

L'ATOME ET OUVERTURE SUR LE MONDE QUANTIQUE

1. LES LIMITES DE LA MECANIQUE DE NEWTON.

1.1. INTERACTION GRAVITATIONNELLE ET INTERACTION ELECTRIQUE.

Manifestation des interactions électriques.

L'atome est constitué d'un noyau chargé positivement et d'un cortège électronique chargé négativement.

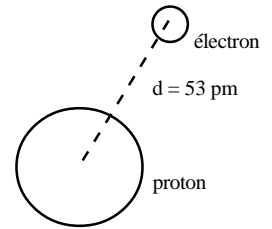
Le noyau (les protons) et les électrons possèdent une masse: ils subissent donc une attraction gravitationnelle. Calculons un ordre de grandeur de l'attraction gravitationnelle dans le cas de l'atome hydrogène:

$$F_{p/e} = F_{e/p} = G \times \frac{m_p \times m_e}{d^2} \quad ; \text{ soit } F_{p/e} = F_{e/p} = 10^{-47} \text{ N}$$

Le noyau (les protons) et les électrons portent des charges de signes opposés: ils subissent donc une attraction électrique. Calculons un ordre de grandeur de l'attraction électrique dans le cas de l'atome hydrogène:

$$F_{p/e} = F_{e/p} = k \times \frac{|q_p \times q_e|}{d^2} \quad ; \text{ soit } F_{p/e} = F_{e/p} = 10^{-7} \text{ N}$$

L'attraction universelle est donc négligeable devant l'attraction électrique. *L'interaction électrique assure ainsi la cohésion de la matière à l'échelle atomique.*



Manifestation des interactions électriques.

Les électrons d'un atome sont liés au noyau par l'attraction s'exerçant entre charges électriques de signes opposés.

Il en est de même pour les anions et les cations d'un solide ionique.

La liaison chimique entre atomes d'une même molécule est fondée, mais de façon complexe (elle ne se réduit pas à l'attraction entre charges électriques de signes opposés), sur l'interaction électromagnétique.

L'attraction entre molécules d'un liquide ou d'un solide moléculaire est également de nature électromagnétique. Cette interaction, qui assure la cohésion d'un fil ou d'un ressort tendu, explique la résistance d'un solide à la déformation.



Remarque.

Ces forces ont une portée infinie et sont 10^{36} fois plus fortes que les forces gravitationnelles. Sur Terre, c'est parce que les objets macroscopiques sont généralement neutres, et que la masse de la Terre est importante, que l'interaction électrique est souvent imperceptible.

Enoncé

Deux corps ponctuels A et B, séparés d'une distance $d=AB$ et portant respectivement les charges q_A et q_B , sont soumis à deux forces directement opposées de même valeur:

$$F = k \frac{q_A \cdot q_B}{d^2}$$

F en Newton (N)
 q_A et q_B en Coulomb (C)
d en mètre (m)
 $k = 9,0 \times 10^9 \text{ N.m}^2.\text{C}^{-2}$ dans le vide ou dans l'air.

Les deux forces ont la même droite d'action: la droite (AB).

Ces forces sont attractives si les charges sont de signes contraires et répulsives si les charges sont de même signe.

Une interaction à courte portée.

Deux molécules exercent l'une sur l'autre des forces:

- attractives (entre protons de l'une et électrons de l'autre);
- répulsives (entre protons - ou électrons - de l'une et de l'autre).

Comme toutes les molécules sont électriquement neutres, ces forces tendent à se compenser. Toutefois, la compensation n'est pas totale pour les molécules en contact: dans ce cas, les forces attractives l'emportent, ce qui explique la cohésion des solides ou des liquides moléculaires.

La force résultante décroît très rapidement avec la distance: sa portée n'excède pas quelques dimensions moléculaires. C'est pourquoi les forces de cohésion au sein d'un liquide ou d'un solide n'augmentent pas avec son volume.

Les forces d'interaction électromagnétiques sont inexistantes entre solides distincts électriquement neutres.

Manifestation des interactions gravitationnelles.

En dehors de toute action d'électrisation, la matière est électriquement neutre car elle est formée d'atomes, eux-mêmes neutres.

