre compte en considérant un modèle très simplifié de la molécule d’ADN dans lequel on ne cherche pas à introduire tous les degrés de liberté des mouvements atomiques, mais seulement la distance entre les deux bases d’une paire de Watson-Crick[3, 4]. C’est une approche qui peut sembler très réductionniste et elle ne prétend évidemment pas

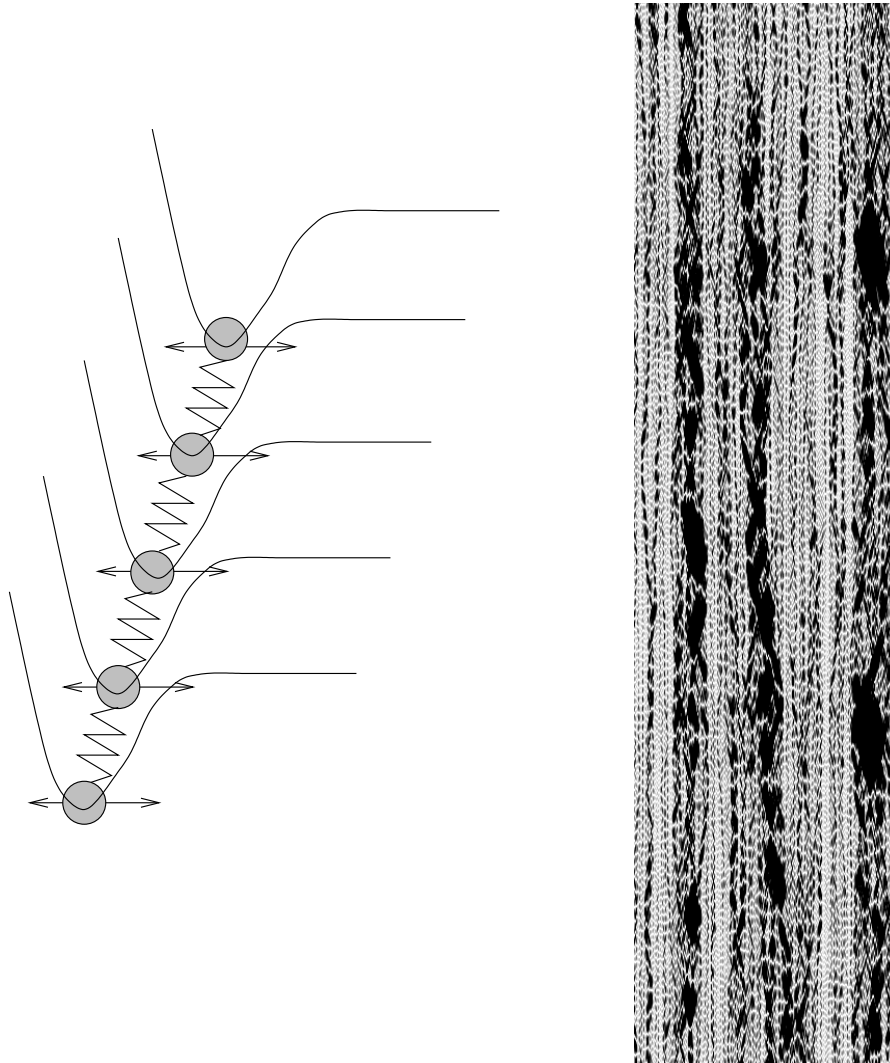


FIG. 7 – Simulation numérique de la dénaturation thermique de l'ADN à partir d'un modèle simplifié de la molécule qui n'étudie que la distance entre les paires de bases. La dynamique de la molécule est formellement analogue à celle de la chaîne de particules placées dans un potentiel de Morse représenté à gauche. Le déplacement des particules dans le sens horizontal est l'équivalent de la distance entre les deux bases d'une paire. Le potentiel décrit l'interaction entre les bases de la paire. Au voisinage de l'état fermé (particules en fond de puits) le potentiel est attractif, mais quand la distance entre bases d'une paire devient très grande la force qui les lie diminue très fortement, correspondant à la zone plate du potentiel. Dans le modèle les ressorts schématisent l'interaction d'empilement entre bases le long de la molécule d'ADN.

