

République Algérienne Démocratique et Populaire
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE BATNA 1
FACULTE DES SCIENCES DE LA MATIERE

Extrait du PV N° 07/2023 de la session ordinaire de la réunion du conseil scientifique tenue le 11 Octobre 2023.

Restitution de rapport d'expertise de polycopié de cours

Les experts désignés (CSD Physique N°4/2023 et CSF N°06/2023), **Pr. Baaziz Hakim** (Université de M'sila) et **Pr. Bouharkat Adjadj Fouzia** (Université Batna 1) ont émis des rapports positifs à l'expertise d'un polycopié de cours émanant du **Dr. Beddiaf Zaidi** intitulé : « Physiques des Matériaux » destiné aux étudiants de Master 1 Physique Energétique et énergies renouvelables et aux étudiants de Master 1 Dynamique des fluides et énergétique.
Le conseil scientifique a émis un avis favorable quant à l'utilisation du polycopié du **Dr. Beddiaf Zaidi** comme support pédagogique.

Fait à Batna le 06/11/2023

La Présidente du Conseil Scientifique

(ADJADJ Fouzia)


رئيس المجلس العلمي
لكلية علوم المادة
أ.د. / عجاج فوزية

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



Université Hadj Lakhdar - BATNA 1

Faculté des Sciences de la Matière

Département de Physique



Polycopié de cours

Physique des Matériaux

Destiné aux:

1^{ère} Master en physique énergétique et énergies renouvelable

1^{ère} Master en Dynamique des fluides et énergétique

Par

Dr. Beddiaf ZAIDI

Année universitaire 2022 / 2023

Avant-propos

Ce polycopié est adressé essentiellement aux étudiants de première année Master en physique énergétique et énergies renouvelable et de première année Master Dynamique des fluides et énergétique. Le contenu de ce support de cours concorde au programme officiel. Ce polycopié de cours est divisé en quatre (04) chapitres. Dans le premier chapitre est consacré essentiellement aux réseaux périodiques d'atomes. Dans le second chapitre, nous présentons une introduction sur le réseau réciproque et diffraction RX. Dans le troisième chapitre, nous décrivons les liaisons cristallines. Le quatrième chapitre décrit les propriétés élastiques.

Mot clé: Réseaux périodiques, Réseaux réciproque, Diffraction RX, Liaisons, Élastiques.

Abstract

This course is intended primarily for first-year Master's students in energy physics and renewable energies and first-year Master's students in Fluid Dynamics and Energy. The content of this course material corresponds to the official program. This course handout is divided into four (04) chapters. The first chapter is essentially devoted to periodic networks of atoms. In the second chapter, we present an introduction to the reciprocal networks and X-ray diffraction. In the third chapter, we describe crystal bonds. The fourth chapter describes elastic properties.

Keywords: Periodic networks, Reciprocal networks, X-ray diffraction, Bonds, Elastics.

ملخص

هذه المطبوعة مخصصة في المقام الأول لطلاب في السنة الأولى ماستر فيزياء الطاقة والطاقات المتجددة وطلاب السنة الأولى ماستر ديناميك الموانع والطاقة. محتوى هذه المادة الدراسية يتوافق مع البرنامج الرسمي. تنقسم هذه المطبوعة إلى أربعة (04) فصول. الفصل الأول مخصص بشكل أساسي للشبكات الدورية للذرات. وفي الفصل الثاني قدمنا مقدمة للشبكة المعكوسة وحيود الأشعة السينية. الفصل الثالث يصف الروابط البلورية. ويصف الفصل الرابع خصائص المرونة للمواد.

الكلمات المفتاحية: الشبكات الدورية، الشبكة المعكوسة، حيود الأشعة السينية، الروابط، المرونة.

SOMMAIRE

Chapitre I : Réseaux périodiques d'atomes

I.1.	Introduction.....	2
I.2.	Solides cristallins	2
	I.2.1. Réseau cristallin	2
	I.2.2. Maille élémentaire	3
	I.2.3. Motif atomique.....	4
I.3.	Réseau de Bravais	5
I.4.	Groupes de symétrie dans les cristaux.....	6
I.5.	Corps cristallins et corps amorphes.....	9
I.6.	Plans cristallins (ou plans réticulaires).....	9
	I.6.1. Définition et propriétés	10
	I.6.2. Indices caractéristiques d'une famille de plans réticulaires.....	10
I.7.	Densité atomique	12

Chapitre II : Réseau réciproque et diffraction RX

II.1.	Introduction	14
II.2.	La diffraction des rayons X	14
	II.2.1. Analyse standard des couches minces : mesures en Θ et 2Θ	15
	II.2.2. Détermination des contraintes et de la taille des grains.....	17
	II.2.2.1. Taille des gains.....	17
	II.2.2.2. Détermination des contraintes.....	18
II.3.	Interaction des rayons X avec la matière.....	19
II.4.	Réseau réciproque.....	20
II.5.	Facteurs de structure.....	22
	II.5.1. Conditions de Laue.....	23
	II.5.2. Conditions de diffraction.....	24
II.6.	Facteur de forme.....	25

Chapitre III : Liaison cristalline

III.1.	Introduction	28
III.2.	Classification des éléments chimiques	28
III.3.	Configuration électronique.....	30
III.4.	La représentation de Lewis.....	30
III.5.	Géométrie des molécules- Théorie de Gillespie.....	31
III.6.	Liaisons chimiques.....	33
III.6.1.	Liaisons fortes.....	33
III.6.1.1.	Liaison covalente.....	33
III.6.1.2.	Liaison ionique.....	34
III.6.1.3.	Liaison métallique.....	35
III.6.2.	Liaisons faibles ou liaisons secondaires.....	36
III.6.2.1.	Liaison hydrogène.....	36
III.6.2.2.	Liaison de Van Der Waals.....	36
III.7.	Classification des matériaux et des propriétés.....	38
III.7.1.	Les grandes classes de matériaux.....	38
III.7.2.	Les propriétés d'usage.....	38
III.8.	Le caractère mixte des liaisons.....	40

Chapitre IV : Propriétés élastiques

IV.1.	Introduction.....	42
IV.2.	L'essai de traction simple.....	42
IV.3.	Caractéristiques du milieu.....	43
IV.4.	Tenseur des contraintes.....	44
IV.4.1.	Vecteur contrainte et tenseur des contraintes.....	44
IV.4.2.	Contraintes principales et invariants	47
IV.5.	Le tenseur des déformations.....	48
IV.6.	Résumé Contraintes – Déformations.....	50
IV.7.	Loi de Hooke.....	51
IV.8.	Module d'Young et coefficient de Poisson.....	52

IV.9. Matériaux anisotropes.....	54
Références.....	55

Chapitre I : Réseaux périodiques d'atomes

I.1. Introduction

Il existe trois états de matière : gazeux, solide et liquide. Les interactions entre les particules constitutives de la matière (atomes, molécules ou ions) déterminent sa forme.

Les gaz et les liquides sont des fluides qui, sous l'action de forces très faibles, prennent la forme du récipient dans lequel ils sont contenus.

Les forces importantes sont nécessaires pour déformer les solides en raison de leur forme unique. Les solides peuvent se trouver dans deux états différents : l'état désordonné, qui se caractérise par une structure non ordonnée, comme dans les systèmes amorphes, comme les verres ; l'état ordonné, qui se caractérise par une structure ordonnée, comme dans les solides cristallins.

Un cristal est composé d'un assemblage de particules qui se produit régulièrement. Les trois directions de référence d'une entité de base appelée maille peuvent être utilisées pour décrire cela. La description du cristal nécessite une compréhension du réseau et du motif.

I.2. Solides cristallins

Un cristal est un ensemble d'atomes (ou de molécules) disposés périodiquement dans les trois directions et présentant un ordre à courte et à longue distance. Le réseau cristallin et le motif atomique sont les deux informations qui peuvent être utilisées pour la définition.

I.2.1. Réseau cristallin

Le réseau cristallin d'un cristal est un être purement géométrique. Il est constitué de points de l'espace à trois dimensions, nommés nœuds du réseau, et obtenus à partir d'un nœud origine arbitraire en lui appliquant l'ensemble des translations \vec{T} caractéristiques du cristal. Les translations \vec{T} sont alors nommées translations de réseau. Dans le réseau cristallin, un des nœuds est choisi arbitrairement comme origine et le repère a, b, c défini pour le cristal est conservé pour le réseau. Ainsi, chacun des nœuds du réseau est indiqué par chacune des translations de réseau $\vec{T} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} = \vec{T}_{uvw}$ avec u, v, w entiers relatifs quelconques qui sont les *coordonnées du nœud* dans le réseau.

I.2.2. Maille élémentaire

Une maille élémentaire (ou primitive) est une maille au volume le plus petit qui contient un seul noeud du réseau. La répétition régulière de cette maille dans les trois dimensions de l'espace permet de reproduire l'intégralité de la structure et du réseau. Une maille multiple, contenant plusieurs nœuds et donc non élémentaire, est fréquemment utilisée pour décrire le cristal pour des raisons de commodité ou pour faire mieux ressortir la symétrie.

Les trois vecteurs a , b et c , qui sont linéairement indépendants, servent à définir une maille. On peut définir plusieurs mailles élémentaires qui pourront plus ou moins bien montrer la symétrie du réseau car le choix de ces trois vecteurs n'est pas unique. Les paramètres de maille sont fréquemment employés : les longueurs des vecteurs, a , b et c , ainsi que les angles qui les séparent, α , β et γ .

Exemple: carrelages – la maille élémentaire = petit carreau.

Pour calculer le nombre de nœuds « contenus » dans une maille élémentaire, il faut tenir compte du fait que les sommets du polyèdre appartiennent simultanément à un nombre p de mailles adjacentes ; par conséquent, chacun d'eux comptera pour $1/p$ nœud. Il est possible de démontrer qu'un nombre entier N de nœuds est toujours présent dans une maille élémentaire.

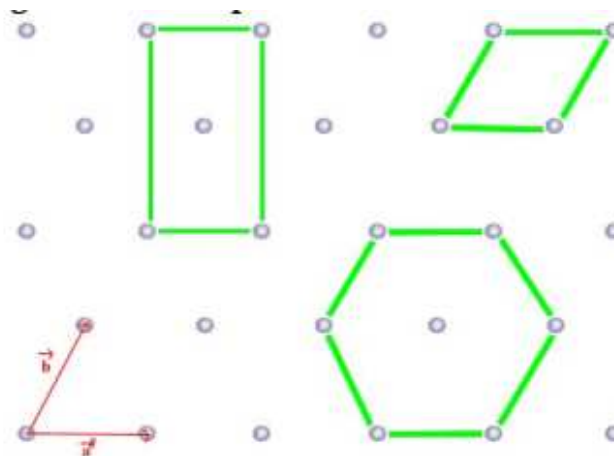


Figure I.1 : Exemple de mailles élémentaires: rectangle, parallélogramme et hexagone

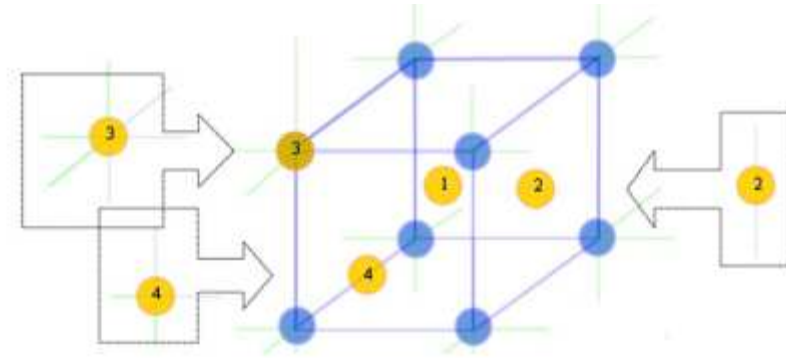


Figure I.2 : Densité des noeuds du réseau

(1) atome dans la maille (=1), (2) atome au centre de la face (=1/2), (3) atome centré sur le sommet de la maille (=1/8), (4) atome au centre d'une arête (=1/4).

Le nombre de noeuds contenus dans une maille élémentaire (toujours un nombre entier) dans un réseau 3D, comme dans la réalité : En considérant un cubique... Comptez les particules dans une maille : (1) Si un atome est dans la maille, il est à 100 % et donc compte pour 1. Si l'atome se trouve au milieu de la face, une partie est à l'intérieur et l'autre est à l'extérieur : l'atome compte pour 1/2. (3) Si l'atome est centré au sommet, il représente 1/8. (4) Si un atome se trouve au cœur d'une arête, il représente un quart de l'arête.

I.2.3. Motif atomique

C'est un ensemble d'atomes (différents ou identiques), avec leur position relative, qui doit être reporté en chaque noeud du réseau cristallin pour reconstituer exactement la totalité des atomes du cristal, sans vide ni recouvrement.

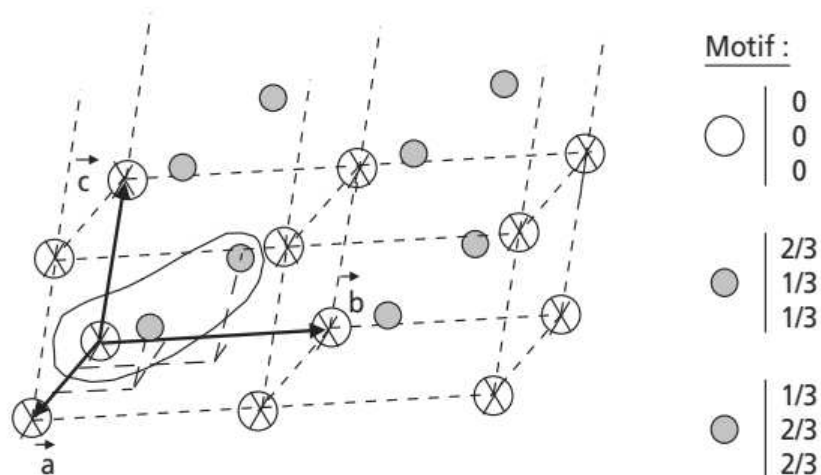


Figure I.3 : Exemple de motif atomique comportant trois atomes.

La nature de chaque atome et les coordonnées de son emplacement ou **site** dans les vecteurs de base de la maille sont utilisées pour le déterminer.

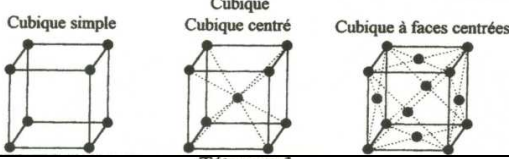


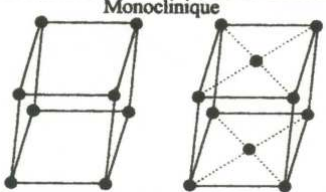

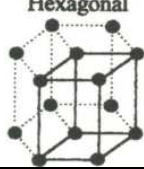
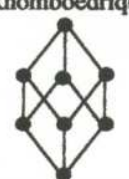
La plupart du temps, l'origine de la maille du réseau, arbitraire, se trouve en un site où se trouve un atome. Bien qu'il soit lié à la maille utilisée pour décrire le réseau du cristal, le choix du motif atomique n'est pas unique. Le motif peut être constitué d'un seul atome dans une maille élémentaire de petites dimensions (quelques dixièmes de nanomètres) dans certains cristaux simples comportant un seul type d'atomes ; dans certains cristaux minéraux ou organiques complexes, il peut comporter des centaines d'atomes dans une maille de plusieurs dizaines de nanomètres.