Dans ces conditions, la matière, à l'échelle astronomique ne met pas en jeu l'interaction électrique: seule l'interaction gravitationnelle, attractive, intervient. **L'interaction gravitationnelle assure la cohésion de la matière à l'échelle de l'Univers.**

Elle est responsable

De la forme et de l'existence des galaxies, des étoiles et des planètes, de la naissance et de la mort des étoiles. D'immenses nuages de gaz se sont contractés sous l'effet de l'attraction gravitationnelle.

Elle régit le mouvement des satellites, des corps célestes et des galaxies.

Les forces gravitationnelles ont une portée infinie et sont toujours attractives. De ce fait, malgré leur faible intensité elles cumulent leurs effets et leurs actions se manifestent même à des distances astronomiques.

Dans l'Univers la loi de l'attraction universelle est vérifiée avec une grande précision par l'étude du mouvement des planètes, des étoiles doubles.

Dans la vie courante, cette interaction se manifeste par la pesanteur: tous les objets sont attirés par la Terre, notamment les molécules de l'atmosphère. Si cette attraction avait été insuffisante, celles-ci se seraient dissipées dans l'espace, empêchant l'apparition de la vie. Quand l'astre est trop léger, l'interaction gravitationnelle est trop faible pour retenir l'atmosphère: c'est le cas, par exemple, de la Lune.

Énoncé

Deux corps ponctuels de masse m_A et m_B , séparés d'une distance d , exercent l'un sur l'autre des forces attractives $F_{A/B}$ et $F_{B/A}$, de même direction, de sens opposés et de même valeur:

$$F_{A/B} = F_{B/A} = \frac{m_A \cdot m_B}{d^2}$$

F en Newton

avec m_A et m_B en kilogramme (kg)

d en mètre (m)

$G = 6,67 \cdot 10^{-11}$ S.I.

1.2. LIMITES DE LA MECANIQUE DE NEWTON.

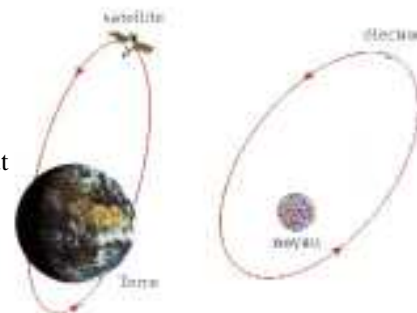
On voit donc que l'électron est soumis à une force centripète inversement proportionnelle au carré de sa distance au proton. L'analogie avec un système Terre-satellite permet d'envisager, pour le mouvement de l'électron autour du noyau, une solution circulaire uniforme.

De la même façon qu'un satellite circulaire peut être placé à n'importe quelle altitude, on peut envisager, pour l'électron, des orbites de rayon quelconque. C'est ainsi, que par analogie, des physiciens tels que E.Rutherford, proposèrent un modèle planétaire pour décrire les atomes: les électrons sont censés graviter autour du noyau, comme les planètes autour du Soleil.

Toutes les trajectoires et les valeurs d'énergie étant a priori permises.

En réalité cette analogie est en désaccord avec la mesure du volume occupé par un atome. Les valeurs des rayons atomiques, qui en sont déduites, attribuent à chaque atome une valeur unique. Tous les atomes de carbones, par exemple, sont identiques. Les électrons ne peuvent donc pas décrire des orbites de dimension quelconque.

La mécanique classique de Newton ne permet pas de rendre compte de la structure de l'atome.



2. LES QUATRE NOTIONS A CONNAITRE pour passer du monde classique au monde quantique.

2.1. LA QUANTIFICATION.

Historiquement, la première différence entre le monde quantique et le monde classique est que contrairement à ce dernier, le premier n'est pas complètement continu. C'est comme si dans ce monde, on ne pouvait s'échanger que des paquets d'argent multiples de 100 euros, sans aucune autre somme intermédiaire. Plus exactement, un système peut sauter d'un état d'énergie à un autre, sans passer par des états d'énergie intermédiaires. C'est la fameuse quantification. L'effet photoélectrique illustre cette propriété. L'éclairement d'un matériau déclenche l'apparition d'un courant électrique pour certaines longueurs d'onde (donc certaines énergies) de la lumière seulement. Au niveau microscopique, les atomes absorbent de l'énergie seulement par paquets.

