Simulation de la structure des états solide et liquide, à l'aide de billes d'acier

par J.-P. MICHEL, Ecole des Mines - Parc de Saurupt, 54042 Nancy.

Résumé.

Il est possible de simuler l'arrangement tridimensionnel des atomes dans un solide par une monocouche de billes d'acier. Chaque bille représente un atome. On peut ainsi visualiser l'état solide, cristallisé ou amorphe. Si en plus on fait vibrer les billes on introduit l'équivalent de l'agitation thermique et on peut alors simuler le phénomène de fusion et l'état liquide.

I. INTRODUCTION.

Dans l'article précédent, nous avons montré les possibilités offertes par la simulation des métaux solides par un arrangement bidimensionnel de bulles de savon. Elles sont limitées aux structures à basse température par la nature statique du radeau de bulles. Le remplacement des bulles de savon par des disques ou des billes durs que l'on fait vibrer, ajoute la simulation de l'agitation thermique et permet de visualiser, en particulier, les changements de phase.

L'inconvénient de ce modèle, c'est qu'il prend mal en compte les liaisons entre atomes. En effet, quand deux billes tendent à s'écarter, il n'y a aucune force de rappel, et quand elles tendent à se rapprocher, la force de répulsion passe pratiquement de zéro à l'infini au moment du contact. C'est ce qu'on appelle un modèle de sphères dures.

Nous avons repris en la simplifiant la méthode développée par PIERANSKI [1]. Nous avons tout d'abord simulé statiquement la matière solide cristallisée et amorphe puis, en agitant le système, la fusion et l'état liquide.

Lorsque, dans cet article, nous ferons rappel à des figures de l'article précédent, leur numéro sera écrit en chiffres romains.

II. DISPOSITIF EXPERIMENTAL.

Nous avons utilisé des billes de roulement en acier. Pour la simulation du solide cristallisé et de la fusion, nous avons choisi 6 000 billes identiques de diamètre 2 mm, masse unitaire 0,032 g. Pour la simulation d'alliages amorphes où il faut des billes de deux diamètres différents obéissant à la condition :

$$10 \% < \Delta d < 25 \%$$

décrite à l'article précédent, nous avons utilisé 300 billes de diamètre 3,5 mm et autant de diamètre 4,0 mm. En ces quantités, on trouve les billes chez les revendeurs des grandes marques de roulements.

Les billes sont dans une boîte en carton ou en bois léger. Le fond de la boîte est de couleur noire pour éviter les reflets lorsqu'on éclaire le système. De plus, nous avons ajouté une plaque de plastique antireflet utilisé habituellement dans l'encadrement des photographies. Cette plaque a en plus l'avantage de fournir une surface parfaitement plane.

Lors des simulations dynamiques, les vibrations sont fournies par un haut-parleur robuste (fig. 1). Nous avons choisi un appareil de récupération, de diamètre 20 cm, avec une impédance de 5 Ω et une puissance de 10 W.



Fig. 1. — Dispositif expérimental. 1, membrane du haut-parleur; 2, plaque de polystyrène expansé; 3, boîte à fond noir; 4, plaque anti-reflet.

La boîte contenant les billes est collée sur le haut-parleur par l'intermédiaire d'un disque en polystyrène expansé. Il n'a pas été nécessaire d'ajouter une plaque transparente sur les billes, l'amplitude verticale de vibration restant limitée, elles n'ont pas tendance à s'échapper. Le haut-parleur est alimenté par un générateur basse-fréquence et un ampli. Il faut chercher la fréquence

618

donnant le maximum d'amplitude. Elle dépend de la masse du montage et varie de 50 à 130 Hz. Elle est assez critique, ce qui exclut la solution simple de l'utilisation du 50 Hz du secteur.

