

Chapitre I : Généralités sur les matériaux:

I-1 Structure des solides :

Il existe deux types d'état solide :

L'état ordonné : les atomes sont régulièrement disposés en un réseau correspondant au solide cristallin et ont une structure polyédrique.

L'état désordonné : caractérisé par une structure non ordonnée dans laquelle l'arrangement atomique est aléatoire, par exemple le verre

I-2 Les réseaux cristallins :

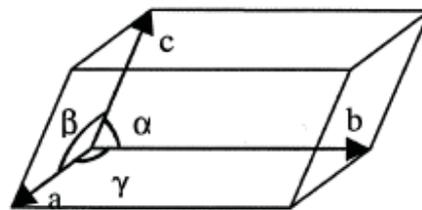
Un réseau cristallin = réseau + motif

Un motif : est un atome ou un groupe d'atomes de même nature ou de nature différente répété dans trois directions de l'espace pour décrire un cristal.

Un réseau : est engendré par la translation de la maille par des vecteurs de base, tous les nœuds du réseau sont définis par cette translation.

Le vecteur de translation : $T = u \cdot a + v \cdot b + w \cdot c$

La maille élémentaire est définie par trois vecteurs primitifs a , b , c et des angles α , β , γ qu'ils forment entre eux. Selon les valeurs relatives de ces six quantités, il existe sept systèmes cristallins qui forment 14 réseaux de Bravais



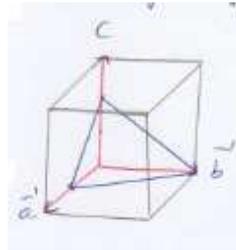
I-1-a) Les indices de Miller :

Pour trouver les indices de Miller d'une famille de plans réticulaires provenant d'un plan, il faut considérer un plan défini par trois entiers (h, k, l) appelés les indices de Miller.

Les indices h, k, l sont proportionnels aux longueurs inverses interceptées sur chaque axe par ce plan.

$$\begin{cases} OA = \frac{1}{2}a \\ OB = 1b \\ Oc = \frac{3}{4}c \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} h = \frac{1}{OA} \cdot 3 = 6 \\ k = \frac{1}{OB} \cdot 3 = 3 \\ l = \frac{1}{Oc} \cdot 3 = 4 \end{cases}$$

$\Rightarrow (h, k, l) = (6, 3, 4)$



D'autres définitions sont utiles pour étudier des solides cristallins : la compacité, la coordinence, la population et la densité.

La coordinence : représente le nombre de plus proches voisins que possède un atome.

La compacité : représente le rapport du volume occupé par les n particules appartenant à la maille du volume totale de la maille.

$$C = \frac{n \cdot \frac{4}{3} \pi r^3}{V_{maille}}$$

La multiplicité : La population N : le nombre de motifs présents dans la maille.

La masse volumique $\rho = \frac{N \cdot M_{motif} / N_A}{V_{maille}}$

I-3) Les amorphes :

Ce type de matériaux sont denses et non structurés, les atomes sont disposés aléatoirement et proches les uns des autres cependant une certaine périodicité à faible distance peut être évidente pour des raisons purement stériques d'encombrement des atomes voisins, exemple : verres métalliques, verres minéraux, polymères.

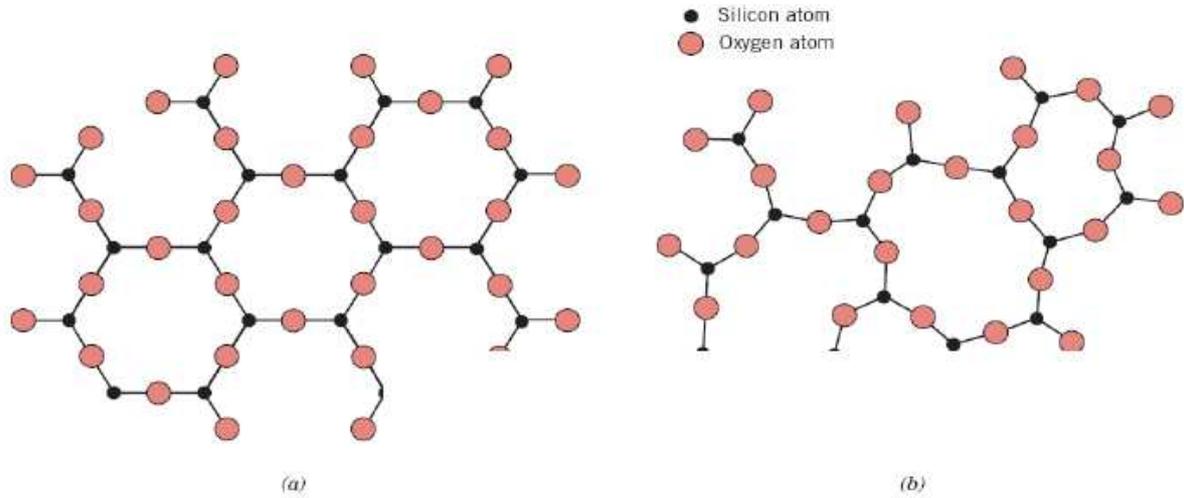


Fig (I-1) : Schémas bidimensionnel : (a) SiO₂ cristallin, (b) SiO₂ amorphe

I-4) Cohésion de la matière :

La cohérence des atomes nécessite la présence d'une énergie de liaison qui est nécessaire à la séparation en ses composants et varie selon le type de cristal.

