

Les théories du comportement des métaux

Les cartes vers la réalité

Des groupes de chercheurs de la Division de physique bâtissent des théories visant à refléter la réalité dans le domaine des propriétés physiques fondamentales des métaux.

Pas de progrès en physique sans partir d'une théorie! En conséquence, un rôle important de tout physicien est de dériver des modèles théoriques décrivant clairement en termes mathématiques les lois physiques selon lesquelles se comporte la matière; ces théories sont donc, en quelque sorte, des "gabarits" intellectuels reproduisant les phénomènes mécaniques de la nature.

La valeur d'une théorie, quelle qu'elle soit, repose sur sa précision et sur les prévisions qu'elle permet; des propriétés observables du monde physique peuvent être prévues *a priori* en partant du modèle dérivé.

Des groupes de chercheurs de la Division de physique du Conseil national de recherches travaillent à l'interface entre la théorie et la réalité pour étudier différents aspects du comportement des métaux.

Comme exemple, citons celui des physiciens qui décrivent les propriétés physiques communes des métaux, comme la malléabilité ou la conductivité, au niveau fondamental de la théorie atomique.

Tout cristal métallique peut être "visualisé" comme étant un agrégat, ou réseau, régulier à remplissage serré d'atomes, de charge positive, liés ensemble par une "mer" d'électrons. A l'inverse de la situation à liaison covalente commune, les électrons de liaison ne se trouvent pas entre les atomes, mais sont plutôt partagés par le cristal entier. Les électrons à la périphérie et qui sont faiblement liés au réseau ont une énergie maximum appelée niveau de Fermi; cette valeur est caractéristique d'un métal. Ces électrons de la plus haute énergie sont à l'origine de nombreuses propriétés magnétiques et électriques d'un métal.

Les chercheurs de la section de la physique des métaux étudient ces électrons par l'intermédiaire d'une sorte de "carte" atomique obtenue à basse température, les expériences de Haas-van Alphen, au cours desquelles des cristaux uniques d'un métal sont étudiés dans un champ magnétique puissant. Un peu de la même manière que celle qui est utilisée par les météorologistes qui joignent tous les points de même pression pour obtenir les lignes appelées isobares, les métallurgistes peuvent obtenir une surface de Fermi pour chaque métal en cartographiant les régions d'énergie électronique constante dans le cadre d'un diagramme tridimensionnel des quantités de mouvement.

Dans le cas le plus simple où les électrons les plus proches de l'extérieur n'ont pas une forte interaction avec le réseau, la surface de Fermi résultante est sphérique. Toutefois, dans le cas de la plupart des métaux, le mouvement des électrons est affecté par le réseau et les surfaces de Fermi ont un contour irrégulier. Leur topologie correspond à des valeurs maximales et minimales de la quantité de mouvement électronique.

Le Dr. Ian Templeton nous a dit: "De bien connaître les surfaces de Fermi donne un profil précieux de la structure électronique. Récemment, nous avons mis au point une nouvelle technique pour examiner les métaux purs et les alliages avec une précision sans précédent. On a trouvé que les variations des propriétés électroniques des métaux composant un alliage se produisent au moment où l'on fait l'alliage et que ces variations affectent la forme et la grandeur de la surface de Fermi."

Les mêmes électrons de conduction représentés par la surface de Fermi sont aussi à la base de cette propriété importante appelée conductivité et faisant l'objet d'études à la section de la physique des hautes températures.

Dans le cas de matériaux bons conducteurs comme le cuivre, les électrons peuvent se déplacer librement dans le

réseau et transférer ainsi une charge électrique. Dans un mauvais conducteur ces électrons sont au contraire fortement liés aux atomes.

A l'aide de ce modèle, on a autrefois essayé, avec un succès limité, d'expliquer une autre propriété des métaux, c'est-à-dire la conductibilité ou, si l'on préfère, le transfert de chaleur. On a souvent essayé d'établir une correspondance entre la conductivité et la conductibilité car les principaux agents de transport, dans les deux cas, sont les électrons de valence du métal.

En étudiant les propriétés de transfert des métaux à haute température, les physiciens du CNRC espèrent bâtir un modèle théorique plus rigoureux de la conductibilité. S'ils peuvent établir un lien, jusqu'ici insaisissable, entre la théorie de la conductibilité et celle de la conductivité, ils pourront faire des prévisions concernant l'un des domaines en utilisant leurs connaissances de l'autre.

La section de la physique des hautes températures est l'une des rares sections au monde capable de mesurer la conductibilité avec précision dans une gamme allant de 80 à 1250 K (de -193 à $+977^{\circ}\text{C}$.).

Le Dr Marek Laubitz, chef de la section, nous a dit: "Quoique nos recherches soient fondamentales, des applications peuvent suivre en raison de la précision croissante de la thermodynamique appliquée. Ainsi, des prévisions des caractéristiques du transfert de chaleur dans les métaux aux températures élevées deviennent importantes dans le domaine de l'extraction efficace de la chaleur donnée par les réacteurs nucléaires."

Le rôle des dislocations dans la détermination des propriétés mécaniques des métaux est analogue à celui des électrons dans la détermination de la conductivité. Presque tous les métaux purs sont mous et malléables car leurs cristaux sont faits de couches d'atomes empilées les unes sur les autres un peu de la même manière que des cartes à jouer. Comme les cartes peuvent glisser les unes sur les autres, ces "feuilles" d'atomes le peuvent également mais pas simultanément d'un seul bloc sur toute la surface car il y a une dislocation et certaines régions du plan glissent alors que d'autres restent sur place ou prennent du retard du fait de certains obstacles. Les propriétés mécaniques des métaux dépendent de la facilité avec laquelle ces dislocations peuvent se déplacer. Dans un métal très pur qui a été chauffé à haute température, puis refroidi, on trouve peu d'obstacles pour empêcher le mouvement des dislocations et ce matériau est mou et malléable. On peut renforcer ces métaux en y introduisant beaucoup d'obstacles pour gêner le mouvement des dislocations autant que possible et l'on dispose de nombreuses techniques pour y parvenir.

Comme exemple citons celui du forgeron qui durcit une barre de fer en la martelant sur son enclume. Au niveau microscopique, le forgeron augmente énormément le nombre de dislocations à chaque coup de marteau. Lorsque leur nombre est suffisamment grand pour que ces dislocations se gênent les unes les autres, un peu à la manière des gens qui s'engouffrent dans les métros, autobus et trains aux heures de pointe, le métal écroui devient beaucoup plus résistant.

Dans les laboratoires de la section de la physique des métaux, les chercheurs soumettent les cristaux métalliques à des variations de contraintes et de température tout en testant différents mécanismes impliquant les dislocations de différentes structures cristallines. En outre, le comportement des dislocations est examiné avec l'aide de techniques avancées basées sur l'utilisation de modèles mathématiques.

Le Dr Zbigniew Basinski nous a dit: "Il est très important