La définition de **230 groupes d'espace** est basée sur les symétries du réseau et les symétries possibles du motif. Tout cristal réel fait partie de l'un de ces groupes, qui est défini par toutes les opérations de symétrie nécessaires pour transformer le cristal infini en lui-même.

I.3. Réseau de Bravais

Un réseau Bravais est un réseau de nœuds créé en traduisant les vecteurs de base d'un seul nœud. Les réseaux de Bravais sont divisés en 14 types en trois dimensions, ainsi que 5 types en deux dimensions, et sont utilisés pour représenter la périodicité de la structure cristalline. Cela est obtenu à partir d'un ensemble minimal d'atomes occupant l'unité asymétrique, qui sont répétés dans l'espace selon les opérations du groupe d'espace du cristal. L'ensemble des matériaux cristallins (mais pas les quasi-cristaux) ont une périodicité correspondant à l'un de ces réseaux.

Remarque: Dans l'hypothèse où coexistent deux types de mailles de formes différentes, les règles topologiques autorisent l'existence de structures atomiques ordonnées non périodiques appelées quasi-cristaux. Ces quasi-cristaux possèdent des propriétés d'auto-similarité par homothéties successives, et des caractéristiques interdites dans les cristaux, comme les axes de symétrie d'ordre 5. Depuis 1980, de nombreux exemples de matériaux quasi-cristallins ont été élaborés et étudiés en laboratoire.

Système	Longueurs des vecteurs	Angles entre les axes	Réseaux de Bravais
Cubique	$a=b=c$	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	
Quadratique ou tétragonal	$a=b \neq c$	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	
Orthorhombique	$a \neq b \neq c$	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	
Monoclinique	$a \neq b \neq c$	$\alpha=\gamma=90^\circ \neq \beta$	
Triclinique	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	
Hexagonal	$a=b \neq c$	$\alpha=\beta=90^\circ \neq \gamma=120^\circ$	
Rhomboédrique	$a=b=c$	$\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$	

I.4. Groupes de symétrie dans les cristaux

Un groupe mathématique G est l'association d'un ensemble d'objets et d'une opération (notée x) sur ces objets, répondant aux critères suivant:

- Existence d'un élément neutre e dans G tel que $\forall a \in G, axe = exa = a$
- Associativité ($\forall a, b, c \in G \ axbxc = (axb)xc = ax(bxc)$)
- Tout élément a possède un inverse noté a^{-1} tel que $axa^{-1} = a^{-1}xa = e$.

On peut créer des groupes pour l'opération "combinaison de symétries", qui consiste à appliquer successivement les opérations de symétries de deux de ses éléments, pour les éléments de symétrie définis ci-dessus.

On peut créer **230 groupes de symétrie différents appelés groupes d'espace**, dont la description est donnée dans les Tables Internationales de Cristallographie, en combinant les opérations de symétries cristallographiques. Chaque groupe d'espace est un groupe clos d'ordre fini qui est complètement défini par la connaissance d'un petit nombre de ses éléments, appelés éléments générateurs. La combinaison finie des éléments générateurs du groupe peut être utilisée pour obtenir chaque élément du groupe. La symétrie du cristal et l'ensemble de ses propriétés physiques et structurelles sont complètement définis par la connaissance du groupe d'espace. De nombreux objets équivalents par symétrie se trouveront à l'intérieur d'une même maille en raison de la symétrie du groupe d'espaces. On appelle **unité asymétrique** la plus petite partie de la maille (ou groupe d'atomes, motif) qui permet de générer l'ensemble du cristal par la seule application des opérations de symétrie.

Parce qu'ils laissent au moins un point de l'espace invariant, les **groupes ponctuels** sont constitués uniquement d'éléments de symétrie sans translation (de type $(R, 0)$). Il y en a 32 qui forment une partie des 230 groupes d'espace. Les propriétés macroscopiques des cristaux, en particulier leurs formes externes, sont responsables des symétries des groupes ponctuels.

Systèmes cristallins	Groupe ponctuels	Groupes d'espace
Triclinique	1 $\bar{1}$	P1 $P\bar{1}$
Monoclinique	2 m 2/m	P2 P ₂ C ₂ Pm Pc CmCc P2/m P ₂ /mC ₂ /m P2/c P ₂ /c C ₂ /c
Orthorhombique	222 mm2 mmm	P222 P222 ₁ P ₂ 2 ₁ 2 P ₂ 2 ₁ 2 ₁ C222 ₁ C222 F222 I222 I ₂ 2 ₁ 2 ₁ Pmm2 Pmc ₂ Pcc ₂ Pca ₂ Pnc ₂ Pmn ₂ Pba ₂ Pna ₂ Pna ₂ Cmm ₂ Cmc ₂ Ccc ₂ Amm ₂ Abm ₂ Ama ₂ Aba ₂ 2Fmm 2Fdd2 Imm ₂ Iba ₂ Ima ₂ Pmmm Pnnn Pccm Pban Pmma Pnna Pmna Pcca Pbam Pccn Pbcm Pnnm Pmmn Pbcn Pbca Pnma Cmcm Cmca Cmmm Cccm Cmma Ccca Fmmm Fddd Immm Ibam Iba ₂ Imma
Tétraгонаle	4 $\bar{4}$ 4/m 422 4mm $\bar{4}m$ 4/mmm	P4 P ₄ P ₄ P ₄ I ₄ I ₄ $P\bar{4} I\bar{4}$ P4/m P ₄ /m P4/n P ₄ /n I4/m I ₄ /a P422 P4 ₂ 2 P ₄ 22 P ₄ 2 ₁ 2 P4 ₂ 22 P4 ₂ 2 ₁ 2 P4 ₃ 22 P4 ₃ 2 ₁ 2 I422 I4 ₂ 22 P4mm P4bm P4 ₂ nm P4cc P4nc P4 ₂ mc P4 ₂ bc I4mm I4cm I4 ₁ md I4 ₁ cd P4 ₂ m P4 ₂ mcP4 ₂ m P4 ₂ 1cP4 ₂ m P4 ₂ c P4 ₂ b2 P4 ₂ n2 I4 ₂ m I4 ₂ c I4 ₂ m I4 ₂ m P4/mmm P4/mcc P4/nbm P4/nnc P4/mbm P4/mnc P4/nmm P4/ncc P4 ₂ /mmc P4 ₂ /mcm P4 ₂ /nbc P4 ₂ /nnc P4 ₂ /mbc P4 ₂ /mmm P4 ₂ /nmc P4 ₂ /ncm I4/mmm I4/mcm P4 ₁ /amd P4 ₂ /acd
Rhomboédrique	3 $\bar{3}$ 32 3m $\bar{3}m$	P3 P ₃ P ₃ R ₃ $P\bar{3} R\bar{3}$ P312 P321 P ₃ 12 P ₃ 21 P ₃ 212 P ₃ 21 R32 P3m1 P31m P3c1 P31c R3m R3c P3 ₁ m P3 ₁ c P3 ₁ m P3 ₁ c R3 ₁ m R3 ₁ c
Hexagonal	6 $\bar{6}$ 6/m 622 6mm $\bar{6}m$ 6/mmm	P6 P ₆ P ₆ P ₆ P ₆ P ₆ $P\bar{6}$ P6/m P6 ₃ /m P622 P6 ₁ 22 P6 ₂ 22 P6 ₃ 22 P6 ₄ 22 P6 ₅ 22 P6mm P6cc P6 ₃ cm P6 ₃ mc P6 ₂ m P6 ₂ c P6 ₂ m P6 ₂ c P6/mmm P6/mcc P6 ₃ /mcm P6 ₃ /mmc
Cubique	23 m $\bar{3}$ 432 $\bar{4}3m$ m $\bar{3}m$	P23 F23 I23 P ₂ 3 I ₂ 3 Pm $\bar{3}$ Pn $\bar{3}$ Fm $\bar{3}$ Fd $\bar{3}$ Im $\bar{3}$ Pa $\bar{3}$ Ia $\bar{3}$ P432 P4 ₂ 32 F432 F4 ₁ 32 I432 P4 ₃ 32 P4 ₁ 32 I4 ₁ 32 P4 ₃ m F4 ₃ m I4 ₃ m P4 ₃ n F4 ₃ c I4 ₃ d Pm $\bar{3}$ m Pn $\bar{3}$ m Pm $\bar{3}$ n Pn $\bar{3}$ m Fm $\bar{3}$ m Fm $\bar{3}$ c Fd $\bar{3}$ m Fd $\bar{3}$ c Im $\bar{3}$ m Ia $\bar{3}$ d

I.5. Corps cristallins et corps amorphes

Le terme "structure cristalline" fait référence à la disposition des atomes dans un cristal. Un cristal est un corps solide à structure réticulaire composé d'atomes (ions) répartis périodiquement dans les trois dimensions selon une succession déterminée. Le corps amorphe est caractérisé par l'absence de structure réticulaire.

Les propriétés des corps cristallin diffèrent considérablement de celles des corps amorphes. La disposition chaotique des atomes des corps amorphes leur donne une structure interne désordonnée (comme un liquide). Un corps amorphe n'a pas de forme géométrique naturelle, ils sont assimilés à des liquides figés. Les corps amorphes sont caractérisés par:

- L'absence d'une température de fusion nettement déterminée.
- L'isotropie (mêmes propriétés dans les différentes directions) surtout les propriétés physiques.

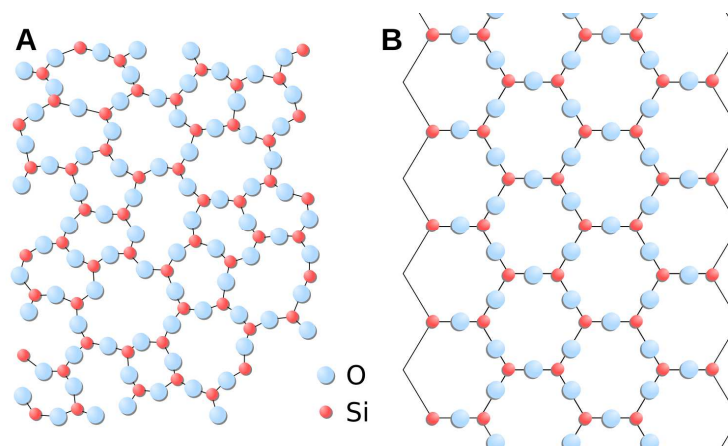


Figure I.4 : État amorphe et état cristallin

En conséquence, les courbes de refroidissement des corps amorphes et cristallins sont distinctes, car celles-ci présentent une courbe décroissante et continue.

I.6. Plans cristallins (ou plans réticulaires)

Les atomes peuvent être classés dans une multitude de familles de rangées atomiques ou de familles de plans atomiques parallèles en fonction de leur disposition périodique. Une famille donnée (de rangées ou de plans) contient tous les atomes d'un cristal parfait ; en revanche, un atome donné transporte un représentant de toutes les familles de rangées et de plans du cristal.

I.6.1. Définition et propriétés

Pour introduire cette notion cruciale des plans cristallins, il est nécessaire d'abord d'en donner une définition, puis d'en décrire les principales propriétés. Un plan cristallin (ou plan réticulaire) est défini par trois noeuds non situés sur une même rangée. Des plans parallèles au précédent peuvent être utilisés pour disposer les autres noeuds du réseau. Tous les plans parallèles sont équidistants dans une direction donnée en raison de la périodicité du réseau cristallin. Cet ensemble de plans cristallins parallèles et équidistants est appelé *une famille de plans cristallins* (ou réticulaires):

- Un plan réticulaire contient une infinité de noeuds.
- La famille de plans réticulaires considérée contient tous les noeuds du réseau.
- Il y a une infinité de manières de regrouper les noeuds d'un réseau en familles de plans réticulaires.

I.6.2. Indices caractéristiques d'une famille de plans réticulaires

Une famille de plans réticulaires (parallèles et équidistants) découpe des segments égaux sur toute droite non parallèle aux plans de la famille. Dans les trois directions [100], [010] et [001], il y a un noeud à l'origine O et un noeud à chacune des extrémités des trois vecteurs \vec{a} , \vec{b} et \vec{c} .

Des plans de la famille considérée passent donc par O ou par les extrémités des vecteurs \vec{a} , \vec{b} et \vec{c} . Cependant, le vecteur a est divisé en parties égales en h, le vecteur b est divisé en parties égales en k et le vecteur c est divisé en parties égales en l. Le premier plan de la famille, à partir du plan passant par l'origine, passe par les points P, Q et R (figure I.5) ; ils sont tels que:

$$\overrightarrow{OP} = \frac{\vec{a}}{h} \quad \overrightarrow{OQ} = \frac{\vec{b}}{k} \quad \overrightarrow{OR} = \frac{\vec{c}}{l}$$

- Sur la figure 2.3, les trois vecteurs \overrightarrow{OP} , \overrightarrow{OQ} et \overrightarrow{OR} sont orientés dans le sens positif des axes [100], [010] et [001]. Cependant, le premier plan rencontré depuis l'origine pourrait être tel que l'un ou l'autre de ces vecteurs soit orienté dans le sens (-). On rendrait alors compte de cela en introduisant un signe (-) dans l'entier h, k ou l correspondant.

- Dans le repère Ox, Oy, Oz , le plan passant par P, Q et R peut être défini par une équation de la forme $px + qy + rz = 1$. Les axes Ox, Oy, Oz portent respectivement les vecteurs de base \vec{a}, \vec{b} et \vec{c} . Ce plan coupe l'axe Ox en P ; P est tel que $y = z = 0$ et $px = 1$ soit $x = OP = 1/p$. On a de même $OQ = 1/q$ et $OR = 1/r$.

En comparant avec les expressions de OP, OQ et OR écrites plus haut, il vient: $1/p = a/h, 1/q = b/k$ et $1/r = c/l$ d'où $p = h/a, q = k/b, et r = l/c$

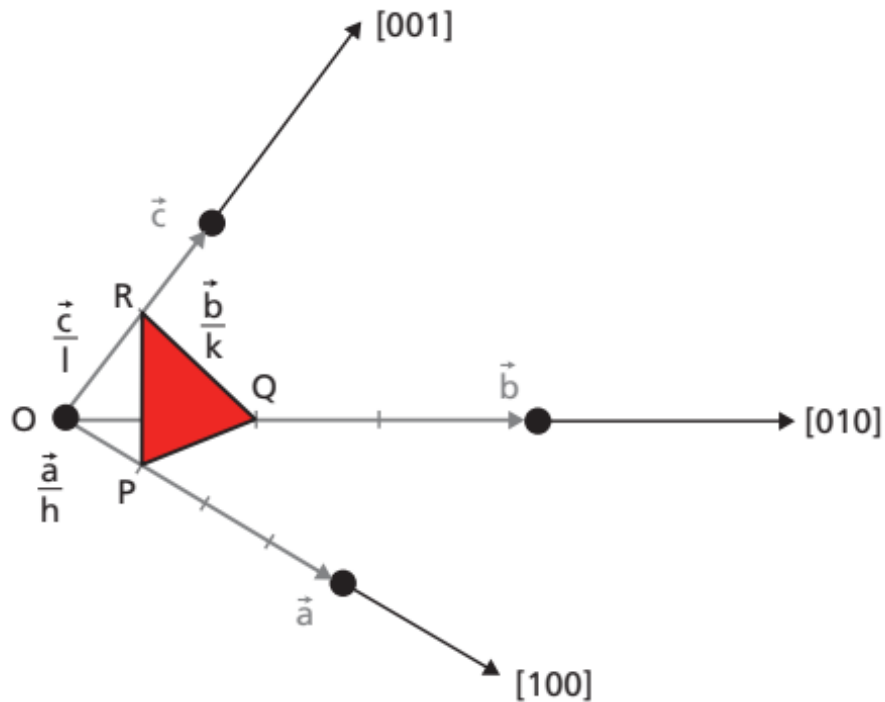


Figure I.5 : Définition des indices h, k et l de la famille de plans réticulaires (hkl)

Dans le repère Ox, Oy, Oz , l'équation du premier plan de la famille (hkl) à partir de l'origine est donc:

$$\frac{hx}{a} + \frac{ky}{b} + \frac{lz}{c} = 1$$

- Cette notation des familles de plans à l'aide des trois indices h, k et l (dits de Miller) permet généralement de répondre à tous les besoins pour les différents systèmes cristallins, y compris celui qui nécessite que les familles de plans équivalentes soient distinguées dans une opération de symétrie par des indices qui présentent des relations linéaires simples entre elles.

