

Chapitre 1 Corrigés des exos.

Exo 1.2 Energie interfaciale

L'énergie interfaciale γ fait intervenir le nombre d'atomes par unité de surface, $n_{at,S}$, selon

un plan donné, ainsi que la surface S du plan en question, $\gamma = \frac{\varepsilon_0 n_{at,S}}{2S}$

Pour une maille de type cfc, ces surfaces S , sont les suivantes :

$$S_{(100)} = a^2, \quad S_{(110)} = \sqrt{2}a^2 \quad \text{et} \quad S_{(111)} = \frac{\sqrt{3}a^2}{2}$$

a représentant le paramètre de maille exprimée de la manière suivante pour une structure

cubique à faces centrées : $a = \frac{4r_{at}}{\sqrt{2}}$

où r_{at} représente le rayon atomique. Le nombre d'atomes par unité de surface $n_{at,S}$ est le suivant (suivant le plan considéré) :

$$n_{at,(100)} = 4 \frac{1}{4} + 1 = 2$$

$$n_{at,(110)} = 4 \frac{1}{4} + 2 \frac{1}{2} = 2$$

$$n_{at,(111)} = 3 \frac{1}{6} + 3 \frac{1}{2} = 2$$

D'où les valeurs des énergies interfaciales :

$$\gamma_{(100)} = 1.29 \text{ J/m}^2 \quad \gamma_{(110)} = 0.913 \text{ J/m}^2 \quad \gamma_{(111)} = 1.492 \text{ J/m}^2$$

Il est possible de remarquer que la valeur d'énergie interfaciale la plus élevée correspond au plan (111), qui est un plan dense

Exo 1.5 Potentiel de Morse

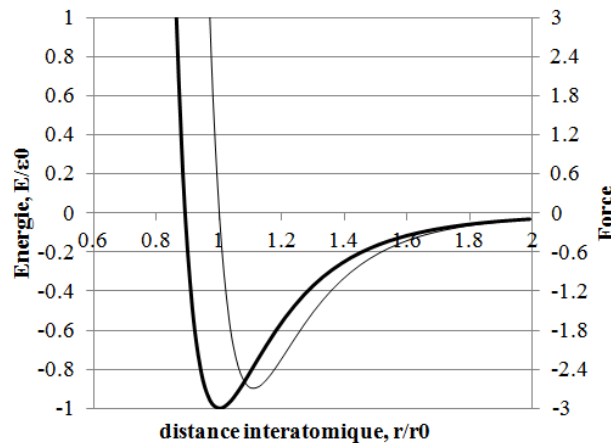
$$E(r) = \varepsilon_0 \left\{ e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)} \right\}$$

a) α est l'inverse d'une distance car l'argument de l'exponentiel ne doit pas avoir d'unité. Donc α est en /m ou en \AA^{-1} . ε_0 est une énergie exprimée en J ou en électronvolt eV.

b) Il faut calculer la dérivée de E par rapport à r et chercher les zéros de cette dérivée :

$$\frac{\partial E(r)}{\partial r} = \varepsilon_0 \left\{ -2\alpha e^{-2\alpha(r-r_0)} + 2\alpha e^{-\alpha(r-r_0)} \right\}, \quad e^{-2\alpha(r-r_0)} = e^{-\alpha(r-r_0)} \quad \text{ssi } r=r_0 \quad \text{et} \quad E(r=r_0) = -\varepsilon_0$$

L'allure générale de ce potentiel est identique au potentiel de Leenards-Jones :



c) la maille est cubique donc son volume vaut r_0 au cube. De plus, dans cette maille, il y aura 8 huitièmes d'atomes soit un atome. Il vient alors :

$$\rho = \frac{M_A}{N_A r_0^3} \text{ soit } r_0^3 = \frac{M_A}{N_A \rho} \text{ et } r_0 = \sqrt[3]{\frac{M_A}{N_A \rho}}; r_0 = \sqrt[3]{\frac{69.72}{6 \times 0.591}} 10^{-10} \text{ m} = 2.7 \text{ \AA}$$

d) le module d'élasticité se calcule comme dans le cours car le système, seul le potentiel $E(r)$

est différent : $E_{(100)} = \frac{1}{r_0} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial r^2} \right)_{r=r_0} = \frac{2\alpha^2 \varepsilon_0}{r_0}$

$E = 200 \text{ GPa}$ donne : $\frac{2\alpha^2 \varepsilon_0}{r_0} = 200 \cdot 10^9$; $\alpha = \sqrt{\frac{2.7}{1.6}} 10^{10} \text{ m}^{-1} = 1.3 \text{ \AA}^{-1}$

e) On cherche r pour lequel la force est maximum, i.e. pour lequel la dérivée seconde de E est nulle :

$$\frac{\partial E(r)}{\partial r} = 2\alpha \varepsilon_0 \left\{ -e^{-2\alpha(r-r_0)} + e^{-\alpha(r-r_0)} \right\}, \frac{\partial^2 E(r)}{\partial r^2} = 2\alpha \varepsilon_0 \left\{ 2\alpha e^{-2\alpha(r-r_0)} - \alpha e^{-\alpha(r-r_0)} \right\}$$

$$2e^{-2\alpha(r-r_0)} = e^{-\alpha(r-r_0)}, \quad 2 = e^{\alpha(r-r_0)} \text{ soit } r = r_0 + \ln(2) / \alpha$$

$$R_{\max} = \frac{F_{\max}}{r_0^2} = \frac{\alpha \varepsilon_0}{2r_0^2} = 14.2 \text{ GPa}$$

Cette valeur correspond à un monocristal parfait i.e sans défauts tels que des dislocations ou lacunes. Un polycristal de Gallium présentera une valeur plus faible.

f) L'énergie de clivage est l'énergie nécessaire pour rompre la liaison interatomique, ceci par unité de surface :

$$\gamma = \frac{1}{2} \frac{\varepsilon_0}{r_0^2} = 1.1/16 \text{ eV \AA}^{-2} = 0.1 \times 11 / 1.6 \text{ eV \AA}^{-2} = 0.068 \text{ eV \AA}^{-2} = 1.1 \text{ J/m}^2 = 1.1 \text{ N/m}$$

ε_0 est en eV ou J

Exo 1.6

Une structure cristalline est faite d'un motif et d'un réseau.

Pour Ni_3Al , il faut disposer les 4 atomes, 3 Ni et un Al, aux sommets du cube pour construire la maille. Ainsi Ni_3Al est le motif et le réseau est cubique simple.

Idem pour NiAl : le motif est NiAl et le réseau est cubique simple.

Le calcul des masses volumiques se fait en comptant les atomes dans le volume a^3 . Pour Ni_3Al , il y a un atome Al et 3 atomes Ni et on trouve une masse volumique de $6.65 \text{ g/cm}^3 = 6.65 \text{ t/m}^3$.

Pour NiAl , il y a un atome Al et 1 atome Ni et on trouve une masse volumique de $5.47 \text{ g/cm}^3 = 5.47 \text{ t/m}^3$.