La figure de droite montre la dynamique d'un segment de molécule comportant 256 paires de bases en représentant la distance entre les bases d'une paire par une échelle de gris. Les teintes les plus claires correspondent à des paires de bases qui sont fermées (situation normale de la double hélice) tandis que le noir correspond à des paires de bases totalement ouvertes. L'axe horizontal correspond au numéro de la paire de bases. L'axe vertical correspond au temps. Les taches noires que l'on observe proviennent de domaines de l'ADN dans lesquels les bases s'ouvrent temporairement.

décrire l'ensemble des comportements de l'ADN. En ce qui concerne la dénaturation elle a cependant été testée expérimentalement avec succès et elle permet d'identifier les éléments clé qui gouvernent le phénomène[5]. La figure 7 présente schématiquement les caractéristiques du modèle en montrant pourquoi le problème est formellement analogue à la dynamique d'un ensemble de particules couplées, placées dans une gouttière de potentiel s'élevant fortement d'un côté (dans la direction qui correspond à la fermeture des paires de bases; la valeur élevée du potentiel correspond dans ce cas à l'énergie très grande qu'il faudrait fournir si on voulait forcer les bases à s'interpénétrer) et formant un plateau dans la direction qui correspond à la séparation des deux bases. Pour parvenir à une description quantitative de la dénaturation thermique de l'ADN, le modèle doit tenir compte de la forme très particulière de l'interaction des bases le long de la molécule, qui diminue fortement dès qu'une paire de bases est rompue et que ses éléments sortent de la pile[4].

La figure 7 illustre par une représentation en échelles de gris le comportement du modèle à une température inférieure à la température de dénaturation. Elle est obtenue par simulation numérique de la dynamique du modèle placé en contact avec un thermostat qui impose la température. Le système n'est donc plus isolé comme dans le cas de la figure 5. Au contraire il est placé dans une situation qui correspond à ce que l'on peut réaliser expérimentalement. On observe de larges taches noires qui proviennent de régions temporairement ouvertes de la molécule. On note aussi des lignes pointillées noires, approximativement verticales. Elles sont produites par des groupes de quelques paires de bases qui fluctuent de manière corrélée entre des états ouverts et des états fermés. Ces mouvements correspondent à la "respiration de l'ADN" observée expérimentalement. Au contraire on constate que certaines zones de la molécule n'ont que des mouvements de faible amplitude. Elles produisent les bandes verticales claires de la figure.

Les résultats présentés sur la figure 7 posent des questions importantes de physique statistique qui intéressent actuellement les physiciens. En effet ils montrent que l'énergie thermique peut s'autocaliser dans un système qui est pourtant initialement parfaitement homogène. Dans la réalité il peut être difficile de s'assurer que toutes les paires de bases d'une molécule d'ADN sont équivalentes. En effet, même avec un homopolymère artificiel, l'environnement local peut varier d'un point à l'autre car la molécule interagit avec ses voisines et, sauf si elle est très courte elle se replie. Dans le modèle le problème ne se pose pas car on a une réelle invariance du système par translation. Pourtant la figure 7 montre que différentes zones ont des comportements différents. Dans les régions où l'amplitude du mouvement est plus grande, la densité d'énergie est plus élevée que la moyenne. On peut se les représenter comme des régions chaudes qui coexistent avec des régions froides voisines, ce qui est étonnant car on est habitué à penser que la température est uniforme dans un système en équilibre. En réalité, dans les réseaux non-linéaires, en général ce n'est pas le cas. Cette affirmation n'est pourtant pas en contradiction avec l'équipartition de l'énergie de la physique statistique car la notion de temps n'est pas présente dans la physique statistique de l'équilibre. On est porté à croire que l'équipartition de l'énergie est obtenue par une uniformité statique de la répartition de température. Mais on peut aussi concevoir que l'équipartition ne soit *assurée qu'en moyenne*. C'est exactement ce que montre le calcul pour le système de la figure 7 si on le poursuit sur des temps très longs. Certaines zones chaudes finissent par se refroidir alors que des zones froides se réchauffent et dépassent même la température moyenne du système. L'uniformité n'est jamais atteinte et on a une lente évolution de la distribution des régions chaudes et froides sur des temps très longs par rapport aux temps microscopiques comme les périodes des vibrations atomiques. Les études de physique non-linéaire montrent que ce comportement