I.7. Densité atomique

Le nombre d'atomes par unité de surface (ou de longueur) d'un plan ou d'une rangée cristallographique est connu sous le nom de densité atomique de ce plan ou de cette rangée. Dans un cristal à atomes tous identiques, une rangée atteint la densité maximale lorsque les atomes sont jointifs, tandis qu'un plan atteint la densité maximale lorsque les atomes sont disposés dans un empilement hexagonal de triangles équilatéraux.

Une famille de plans cristallographiques doit contenir tous les atomes du cristal. Plus la distance caractéristique d_{hkl} est grande, plus la densité atomique est élevée. Le classement des plans cristallographiques par distance et densité décroissante permet de déterminer les plans les plus denses d'une structure cristalline donnée, qui y constituent des "feuillets" à grande distance et forte cohésion.

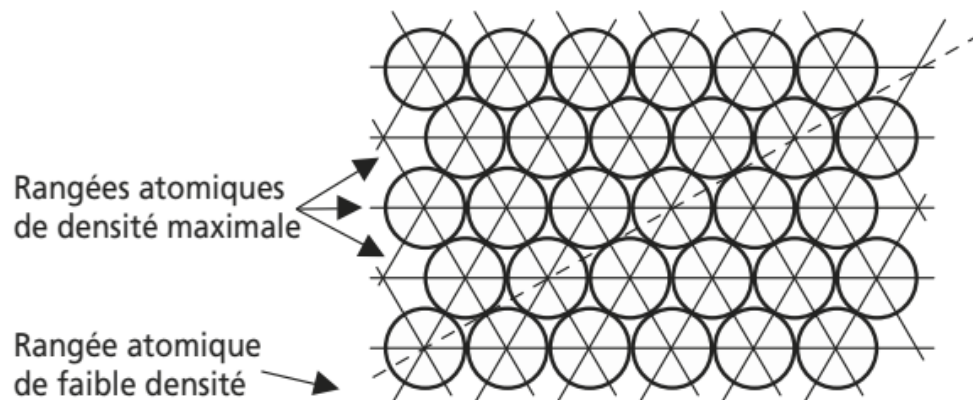


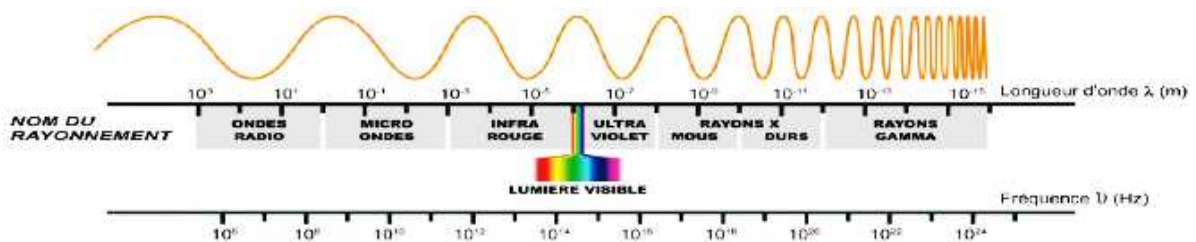
Figure I.5 : Empilement compact d'atomes identiques dans un plan cristallographique

Chapitre II : Réseau réciproque et diffraction RX

II.1. Introduction

Les rayons X, qui ont été découverts par le physicien allemand Röntgen en 1895, sont utilisés dans de nombreuses techniques d'analyse telles que la radiographie, la spectroscopie et la diffractométrie. Les longueurs d'onde de ces radiations électromagnétiques sont de l'ordre de l'Ångström ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$). Un cristal est un assemblage d'atomes, d'ions ou de molécules avec un motif répété régulièrement dans les trois dimensions. Les distances interatomiques sont de la même taille que les longueurs d'onde des rayons X, ce qui fait d'un cristal un réseau 3D capable de diffracter les rayons X.

En 1913, Sir William Henri Bragg et son père William Lawrence Bragg ont utilisé ce rayonnement pour déterminer la structure cristalline du chlorure de sodium (NaCl), ainsi que celle de plusieurs autres sels métalliques. En 1915, ils ont tous les deux reçu le prix Nobel de Physique pour leurs efforts dans l'étude de la structure cristalline à l'aide des rayons X. Les rayons X ont une longueur d'onde allant de $0,1 \text{ \AA}$ à 100 \AA . En termes d'énergie, cela représente la plage de $0,1$ à 100 keV . L'énergie (en électronvolt) d'un photon X de longueur d'onde l (en Å) vaut:



$$E = \frac{1.24}{\lambda(\mu\text{m})} \quad \text{avec : } E = h \cdot \nu = (h \cdot c) / \lambda$$

Figure II.1 : spectre des ondes électromagnétiques

II.2. La diffraction des rayons X

L'outil le plus utilisé pour analyser la structure cristalline des matériaux est la diffraction des rayons X (θ , 2θ). Elle permet d'étudier la structure cristalline des matériaux et de déterminer les différents plans de cristallisation ainsi que les différentes phases présentes dans les poudres, les matériaux massifs et les couches minces.

Un matériau cristallin est composé d'un empilement tripériodique de mailles élémentaires, répétées dans le réseau cristallin.

Le solide idéal décrit par la figure II.2 comporte des plans réticulaires notés (hkl) .

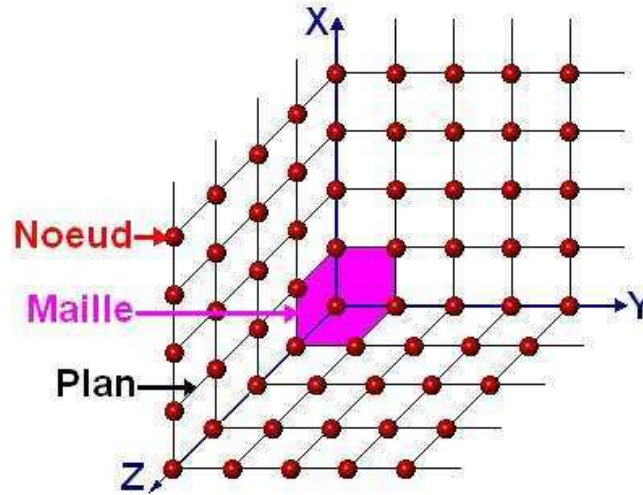


Figure II.2 : Représentation structurale d'un solide idéal.

Lorsque le matériau est irradié par des rayons X, une famille de plans (hkl) diffracte le rayonnement. L'angle θ_B situé entre le faisceau incident et la surface des plans (hkl) est défini par la loi de Bragg:

$$2d_{hkl} \cdot \sin \theta_{B(hkl)} = \lambda$$

Avec,

d_{hkl} : distance inter réticulaire ; λ : longueur d'onde du rayonnement X.

II.2.1. Analyse standard des couches minces : mesures en θ et 2θ

La configuration systématique que nous avons utilisée est du type Bragg-Brentano (θ , 2θ) classique (figure II.3). Les cristallites dont les plans (hkl) sont parallèles à la surface vérifient la loi de Bragg et la diffraction se produit dans la direction $2\theta_{B(hkl)}$ lorsque l'échantillon fait un angle $\theta_{B(hkl)}$ par rapport au faisceau incident. Le détecteur placé en 2θ permet de relever l'intensité du rayonnement diffracté par le matériau et de déterminer la position angulaire pour laquelle un plan vérifie la loi de Bragg. Le diagramme de diffraction, qui montre l'évolution de l'intensité diffractée en fonction de la position angulaire, représente le résultat.

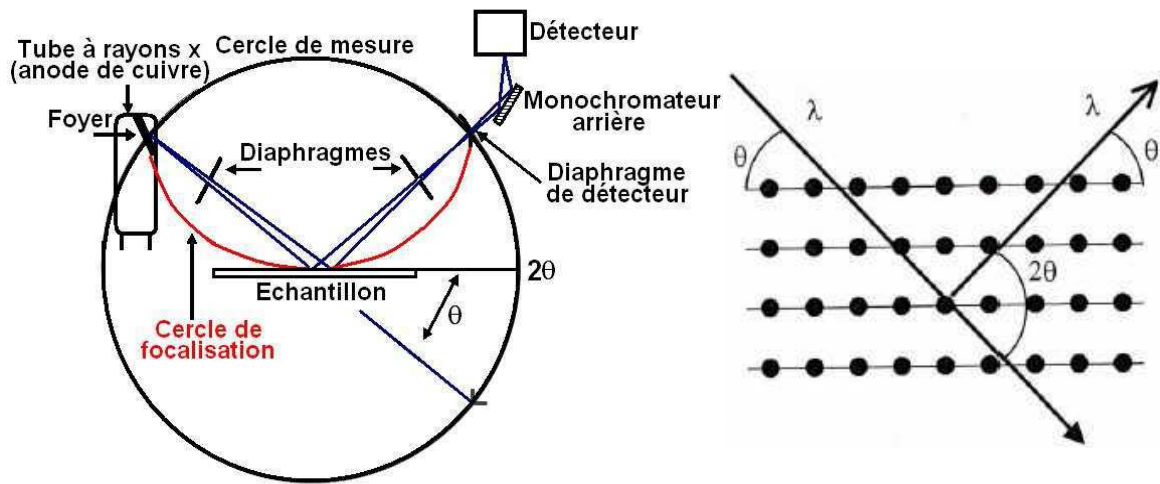


Figure II.3 : Schéma du principe du montage Bragg-Brentano.

L'acquisition et le traitement des spectres sont effectués par une unité de contrôle et de traitement des spectres. L'acquisition est effectuée à l'aide d'un logiciel basé sur les données des fiches ASTM, qui établit les distances interréticulaires d et les angles 2θ enregistrés.

L'analyse des spectres de rayons X permet d'obtenir des informations sur :

- la ou les phases cristallines (position des pics);
- la taille des cristallites et/ou le stress interne (largeur des pics à mi-hauteur);
- les défauts d'empilement (forme des pics);
- l'orientation des cristallites (absence ou présence de réflexions).

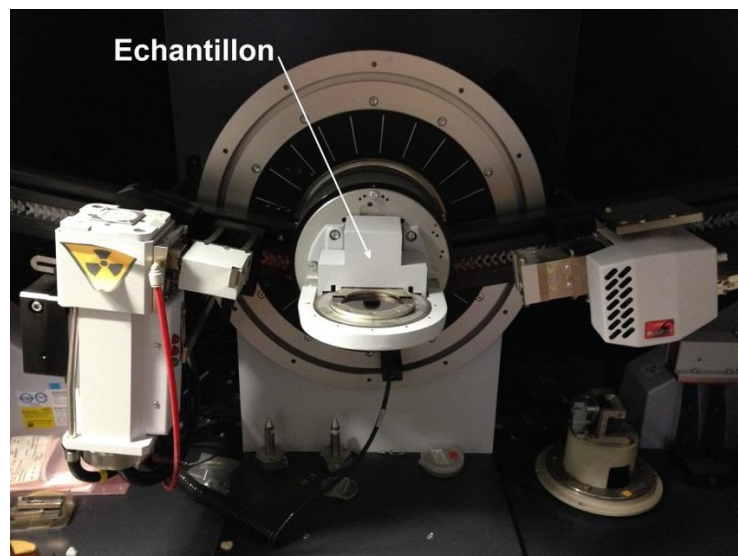


Figure II.4 : Diffractomètre des rayons-X (XRD)

La Figure II.5 présente le spectre de diffraction des rayons-X (XRD) d'une poudre de ZnO stochiométrique standard selon la table ASTM 36-1451. Nous avons utilisé ce spectre de diffraction spécifique au ZnO pour identifier les différents pics de diffraction mesurés sur nos échantillons de ZnO.

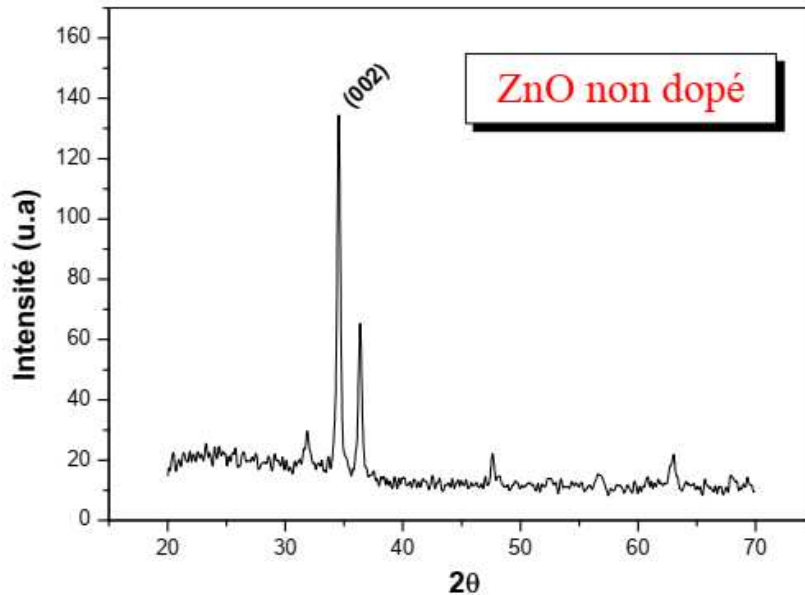


Figure II.5 : Spectre de diffraction des rayons-X (XRD) de couche mince de ZnO.

II.2.2. Détermination des contraintes et de la taille des grains

II.2.2.1. Taille des gains

La taille des gains des différents échantillons a été déterminée tout d'abord à partir des spectres des diffractions. Afin de s'assure de ces valeurs de taille de grains de nos films, nous avons utilisé la relation de Scherrer:

$$D = \frac{0.9 \lambda}{\beta \cos \theta_{hkl}}$$

Où : D est la taille des grains, λ est la longueur d'onde du faisceau de rayon X, θ est l'angle de diffraction et β est la largeur à mi-hauteur exprimée en radian (Figure.II.6).