L'agitation thermique est simulée par la vibration du plateau sur lequel reposent les billes. L'amplitude du mouvement des billes est représentatif de la température ; plus elle est grande, plus la température simulée est élevée. Elle dépend de deux paramètres : l'amplitude de vibration du plateau et la surface libre offerte à chaque bille. Le deuxième paramètre est le plus facile à faire varier de façon mesurable et contrôlée. Nous avons tout d'abord utilisé une boîte carrée de dimensions fixes puis une boîte hexagonale dont on peut faire varier la surface par un piston mobile (fig. 2). La forme hexagonale a été



Fig. 2. - Boîte de surface variable.

choisie pour deux raisons : elle a une symétrie proche de celle du haut-parleur et c'est celle de l'arrangement compact de billes (fig. VII) à condition d'adapter les dimensions de la boîte aux diamètres des billes et de choisir leur nombre en conséquence. En effet, pour construire un hexagone, il faut un nombre N de billes :

$$N = 3k (k+1) + 1 \quad ou \quad k \text{ est un entier.}$$
(1)

A l'usage, ces conditions sont apparues illusoires. La seule qu'il faille vraiment respecter est la légèreté du montage car le hautparleur est une source de vibration un peu faible. Il eut été préférable d'utiliser les plus petites billes du marché, diamètre 1 mm; nous aurions gagné 168 g pour le nombre de billes utilisé mais perdu en visibilité. Nous avons enregistré les configurations statiques en photographiant avec du film de sensibilité variant de 125 à 400 ASA. L'éclairage est assez délicat car il faut essayer d'éviter les reflets sur les billes. C'est pratiquement impossible même avec un éclairage multiple et diffus et en mettant un filtre polarisant devant l'objectif de l'appareil.

(Remarque : Il existe une autre méthode simple de visualisation d'arrangements statiques de billes. Il suffit de réaliser une diapositive dont les deux plaques du support sont assez distantes pour que des billes de 1 mm de diamètre se déplacent librement. On la remplit partiellement de billes, on la place dans le projecteur et on observe sur un écran. Une simple agitation permet de modifier complètement la configuration).

Lors des simulations dynamiques, nous avons suivi la trajectoire des billes en photographiant avec des temps de posenettement supérieurs à la période de vibration du haut-parleur avec un film 25 ASA. Nous avons dans ce cas utilisé une seule source de lumière car c'est le reflet de cette source sur chaque bille qu'on enregistre. L'évolution des configurations a été également suivie avec une caméra vidéo.

III. RESULTATS.

1) Simulations statiques.

La fig. 3 montre une configuration typique d'une structure cristallisée. On observe trois cristaux avec les joints qui les



Fig. 3. — Simulation statique. On observe trois grains, celui de droite contient deux lacunes.

séparent. On remarque la présence de deux lacunes dans le grain de droite. D'une façon générale, nous avons relevé deux observations : les dislocations sont très rares à cause de l'absence d'élasticité des billes et les joints de grains sont fréquemment des joints de mâcle Σ 13.

L'absence d'élasticité des billes est également responsable de la faible compacité des structures amorphes (fig. 4) qui sont moins représentatives des métaux réels que celles obtenues avec des bulles. Il faut remarquer que les billes voisines sont bien en contact. même si la présence des reflets laisse supposer le contraire.



Fig. 4. — Simulation statique d'un solide amorphe réalisé avec un mélange 50-50 de billes de deux diamètres différents.

2) Simulations dynamiques.

* FUSION D'UN CRISTAL.

Si on incline très légèrement le plateau, sous l'effet de la pesanteur, les billes s'accumulent sur un côté. Entre les billes qui sont en bas sur le bord de la boîte et qui supportent le poids de toutes les autres et celles du haut qui sont libres, il existe un gradient de gravité. Si partant de l'état ordonné, on augmente progressivement l'amplitude des vibrations, les billes supérieures se mettent à avoir un mouvement désordonné et l'interface entre les parties ordonnée et désordonnée se déplace vers le bas : le cristal fond. Pour des fortes vibrations, les billes



Fig. 5. — Simulation dynamique de la fusion. Le solide cristallisé (S) coexiste avec le liquide (L). En haut, à droite, on a un peu de vapeur (V).

supérieures peuvent même avoir un mouvement erratique avec un grand libre parcours moyen, caractéristique d'une phase vapeur. La fig. 5 montre la coexistence de ces trois phases : solide (S), liquide (L) et vapeur (V). Elle a été obtenue avec un temps de pose de une seconde, soit 200 périodes de vibration du plateau environ. On remarque, près de l'interface, dans la partie cristallisée, de nombreuses lacunes. C'est également ce qui se passe dans les métaux à l'approche du point de fusion, le nombre de ces défauts croissant exponentiellement avec la température absolue. On peut voir également que l'interface n'est pas abrupt mais que sur une largeur de deux ou trois rangées, les billes ont une amplitude de vibration intermédiaire entre le cristal et le liquide.