n'est pas l'exception, mais plutôt la règle. Une des questions sur lesquelles travaillent actuellement certains physiciens des matériaux est l'origine de ces relaxations lentes observées dans les réseaux non-linéaires. On sait qu'elles sont liées à l'existence des modes localisés qui ont une très grande durée de vie, mais la raison pour laquelle ces modes échangent si peu d'énergie entre eux et sont si stables, même en présence des fluctuations toujours présentes dans un système thermalisé, est encore mal comprise.

L'existence de ces zones chaudes et froides peut avoir des conséquences importantes. Par exemple, une question qui n'est pas encore élucidée est l'origine du "critère de Lindemann" qui détermine approximativement la température de fusion des solides. On sait qu'à l'échelle microscopique une augmentation de température correspond à un accroissement de l'amplitude du mouvement aléatoire des atomes autour de leurs positions d'équilibre. Le critère de Lindemann dit qu'un cristal fond quand cette amplitude de vibration atteint 10% des dimensions de la maille cristalline. C'est une valeur qui semble bien faible pour suffire à provoquer l'effondrement du réseau cristallin et le passage à l'état liquide. Le phénomène d'autolocalisation de l'énergie décrit précédemment fournit un point de vue nouveau sur cette question car il montre que ce 10% *en moyenne* peuvent être obtenus avec des valeurs très grandes (jusqu'à 100%) en certains points et très faibles ailleurs. On comprend que le réseau puisse céder dans les "zones chaudes" et qu'ensuite tout l'édifice s'écroule bien que le mouvement moyen reste faible.

Dans les solides il n'y a pas de preuve expérimentale de cette hypothèse car l'observation directe est difficile mais dans le cas de la "fusion unidimensionnelle" de l'ADN on voit effectivement les bulles de dénaturation. Bien que les expériences sur les modes localisés non-linéaires dans les réseaux cristallins commencent à apparaître, c'est peut-être dans le domaine de la biologie moléculaire que leurs effets peuvent être les plus grands car les molécules biologiques sont des objets très déformables, donc très non-linéaires. Dans le cas de l'ADN, la transcription, c'est à dire la lecture d'un gène, qui commence par la formation d'une "bulle de transcription" analogue aux bulles de dénaturation thermique est probablement concernée. Elle est initiée par une enzyme, mais dans la première phase d'ouverture de l'ADN sur une vingtaine de paires de bases, il n'y a pas d'apport d'énergie extérieure alors qu'il faut briser un grand nombre de liaisons hydrogène. Une hypothèse, qui n'a encore été validée que sur des modèles simplifiés, est que l'enzyme joue le rôle d'un site spécifique de collection des excitations non linéaires. On sait que ces excitations non-linéaires existent dans l'ADN puisque ce sont les fluctuations d'ouverture observées expérimentalement dans les travaux sur la "respiration de l'ADN". Cette phase de collecte, qui peut être lente quand on la compare aux échelles de temps microscopiques, permettrait de comprendre pourquoi on peut parfois observer une longue période de latence avant le début de transcription, alors que l'enzyme est déjà en place au site d'initiation. Les simulations numériques montrent que ce scénario est possible. Il reste à le confirmer expérimentalement.

Un autre point sur lequel nous travaillons actuellement est la cinétique des réactions biologiques. Les réactions chimiques standard mettent en jeu des molécules de petite taille, en général dans un milieu fluide où elles sont soumises à des fluctuations aléatoires. Au contraire les sites actifs des molécules biologiques appartiennent à de très gros ensembles moléculaires. Les fluctuations auxquelles ils sont soumis proviennent des mouvements du reste de la molécule. Si ces fluctuations sont non-linéaires et comportent des modes localisés, les grandes concentrations d'énergie qu'ils représentent peuvent être suffisantes pour provoquer des réactions qui ne pourraient pas avoir lieu si l'énergie des fluctuations thermiques était

