

Introduction à la physique des matériaux
SMP5- Série n° 2

I) Soit une ligne de $2N$ ions de charges égales alternativement à $\pm q$ avec une énergie de répulsion égale à $\frac{B}{r^n}$ entre plus proches voisins.

- 1- Calculer la constante de Madelung.
- 2- Montrer qu'à l'équilibre, on a :

$$E(r_0) = - \frac{2Nq^2 \text{Log}2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

3- Soit une compression du cristal qui transforme r_0 en $r_0(1-\delta)$. Montrer que le travail de compression par unité de longueur du cristal est approximativement égal à $\frac{1}{2} C \delta^2$ avec :

$$C = \frac{(n-1)q^2 \text{Log}2}{4\pi\epsilon_0 r_0^2}.$$

II) Soit un cristal de CsCl où Cs est au sommet au cube et Cl à son centre.

Pour calculer le potentiel en O appelé $V(O)$, on utilise la méthode d'Evjen. Cette dernière tient compte du seul effet des ions ou fractions d'ions contenus dans le cube centré en O dont les arêtes de longueur $2\mu r$ (μ entier naturel) sont parallèles à OX, OY ou OZ: Les ions sont supposés sphériques, centrés sur leurs sites respectifs et d'électrisation uniforme.

Evaluer par la méthode d'Evjen la constante de Madelung de ce cristal en considérant les charges et fractions de charges contenues dans un cube d'arête $2a$ et centré sur un ion Cs^+ . A : arête de la maille élémentaire.

III) Considérons un réseau plan dans lequel les ions sont disposés de la même façon que sur le plan (100) du NaCl.

- 1- Calculer la constante de Madelung (2d) à l'aide de la méthode d'Evjen.
- 2- Dans le cas où l'énergie de répulsion est donnée par $\frac{B}{r^n}$ et qu'elle ne s'exerce qu'entre premiers voisins, déterminer la distance r_0 qui sépare les ions à l'équilibre.

IV) On a montré que l'énergie d'interaction entre deux dipôles est donnée par :

$$E(r) = \frac{-P}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{p^2}{r^6} [1 + 3\cos^2 \theta]$$

- 1- Sachant que de l'énergie de répulsion est égale $\frac{B}{r^n}$ avec $n = 12$, donner l'expression de l'énergie totale d'interaction d'une paire d'atomes.
- 2- En supposant que les gaz rares cristallisent dans le système c.f.c. et en prenant en compte que les interactions réciproques entre un atome donné et les atomes distants de r_0 (qui sont ses plus

proches voisins), donner l'expression de l'énergie totale à l'équilibre des N atomes d'une mole d'un gaz rare.

3- Dans ces calculs, nous n'avons pas pris en considération les vibrations des atomes. En effet, un tel mouvement des atomes conduit à une énergie par atome égale à :

$$E_{\text{vib.}} = \frac{9}{8} K_B \theta_D .$$

Quelle erreur relative commet-on sur E_{tot} dans le cas où θ_D est égale à la température de l'azote liquide.

Données:

la polarisabilité d'un atome de Krypton égale à $2.7 \cdot 10^{-40} \text{ F.m}^2$.

$r_0 = 4 \text{ \AA}$.

Le moment dipolaire p correspond au moment dipolaire du couple formé par un ion et un électron distants de 1 \AA .

La température de l'azote liquide est égale à 77 K .