

## Chapitre 1 Corrigés des exos.

### Exo 1.2 Energie interfaciale

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

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

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 :

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

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

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

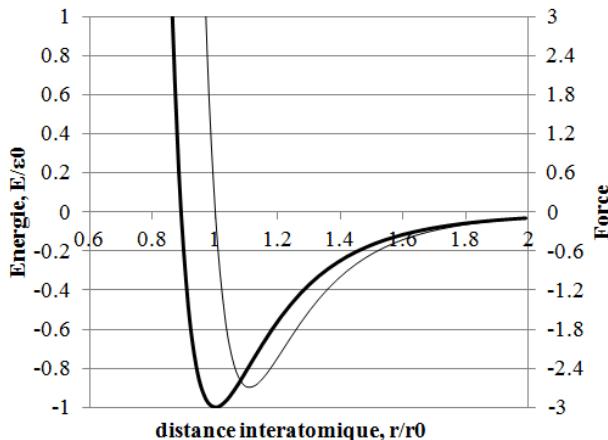
a)  $\alpha$  est l'inverse d'une distance car l'argument de l'exponentiel ne doit pas avoir d'unité.

Donc  $\alpha$  est en  $/m$  ou en  $\text{\AA}^{-1}$ .  $\varepsilon_0$  est une énergie exprimée en J ou en electronvolt eV.

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

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

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

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

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

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

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

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

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 :

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

$\varepsilon_0$  est en eV ou J

### Exo 1.6

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

Pour Ni<sub>3</sub>Al, il faut disposer les 4 atomes, 3 Ni et un Al, aux sommets du cube pour construire la maille. Ainsi Ni<sub>3</sub>Al 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<sub>3</sub>Al, 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  $5.47 \text{ g/cm}^3 = 5.47 \text{ t/m}^3$ .