I-4-a) Cristaux de gaz rares :

L'énergie d'attraction entre deux atomes résultant d'une interaction dipôle-dipôle (dite liaison de Vanderwaals-London) qui varie en r^{-6} .

$$w_{\text{att}} = -\vec{P}_A \cdot \vec{E}_A = -\epsilon_0 \alpha_e \propto \alpha \frac{P_A^2}{r^6}$$

α_e : La polarisabilité de l'atome.

P : Le moment électrique dipolaire.

L'énergie de répulsion due au recouvrement des orbites électroniques varie de façon encore plus abrupte en r^{-12} ou en $\lambda \exp(-r/\rho)$

ρ : mesure le rayon d'interaction. En ignorant complètement les termes d'énergie cinétique, une forme d'énergie potentielle connue sous le nom d'énergie de Lennard-Jones est obtenue.

$$w_p = 4\epsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6]$$

σ : Représente l'énergie de cohésion de la molécule qui est liée à la distance d'équilibre r_0 séparant les atomes par $r_0 = 1.12 \epsilon$

Dans un cristal de N atomes, on additionne les j premiers voisins, l'expression de l'énergie de cohésion est :

$$E_c = \frac{N}{4} + 4\epsilon \left[\sum_j \left\{ \left(\frac{\sigma}{r_{0j}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{0j}} \right)^6 \right\} \right]$$

I-4-b) Cristaux ioniques :

La cohésion dans les cristaux ioniques est le résultat de phénomènes électrostatiques entre des ions opposés.

$$E_p = -q^2 \alpha / 4\pi\epsilon_0 r_0$$

La constante de Madelung, permet de quantifier le potentiel.

r_0 : La distance entre les deux proches voisins à l'équilibre.

Les énergies de répulsion électrostatique des ions à très courte distance due au recouvrement des orbitales électroniques entre plus proches voisins sont décrites par :

- Une expression de type potentiel du Lenard-Jones: Ar^{-P} (avec p=9 ou 10)
- Une expression de la forme : $\lambda e^{-r/\rho}$.

L'énergie d'ionisation des espèces près, et en négligeant les termes d'énergie cinétique, l'énergie de Liaison de N paires d'ions prendre l'une des formes suivantes :

$$E_c = N[Z\lambda e^{-r/\rho} - (\alpha q^2 / 4\pi\epsilon_0 r_0)]$$

$$E_c = N[ZAe^{-P} - (\alpha q^2 / 4\pi\epsilon_0 r_0)]$$

Z : le nombre de plus proches voisins.

r : la distance entre les plus proches voisins à l'équilibre.

λ, ρ : Constants

La condition d'équilibre $\left(\frac{\partial E_c}{\partial r} \right)_{r=r_0} = 0$ permet de calculer A, P, et λ, ρ .

L'énergie de cohésion provient essentiellement de l'attraction coulombienne.

$$E_C = -\frac{\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{\rho}{r_0} \right) \quad \text{ou} \quad E_C = -\frac{\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{P} \right)$$

α : Le facteur qui dépend de la structure cristalline considérée.

I-4-c) Liaison métalliques :

C'est une liaison dans laquelle les électrons de valence ne sont plus situés près de leur atome parent. Ceux-ci se délocalisent et forment un gaz d'électrons baignant les ions constitués par les noyaux et leurs électrons de cœur. La stabilité de la liaison métallique provient de l'abaissement de l'énergie cinétique de localisation des électrons. C'est un effet purement quantique, lié au principe de Heisenberg.

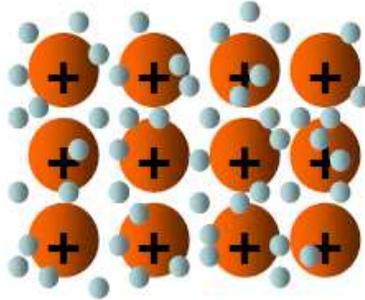


Fig (I-2) : Schématisation de liaison métallique

I-5) Les constantes élastiques :

C'est la quantité macroscopique qui relie les contraintes aux déformations dans les solides.