répartie de manière uniforme. Là non plus nous n'avons pas encore de preuve expérimentale directe. Mais des expériences, effectuées en particulier sur la myoglobine, ont montré que si on injecte une très grande quantité d'énergie localement dans la molécule et que l'on chauffe certains sous-ensembles à des températures qui peuvent atteindre près de  $1000^\circ \text{K}$ , cette énergie ne relaxe que très lentement vers les autres parties de la molécule, de la même façon que ce que nous avons pu observer en donnant une très grande impulsion à un pendule particulier dans la chaîne de pendules couplés. Ainsi la stabilité de grandes localisations d'énergie peut être confirmée dans certaines molécules biologiques. Comme les travaux sur des modèles très variés concordent pour dire que, quand cette stabilité existe, elle est associée à la possibilité de formation spontanée des modes localisés à partir des fluctuations thermiques, il y a de bonnes raisons de penser que de tels modes peuvent être présents dans les molécules biologiques aux températures physiologiques, comme nous l'avons vu pour l'ADN. Mais, contrairement à un cristal qui présente une régularité parfaite, la structure des molécules biologiques est loin d'être régulière. Les travaux théoriques doivent donc traiter simultanément non-linéarité et désordre, qui conjuguent leurs effets pour localiser l'énergie.

## 5 Conclusion

Comme nous l'avons vu la physique des solides avait été conduite naturellement à travailler dans l'espace réciproque plutôt que dans l'espace réel. Cette façon de voir était suggérée aussi bien par les méthodes expérimentales de détermination des structures par diffraction des ondes que par les approches théoriques tirant avantage de la transformation de Fourier pour résoudre les équations linéaires de la dynamique des petits mouvements atomiques et de la mécanique quantique.

Les expériences et les méthodes théoriques sont en train d'évoluer très rapidement et conduisent la physique des solides et des macromolécules à redécouvrir l'espace réel. Nous n'avons pas discuté les nouvelles méthodes expérimentales, mais il faut noter que la perspective a été totalement changée par la mise au point de méthodes à sondes locales, dont le microscope à effet tunnel électronique, popularisé en 1986 par le prix Nobel de Ruska, Binnig et Roehrer, a été le premier exemple. A ce niveau il ne s'agit pas d'un bouleversement des concepts mais plutôt d'une évolution spectaculaire des techniques. Maintenant on peut "voir un atome" ou manipuler une molécule unique sans passer par la diffraction par une collection de ces objets.

La découverte des modes localisés non-linéaires et de la possibilité d'autolocalisation de l'énergie thermique dans un système représente au contraire une évolution importante des concepts. L'uniformité à laquelle laissait penser l'équipartition de l'énergie prévue par la physique statistique cède la place à la diversité. On est maintenant conscient du fait que, même dans un réseau parfait, lorsque la dynamique est prise en compte les différents points de l'espace réel peuvent ne pas être équivalents. La physique statistique d'équilibre n'est pas remise en cause, mais comme elle n'intègre pas la notion de temps elle ne peut pas prendre en compte les aspects dynamiques que sont l'émergence et la disparition des modes localisés non-linéaires dont l'existence a peut-être des conséquences très importantes, en particulier pour la physique des macromolécules biologiques.

## Références

- [1] M. Peyrard, *The pathway to energy localization in nonlinear lattices*, proceedings of the conference “Localization in Nonlinear lattices”, Dresden, April 7–11, 1997, Physica D **119**, 184-199 (1998)
- [2] T. Dauxois and M. Peyrard, *Energy localization in nonlinear lattices*. Phys. Rev. Lett. **70** 3935-3938 (1993)
- [3] M. Peyrard, A.R. Bishop, *Statistical Mechanics of a Nonlinear Model for DNA Denaturation*. Phys. Rev. Lett. **62**, 2755-2758 (1989)
- [4] T. Dauxois, M. Peyrard and A.R. Bishop, *Entropy driven DNA denaturation* Phys. Rev. E **47**, R44-R47 (1993).
- [5] J. Maddox *Towards the calculation of DNA*. Nature **339**, 577 (1989)