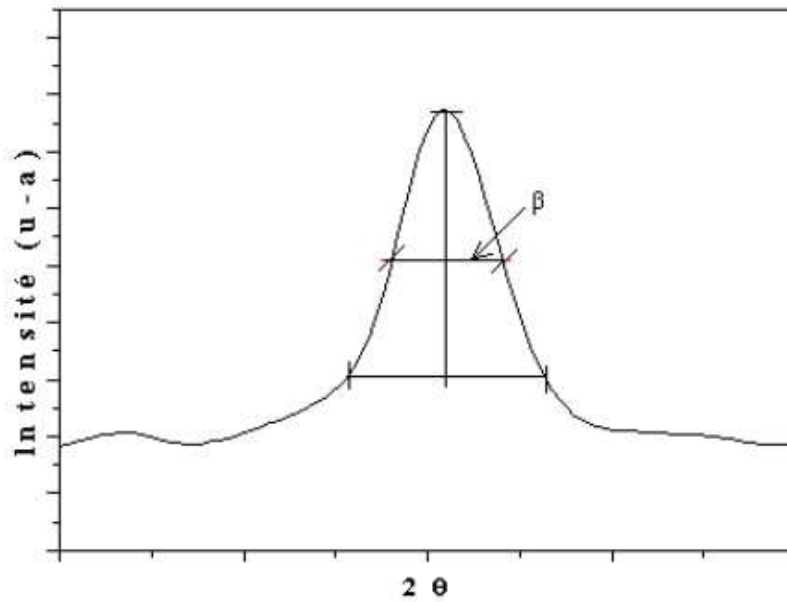


Figure II.6 : Illustration montrant la définition de β à partir de la courbe de diffraction des rayons X

II.2.2.2. Détermination des contraintes

Les diffractogrammes subissent un déplacement des pics de diffraction en raison des contraintes. Comparer les fiches de J.C.P.D.S. Nous pouvons déterminer les paramètres de mailles en enregistrant le spectre de l'échantillon. En effet, un plan réticulaire (h, k, l) et une distance d sont associés par la formule de Bragg à chaque angle de diffraction. Nous savons également qu'il existe une relation entre les plans (h, k, l) et la distance interréticulaire entre les paramètres de maille de l'échantillon pour une maille.

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2 + k^2 + hk) + l^2 \frac{a^2}{c^2}}}$$

a et c étant les paramètres de maille.

En prenant dans la mesure du possible les plans pour lesquels $h=k=0, l=2$, on peut trouver le paramètre c à partir de cette formule. Si les comparaisons aux valeurs théoriques des paramètres de maille de ZnO $c_0 = 5.205 \text{ \AA}$, la mesure des paramètres de maille donnera une indication sur l'état de contraintes des couches déposées. Les contraintes internes peuvent être calculées à partir des expressions suivantes:

$$\sigma = \left(2C_{13} - \frac{(C_{11} + C_{12}) C_{33}^{couche}}{C_{13}} \right) e_{zz}$$

$$\text{Avec } C_{33}^{couche} = \frac{0.99 C_{33}^{cristal}}{(1 - e_{zz})^4} \quad \text{et} \quad e_{zz} = \frac{c_0 - c}{c_0}$$

Où C_{ij} les constantes élastiques de ZnO données par les valeurs suivantes: $C_{11} = 209.7$ GPa, $C_{12} = 121.1$ GPa, $C_{13} = 105.1$ GPa, $C_{33} = 210.9$ GPa

II.3. Interaction des rayons X avec la matière

Lorsqu'un faisceau de rayon X et pénètre dans un milieu matériel, on constate diminution progressive de son intensité. Cette diminution du nombre de photons à l'atténuation du faisceau, due essentiellement à l'interaction des photons avec les électrons. Les phénomènes peuvent se produire:

- **L'absorption:** transformation de l'énergie absorbée en chaleur par la vibration du réseau.
- **La transmission:** fraction de rayons X qui n'interagit pas avec l'échantillon (utilisée en radiographie x que l'on utilise pour la détection de fissures).
- **La fluorescence:** émission de rayonnement X secondaire lors de l'existence du matériau le rayonnement X incident utilisé pour déterminer la composition chimique des matériaux.
- **La diffusion:** phénomène consistant en un changement de direction d'une particule ou une émission d'un photon à la suite d'une collision avec un électron d'une orbitale atomique. Cette diffusion implique ou non un changement d'énergie, s'il n'y a pas un changement d'énergie, on parle de la diffusion élastique (diffusion Rayleigh) dans le contraire on parle de la diffusion inélastique (diffusion Compton).

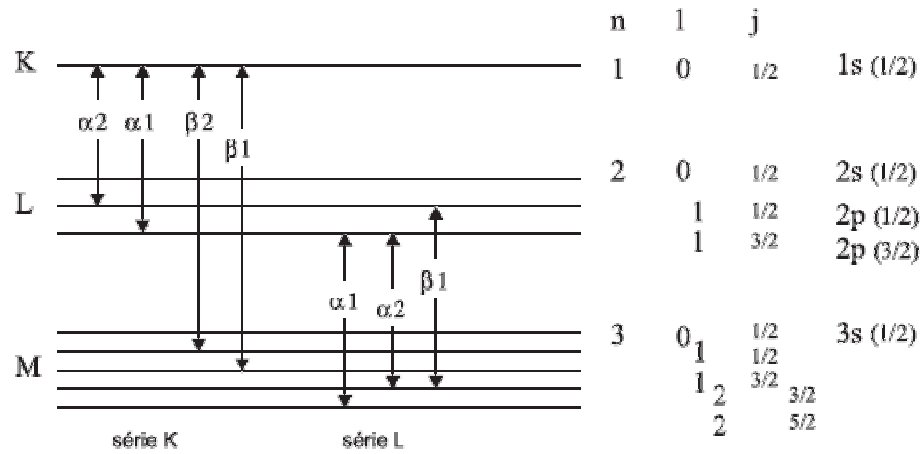


Figure II.7 : schéma des niveaux d'énergie et les nombres quantiques qui leur sont associés

II.4. Réseau réciproque

Soient $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ les vecteurs de base sur lesquels se construit le réseau d'un cristal donné. Un tel réseau est appelé réseau direct $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$. C'est l'espace réel dans lequel sont repérées les positions atomiques.

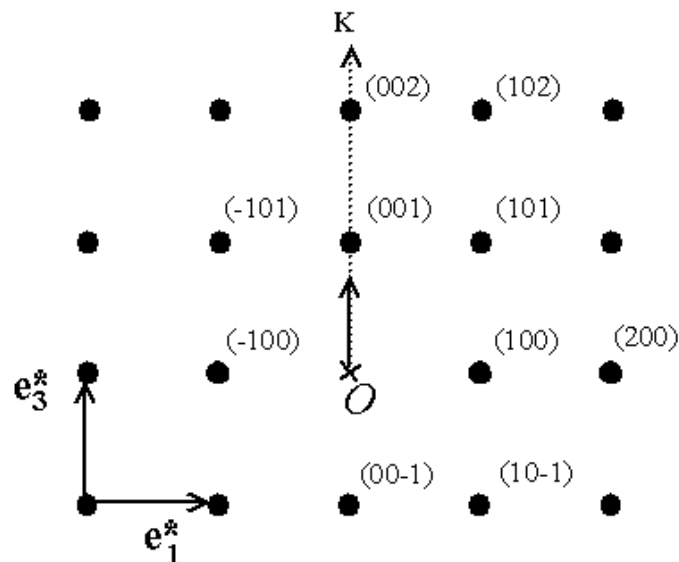


Figure II.8 : Diffraction monocristal réseau réciproque

Le réseau réciproque est un réseau purement mathématique et ce réseau est bâti sur trois vecteurs $\vec{e}_1^*, \vec{e}_2^*, \vec{e}_3^*$ et il est lié mathématiquement au réseau direct par les relations suivantes :

$(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$ et $(\vec{e}_1^*, \vec{e}_2^*, \vec{e}_3^*)$ ont même origine

Et $\vec{e}_i^* \cdot \vec{e}_i = 1, \vec{e}_j^* \cdot \vec{e}_i = 0$ si $i \neq j$

Les équations ci-dessus traduisent le fait que :

- $\vec{e}_1^* \perp \text{plan}(\vec{e}_2, \vec{e}_3)$ et comme le produit scalaire $\vec{e}_1 \wedge \vec{e}_1^*$ est positif, alors \vec{e}_1^* et \vec{e}_1 sont situés du même côté par rapport au plan (\vec{e}_2, \vec{e}_3) .
- $\vec{e}_2^* \perp \text{plan}(\vec{e}_1, \vec{e}_3)$ et comme le produit scalaire $\vec{e}_2 \wedge \vec{e}_2^*$ est positif, alors \vec{e}_2^* et \vec{e}_2 sont situés du même côté par rapport au plan (\vec{e}_1, \vec{e}_3) .
- $\vec{e}_3^* \perp \text{plan}(\vec{e}_1, \vec{e}_2)$ et comme le produit scalaire $\vec{e}_3 \wedge \vec{e}_3^*$ est positif, alors \vec{e}_3^* et \vec{e}_3 sont situés du même côté par rapport au plan (\vec{e}_1, \vec{e}_2) .

Inversement :

- $\vec{e}_1 \perp \text{plan}(\vec{e}_2^*, \vec{e}_3^*), \vec{e}_2 \perp \text{plan}(\vec{e}_1^*, \vec{e}_3^*)$ et $\vec{e}_3 \perp \text{plan}(\vec{e}_2^*, \vec{e}_1^*)$

Le réseau réciproque est généré par la maille de paramètres $\vec{e}_1^*, \vec{e}_2^*, \vec{e}_3^*, \alpha^*, \beta^*$ et γ^* avec

$\alpha^* = \text{angle}(\vec{e}_2^*, \vec{e}_3^*), \beta^* = \text{angle}(\vec{e}_1^*, \vec{e}_3^*)$ et $\gamma^* = \text{angle}(\vec{e}_2^*, \vec{e}_1^*)$.

D'un autre côté :

$$\alpha + \alpha^* = \beta + \beta^* = \gamma + \gamma^* = \pi$$

L'étude des conditions géométriques de diffraction des RX par un cristal montre qu'à chaque famille de plans (hkl) correspond une rangée réticulaire réciproque notée [hkl]*. Cette dernière est normale à la famille de plans (hkl) et permet d'expliquer la diffraction des RX par la famille (hkl) :

$$[\text{hkl}]^* \perp (\text{hkl})$$

Le paramètre (ou période) de la rangée $[hkl]^*$ ayant pour module :

$$\left| \vec{n}_{hkl}^* \right| = \left| h\vec{e}_1^* + k\vec{e}_2^* + l\vec{e}_3^* \right|$$

(\vec{n}_{hkl}^* étant le vecteur unitaire de la rangée réticulaire $[hkl]^*$) correspond à l'inverse de la distance inter-réticulaire de la famille (hkl) c'ad que :

$$d_{hkl} = 1 / \left| \vec{n}_{hkl}^* \right|$$

L'établissement des expressions de d_{hkl} est beaucoup plus simple lorsqu'on utilise le réseau réciproque:

Réseau monoclinique	$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a^2 \sin^2 \beta} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2 \sin^2 \beta} - \frac{2hl \cos \beta}{ac \sin^2 \beta}$
Réseau orthorhombique	$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$
Réseau tétragonal	$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$
Réseau trigonal	$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{(h^2 + k^2 + l^2) \sin^2 \alpha + 2(hk + kl + lh)(\cos^2 \alpha - \cos \alpha)}{a^2 (1 + 2 \cos^3 \alpha - 3 \cos^2 \alpha)}$
Réseau hexagonal	$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4}{3} \frac{(h^2 + k^2 + hk)}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$
Réseau cubique	$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$

II.5. Facteurs de structure

Considérons les atomes présents dans une seule maille cristalline. La somme des ondes diffractées par les atomes de cette maille vaut:

$$\psi_1' = A \cdot \exp[i(\omega \cdot t + k' \cdot r)] \cdot F(k)$$

$$\text{Avec } F(k) = \sum_j f_j \exp(i \cdot k \cdot r_j)$$

F est appelé «facteur de structure», car il est caractéristique de la structure cristallographique.

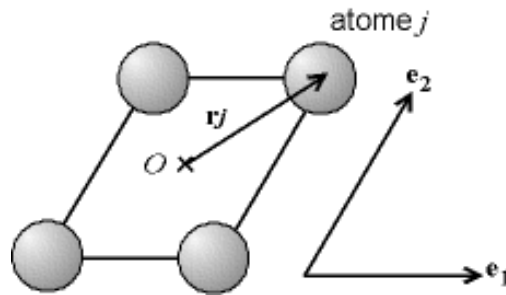


Figure II.9 : Maille cristalline et facteur de structure

II.5.1. Conditions de Laue

Dans le cas général, on détermine un rayon incident arrivant sur un nœud par son vecteur d'onde \vec{k} (de norme $1/\lambda$). Le rayon diffusé par ce nœud dans la direction d'observation (vecteur unitaire \vec{u}) a un vecteur d'onde $\vec{k}' = k\vec{u}$. Comme l'interaction entre un photon X et la particule du nœud est élastiques, les photons diffusés sont de même énergie que les photons incidents et les vecteurs d'onde \vec{k}' et \vec{k} ont la même norme. Le vecteur de diffusion est défini par: $\vec{K} = \vec{k}' - \vec{k}$.

La différence de chemin optique entre deux rayons X émergents après diffusion sur deux nœuds différents localisés en \vec{r}_1 et \vec{r}_2 est égale à $\vec{K} \cdot (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)$. En remarquant que tous les vecteurs qui ont des nœuds aux deux extrémités $\mathbf{r1}$ et $\mathbf{r2}$ constituent justement l'ensemble des vecteurs \vec{n} du réseau direct, on traduit la condition d'interférences constructives en écrivant que le produit scalaire $\vec{K} \cdot \vec{n}$ est un entier.

Autrement dit, il faut que \vec{K} soit un vecteur \vec{n}^* du réseau réciproque:

$$\vec{K} = h\vec{e}_1^* + k\vec{e}_2^* + l\vec{e}_3^*$$

C'est ce qu'expriment les conditions de diffraction de Laue :

$$\begin{aligned}\vec{K} \cdot \vec{e}_1 &= h \\ \vec{K} \cdot \vec{e}_2 &= k \\ \vec{K} \cdot \vec{e}_3 &= l\end{aligned}$$

Expérimentalement, la position des pics de diffraction observés nous permet de déterminer les vecteurs du réseau réciproque et donc de décrire la maille cristalline.