La fig. 5 ressemble d'assez près à la fig. 6, obtenue par d'autres auteurs [2] par simulation sur ordinateur. Cette technique consistant à réaliser des « expériences » complètement sur ordinateur connaît actuellement un essor considérable. On introduit les lois d'interaction entre atomes dans le calculateur qui considère toutes les situations susceptibles de se produire et qui suit ainsi l'évolution du système. On est souvent réduit à un nombre limité d'atomes par la capacité des ordinateurs disponibles sur le marché.

Nous avons tenté de reproduire l'expérience de PIERANSKI qui a caractérisé l'influence de la surface libre offerte aux billes sur la transition solide-liquide. Le but de l'expérience est, lorsque le plateau vibre, d'augmenter progressivement la surface S offerte aux billes en partant de la surface minimale S_0 et de noter la surface critique, S_c , pour laquelle le cristal fond « en bloc ». Il faut pour cela respecter plusieurs conditions :

- éliminer tous les effets gravitationnels par une horizontalité parfaite du plateau;
- partir d'un cristal parfait remplissant complètement la boîte.
 Celle-ci doit être un hexagone régulier dont la longueur des côtés est égale à kd où d est le diamètre d'une bille et k est défini à la relation (1);
- pouvoir augmenter la surface de la boîte lentement et de façon mesurable. Le système de piston que nous avons retenu n'est pas totalement satisfaisant (fig. 2). Une dilatation homothétique de la boîte serait préférable car symétrique mais elle est difficile à réaliser.

Nous n'avons jamais obtenu que des fusions partielles : il y a toujours des zones de la boîte où les vibrations sont plus importantes qu'ailleurs. PIERANSKI a obtenu :



Fig. 6. — Simulation de la fusion réalisée à l'ordinateur (voir la référence [2]).

$$1,25 < \frac{S_c}{S_0} < 1,35$$

ce qui est en accord avec des simulations de disques durs réalisées par ordinateur [3].

Une étude consacrée au libre parcours moyen et à la distribution des vitesses de billes dans la phase liquide a été réalisée avec une quinzaine de grosses billes à 15 Hz. L'article correspondant [4] contient des renseignements techniques intéressants.

BULLETIN DE L'UNION DES PHYSICIENS

* ORDRE DANS LE CRISTAL ET DANS LE LIQUIDE.

Afin de visualiser les notions d'ordre à courte et à longue distance, nous avons collé une bille sur le plateau et nous l'avons photographiée ainsi que celles qui l'entourent pendant un temps de pose très long, plusieurs minutes. Pour cette expérience, nous n'avons utilisé que 400 billes.



Fig. 7. — Visualisation de l'ordre à courte et à longue distance dans un cristal en vibration. La bille marquée d'une croix est collée sur le plateau, les autres sont libres. Temps de pose : 2 minutes.

Sur la photographie obtenue dans la zone cristallisée (fig. 7), il est difficile de reconnaître la bille fixe; nous l'avons marquée d'une croix. Les autres billes ont des contours un peu plus flous à cause de l'agitation mais elles constituent toujours un réseau régulier, chacune étant restée à sa place tout au long de l'expérience.