2.2. LA DUALITE ONDE-PARTICULE.

La théorie quantique ne décrit pas les objets de la même manière. Dans le monde classique, la position et la vitesse d'une voiture, par exemple, sont bien définies. Sans cela les radars ne serviraient à rien ... Dans le monde quantique, ce n'est pas tout à fait le cas. Il est impossible, par exemple, de connaître simultanément et précisément la position d'une particule et sa vitesse. Les spécialistes parlent des inégalités de Heisenberg. Si le radar mesure la vitesse, la photo sera floue et la voiture méconnaissable. Inversement, une belle photo sera inutilisable car la vitesse sera imprécise.

Au niveau mathématique, la théorie décrit un état non pas par un couple de points (vitesse et position précises) mais par une fonction, dite fonction d'onde, qui permet de calculer la probabilité de trouver la particule en un point ou en un autre. De là découle le caractère probabiliste de la mécanique quantique. Tout comme l'idée que les particules sont aussi des ondes et plus seulement des points matériels. L'équation dite de Schrödinger prédit l'évolution de ces états particuliers.

2.3. LE CHAT DE SCHRÖEDINGER OU LA SUPERPOSITION D'ETATS.

Toujours plus fort, dans le monde quantique il est possible d'être à deux endroits à la fois ! Imaginons que l'état d'une particule soit entièrement décrit par sa couleur, qui ne peut prendre que deux valeurs, rouge ou bleue. Dans notre monde, les deux couleurs, donc les deux états, sont parfaitement distinguables. Pas dans l'univers quantique. Des états qui soient à la fois rouges et bleus existent. Seule une photo ou un instrument de mesure révèle la nature bleue ou rouge du système. Sans lui, l'objet n'a pas vraiment de couleur ... Pour désigner ces états bizarres, les physiciens citent l'exemple des chats de Schrödinger: un chat est enfermé dans une boîte dans laquelle un atome radioactif déclenche un système libérant un poison lorsque l'atome se désintègre. Tant que la boîte n'est pas ouverte, et que l'on n'a pas constaté de visu son état, le chat n'est ni mort ni vivant.



2.4. L'INTRICATION.

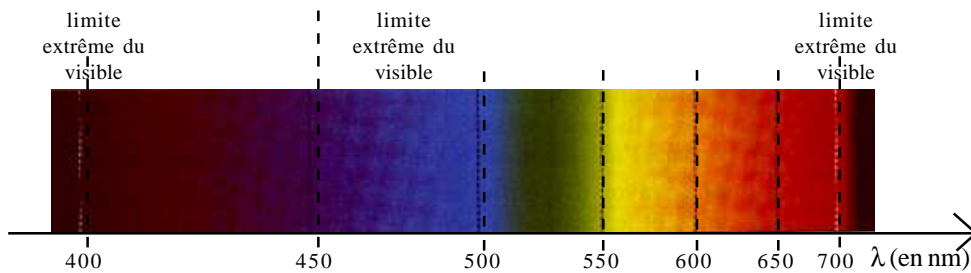
C'est la caractéristique sur laquelle reposent les prouesses de l'information quantique. Prenons deux voitures de couleur différente filant l'une vers l'autre sur la même route. Si les pilotes sont assez habiles, ils s'évitent par la droite ou par la gauche. Après l'évitement, un observateur saura dire quel véhicule est passé à droite et quel autre à gauche.

En mécanique quantique, si la manoeuvre est bien faite, il y a bien quelque chose qui part vers la gauche et une chose qui part vers la droite, mais impossible de dire à quel véhicule initial cela correspond. Mathématiquement, seule une fonction d'onde, inséparable en deux fonctions distinctes, décrit le système. Mais, c'est toute la subtilité, les deux parties restent en fait fortement corrélées. Si un radar prend une photo d'un des objets roulant dans une direction, alors instantanément, l'autre véhicule adoptera la même couleur (ou la couleur opposée, selon le type de collision). Le résultat n'est plus probabiliste mais sûr et certain.

