

augmente rapidement dans la direction des sommets voisins et décroît dans la direction perpendiculaire. Le col a une courbure principale positive et l'autre courbure principale négative. C'est un point selle.

La description complète de la densité de charge nécessite une description en trois dimensions (au lieu des deux qui correspondent à un paysage). Chaque point critique possède alors trois courbures principales. Un point selle qui a, par exemple, deux courbures principales négatives et une courbure principale positive définit une liaison tridimensionnelle.

Premières prédictions

Comment décrire maintenant la rupture d'une liaison topologique? Lorsque deux atomes à l'intérieur d'un solide s'éloignent, les courbures changent le long de l'axe de la liaison et dans les deux directions perpendiculaires. Quand la courbure s'annule dans une ou deux de ces directions, la connexion topologique entre les atomes disparaît. Dans cette théorie, une liaison est rompue, non pas quand la densité de charge s'annule entre les atomes, ce qui n'arrive jamais, mais quand les deux atomes perdent leur connexion topologique.

Grâce à cette description, on obtient une analyse quantitative de la fracture. Reprenons l'analogie du paysage, à deux dimensions, et considérons un point selle (voir l'encadré de la page 72). En partant d'un col entre deux sommets, on peut se diriger dans quatre directions différentes à altitude constante (deux autour de chacun des sommets adjacents). En suivant ces chemins, la densité de charge n'est donc pas modifiée. Si quatre personnes se mettent en marche à partir du col, chacune dans l'une de ces quatre directions, elles décriront un X dans un plan qui fera un angle aigu avec la pente escarpée qui descend vers le lac ou la cuvette qui représente la zone de densité de charge minimale. On calcule que cet angle est lié au quotient des deux courbures principales du col.

Étirer une liaison interrompue, c'est réduire la densité de charge entre les noyaux. C'est aussi comme si l'on éloignait deux sommets tout en abaissant le col, par déblai de roches. La valeur de l'angle initial, avant la séparation, indique combien de rochers

peuvent être enlevés, et, à mesure que l'on creuse, l'angle diminue. Lorsque cet angle approche de zéro, l'altitude du col devient inférieure à celle de la surface du lac et celui-ci commence à se vider. Quand l'angle est égal à zéro, le col n'existe plus (la liaison se rompt). À cet instant, le col est au même niveau que le point le plus bas de la cuvette, et la dernière goutte d'eau du lac disparaît.

Inversement, une liaison se forme par l'ajout de charges. Topologiquement, la création d'une liaison correspond au remblai de matériaux rocheux pour former une digue ou une ligne de crête à partir du centre du lac. En bref, une liaison se brise quand on retire de la charge de la zone qui entoure le point selle, et une liaison peut se former quand on ajoute de la charge auprès d'un minimum.

Quand on considère des densités de charge dans l'espace à trois dimensions, les angles qui les mesurent doivent être remplacés par des formes géométriques. Au lieu d'un plan contenant les quatre directions où l'on peut se déplacer à altitude constante, on doit utiliser une forme qui contient toutes les directions où la densité de charge est équivalente.

Si l'on prend la forme en X des directions bidimensionnelles de densités de charge égales et qu'on la fasse tourner autour de son axe le long de la liaison chimique, on obtient deux cônes opposés par le sommet. Les cônes font un angle aigu avec un plan perpendiculaire à la liaison et passant par le sommet des cônes. C'est cet angle qui mesure la quantité de charges qui doit disparaître au point selle pour qu'une liaison se brise. Lorsque l'angle diminue, les bases des cônes se rapprochent et forment finalement un disque. Comme pour le paysage bidimensionnel, plus l'angle initial est grand, plus grande est la charge qui doit être ôtée pour arriver à un angle nul et rompre la liaison.

L'inverse d'une rupture de liaison est la formation d'une liaison, dont la compréhension est également nécessaire à la description du phénomène de rupture. De même qu'un cône représente une liaison, d'autres formes géométriques représentent les autres points critiques. Les minimums qui peuvent devenir des liaisons quand on leur ajoute suffisamment de charges, sont représentés par des ellipsoïdes. Dans

ce cas, deux angles sont nécessaires à la caractérisation géométrique et à la mesure de la quantité de charges qui doit être transportée du point selle pour former la liaison. Ces angles indiquent également dans quelle direction il sera le plus facile de construire une digue qui traverse le lac.

Avec cette représentation géométrique pour tous les points critiques

d'un solide, on peut mesurer exactement quand et de combien la densité de charge se modifie pendant la formation et la destruction d'une liaison. Le comportement cassant ou ductile d'un matériau dépend de la prépondérance de ces deux mécanismes, formation et destruction d'une liaison. Ainsi, en favorisant un mécanisme par rapport à l'autre, nous pour-

rions modifier le comportement des matériaux.