II.5.2. Conditions de diffraction

Pour que F soit maximal (c'est à dire que l'on ait un pic), il faut que les rayons diffusés soient en phase, donc que leur déphasage soit le même à 2π radians près, soit $\vec{k} \cdot \vec{r}_i = \vec{k} \cdot \vec{r}_l [2\pi]$ pour tous les atomes de la maille deux à deux. Si $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$ sont les vecteurs de base de la maille (c.-à-d. les vecteurs des arêtes non coplanaires), les positions des atomes s'écrivent

$$\vec{r}_i = x\vec{e}_1 + y\vec{e}_2 + z\vec{e}_3$$

x, y et z sont des réels positifs inférieurs à 1. De ceci, on déduit la condition de diffraction de Laue : il y a un maximum d'intensité si k est une combinaison linéaire entière des vecteurs de la base conjuguée $(\vec{e}_1^*, \vec{e}_2^*, \vec{e}_3^*)$ définie par:

$$\vec{e}_1^* = 2\pi \cdot \vec{e}_2 \wedge \vec{e}_3 / V ; \vec{e}_2^* = 2\pi \cdot \vec{e}_3 \wedge \vec{e}_1 / V ; \vec{e}_3^* = 2\pi \cdot \vec{e}_1 \wedge \vec{e}_2 / V$$

$V = \vec{e}_1 \cdot (\vec{e}_2 \wedge \vec{e}_3)$ étant le volume d'une maille élémentaire ; on a $\vec{e}_i^* \cdot \vec{e}_i = 2\pi$ et $\vec{e}_j^* \cdot \vec{e}_i = 0$ si $i \neq j$. (si l'on prend $k = 1/\lambda$, alors il n'y a pas de facteur 2π dans la définition de la base réciproque, et l'on a $\vec{e}_i^* \cdot \vec{e}_i = 1$)

On peut donc écrire $\vec{K} = h\vec{e}_1^* + k\vec{e}_2^* + l\vec{e}_3^*$, h, k et l étant des entiers. On peut ainsi indiquer les vecteurs de diffraction donnant un maximum d'intensité par ces indices et écrire \mathbf{K}_{hkl} . On a donc un pic de diffraction si le détecteur se trouve dans une direction $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{K}_{hkl}$. Le facteur de structure est alors noté F_{hkl} .

Lorsque \mathbf{K} vaut \mathbf{K}_{hkl} (pour h, k et l donnés), cela signifie que les rayons diffusés dans la direction du détecteur par tous les atomes d'un même plan cristallographique (hkl) dans le monocristal ont la même phase, on peut donc dire que le pic de diffraction est généré par ce plan (hkl) ; on retrouve ainsi la loi de Bragg.

Pour être rigoureux, il faudrait parler du «facteur de structure lorsque les rayons diffusés par les atomes des plans (hkl) dans la direction du détecteur sont en phase», mais par abus de langage, on parle du «facteur de structure du plan (hkl) ».

II.6. Facteur de forme

Nous avons ci-dessus travaillé sur les rayons diffusés par les atomes d'une même maille. Un monocristal est un empilement de ces mailles, donc pour avoir la fonction de l'onde totale diffractée par le cristal, il faut sommer les fonctions d'onde ψ_1 pour chaque maille. La maille j est décalée d'une translation $\vec{u}_j = a\vec{e}_1 + b\vec{e}_2 + c\vec{e}_3$, a , b et c étant des entiers.

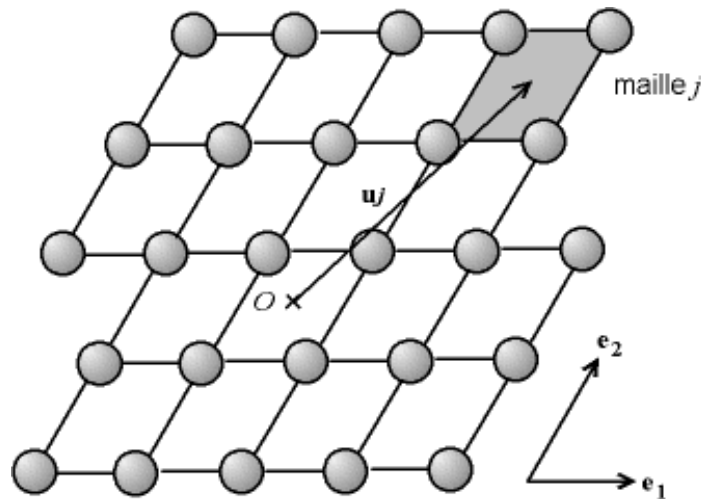


Figure II.10 : Contribution de toutes les mailles, définition du facteur de forme

Si ψ'_{10} est la fonction d'onde diffractée par la maille située à l'origine, et ψ'_{1j} celle diffractée par la maille j , alors:

$$\psi'_{1j} = \psi'_{10} \cdot \exp(i \cdot \vec{k} \cdot \vec{u}_j)$$

L'intensité diffractée totale est donc: $\psi'_2 = \sum_j \psi'_{1j}$, avec $L_{\mathbf{K}} = \sum_j \exp(i \cdot \vec{k} \cdot \vec{u}_j)$

$L_{\mathbf{K}}$ dépend de la forme du cristal et de ses dimensions, il porte donc le nom de «facteur de forme».

Lorsque le vecteur de diffraction vaut \mathbf{K}_{hkl} , on note le facteur de forme L_{hkl} ; pour être rigoureux, il faudrait parler du «facteur de forme lorsque les rayons diffusés par les atomes des plans (hkl) dans la direction du détecteur sont en phase», mais par abus de langage, on parle du «facteur de forme du plan (hkl)».

Ce facteur de forme joue sur l'élargissement des raie. Si le cristal a des dimensions infinies, alors les conditions de diffraction s'arrêtent dès que l'extrémité de \mathbf{K} a quitté le noeud du réseau réciproque. Si le cristal a des dimensions finies, on a une petite sphère autour du noeud, tant que l'extrémité de \mathbf{K} est dans cette sphère, on est en condition de diffraction.

Si l'on travaille en surface de pic du diffractogramme, on intègre ce facteur de forme et l'on trouve 1, celui-ci ne joue donc pas de rôle dans l'intensité intégrale.

En réalité, les cristallites ne présentent pas de zones de diffraction sphériques car ils sont des polyèdres, avec des joints de grain plans qui suivent les plans cristallins denses pour réduire l'énergie d'interface. Cependant, comme les faces des polyèdres ne sont pas parallèles, les zones de diffraction sphériques sont présentes dans l'ensemble lorsque tous les cristallites sont orientés de la même manière. Si les grains sont plus aplatis, c'est-à-dire en forme de galettes, les zones de diffraction seront des aiguilles dont l'axe est perpendiculaire au plan des galettes.

Chapitre III : Liaison cristalline

III.1. Introduction

La structure électronique la plus stable des atomes est souvent celle du gaz rare le plus proche dans la classification périodique. Pour obtenir cette structure électronique, les atomes peuvent soit gagner ou perdre des électrons pour former des ions, soit former des liaisons chimiques en combinant une ou plusieurs paires d'électrons, connues sous le nom de doublets de liaisons, où un tiret entre les deux atomes est utilisé pour les représenter.

Les électrons périphériques des atomes voisins sont partagés entre eux dans les liaisons chimiques, ce qui crée des orbitales moléculaires communes où se situent les électrons de liaison. Les liaisons fortes et faibles sont les quatre types de liaisons qui peuvent se former en fonction du remplissage des couches électroniques les plus externes des atomes.

III.2. Classification des éléments chimiques

Les propriétés chimiques d'un élément proviennent essentiellement de ses électrons, et en particulier de ceux de la couche externe, appelés électrons de valence; ces propriétés sont donc liées au groupe (colonne du tableau de classification périodique) auquel il appartient.

Les gaz rares, qui sont des éléments du groupe VIII, ont une couche externe complète, ce qui leur donne une stabilité chimique exceptionnelle. Les éléments du groupe I A du tableau périodique ne possèdent qu'un seul électron sur leurs couches externes ; ils ont tendance à s'en défaire pour avoir une couche extérieure saturée et produire des ions positifs ou cations. Cette tendance s'étend également à tous les métaux de la partie gauche du tableau, qui sont tous des donneurs d'électrons. Les éléments du groupe VII A possèdent sept électrons sur leurs couches externes: ils ont tendance à la compléter en captant un électron disponible dans leur voisinage pour donner des ions négatifs ou anions. Cette tendance s'étend aussi à certains éléments de la partie droite du tableau périodique, appelés non-métaux, tous accepteurs d'électrons. Certains éléments situés à la limite entre ces deux zones présentent des caractères mixtes, variables selon le champ électrique auquel ils sont soumis (ils sont semi-conducteurs).

III.3. Configuration électronique

Il faut considérer le tableau périodique des éléments et examiner le remplissage électronique en fonction du nombre atomique croissant de chaque atome. Dans chaque niveau, il y a un nombre défini d'électrons.

Exemple: Cl ($Z = 17$) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ (7 e⁻ de valence)

s, **p**, **d** et **f** correspondent aux orbitales atomiques qui, par définition, nous indiquent la région de l'espace où il est probable de trouver un électron. Ces orbitales ont un niveau d'énergie différent. Pour les remplir, il faut commencer par les niveaux les plus bas (1s, 2s) et ainsi de suite (2p, 3s,...).

$$1s^2$$

$$2s^2 2p^6$$

$$3s^2 3p^6 3d^{10}$$

$$4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14}$$

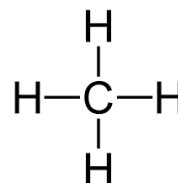
III.4. La représentation de Lewis

Le nombre de liaisons chimiques qu'un élément peut former est appelé sa valence. Les électrons de la couche externe, également appelée couche de valence ou couche périphérique, de l'élément chimique en question ont une configuration électronique directement liée à cette notion. Il est égal au nombre d'électrons célibataires.

Les propriétés chimiques d'un élément sont déterminées par l'existence dans cette couche de doublets d'électrons, d'électrons célibataires ou d'orbitales atomiques vides. C'est un système de représentation de points électroniques par paire.

- Dessiner le squelette de la molécule.

Exemple: CH₄



- Compter le nombre d'électrons de valence disponibles.

4H	$1s^2$	$= 4e^-$	
C	$1s^2 2s^2 2p^2$	$= 4e^-$	
			$8 e^-$ disponibles

- Règle de l'octet.

L'explication initiale de Lewis est que la présence de huit électrons (quatre paires) sur la couche de valence explique la stabilité particulière des gaz rares. Il applique cette notion aux molécules et exprime la règle de l'octet de la manière suivante : les atomes se rassemblent pour créer une molécule, remplir leur couche externe et adopter la configuration électronique du gaz rare le plus proche. Un octet d'électrons est présent dans la couche externe d'une configuration électronique qui est particulièrement stable chimiquement.

Dès lors, Lewis n'admet que tout arrangement moléculaire tel que chaque atome de la molécule se voit entouré de huit électrons et acquiert la configuration électronique des gaz rares, exception: l'hydrogène adopte une configuration électronique analogue à celle de l'hélium, gaz rare de la première période.

- **Exception à la règle de l'octet**

- ✓ **Octet incomplet** : Il concerne quelques éléments de la deuxième période (**B, Be, ...**) par exemple, l'atome de bore est entouré de 6 électrons.
- ✓ **Extension de l'octet** : Il concerne quelques éléments de la troisième période (**P, S, ...**). Par exemple, dans **PCl₅** l'atome de phosphore est entouré de 10 électrons.

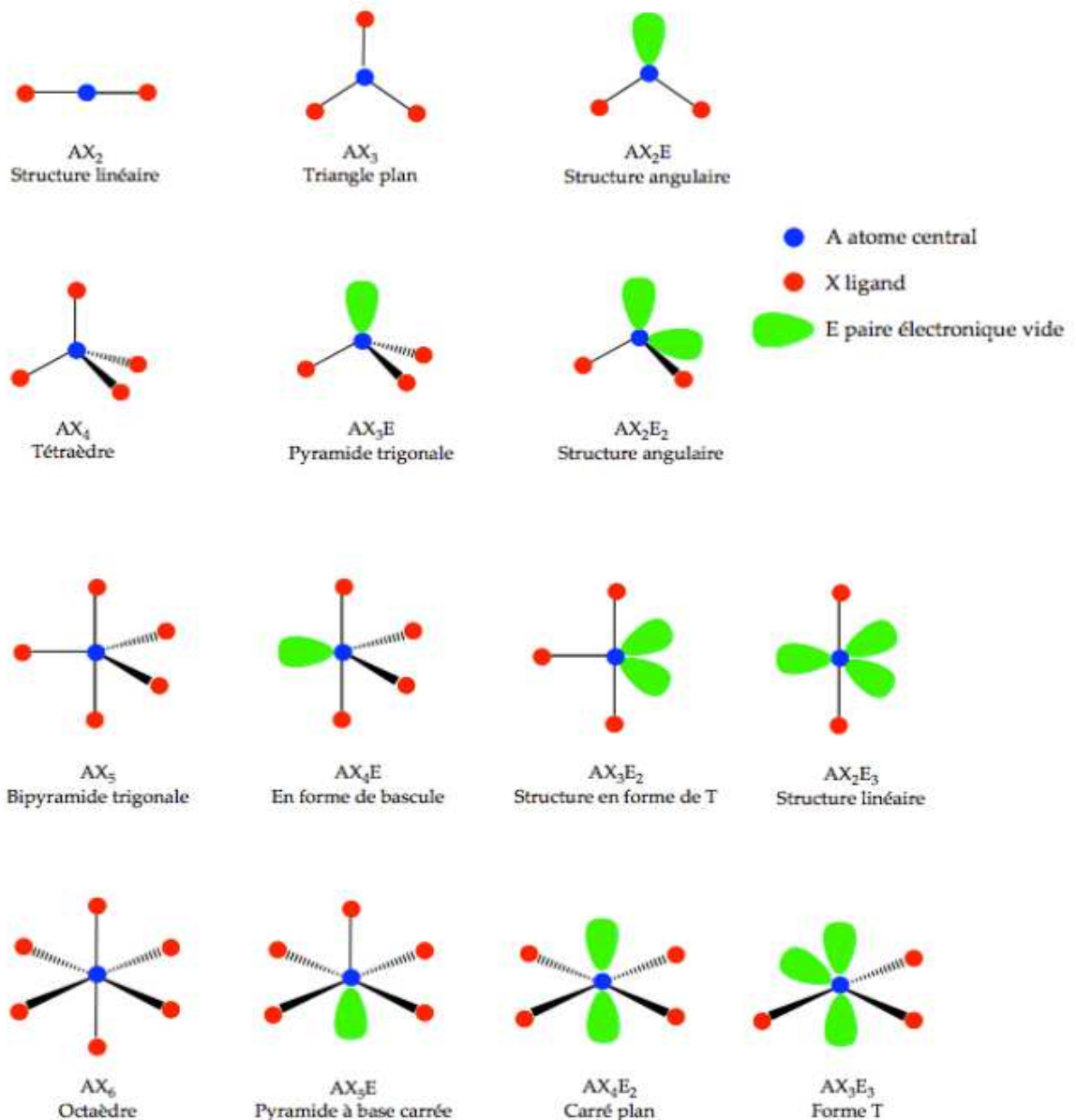
III.5. Géométrie des molécules- Théorie de Gillespie (Valence Shell Electron Pair Repulsion: VSEPR)

Comme son nom l'indique, cette théorie repose sur la répulsion des paires électroniques de valence. Selon cette théorie développée par Sidgwick, Nyholm et Gillespie, la géométrie d'une molécule peut être prédite en comptant les paires de liaison et les paires libres portées par l'atome (ou ion) central de la molécule donnée par la formule de Lewis. Les paires électroniques, qu'elles soient liantes ou non liantes, se positionnent de manière à ce que leurs répulsions l'une envers l'autre soient les plus faibles possibles.

La théorie VSEPR offre l'avantage de prévoir la géométrie des molécules de façons très simple et pratiquement générale. Elle permet, par exemple de prévoir que CO_2 est linéaire alors que NO_2 est triangulaire. Cependant, elle ne s'applique pas aux molécules dont l'atome central est un élément de transition.

Pour pouvoir prédire la géométrie d'une molécule, il faut procéder comme suit:

- ✓ Faire la représentation de Lewis de tous les atomes de la molécule en précisant l'atome central.
- ✓ On écrit la molécule sous la forme AX_nE_m tel que:
 - A : l'atome central.
 - X_n : paires liantes avec **n** le nombre. E : paires non liantes (libres) avec **m** le nombre.