3. LA QUANTIFICATION DE L'ENERGIE DES ATOMES.

3.1. LES SPECTRES D'EMISSION.

La décomposition de la lumière par un prisme produit une figure appelée spectre lumineux. On distingue des spectres continus et des spectres de raies.



Le spectre de la lumière émise par la matière est un spectre d'émission; le spectre de la lumière ayant traversé une substance est un spectre d'absorption.

3.2. NIVEAUX D'ENERGIE

Contrairement à ce que la mécanique de Newton laisse prévoir: au niveau de l'atome ou plus petit, les échanges d'énergie se font par quantités discrètes appelées quanta d'énergie: on dit que les énergies échangées sont quantifiées et non plus continues.

Un quantum d'énergie associé à une radiation lumineuse de fréquence ν contient la quantité d'énergie:

$$\Delta E = h \cdot \nu = h \cdot \frac{c}{\lambda} \quad \text{avec} \quad \begin{array}{l} h \text{ est une constante universelle appelée constante de Planck et vaut } h = 6,62 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} \\ \nu \text{ a la dimension de l'inverse d'une durée.} \end{array}$$

Remarque.

C'est parce que h est très petite que la quantification des échanges d'énergie lumineuse ne se manifeste pas à notre échelle.

Puisque les niveaux d'énergie de l'atome sont quantifiés, les quanta d'énergie lumineuses susceptibles d'être émis ou absorbés ne peuvent prendre que certaines valeurs discrètes. Il en est de même pour les fréquences (ou pour les longueurs d'onde) des radiations monochromatiques associées.

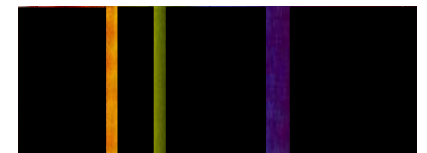
L'atome ne peut absorber au cours d'un choc que l'énergie qui lui permet de passer d'un état d'énergie accessible à un autre:

On fait appel au modèle simple de l'atome, avec un noyau entouré de couches concentriques sur lesquelles se répartissent les électrons.

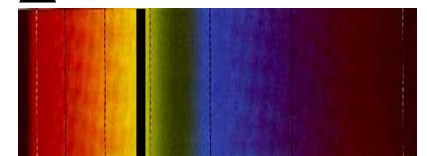
Tout commence par l'excitation d'un atome sous l'effet d'un choc ou de la température. Un atome reçoit de l'énergie; il est excité: un de ses électrons «saute» sur une couche supérieure.



L'atome se désexcite: l'électron revient sur sa couche initiale... et l'atome réémet, sous forme de lumière, l'énergie qu'il avait emmagasinée.



▲ Spectre d'émission de raies



▲ Spectre d'absorption de raies.
Les raies du spectre d'absorption ont les mêmes longueurs d'ondes que les raies du spectre d'émission.



Admirable petit mécanisme, capable de transformer un simple choc en lumière !!! Il est à l'oeuvre dans nos lampes (où des électrons heurtent les atomes du filament), dans toutes les étoiles...

La couleur de la lumière obtenue dépend très précisément de l'écart entre les deux couches de l'atome visitées par l'électron. Plus cet écart est grand et plus la longueur d'onde produite est courte.

- La radiation associée au quantum d'énergie émis correspond à une raie du spectre d'émission;
- La radiation associée au quantum d'énergie absorbé correspond à une raie du spectre d'absorption.

Les variations d'énergie possibles sont les mêmes qu'il y ait émission ou absorption: par suite, les radiations qui peuvent être absorbées sont celles qui peuvent être émises, ce qui explique l'identité des raies de spectres d'émission et d'absorption d'un même élément.

Les énergies que peut échanger un atome forment donc une suite discontinue, l'atome ayant une énergie qui ne peut varier que par sauts.