Appliquons ce raisonnement à la description des propriétés de l'aluminium de nickel et de deux alliages très proches, les aluminures de fer et de cobalt.

Ces trois composés aux structures identiques sont idéaux pour tester une nouvelle description de la rupture des

Fâcheuses cassures

La défaillance subite d'une structure qui met en jeu la sécurité doit évidemment être évitée à tout prix. Les passagers et l'équipage du vol 243 d'*Aloha Airlines* ont fait les frais d'une telle défaillance, le 28 avril 1988. Vingt minutes après le départ, des fissures le long des rivets de l'enveloppe métallique de l'avion se sont brusquement ouvertes. Une surpression dans la cabine emporta six mètres de fuselage avant, et l'avion dut atterrir en urgence. Un passager fut éjecté en vol ; ce fut la seule victime.

Des contrôles plus minutieux de l'avion, avant l'accident, auraient révélé que des fissures microscopiques autour des rivets avaient grandi, au cours de 19 années de service. Pendant le fatidique et dernier vol de cet avion, les fissures ont atteint une taille critique et se sont ouvertes.

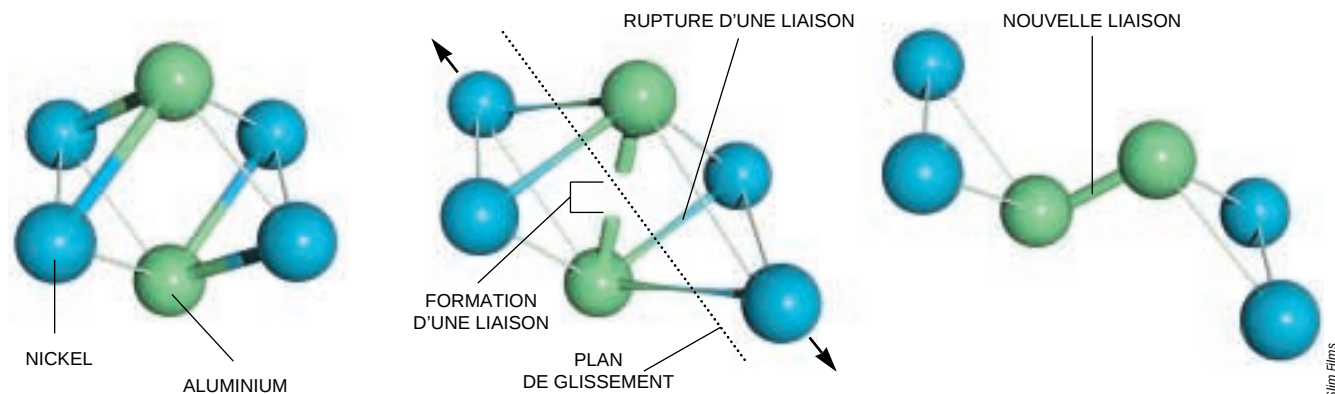
Jusqu'à ce moment, le métal avait travaillé doucement, uniquement à l'endroit des fissures, comme les ingénieurs l'avaient souhaité. Cette déformation ductile diminue les contraintes en émoussant les extrémités des fissures. Leur lente croissance est le meilleur moyen de noter des signes de fatigue avant une brusque rupture.

Par souci de sécurité, les constructeurs de matériaux cherchent à ajouter un zeste de ductilité aux métaux rigides utilisés dans les avions. Pour rendre un matériau plus ductile, on lui ajoute un élément chimique, mais lequel ? Pendant des siècles, la recherche de cet élément s'est effectuée par tâtonnements, mais aujourd'hui, on prédit quels seront les éléments les mieux adaptés.

Les métallurgistes ont un autre moyen de prévenir la rupture d'un matériau cassant : le contrôle de la structure microscopique. Les chimistes des matériaux peuvent disposer individuellement chaque cristal métallique avec le même soin que pour l'emballage de la porcelaine. Par exemple, ils enveloppent les cristaux d'un matériau cassant dans des couches d'un matériau ductile, tel le cuivre : toute fêlure se produisant dans le cristal d'un métal cassant ne dépassera pas la couche ductile. Une fois que le meilleur alliage de base est choisi, on le rend suffisamment ductile, grâce à cette structure en sandwich, pour qu'il soit sans danger ou tout au moins pour qu'il présente des signes de fatigue avant la catastrophe.



L'ÉVACUATION DES PASSAGERS du vol 243 de l'*Aloha Airlines*.