La même expérience, réalisée dans la phase liquide (fig. 8) montre la bille fixe, ou plutôt un reflet intense et à peu près ponctuel, plus des reflets parasites formant un petit cercle mais aucune des billes mobiles n'est identifiable, le temps de pose étant bien supérieur au temps de stationnement d'une bille à un endroit donné. On voit seulement des anneaux de lumière, centrés sur le reflet de la bille fixée que nous appelons origine. Ce sont des renforcements de lumière créés par le reflet principal aux endroits où les billes séjournent le plus longtemps. C'est ainsi qu'entre le reflet de la bille origine et le premier anneau brillant se trouve un disque sombre de diamètre 2d environ dû au fait que les billes mobiles viennent souvent au contact de la bille fixe sans pouvoir, bien sûr, s'en approcher plus. On a, ensuite, une succession d'anneaux sombres et brillants, de plus en plus délavés, puis un fond gris à peu près uniforme (cette figure est invisible lors de l'observation directe de l'expérience, il est nécessaire d'en faire un long enregistrement photographique). Si on traçait la courbe de l'intensité en fonction de la distance à l'origine, on obtiendrait une courbe semblable à celle de la fig. XII. Il s'agit dans les deux cas de la même grandeur, la probabilité de trouver des particules, en fonction de la distance.



Fig. 8. — Visualisation de l'ordre à courte distance dans un liquide. Le reflet central est celui de la bille fixe. Les trois anneaux blancs correspondent aux endroits de plus forte présence des billes mobiles. Temps de pose : 5 minutes.

* DIFFUSION.

Nous avons tenté de simuler la diffusion atomique, c'est-àdire le déplacement des atomes d'une espèce chimique dans une autre sous le double effet de l'agitation thermique et d'un gra-

626

dient de concentration. Nous avons utilisé des billes de diamètre identique. Au départ, nous en avons rassemblé plus de 90 % de façon ordonnée; elles simulent un cristal parfait d'une espèce chimique. Les autres, colorées au marqueur, sont rassemblées en quelques rangées denses sur un bord du cristal. Puis nous avons fait vibrer l'ensemble. Le but était de suivre au cours du temps la dilution des billes colorées dans le cristal et si possible de la quantifier et de la comparer à la solution mathématique bien connue de ce problème simple de diffusion. Malheureusement la diffusion est pratiquement nulle dans un solide de sphères dures. Il faudrait se placer dans un gaz de billes comme l'ont fait d'autres auteurs [5], utilisant des palets sur une table soufflante. Une autre solution est d'utiliser des billes enduites de graisse [6], ce qui permet un meilleur déplacement des unes par rapport aux autres et donne une force de cohésion à l'ensemble.

En conclusion, la simulation par un modèle de sphères dures permet surtout de visualiser les changements de phases et les degrés d'ordre. Des perfectionnements peuvent être apportés. Au lieu d'utiliser des billes individuelles, on peut les coller en paquets de sept : une bille centrale et six sphériques suivant l'arrangement décrit à propos de la fig. II. On constitue ainsi une molécule dont on peut suivre le mouvement du centre de gravité mais également la rotation. Il suffit de colorer différemment la bille centrale et une de ses voisines. On peut ainsi définir des valeurs du rapport S/S₀, défini précédemment, pour lesquelles la translation et la rotation des molécules interviennent différemment [7]. On peut également pour un modèle de disques durs, utiliser des pièces de monnaie, éventuellement de tailles et de couleurs différentes; on peut même simuler des interactions type Van der Waals en collant sur chacune un petit aimant. Il faut, dans tous ces cas, une source de vibration puissante, et étendue

Nous remercions M^{Ile} PHILOUZE et MM. AUGER, GADY et LE BRIS pour leur participation.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] P. PIERANSKI. Am. J. Phys. 52, 1984, p. 68.
- [2] Figure aimablement communiqueé par A. BONISSENT. Pour plus de détails, voir :
 J. Q. BROUGHTON, A. BONISSENT et F. F. ABRAHAM. J. Chem. Phys. 74, 1981, p. 4029.
- [3] B. J. ALDER et T. E. WAINWRIGHT. Phys. Rev. 127, 1962, p. 359.
- [4] B. G. EATON, R. G. FINSTAD et P. D. LANE. Am. J. Phys. 47, 1979, p. 132.
- [5] C. BETRENCOURT, J. C. DEROCHE, E. GUYON et J. F. SADOC. B.U.P. 675, 1985, p. 1131.
- [6] A. J. WALTON et A. G. WOODRUFF. Contemp. Phys. 10, 1969, p. 59.
- [7] A. C. BRANKA, P. PIERANSKI et K. W. WOJCIECHOWSKI. J. Phys. Chem. Solids, 43, 1982, p. 817.