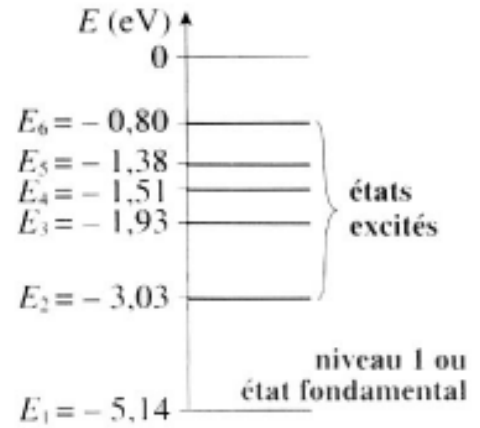


Diagramme simplifié des états d'énergie de l'atome de sodium.

3.3. UN EXEMPLE: LES NIVEAUX D'ENERGIE DE L'ATOME HYDROGENE.

Pour représenter les niveaux d'énergie de l'atome Hydrogène, on attribue, par convention, une énergie nulle au système proton-électron, lorsque le proton et l'électron sont au repos et infiniment éloignés l'un de l'autre. L'atome est alors ionisé.

Comme il faut fournir de l'énergie à un atome pour l'ioniser, l'énergie d'un atome d'hydrogène est donc négative. A chacun des niveaux d'énergie correspond donc une valeur négative de l'énergie. Il en est de même pour tous les atomes.

Le niveau d'énergie minimale correspond à l'état fondamental de l'atome. C'est l'état le plus stable. Les niveaux dont l'énergie est supérieure sont dits excités.

Le passage d'un niveau à un autre est appelé transition.

Le cas de l'atome hydrogène est le plus simple. Les différents niveaux d'énergie sont donnés

par la relation: $E_n = \frac{E_0}{n^2}$ avec $E_0 = -13,6 \text{ eV}$
 n appelé nombre quantique principal, ne peut prendre que des valeurs entières et positives.

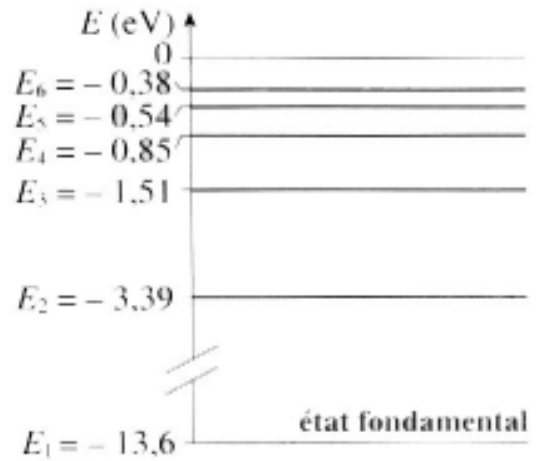


Diagramme d'énergie de l'atome d'hydrogène.

4. CONCLUSION.

La mécanique de Newton, adaptée à l'étude des systèmes macroscopiques, par exemple à l'étude du mouvement des astres, des planètes et des satellites, cède la place à la mécanique quantique pour l'étude des systèmes microscopiques tels que les atomes, les molécules et les noyaux.

Les variations d'énergie de ces systèmes microscopiques sont quantifiées; ce n'est pas le cas des systèmes macroscopiques comme les astres et les satellites.

L'énergie d'un photon émis par un atome ou un noyau dépend des niveaux énergétiques concernés par la transition. ainsi, pour des transitions entre la couche externe et le niveau fondamental, le photon appartient au domaine de la lumière visible, mais pour une transition entre la couche externe et une couche interne, le photon appartient au domaine des rayons X.

Les principes de la mécanique quantique sont très différents de ceux de la mécanique classique. Ainsi, la notion de trajectoire d'une particule n'a plus de sens: nous parlons plutôt de probabilité de présence: la mécanique quantique est probabiliste.

Une flamme

c'est un gaz, un liquide ou un solide ?

C'est un gaz tellement chaud qu'il émet de la lumière. Pourquoi ? La flamme est le résultat de la combustion, qui est une réaction entre un corps (bois, essence ...) et l'oxygène de l'air. Cette réaction produit un gaz très chaud, principalement formé de CO₂, de vapeur d'eau et d'air. Les atomes de ces corps sont excités par la chaleur. Cela signifie qu'ils relâchent une flopée de photons: les petits «grains» qui forment la lumière, et qui rendent la flamme visible. La couleur de celle-ci dépend de l'énergie des photons: bleue pour les hautes énergies et jaune-orangé pour les basses énergies.