4. LA TOPOLOGIE DE DENSITÉ DE CHARGE révèle où et quand les liaisons chimiques se brisent et se forment lorsqu'un solide métallique se déforme. Les théories classiques n'expliquent pas ces phénomènes : par exemple, elles n'indiquent pas si une liaison se forme entre deux atomes d'aluminium, dans un cristal d'aluminium de nic-

kel quand celui-ci est étiré le long d'un plan de glissement. La charge nécessaire à la formation de cette liaison provient de la rupture des liaisons entre les atomes d'aluminium et de nickel. La manipulation de ce transfert de charge est la clé de la fabrication d'alliages plus ductiles.

matériaux. J'ai cherché les différences de propriétés entre ces trois alliages qui n'avaient pas été expliquées par les modèles classiques, et quels éléments ajoutés à l'aluminium de nickel le rendraient plus ductile. L'aluminium de nickel est ductile si les liaisons initiales sont maintenues longtemps avant la rupture, tandis que de nouvelles liaisons se forment rapidement le long du plan de glissement. Pour satisfaire ces exigences contradictoires, il fallait utiliser la charge des liaisons qui se rompent pour en former de nouvelles. Afin d'évaluer dans quelle mesure ce projet était faisable, j'avais besoin de nouveaux programmes informatiques qui engendreraient les nombres représentant la densité de charge et qui évalueraient les changements dans sa topologie.

À l'Université de Tulane, James MacLaren avait mis au point les instruments dont j'avais besoin pour calculer la densité de charge des trois aluminiums, et pour identifier les points critiques et les différents angles qui les décrivent. Les premières simulations ont confirmé l'accord avec les propriétés expérimentales. Par exemple, l'aluminium de fer, connu pour être le plus ductile des trois alliages, est celui qui a la charge la plus forte autour du point selle, dans les liaisons entre les atomes de fer et d'aluminium. Cet aluminium a aussi un minimum très plat entre les atomes d'aluminium voisins, et, par conséquent, la création d'une liaison à cet endroit ne nécessiterait qu'une faible charge.

J'ai poussé cette idée plus loin. Les programmes ont calculé la modification

des propriétés de l'aluminium de nickel en remplaçant quelques atomes de nickel par un élément qui placerait davantage de charges le long de la liaison nickel-aluminium, charges qui seraient ensuite disponibles pour la création de nouvelles liaisons entre les atomes d'aluminium à l'endroit du minimum. Cette redistribution des charges rendrait le matériau plus ductile.

Par quels éléments remplacer le nickel? L'analogie avec la chaîne de montagnes montre que chaque atome est un sommet, avec des pentes différentes qui en descendent. Dans une montagne d'aluminium proche d'une montagne de fer, il y a davantage de rochers à l'endroit du col, et la cuvette est plus plate qu'à côté d'une montagne de nickel. Avec du fer, il y a suffisamment de rochers pour retirer une partie de la liaison et pour la construction d'une nouvelle ligne de crête entre les atomes d'aluminium dans la cuvette. En revanche, avec une montagne de cobalt, il n'y a pas assez de rochers à l'emplacement du col pour la construction d'une ligne de crête. Le fer semblait le meilleur candidat pour la substitution.

Lorsque ce résultat fut obtenu, la recherche empirique d'éléments capables d'améliorer l'aluminium de nickel était en cours depuis 15 ans, de sorte que j'espérais qu'elle aurait confirmé mes prévisions. De fait, à une conférence, à la fin de 1998, j'appris que dix pour cent de fer substitué au nickel donne exactement l'effet prévu.

Trop tardive pour améliorer les alliages d'aluminium de nickel, la théorie topologique de la liaison chimique

devrait mettre fin aux longs tâtonnements des métallurgistes.

On l'utilise déjà pour chercher de nouveaux alliages plus légers, plus solides et qui conservent leurs propriétés à des températures supérieures. Ces alliages seront utilisés pour la fabrication d'avions supersoniques dans les années 2010. Enfin, au lieu de tester d'innombrables alliages que l'on modifie à l'aveuglette, les métallurgistes utiliseront des ordinateurs pour calculer la densité de charge d'alliages qu'ils n'auront pas à réaliser. Munis de cette information, ils détermineront comment modifier la densité de charge pour obtenir les propriétés désirées et ainsi prévoir quels éléments produiront ces changements. Et si l'on brise une bouteille de champagne sur le nez d'un avion construit avec ces alliages, j'espère être là pour en étudier la rupture.

Mark EBERHART est professeur de chimie et de géochimie à l'École des mines du Colorado.

Richard F.W. BADER, *Atoms in Molecules : A Quantum Theory*, Oxford University Press, 1994.

Mark EBERHART, *Computational Metallurgy*, in *Science*, vol. 265, pp. 332-333, 15 juillet 1994.

Ivan AMATO, *Stuff*, BasicBooks, 1997.

M.E. EBERHART et A.F. GIAMEI, *The Visualization and Use of Electronic Structure for Metallurgical Applications*, in *Materials Science and Engineering A : Structural Materials*, vol. 248, n° 1, pp. 287-295, 1998.
