

rassemblés. Hors du noyau, les électrons engendrent un nuage diffus de charges négatives. Habituellement, c'est dans la direction du noyau le plus proche, là où des électrons qui appartiennent aux deux atomes voisins se recouvrent, que le nuage est le plus dense. En 1926, les physiciens découvrirent les lois de la mécanique quantique, qui décrivent la répartition des charges dans les molécules et dans les atomes, mais la résolution des équations pour un grand nombre d'atomes nécessite des superordinateurs.

À la fin des années 1970, les ordinateurs sont devenus suffisamment puissants pour que l'on étudie sommairement comment la rupture des solides dépend de leur structure électronique. Enfin, en 1990, des ordinateurs ont reproduit le phénomène de cassure ou de déformation des solides.

Grâce à ces machines, des physiciens comme Gregory Olson et Arthur Freeman, du Groupe de recherches métallurgiques de l'Université Northwestern, ont comparé les densités de charge dans des matériaux semblables. D'abord, ils calculèrent les densités de charge dans deux alliages virtuels, l'un où deux plans d'atomes se séparent, et l'autre où ils glissent l'un par rapport

à l'autre. À partir de cette densité de charge, ils déterminèrent la quantité d'énergie nécessaire au déclenchement d'une rupture ou d'un glissement. Puis ils modifièrent la composition des alliages virtuels et relancèrent les calculs. En comparant l'énergie obtenue pour les deux matériaux, ils déterminèrent si les alliages analysés étaient cassants ou ductiles. Les différences d'énergie trouvées entre les alliages virtuels s'accordent avec les propriétés mesurées sur des alliages réels, au laboratoire.

Ces calculs ont montré que l'on savait décrire les ruptures et les glissements, mais ils ne permettaient pas de prévoir comment la modification de la composition d'un alliage engendrait un matériau cassant ou ductile. C'est à ce travail de prédiction que je me suis attelé. En particulier, je voulais comprendre quels éléments on devait ajouter à une structure chimique pour en modifier le comportement mécanique. On sait empiriquement que certains éléments seulement conviennent, mais lesquels? La réponse est apparue quand on a mis au point une nouvelle description des liaisons chimiques dans les solides.

Des liens profonds

Une théorie prédictive de la fragilité serait très utile à ceux qui conçoivent de nouveaux alliages, tel l'aluminium de nickel, un alliage léger qui devient plus résistant quand on le chauffe et que les ingénieurs aéronautiques voudraient utiliser pour les moteurs d'avion. Malheureusement, comme beaucoup d'alliages qui supportent des températures élevées, l'aluminium de nickel est trop cassant pour être utilisé dans la fabrication d'avions et d'autres machines. Rendraient-ils l'alliage plus ductile si l'on remplaçait certains atomes de cet alliage?

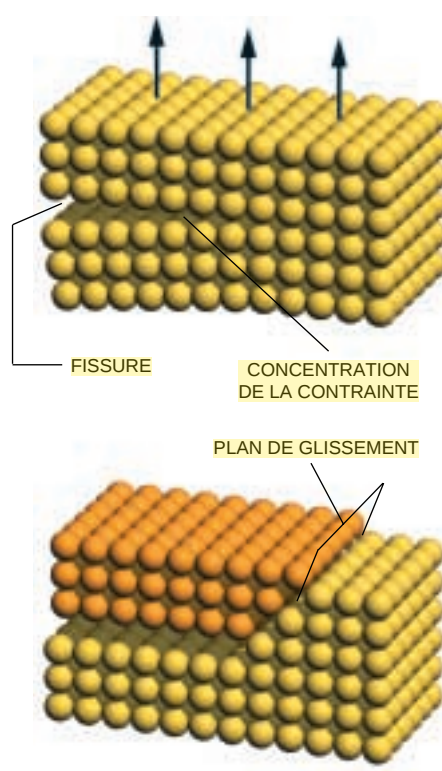
Les théories classiques décrivent les liaisons chimiques par des densités de charge électronique situées entre les atomes, mais ce concept est simpliste : quand on écarte les atomes, la densité diminue, mais elle ne disparaît jamais. Dans cette hypothèse, les liaisons ne sont jamais rompues, et les ruptures n'ont jamais lieu. Une autre caractéristique de la densité de charge, fondée sur la topologie, représente mieux la nature d'une liaison et la manière dont elle se brise.