III.6. Liaisons chimiques

Elles sont classées selon les électronégativités des atomes liés. La différence d'électronégativités entre les atomes de la liaison détermine sa nature. On distingue deux types de liaison chimiques:

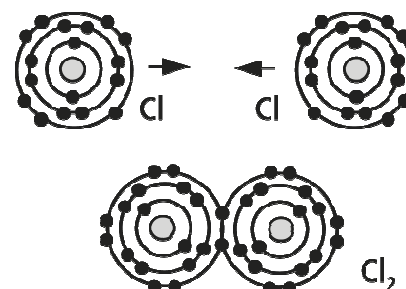
III.6.1. Liaisons fortes

III.6.1.1. Liaison covalente

Ici, la liaison est fortement directionnelle, contrairement aux solides ioniques et métalliques, et cette directionnalité impose de fortes contraintes sur les arrangements possibles entre les atomes. Il n'y a que quelques cas où les atomes d'un même élément peuvent être liés par liaison covalente pour former un solide ; ceux-ci incluent le germanium, le silicium et le carbone. Le diamant, qui est formé de carbone, est un exemple de solide à liaison covalente. Le carbone a un arrangement des électrons sur sa couche externe qui nécessite quatre électrons supplémentaires pour obtenir une configuration similaire au néon. Dans le cas du diamant, c'est acquis par partage des électrons des atomes de carbone voisins. La direction de ces liaisons est telle qu'elles sont dirigées vers les quatre coins d'un tétraèdre ayant le noyau d'un atome de carbone en son centre.

Les solides covalents constitués d'un seul élément sont très rares. Les liaisons covalentes sont plus habituellement formées entre des éléments différents où chacun prend la configuration d'un gaz rare. Lorsque ces éléments ont réagi pour former ces liaisons, la molécule créée devient hautement non réactive envers les molécules du même type, et ceci ne produit pas la base pour la formation d'un réseau tridimensionnel.

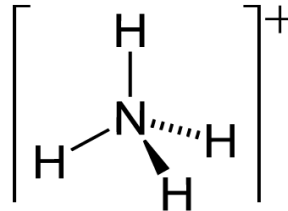
Par conséquent, les molécules stables sont des molécules liées par liaison covalente, et la majorité de ces éléments sont des gaz ou des liquides tels que l'eau, l'oxygène et l'hydrogène. Les liaisons secondaires, également appelées liaisons hydrogènes, sont nécessaires pour que l'eau solidifie à 0°C.



Exemple: La molécule de dichlore Cl_2 .

Si le doublet appartient initialement à un seul donneur, la liaison covalente est appelée **liaison dative** (ou coordination). Elle se forme entre une espèce chimique possédant une lacune électronique (ou case vide) et une espèce possédant un doublet électronique.

Exemple: NH_3^+



Liaison double ou triple, à la liaison σ viennent s'ajouter une ou deux liaisons π , plus faibles que les liaisons σ , mais encore dans la catégorie des liaisons fortes.

- ✓ Liaison covalente simple : résulte de la mise en commun entre deux atomes d'une seule paire d'électron. Chaque atome fournit un électron, elle est appelée « liaison σ ».

Exemple: H_2 $\text{H}-\text{H}$

- ✓ Liaison covalente double : résulte de la mise en commun de deux paires d'électrons entre deux atomes. Chaque atome fournit 2 électrons.

Exemple: O_2 $\langle \text{O}=\text{O} \rangle$

- ✓ Liaison covalente triple : résulte de la mise en commun entre deux atomes de trois paires d'électrons. Chaque atome fournit 3 électrons.

Exemple: N_2 $\left| \begin{array}{c} \cdot \\ \text{N} \\ \cdot \end{array} \cdot \begin{array}{c} \cdot \\ \text{N} \\ \cdot \end{array} \right| \longrightarrow \left| \text{N} \equiv \text{N} \right|$

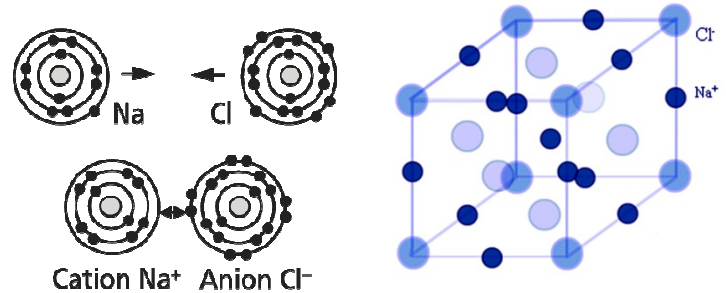
III.6.1.2. Liaison ionique

Deux facteurs relativement simples régissent la structure cristalline des solides ioniques : les champs électrostatiques non directionnels entourent les ions. (1) Formation d'un réseau tridimensionnel régulier, énergétiquement bénéfique, entre les ions chargés positivement et négativement ; (2) Les charges opposées ne peuvent pas se toucher car elles se repoussent.

Les ions chlorures, nitrures et oxydes des métaux sont les groupements de base des matériaux connus comme étant les céramiques, dans lesquels se trouvent les verres. Ces

matériaux sont très stables grâce à leurs très fortes liaisons ioniques (Ex : Chlorure de sodium).

Exemple: Le chlorure de sodium NaCl.



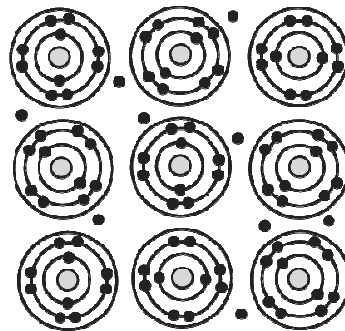
III.6.1.3. Liaison métallique

Un arrangement similaire à celui des solides ioniques est possible avec la liaison métallique. Les atomes ont de faibles électronégativités et par conséquent, les électrons sont délocalisés entre tous les atomes. Le nuage électronique forme la base des métaux.

Elle apparaît entre les éléments d'un amas d'atomes métalliques (liaison assurée par les électrons de la bande de conduction). Les électrons de la liaison métallique sont mobiles et disponibles pour assurer la circulation éventuelle d'un courant électrique.

Les trois structures les plus fréquentes dans les métaux sont les structures cubiques centrées (CC), cubiques à faces centrées (CFC) et hexagonales compactes (HC).

Exemple: Cristal de sodium Na.



Dans un corps présentant des liaisons métalliques, les électrons de valence ne sont plus localisés auprès de leurs atomes d'origine. 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 trouve son origine dans l'abaissement de l'énergie cinétique de localisation des électrons. Il s'agit d'un effet purement quantique, lié au principe d'incertitude d'Heisenberg. Du fait de la répartition homogène des électrons, la liaison métallique n'est pas directionnelle. L'arrangement structural n'est déterminé que par l'optimisation de la compacité (rapport du volume occupé par les atomes sur le volume total). La coordinence

maximale de 12 est souvent atteinte dans les métaux, qu'ils soient liquides ou solides. La liaison métallique est considérée comme une liaison forte. Cependant, elle n'est pas aussi forte que les liaisons covalente et ionique (1 eV par paire liée), du fait des forces répulsives qui s'exercent entre les électrons libres de charge $-e$. Ainsi, les métaux seront en général plus malléables que les cristaux ioniques et covalents. Notons par ailleurs que la mobilité des électrons est à l'origine des bonnes propriétés de conduction électrique et thermique dans les métaux.

III.6.2. Liaisons faibles ou liaisons secondaires

Ce sont de simples attractions électrostatiques entre charges électriques de signes opposés. Elles apparaissent entre les pôles $+$ et $-$ de molécules à répartitions de charges inhomogènes ou polarisables. Elles agissent à plus longue distance, mais avec une intensité plus faible que les liaisons fortes.

III.6.2.1. Liaison hydrogène

L'hydrogène n'a qu'un seul électron ($Z = 1$), il ne peut à priori avoir qu'une seule liaison chimique. Pourtant, il lui arrive d'être sollicité par deux atomes à la fois. Une des deux liaisons est appelée liaison hydrogène. En effet, cette liaison hydrogène intervient lorsque H est lié à un atome "petit" et à forte électroaffinité comme (F, O, N) par une liaison ion-covalente très polaire.

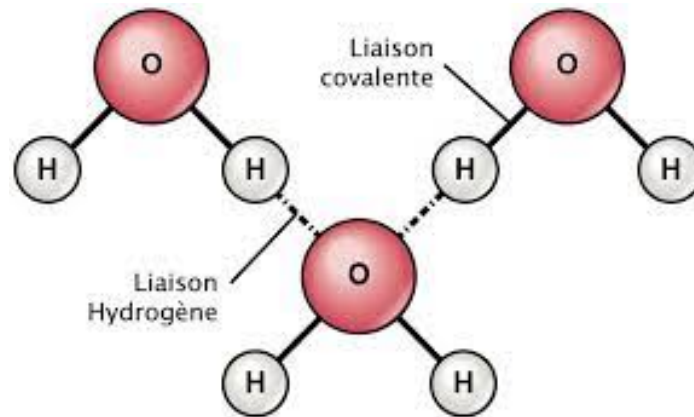
III.6.2.2. Liaison de Van Der Waals

C'est en étudiant les interactions entre les molécules neutres de gaz rares sous forte pression que Van Der Waals (1873) a compris l'existence de forces d'attraction faibles et à courte entre ces molécules. Ces forces ont été par la suite décrits en termes quantiques par London en 1930. Dans ce cours, nous allons nous limiter à une étude semi-quantitative classique en prenant le cas de deux atomes neutres d'un même gaz rare.

Liaison	Energie de liaison (eV)	Distance (nm)
Chimique	1.5	0.1 - 0.2
Hydrogène	0.1 - 0.3	0.25 – 0.30
Van Der Waals	< 0.1	0.3 – 0.4

Exemple:

- Liaisons de Van der Waals entre macromolécules dans un polymère.
- Liaisons-hydrogène entre molécules d'eau H₂O dans la glace.



La liaison Van Der Waals est susceptible d'unir faiblement des partenaires non actifs chimiquement (atomes ou molécules stables) et de former ainsi une entité dite complexe de Van Der Waals. L'énergie de liaison est < 0.1 eV et elle est même souvent inférieure à l'énergie thermique ambiante (0.03 eV).

Tableau 3.1 Principales caractéristiques des liaisons

Type de liaison	covalente	ionique	métallique	hydrogène	Van der Waals
enthalpie d'atomisation- (kJ/mol)	Si: 450 C (diamant): 717	LiF: 849 NaCl: 640 MgO: 1000 CaF₂: 1548	Na : 108 Al : 330 Fe : 414 W : 849	(sublimation à T_f) H₂O : 51 NH₃ : 35	(sublimation à T_f) Ar 7,5 O 7,52 CO₂ 25 CH₄ : 18
conductivité électrique	faible si matériaux purs, augmente si dopage	basse à basse T (électronique) élevée à haute T (ionique)	élevée		basse (isolants)
densité, compacité	faible		élevée		compacité élevée
propriété mécaniques	dureté fragilité	dureté fragilité	déformabilité plasticité	faible résistance	faible résistance, forte compressibilité
T	élevée	élevée	faible à élevée	faible	très faible

T : température ; T_f : température de fusion du matériau

III.7. Classification des matériaux et des propriétés

III.7.1. Les grandes classes de matériaux

De nombreuses propriétés physico-chimiques et propriétés d'usage des matériaux sont étroitement liées à la nature des liaisons chimiques entre les atomes qui les constituent. C'est sur cette base qu'est établie la distinction entre les principales classes de matériaux.

- **Matériaux métalliques.** Ce sont les métaux purs et leurs mélanges, ou alliages, comportant essentiellement des **liaisons métalliques**.
- **Matériaux organiques.** Ce sont les matériaux d'origine biologique, les polymères et élastomères de synthèse, comportant des liaisons covalentes et des liaisons faibles.
- **Matériaux minéraux.** Ce sont les roches, oxydes, verres minéraux, céramiques comportant des liaisons ioniques et/ou des liaisons covalentes.
- **Matériaux composites.** Ils associent de manière structurée à fine échelle des matériaux différents, appartenant éventuellement à des classes différentes parmi les trois précédentes.

III.7.2. Les propriétés d'usage

Les propriétés physico-chimiques et d'utilisation des matériaux sont nombreuses et peuvent être classées de diverses manières. Certains sont principalement influencés par la nature des atomes et des liaisons chimiques majoritairement présentes dans le matériau, telles que la masse volumique, la stabilité mécanique et thermique, la température de fusion, la souplesse ou la rigidité élastique, la fragilité ou la ductilité, la conductivité électrique et thermique, les propriétés magnétiques, etc. Certains sont sensibles aux structures des atomes telles que la rigidité plastique, la dureté, la ductilité et la ténacité.

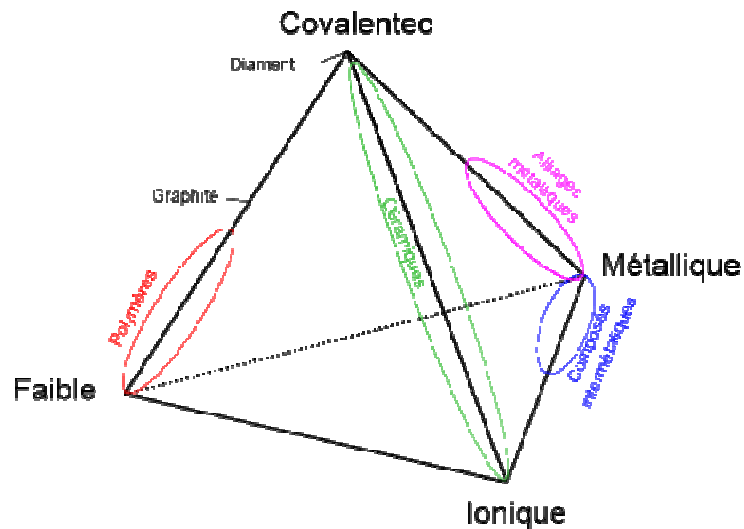
Tableau 3.2 Classification non exhaustive des propriétés d'usage des matériaux: outre leur caractère objectif ou attribué, ces propriétés peuvent être de Volume (V) ou de Surface (S), Propres au matériau seul (P) ou Interactives (I) entre le matériau et son environnement.

Propriétés objectives (intrinsèques au matériau)		Propriétés attribuées (dépendant du contexte)	
V, P	Mécaniques statiques: - constantes d'élasticité, dureté, contraintes limites...	V, P	Disponibilité: - ressources, réserves, fournisseurs, niveaux de qualité...
V, P ou I	Mécaniques dynamiques: - viscosité, fluage, fatigue, ténacité, amortissement...	V, P ou I	Coût: - matière première, élaboration, mise en œuvre...
V, P	Structurales: - structure amorphe ou cristalline, variétés allotropiques, - températures de changement d'état, - homogénéité...	S et V, P ou I	Degré de familiarité: - connaissance du matériau, expérience à court et long terme, - savoir-faire acquis sur le matériau...
V, P	Physiques: - masse volumique, propriétés électriques, ther-miques, magnétiques, optiques, radioactives...	V, P	Aptitudes à la mise en œuvre: - ductilité, coulabilité, usinabilité...
S, I	Chimiques: - réactivité, toxicité, tenue à la corrosion...	S, I	Aptitudes à l'assemblage: - soudabilité, collabilité...
S, I	Tribologiques: - friction, usure...	S et V, P ou I	Impact environnemental: - contenu en énergie, dégradable, recyclable

III.8. Le caractère mixte des liaisons

Ces définitions doivent être considérées comme assez théoriques, car dans de nombreux cas, la cohésion d'un solide ne repose pas entièrement sur un type de liaison spécifique. Cela explique pourquoi certaines propriétés semblent parfois être en désaccord avec le type de liaison en question. Par exemple, les solides constitués de liaisons métalliques ont une température de fusion moyenne inférieure à 1000°C . Cependant, en raison du caractère partiellement covalent de la liaison, certains métaux fondent à des températures beaucoup plus élevées. Le Tungstène (W pour Wolfram en allemand) est l'exemple le plus extrême, avec une température de fusion remarquable de 3200°C , qui le place en deuxième position après le carbone à 3500°C (liaisons strictement covalentes).