5. LES APPLICATIONS.

Un siècle après sa découverte, les chercheurs mettent peu à peu en évidence les fantastiques potentialités des étranges phénomènes de la physique quantique.

Nous entrons dans la deuxième révolution de la mécanique quantique, la théorie qui décrit le monde microscopique des atomes, des électrons ou des grains de lumière, les photons. La première révolution a déjà changé nos vies: à l'intérieur des microprocesseurs, elle fait battre le coeur des ordinateurs et des serveurs qui régissent les milliards de pages du réseau mondial Internet. Elle nous berce d'images et de sons grâce aux lasers qui lisent les CD et les DVD ainsi qu'aux mémoires magnétiques qui stockent l'information dans les baladeurs. Elle nous guide dans nos déplacements grâce aux horloges atomiques ultraprécises des satellites de GPS. Mais nous n'avons peut-être encore rien vu. Car le premier âge de cette théorie n'utilise finalement qu'une propriété assez primitive, même si elle n'est pas intuitive: la quantification des niveaux d'énergie. Son nouvel âge reposera sur des phénomènes encore plus étranges: capacité à être dans deux états à la fois, interaction instantanée à distance, lien indestructible mais invisible. A la clé, des communications plus sûres et plus rapides.

□ L'ordinateur quantique

De quoi s'agit-il exactement ? L'ordinateur quantique est un système qui tire sa puissance de quelques bizarreries quantiques comme la superposition des états et leur intrication. Ces deux propriétés permettent une sorte de calcul parallèle particulièrement efficace. Il a été ainsi démontré qu'il était possible de décomposer plus rapidement des grands nombres en produit de facteurs premiers que par une méthode classique. De même pour trouver à quel nom correspond un numéro de téléphone dans un annuaire à un million d'entrées, un ordinateur quantique mettrait mille fois moins de temps qu'une machine classique.

□ Simuler la nature.

Il ne s'agit pas d'inventer une machine qui résoudrait des équations mais d'avoir un système qui se comporterait exactement comme le phénomène que l'on cherche à décrire. En 1982, le physicien Richard Feynman, au cours d'une conférence, émet l'idée de simuler la nature par des machines. Et la nature étant quantique, il est clair que ces simulateurs doivent l'être aussi. On parle de la possibilité d'avoir une simulation exacte. Que le calculateur fasse exactement ce que fait la nature. L'idée est de faire un peu comme les horloges astronomiques du Moyen Age, qui utilisaient des engrenages et des leviers pour simuler le déplacement des planètes. Mais quels sont donc les mouvements des planètes qu'ils veulent simuler, et que, par définition, aucun ordinateur classique ne peut appréhender ? Il y a d'abord l'un des grands mystères de la physique contemporaine, la supraconductivité à haute température. Dans cet état de la matière, le courant électrique circule sans résistance. Mais aucun modèle ne parvient à décrire exactement comment les interactions entre tous les électrons causent cette étonnante propriété. D'autres situations du même genre existent pour le magnétisme.

□ Stocker et renvoyer l'information le plus loin possible

Evidemment qui dit ordinateur quantique dit mémoire pour stocker l'information. Mais ces mémoires sont utiles aussi pour la cryptographie. Le problème est que l'information se perd dans les fibres au bout de cent kilomètres. Pour aller plus loin, des noeuds intermédiaires sont donc nécessaires. Ceux-ci doivent recevoir, stocker et renvoyer l'information quantique.

□ Des images plus nettes.

Le but ? Supprimer le bruit qui brouille les images, amplifier de petits signaux pour voir ce qui était invisible et même faire des pointeurs lasers précis à l'atome près. Comment ? En intriquant deux faisceaux lasers couramment utilisés en imagerie.

□ Sécuriser l'information: la cryptographie quantique.