Les contraintes :

Représentent des forces agissant sur la surface d'un solide qui sont créées par le milieu qui l'entoure comme Y_z, Z_y, Z_x, X_z et Y_x, X_y

Une contrainte uniaxiale : lorsque la force agit dans une seule direction.

$$\begin{bmatrix} X_x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Une contrainte hydrostatique : quand les forces agissent selon toutes les directions.

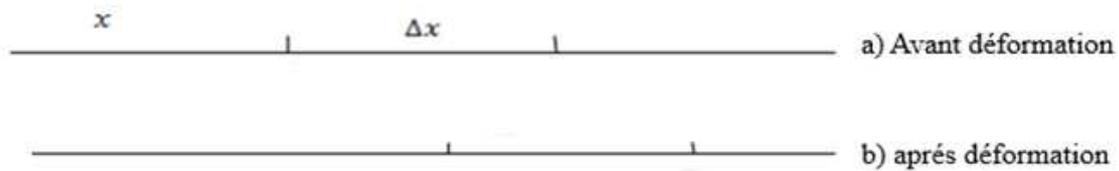
$$\begin{bmatrix} -P & 0 & 0 \\ 0 & -P & 0 \\ 0 & 0 & -P \end{bmatrix}$$

Une contrainte de cisaillement : les forces exercées pour se déplacer dans le plan parallèle du solide.

Déformations

Une déformation présente une réponse à un changement de dimensionnalité ou de force.

Déformation Unidimensionnelle :

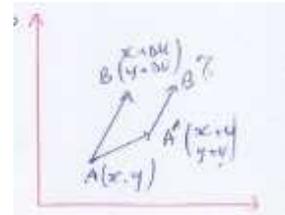


La déformation du segment \overline{AB} est défini par : $\frac{A'B' - AB}{AB} = \frac{\Delta u}{\Delta x}$

La déformation au point A par $e = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta x}{\Delta u} = \frac{du}{dx}$ M N

Déformations bidimensionnelles :

$$\overline{A'B'} = \overline{AB} + \left(\frac{\delta u}{\delta x} + \frac{\delta v}{\delta x} \right) \overline{\Delta x} + \left(\frac{\delta u}{\delta y} + \frac{\delta v}{\delta y} \right) \overline{\Delta y}$$



Déformations tridimensionnelles : Pour connaître la déformation pratique d'un solide en présence de petites déformations, il suffit de connaître soit les éléments e_{ij} des déformations pratiques soit les éléments ε_{ij} des tenseurs de déformations avec $(i, j=1, 2, 3)$ qui sont reliées entre elles.

La loi de Hook :

La loi de Hook établit que la déformation est directement proportionnelle à la contrainte, soit à une dimension : $X_c = C \frac{du}{dx}$; ces trois dimensions conduits aux relations linéaires suivantes :

$$X_x = C_{11}e_{xx} + C_{12}e_{yy} + C_{13}e_{zz} + C_{14}e_{yz} + C_{15}e_{zx} + C_{16}e_{xy}$$

$$Y_y = C_{21}e_{xx} + C_{22}e_{yy} + C_{23}e_{zz} + C_{24}e_{yz} + C_{25}e_{zx} + C_{26}e_{xy}$$

$$Z_z = C_{31}e_{xx} + C_{32}e_{yy} + C_{33}e_{zz} + C_{34}e_{yz} + C_{35}e_{zx} + C_{36}e_{xy}$$

$$Y_z = C_{41}e_{xx} + C_{42}e_{yy} + C_{43}e_{zz} + C_{44}e_{yz} + C_{45}e_{zx} + C_{46}e_{xy}$$

$$Z_x = C_{51}e_{xx} + C_{52}e_{yy} + C_{53}e_{zz} + C_{54}e_{yz} + C_{55}e_{zx} + C_{56}e_{xy}$$

$$X_y = C_{61}e_{xx} + C_{62}e_{yy} + C_{63}e_{zz} + C_{64}e_{yz} + C_{65}e_{zx} + C_{66}e_{xy}$$

C_{ij} : les constantes d'élasticités. Un cristal est caractérisé par 3 constantes élastiques C_{11} ; C_{12} et C_{44} .

Dans le cas d'un solide isotrope $C_{44} = \frac{C_{11}-C_{12}}{2}$, on utilise des coefficients qui ont des significations physiques plus directe comme :

Le module de Young : $E = \frac{F/S}{\Delta l/l} = \frac{X_x}{e_{xx}} = C_{11}$

Le coefficient de Poisson : $\nu = \frac{\Delta b/b}{\Delta l/l} = -\frac{e_{yy}}{e_{xx}} = \frac{C_{12}}{C_{11}+C_{12}}$

Référence :

1-Initiation à la physique du solide « J.CAZAUX », 3^e édition.

2-Physique des semiconducteurs et des composants électroniques. «Henri MATHIEU et Hervé FANET », 6^e édition.