La topologie est une branche des mathématiques qui étudie les propriétés qui se conservent par déformation.



Chris Jones, The Stock Market

3. UN MATÉRIAU DUCTILE se déforme le long de plans inclinés par rapport aux fissures microscopiques initiales. Les atomes de part et d'autre de ce plan glissent les uns par rapport aux autres et diminuent ainsi la contrainte exercée sur les liaisons dans la fissure. Cette



Sim Films

réduction de la contrainte absorbe des quantités d'énergie considérables. C'est pourquoi l'utilisation des métaux ductiles est plus sûre que celle des métaux cassants dans la construction de voitures et d'autres structures résistantes.

En coupant ou en associant des formes, on modifie leur topologie. Une tasse à thé et un anneau, par exemple, sont identiques d'un point de vue topologique : on peut passer de l'un à l'autre par des déformations continues, l'anse de la tasse se transformant en trou. Si l'on utilise un anneau en argile, on peut le façonner en forme de tasse à thé sans couper l'argile. En revanche, on ne peut transformer une boule d'argile en un anneau ou en une tasse à thé sans une perforation qui sépare des parties qui étaient initialement contiguës.

En utilisant ces concepts, le chimiste canadien Richard Bader a analysé les molécules organiques. Ces idées peuvent toutefois être étendues à l'étude des solides métalliques. La cassure change la nature des liens à l'intérieur d'un objet, de sorte que sa description topologique paraît judicieuse. Tout d'abord, comme Bader l'a fait pour les molécules organiques, j'ai dû montrer dans un solide le lien entre la représentation topo-

logique et la représentation classique des liaisons chimiques (voir l'encadré ci-dessous).

On comprend ce qu'est une liaison topologique entre deux atomes quand on compare la densité de charge à une chaîne de montagnes : l'altitude correspond à la densité de charge, les sommets sont les lieux où les charges sont les plus fortes et les cuvettes sont les zones de moindre charge. Deux atomes sont topologiquement reliés quand une ligne de crête relie les sommets. De telles lignes de crête correspondent aux tiges de la représentation classique de la liaison chimique.

Durant quatre ans, j'ai analysé des métaux et des alliages afin de montrer que la représentation topologique des liaisons relie les mêmes atomes que la représentation classique. La topologie enseigne qu'il n'est pas nécessaire d'examiner la totalité de la densité de charge pour établir la carte d'un terrain : seuls sont primordiaux les sommets, les cuvettes et les cols. À partir

de la position de ces points critiques, on interpole le terrain avoisinant. Notamment, quand on connaît la position de deux pics et d'un col qui les relie, on déduit sans risque qu'une ligne de crête – ou une liaison chimique – lie un sommet à l'autre en passant par le col.

La démonstration de la validité de la représentation topologique des liaisons chimiques fut simple, mais elle indiquait seulement quels atomes étaient connectés. Comment savoir si les liaisons se rompraient facilement ou non ? Pour répondre à cette question, il fallait examiner la forme du terrain autour des points critiques. Cette forme peut être caractérisée par les courbures principales en chaque point, des nombres qui décrivent la courbure selon la direction où l'altitude change le plus vite et selon la direction perpendiculaire. Une courbure principale est négative quand elle est analogue à celle d'un sommet ; elle est positive pour une cuvette. Sur un col entre deux sommets, l'altitude

Une nouvelle approche des liaisons chimiques

La théorie classique des liaisons chimiques représente celles-ci comme des tiges entre des atomes. En réalité, les liaisons sont un nuage de charges électroniques. Si l'on sépare deux atomes, le nuage de charges devient moins dense, mais, comme il ne s'annule jamais, on ignore le moment de la rupture. Pour savoir ce qui disparaît lorsque les liaisons se brisent, on examine la topologie de la densité de charge.

La densité de charge, à deux dimensions, est analogue à un paysage de montagne. Les sommets représentent les maxi-

mums de la densité de charge, qui correspondent au noyau des atomes ; la cuvette représente une zone où la charge est très faible, et les arêtes joignant deux sommets représentent les liaisons chimiques.

Lorsqu'un matériau est étiré, les atomes s'éloignent et la densité de charge le long des liaisons diminue. Finalement, les liaisons se cassent – et cessent d'exister en tant que connexion topologique – quand le point le plus bas de la crête passe sous le niveau du fond de la cuvette.