Contrairement aux systèmes d'encryptage actuels, la cryptographie quantique garantit que la clé de chiffrement, c'est-à-dire le code secret pour déchiffrer le message crypté, est transmise de manière sécurisée au destinataire. Comment ? Les données transitent par fibre optique sous forme de photons. Or, selon la physique quantique, l'observation de photons modifie leur état quantique. Résultat: toute tentative d'espionnage lors de l'envoi de la clé laisse une trace indélébile aussitôt détectée. Le message est alors bloqué sans être révélé. Jusqu'à présent, cette technique ne pouvait être utilisée qu'entre deux sites. Lors de la démonstration, elle a été appliquée pour la première fois à un réseau commercial (reliant six sites distants de 6 à 82 km) pour sécuriser des communications vocales et en vidéoconférence. Les premières applications commerciales de cryptographie quantique en réseau pourraient voir le jour d'ici trois ans.

Saturnisme: Le plomb a livré les secrets de sa toxicité.

Le saturnisme est souvent associé à la Rome antique. Si les riches Romains, fréquemment victimes de coliques, maux de tête, stérilité et anémie, ignoraient l'origine de leur mal, on sait depuis bien longtemps qu'ils s'empoisonnaient en fait au plomb, notamment parce qu'ils utilisaient ce métal dans les récipients culinaires. Mais la maladie, ainsi surnommée en référence à la planète Saturne, symbole du plomb pour les alchimistes du Moyen-Age, frappe toujours. Elle reste un véritable problème de santé publique et aucun traitement n'est efficace pour le moment

Mais peut être une voie s'est-elle enfin ouverte, car deux chercheurs viennent de découvrir l'origine précise de la toxicité de ce métal, et cela, grâce à la mécanique quantique.

A priori ce n'est pas sa nature métallique, qui rend le plomb toxique, puisque certains autres métaux sont tolérés par l'organisme, voir lui sont indispensables, comme le fer, le cuivre ou le zinc. Les trois métaux entrent en effet dans la composition de protéines appelées métalloprotéines, sous leur forme ionique. Sous sa forme Pb^{2+} , le plomb est lui aussi un ion. Mais il ne joue aucun rôle physiologique vertueux. Au contraire, c'est un redoutable perturbateur de métalloprotéines !! Et notamment chez l'ALAD, une enzyme essentielle à la fabrication de l'hémoglobine des globules rouges. Au centre de l'ALAD se niche en effet un ion Zn^{2+} . Lors d'une intoxication au plomb, l'ion Pb^{2+} prend sa place. Conséquence: l'ALAD est inhibée, incapable de jouer son rôle. D'où une sévère anémie.

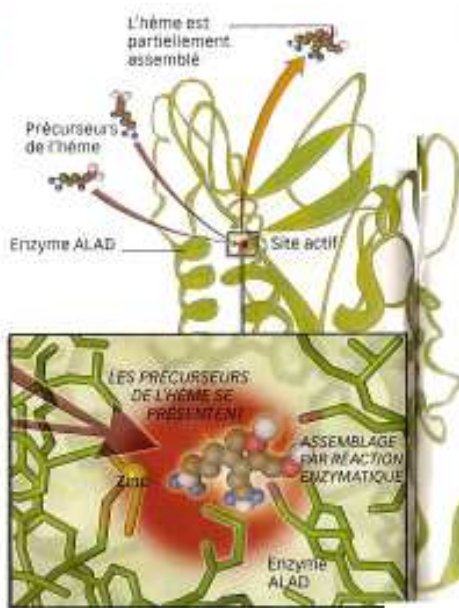
Mais la biochimie ne peut en dire plus sur le rôle du plomb au niveau moléculaire. Notamment sur ce qui le différencie des autres ions métalliques pour perturber à ce point l'activité enzymatique.