La figure suivante illustre le cas de quelques solides liés par des liaisons diverses.



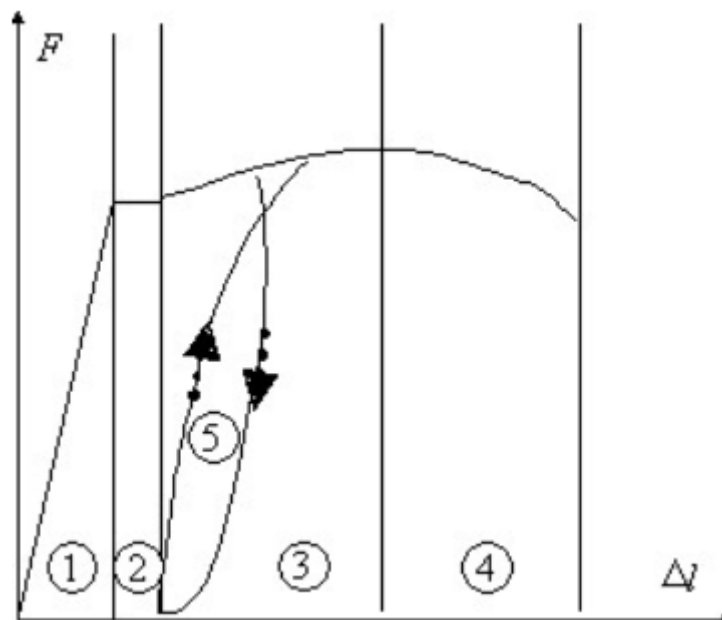
Chapitre IV : Propriétés élastiques

IV.1. Introduction

L'expérience montre que si la déformation du matériau est suffisamment faible, il reprend son état initial non déformé lors de la suppression des efforts extérieurs qui l'ont déformé. Une réversibilité mécanique idéale correspond à un comportement élastique idéal. Le tenseur des déformations est alors une variable d'état et sa donnée est utilisée pour déterminer le tenseur des contraintes, de manière biunivoque. Le travail de déformation qui se produit entre deux états d'équilibre ne dépend alors pas du chemin suivi entre ces deux états.

IV.2. L'essai de traction simple

L'essai de traction met habituellement en évidence trois stades principaux dans l'évolution du comportement du matériau.



- **Un comportement élastique** linéaire ou non (domaine 1) pour lequel aucune déformation résiduelle ne se maintient après décharge.
- **Un stade de déformation plastique** parfait (domaine 2) et avec écrouissage (domaine 3) caractérisé par une déformation résiduelle irréversible après décharge, l'ensemble du comportement étant complètement indépendant du temps, notamment de la vitesse de chargement.
- **Une étape d'endommagement** (domaine 4) conduisant à la rupture. L'endommagement se manifeste par l'altération progressive des propriétés mécaniques qui accompagne, habituellement pour d'assez grandes déformations ou

sous sollicitations cycliques, la formation et la croissance de microfissures et microcavités, altération pouvant aller jusqu'à la rupture. Naturellement liées à la déformation elle-même les lois d'endommagement doivent être couplées aux lois de comportement et l'ensemble détermine le comportement réel du matériau. Selon les matériaux, la rupture peut se produire plus ou moins tôt, notamment en stade élastique ou plastique avant endommagement. Cependant, dans bien des cas le temps intervient et la courbe d'essai obtenue est une fonction de la vitesse de sollicitation (domaine 5). Ainsi un arrêt à contrainte constante s'accompagne d'une déformation de fluage, un arrêt à déformation constante s'accompagne d'une relaxation de la contrainte, une sollicitation cyclique d'hystérésis. C'est la manifestation de la viscosité du matériau visco-élasticité ou visco-élasto-plasticité.

IV.3. Caractéristiques du milieu

Les ondes sismiques interagissent avec leur environnement. Effectivement, l'onde exerce une influence sur l'environnement et le comprime. En mécanique des roches, l'objectif est de déterminer la façon dont les corps réagissent ou réagissent à des contraintes. Ainsi, cela dépend de la pression et des caractéristiques mécaniques du corps. Les types de milieux ont des caractéristiques physiques distinctes.

✓ **Milieu homogène**

Un matériau homogène a les mêmes propriétés physiques en chacun de ces points.

✓ **Milieu élastique**

Un matériau est dit élastique lorsqu'il reprend sa forme initiale après le passage de l'onde. Si, au contraire, il garde en mémoire le passage de l'onde il est défini comme étant plastique et ne reprend pas sa forme initiale.

✓ **Milieu isotrope et anisotrope**

Un matériau est dit isotrope si ses propriétés mécaniques sont identiques dans toutes les directions. La déformation sera homogène dans n'importe quelle direction donnée. La propagation de la force n'a pas une direction spécifique. A l'inverse, un matériau est dit anisotrope si ses propriétés mécaniques ne sont pas les mêmes dans toutes les directions. Selon la direction d'application des contraintes le matériau ne réagira de manière différente, en fonction de ces propriétés physiques. Autres paramètres caractérisant les milieux:

- **La viscosité**

La valeur de la déformation dépend de la durée d'application de la contrainte. Pour une contrainte donnée non nulle, la déformation se fait à vitesse constante. Après suppression de la contrainte, le système conserve son état final.

- **Ductilité**

La ductilité désigne un matériau capable de se déformer plastiquement sans se rompre. Un matériau est ductile si : Son allongement et sa striction à la rupture sont importants, l'énergie dépensée pour le casser est importante. Inversement un matériau est fragile si : Son allongement et sa striction à la rupture sont faibles, l'énergie dépensée pour le casser est faible.

- **La porosité**

La porosité est la propriété d'un milieu, d'un sol ou d'une roche de contenir des pores, c'est-à-dire des vides interstitiels interconnectés ou non. Le rapport du volume de ces vides au volume total du milieu donne sa quantité.

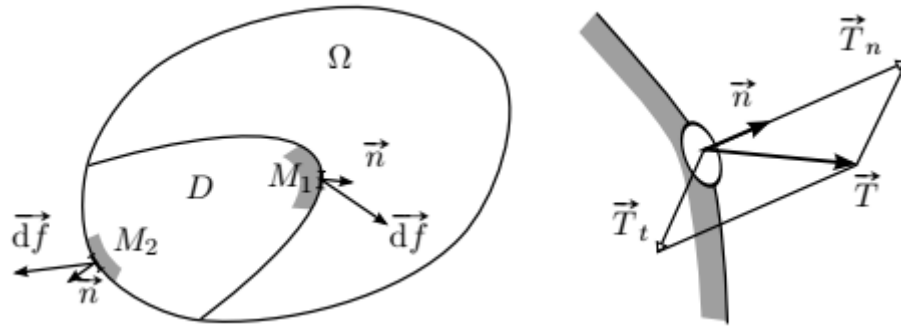
IV.4. Tenseur des contraintes

IV.4.1. Vecteur contrainte et tenseur des contraintes

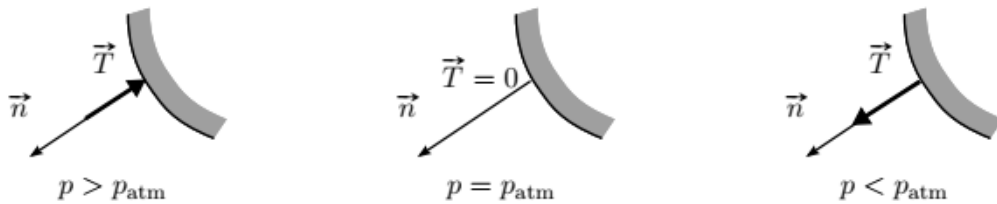
Le vecteur contrainte caractérise les efforts de contact exercés à travers un élément de surface dS de normale \vec{n} sur une partie D du milieu continu : le vecteur contrainte est défini par:

$$\vec{T}(\vec{n}) = \lim_{dS \rightarrow D} \frac{d\vec{f}}{dS} \quad / \quad d\vec{f} = \vec{T}(\vec{n}) dD$$

Suivant le cas, il s'agit des efforts exercés sur D par le reste du milieu continu (point M_1 – effort intérieur pour le solide Ω) ou bien par l'extérieur (point M_2 – effort extérieur pour Ω).



Par convention, on choisit pour \vec{n} la normale extérieure au domaine D sur lequel s'applique \vec{T} . Cette convention est à peu près universelle en MMC, à une exception près, la Mécanique des Sols, où l'on utilise la convention contraire. En mécanique des solides, il est conventionnel de considérer que les contraintes de pression atmosphérique sont zéros. Par conséquent, les contraintes sont mesurées en utilisant cette pression atmosphérique. Ainsi, si le solide est en contact avec un fluide à la pression p :



$$\vec{T} = -(p - p_{atm}) \vec{n}$$

La pression atmosphérique est d'ailleurs en général négligeable par rapport aux contraintes que l'on rencontre. On projette le vecteur contrainte sur la normale et sur le plan perpendiculaire.

$$\vec{T} = T_n \vec{n} + \vec{T}_t$$

où T_n est alors la contrainte normale (algébrique) et \vec{T}_t , la contrainte tangentielle ou de cisaillement.

Le vecteur contrainte est associé à un élément de surface de normale extérieure \vec{n} – on parle en général d'une *facette*. Pour connaître l'état de contrainte en un point donné, il faut connaître les vecteurs contraintes associés à toutes les facettes, c'est-à-dire à tout

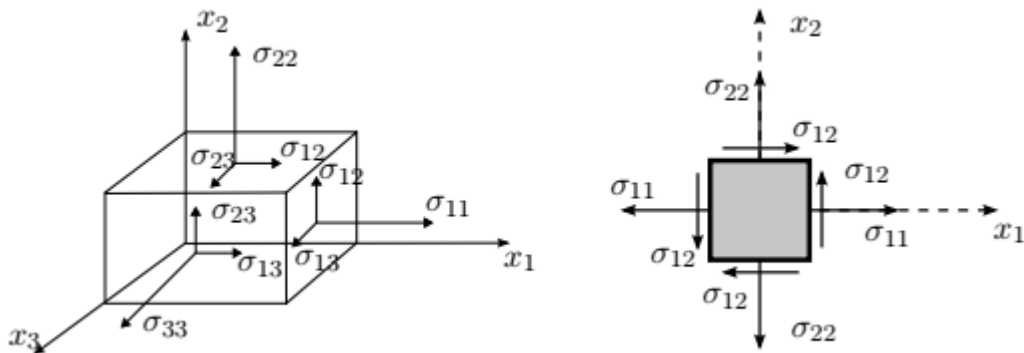
vecteur unitaire \vec{n} . Il existe donc une application linéaire, le *tenseur des contraintes*, faisant passer de \vec{n} à \vec{T} :

$$\vec{T} = \sigma \vec{n}$$

Le tenseur des contraintes est donc une application linéaire de l'espace vectoriel à trois dimensions E_3 dans lui-même. Si l'on choisit une base orthonormée \vec{e}_i , cette application linéaire est représentée par une matrice d'éléments σ_{ij} ($i, j = 1, 2, 3$) et la relation $\vec{T} = \sigma \vec{n}$ donne la relation matricielle

$$\begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{bmatrix}$$

Les composantes $\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \dots$ sont les composantes des vecteurs contraintes associés aux facettes normales à $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$.



Les composantes diagonales $\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}$, sont donc des contraintes normales, tandis que les composantes non diagonales $\sigma_{12}, \sigma_{13}, \dots$ sont des contraintes de cisaillement. La symétrie du tenseur des contraintes $\sigma_{12} = \sigma_{21}$ exprime l'égalité de la contrainte de cisaillement associée à deux facettes perpendiculaires. Pour cette raison, cette symétrie est souvent appelée *principe de réciprocité des cisaillements*.

Dimensionnellement, une *contrainte* 1 est homogène à une force par unité de surface, donc à une pression. L'unité SI, le Pascal ($1 \text{ Pa} = 1 \text{ N/m}^2$) étant très petite par rapport aux contraintes habituellement rencontrées, on utilise traditionnellement l'hectobar, le

méga pascal et le daN/mm (et chez les anglo-saxons, le p.s.i. *pound per square inch*) avec l'équivalence $1 \text{ daN/mm}^2 = 1 \text{ hectobar} = 10 \text{ MPa} = 10^7 \text{ Pa}$.

IV.4.2. Contraintes principales et invariants

Le tenseur des contraintes est symétrique ; on peut donc le diagonaliser. Il existe trois directions principales orthogonales associées à trois valeurs propres $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$, appelées *contraintes principales*.

$$\sigma_{ij} e_j^{(1)} = \sigma_1 e_i^{(1)}, \quad \text{etc.}$$

À partir de ($\vec{T} = T_n \vec{n} + \vec{T}_t$), on voit qu'une condition nécessaire et suffisante pour qu'une direction soit principale pour σ est que la contrainte exercée sur la facette correspondante soit purement normale (pas de contrainte de cisaillement). Dans le repère principal, la matrice représentative du tenseur des contraintes est diagonale. Par abus de langage, on dit que le tenseur des contraintes est diagonal, et on écrit

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{bmatrix}$$

Les contraintes principales s'obtiennent par résolution de l'équation caractéristique

$$P_\sigma = \det \begin{bmatrix} \sigma_{11} - \lambda & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} - \lambda & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} - \lambda \end{bmatrix} = -\lambda^3 + I_1 \lambda^2 - I_2 \lambda + I_3$$

où I_1, I_2, I_3 sont les invariants de σ

$$\begin{cases} I_1 = I_1 = \sigma_{ij} = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 \\ I_2 = \frac{1}{2}(\sigma_{ii} \sigma_{jj} - \sigma_{ij} \sigma_{ij}) = \sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_1 \\ I_3 = \det(\sigma_{ij}) = \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \end{cases}$$

On décompose habituellement le tenseur des contraintes en déviateur et partie sphérique.