Dans leurs puissants ordinateurs, les chercheurs ont reconstruit l'architecture de l'ALAD en prenant en considération le nuage

1 Quand 2 électrons du plomb empêchent l'enzyme de jouer son rôle

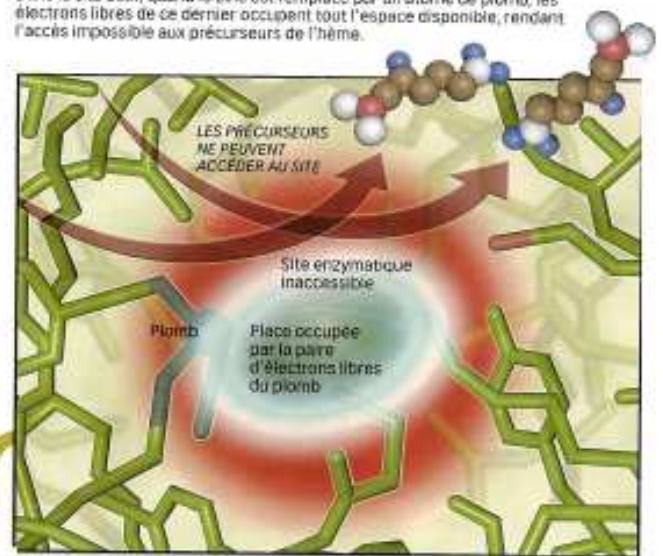
L'enzyme ALAD est dotée d'un site actif qui intervient dans la synthèse de l'hème, le centre transporteur d'oxygène de l'hémoglobine. Quand, au cœur de ce site actif, l'un des constituants, le zinc, est remplacé par un atome de plomb, l'enzyme ALAD ne fonctionne plus.

1 Le site est accessible
Le site actif est un espace au sein de la structure de l'enzyme (en vert). C'est ici qu'en présence de l'atome de zinc, l'hème va commencer à être assemblé.



2 L'atome de plomb bloque la fabrication de l'hème

Dans le site actif, quand le zinc est remplacé par un atome de plomb, les électrons libres de ce dernier occupent tout l'espace disponible, rendant l'accès impossible aux précurseurs de l'hème.



d'électrons qui gravite autour de chaque noyau d'atome et d'ion métallique. Pourquoi ? Parce que ces nuages sont susceptibles d'interagir entre eux et, in fine, d'influencer la configuration géométrique de l'enzyme. Or c'est la mécanique quantique, science physique de l'infiniment petit, qui règle la disposition électronique de ces nuages. A savoir que les électrons (habituellement représentés, pour simplifier, comme tournant autour du noyau) ne sont pas disposés de manière aléatoire: ils sont répartis par paires sur des «couches» circulaires autour du noyau, un peu comme des planètes sur leurs orbites de gravitation. Ces paires d'électrons forment des liaisons avec les autres atomes: elles se mettent en commun avec deux atomes pour former une liaison moléculaire. Chacune d'entre elles exerce sur les autres des forces électriques répulsives. Afin de minimiser les valeurs de ces forces, les paires se répartissent de manière homogène autour du noyau.

L'ion Pb^{2+} , qui compte 80 électrons, semble parfois oublier cette règle: deux électrons, qui se trouvent sur l'orbite la plus externe, font bande à part en formant une «paire libre», et ne s'engagent pas dans une liaison avec un autre atome. Tout cela dépend de l'environnement de Pb^{2+} . Quand l'ion plomb se lie à plus de 6 autres atomes, la symétrie électronique autour du noyau est respectée. Mais lorsqu'il s'engage dans moins de 6 liaisons, la paire libre a tendance à prendre toute la place qui lui est dévolue et à organiser la structure de l'édifice chimique de manière à libérer de la place.

Si la chimie l'explique bien en théorie, il faut faire appel à la modélisation pour voir ce qui se passe réellement à l'intérieur de l'enzyme lorsque le plomb se substitue aux ions naturels. Dans le cas de l'ALAD, le plomb se lie à seulement trois atomes. La paire libre profite alors de la moitié de l'espace qui lui est offerte pour s'étaler. Il se forme un véritable bouclier électronique qui repousse le substrat naturel de la protéine et l'empêche de se fixer dans son site enzymatique. L'enzyme est alors totalement inapte à remplir sa fonction biologique.

La toxicité du plomb semble donc résider dans cette seule paire d'électrons et dans sa capacité à se déformer et à repousser les atomes qu'elle côtoie.