$\sigma_{ij} = \sigma \delta_{ij} + s_{ij}$ où σ est la partie sphérique

$$\sigma = \frac{1}{3} I_1 = \frac{\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}}{3}$$

et où s_{ij} est le déviateur

$$\begin{cases} s_{ii} = 0 & s_{ij} = \sigma_{ij} + \frac{1}{3} \sigma_{kk} \delta_{ij} \\ s_{12} = \sigma_{12} & s_{11} = \frac{2\sigma_{11} - \sigma_{22} - \sigma_{33}}{3} \end{cases}$$

Il est clair que le tenseur des contraintes et son déviateur ont mêmes directions principales, les contraintes principales s_1, s_2, s_3 sont données par:

$$s_1 = \frac{2\sigma_1 - \sigma_2 - \sigma_3}{3}$$

et les invariants J_2, J_3 (puisque $J_1 = 0$) du déviateur s_{ij} sont donnés par:

$$\begin{cases} J_2 = -\frac{1}{2} s_{ii} s_{ij} = s_1 s_2 + s_3 s_2 + s_1 s_3 = -\frac{1}{2} (s_1^2 + s_2^2 + s_3^2) \\ \quad = -\frac{1}{6} [(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2] \\ J_3 = \text{del} (s_{ij}) = s_1 s_2 s_3 \end{cases}$$

IV.5. Le tenseur des déformations

Dans le cadre de la théorie des petites déformations, l'état de déformation en un point M est donc caractérisé par le tenseur *symétrique* $\bar{\varepsilon}(M)$ et la relation donnant le déplacement d'extrémité $\vec{u}(M, \vec{l})$ d'un segment unitaire d'origine M et de direction \vec{l} est donnée par:

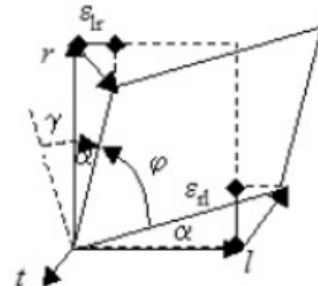
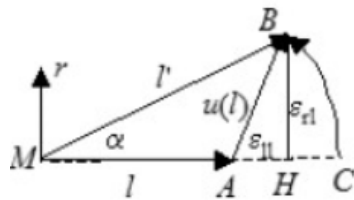
$$\vec{u}(M, \vec{l}) = \bar{\varepsilon}(M) \vec{l}$$

$\bar{\varepsilon}(M)$ caractérise au point M la relation entre les vecteurs déplacements \vec{u} de segments unitaires de différentes orientations \vec{l} .

Comme dans le cas du tenseur des contraintes, la connaissance des vecteurs déplacements d'extrémité u_1 , u_2 et u_3 de trois segments orthogonaux de longueur unitaire d'origine M respectivement orientés selon les axes M_{x_1} , M_{x_2} et M_{x_3} suffit à déterminer en ce point M l'état de déformation. La relation entre $\vec{u}(M, \vec{l})$ et \vec{l} s'écrit de manière générale à l'aide du tenseur $\overset{=}{\mathcal{E}}(M)$ dont les composantes dans le repère $M; x_1; x_2; x_3$ sont:

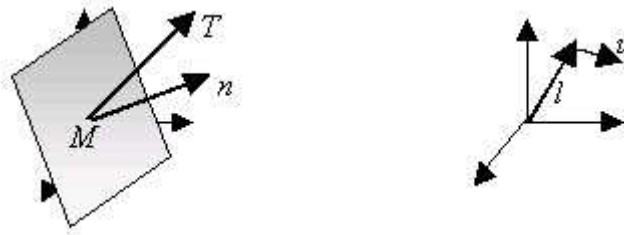
$$\overset{=}{\mathcal{E}}(M) = \begin{bmatrix} \mathcal{E}_{11} & \mathcal{E}_{12} & \mathcal{E}_{13} \\ \mathcal{E}_{21} & \mathcal{E}_{22} & \mathcal{E}_{23} \\ \mathcal{E}_{31} & \mathcal{E}_{32} & \mathcal{E}_{33} \end{bmatrix}$$

- ✓ **déformation normale** \mathcal{E}_{ll} C'est la composante de \vec{u} qui étire lorsqu'elle est parallèle à \vec{l} ou qui contracte si elle est antiparallèle à \vec{l} . Le signe de \vec{l} est donc intrinsèque : $\mathcal{E}_{ll} > 0$ pour l'extension et $\mathcal{E}_{ll} < 0$ pour la contraction.



- ✓ **déformation de distorsion** \mathcal{E}_{rl} C'est la composante de \vec{u} qui change l'orientation de l en la faisant tourner dans le plan de glissement \vec{l}, \vec{r}

IV.6. Résumé Contraintes – Déformations



Description de l'Etat Mécanique Local

<p>Contrainte</p> $\vec{T}(M, \vec{n}) = \overset{\equiv}{\sigma}(M) \vec{n}$ $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$	<p>Définition</p> $\vec{u}(M, \vec{l}) = \overset{\equiv}{\varepsilon}(M) \vec{l}$
<p>Symétrie</p> $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$	<p>Relation Déformation - Déplacement</p> $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$

Principe Fondamental de la Dynamique

$$\text{Div } \overset{\equiv}{\sigma} + \rho \vec{X} = \rho \vec{\gamma}$$

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + \rho X_i = \rho \gamma_i$$

Relation Déformation - Déplacement

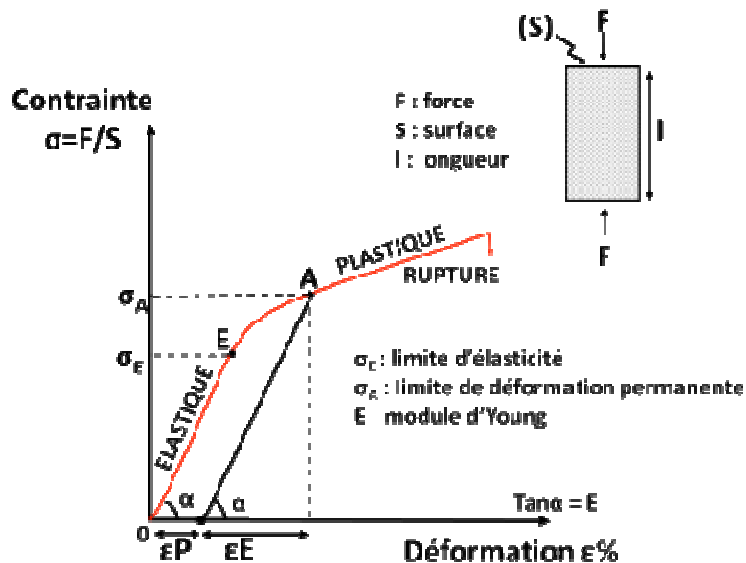
$$2 \overset{\equiv}{\varepsilon} = \text{Grad } \vec{u} + {}^t \text{Grad } \vec{u}$$

$$\frac{dV}{V} = \text{Tr } \overset{\equiv}{\varepsilon} = \text{Div } \vec{u}$$

Equation d'Etat du Matériau

$$F \left\{ \overset{\equiv}{\sigma}, \frac{d \overset{\equiv}{\sigma}}{dt}, \dots, \overset{\equiv}{\varepsilon}, \frac{d \overset{\equiv}{\varepsilon}}{dt}, \dots \right\} = 0$$

Si on applique une sollicitation mécanique (par exemple une sollicitation de traction simple) à un matériau isotope et homogène, il est possible d'observer deux étapes de comportement; élastique et plastique.



IV.7. Loi de Hooke

Comme annoncé dans l'introduction de ce cours, il s'agit ici d'étudier le comportement d'un solide dans le domaine élastique des déformations (réversibilité et linéarité). Dans ces conditions, il existe une relation linéaire entre contraintes et déformations pures. Il s'agit de la loi de *Hooke*:

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l} \lambda_{ijkl} \varepsilon_{kl}$$

où σ_{ij} sont les éléments du tenseur des contraintes \bar{T} , ε_{kl} les éléments du tenseur des déformations pures \bar{E} et λ_{ijkl} les éléments du tenseur de rigidité \bar{L} . Compte tenu du fait que \bar{T} et \bar{E} sont des tenseurs de rang 2, \bar{L} est nécessairement un tenseur de rang 4 comportant $3^4=81$ éléments. Notons qu'une relation inverse peut s'établir de manière équivalente en exprimant les déformations en fonction des contraintes à l'aide d'un tenseur de rang 4 appelé tenseur d'élasticité.

\bar{T} et \bar{E} étant symétriques, le tenseur de rigidité (ou celui d'élasticité) est nécessairement symétrique en i et j , ainsi qu'en k et l . Le nombre d'éléments indépendants composant \bar{L} est donc ramené de 81 à 36. Ce nombre d'éléments reste élevé mais peut encore être restreint en considérant la symétrie du matériau étudié : une ultime simplification consiste à considérer un matériau isotrope. Dans ce cas, le nombre d'éléments indépendants constituant \bar{L} est ramené de 36 à 2, se limitant donc aux coefficients élastiques de Lamé (λ) et (μ). Cela signifie que le comportement élastique d'un matériau isotrope est complètement défini à partir de la connaissance de ces deux seuls paramètres. Ainsi, chacun des éléments λ_{ijkl} de \bar{L} peut se formuler en fonction des coefficients élastiques de Lamé:

$$\lambda_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk})$$

où

$$\delta_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & si & i = j \\ 0 & si & i \neq j \end{pmatrix} \text{ est le symbole de Krönecker.}$$

Il en résulte que la loi de *Hooke* se réécrit:

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l} [\lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk})] \varepsilon_{kl}$$

Cette nouvelle formulation peut se simplifier en remarquant notamment que le symbole de *Kronecker* force l'égalité des indices dans une sommation: $\sum_j \delta_{ij} \delta_{jk} = \delta_{ik}$.

On obtient ainsi:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= \sum_{k,l} \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} \varepsilon_{kl} + \sum_{k,l} \mu \delta_{ik} \delta_{jl} \varepsilon_{kl} + \sum_{k,l} \mu \delta_{il} \delta_{jk} \varepsilon_{kl} \\ \sigma_{ij} &= \lambda \theta \delta_{ij} + \mu \sum_k \delta_{ik} \varepsilon_{kj} + \mu \sum_k \delta_{jk} \varepsilon_{ki} \end{aligned}$$

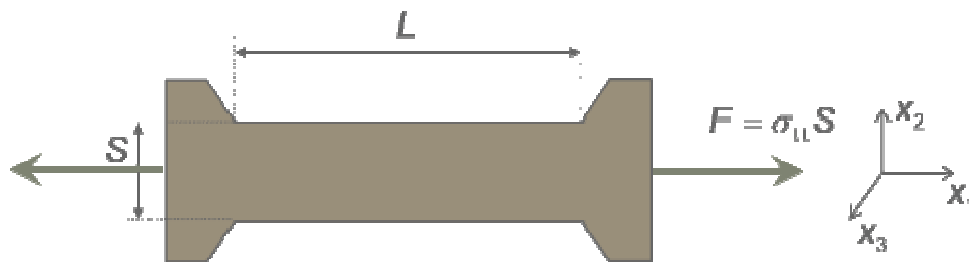
Et finalement: $\sigma_{ij} = \lambda \theta \delta_{ij} + 2 \mu \varepsilon_{ij}$, ou de façon

équivalente $\bar{T} = \lambda \theta \bar{I} + 2 \mu \bar{E}$. Cette dernière formulation correspond donc à la *loi de Hooke appliquée au cas d'un matériau élastique isotrope*.

IV.8. Module d'Young et coefficient de Poisson

Les deux coefficients de Lamé, λ et μ , caractérisent les propriétés élastiques du matériau, mais ne peuvent pas être directement déterminés à l'aide d'une mesure expérimentale. Cependant, il y a deux autres paramètres qui définissent également les propriétés élastiques du matériau, qui peuvent être mesurés expérimentalement : le module d'Young (E) et le coefficient de Poisson (ν). Ainsi, cette section vise à présenter la mesure de ces deux paramètres et à établir leur relation avec les deux coefficients de Lamé.

Comme le montre la figure, l'expérience consiste à soumettre une éprouvette de longueur L et de section S à une traction longitudinale.



Cette traction résulte d'une force exercée par unité de surface $\sigma_{11} = \frac{F}{S}$ et est proportionnelle à l'allongement relatif mesurable dans la direction longitudinale repérée par \vec{e}_1 . Le coefficient de proportionnalité correspond au module d'*Young* et se formule donc :

$$E = \frac{F / S}{\Delta L / L} = \frac{\sigma_{11}}{\varepsilon_{11}}$$

Cette traction engendre naturellement d'autres déformations qu'il convient d'expliciter en appliquant la loi de *Hooke* :

$$\vec{T} = \lambda \theta \vec{I} + 2\mu \vec{E} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \lambda \theta \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + 2\mu \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix}$$

ce qui conduit, par identification, aux relations suivantes:

- (i) $\varepsilon_{12} = \varepsilon_{13} = \varepsilon_{23} = 0$
- (ii) $(\lambda + 2\mu) \varepsilon_{11} + \lambda \varepsilon_{22} + \lambda \varepsilon_{33} = \sigma_{11} = E \varepsilon_{11}$
- (iii) $\lambda \varepsilon_{11} + (\lambda + 2\mu) \varepsilon_{22} + \lambda \varepsilon_{33} = \lambda \varepsilon_{11} + \lambda \varepsilon_{22} + (\lambda + 2\mu) \varepsilon_{33} = 0$

La relation (i) permet de constater qu'il y a absence de glissement (pas de déformations angulaires pures dans le repère choisi). Par conséquent, seuls les allongements relatifs ε_{ii} sont à considérer. La relation (iii), après simplification, conduit à $\varepsilon_{22} = \varepsilon_{33}$: les allongements relatifs dans la direction transverse sont identiques. En remplaçant ε_{33} par ε_{22} dans la relation (ii), on obtient alors:

$$(\lambda + 2\mu) \varepsilon_{11} + 2\lambda \varepsilon_{22} = E \varepsilon_{11}$$

Nouvelle relation permettant d'établir une proportionnalité entre ε_{11} , ε_{22} et ε_{33} :

$$\varepsilon_{22} = \varepsilon_{33} = -\frac{(\lambda + 2\mu - E)}{2\lambda} \varepsilon_{11}$$

Ce coefficient de proportionnalité, négatif, définit le coefficient de *Poisson* (ν) et permet de formuler:

$$\frac{\varepsilon_{22}}{\varepsilon_{11}} = \frac{\varepsilon_{33}}{\varepsilon_{11}} = -\nu \quad \text{Ou} \quad \nu = -\frac{(\lambda + 2\mu - E)}{2\lambda} > 0$$

On peut donc en conclure que module d'Young et coefficient de Poisson sont deux paramètres, propriétés intrinsèques du matériau, que l'on peut facilement déterminer expérimentalement par la mesure des allongements relatifs longitudinal (ε_{11}) et transversal ($\varepsilon_{22} = \varepsilon_{33}$).

IV.9. Matériaux anisotropes

La loi de Hooke a été généralisée par Cauchy (1789-1857). Cauchy a proposé d'exprimer chaque composante du tenseur des contraintes comme fonction linéaire des composantes du tenseur des déformations.

Dans ce cas les tenseur d'élasticité \bar{M} et \bar{L} ont a priori 81 composantes (chaque indice varie de 1 à 3). Toutefois, le tenseur des contraintes de Cauchy $\bar{\sigma}$ et le tenseur de petites déformations $\bar{\varepsilon}$ sont symétriques. Ces tenseurs n'ont donc que 6 composantes indépendantes. Les liaisons linéaires entrées ces deux tenseurs peuvent donc s'exprimer par 36 termes. En effet, $\varepsilon_{ij} = M_{ijkl} \sigma_{kl}$, $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$, $\sigma_{kl} = \sigma_{lk}$, permet d'écrire:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij} &= M_{ijkl} \sigma_{kl} = M_{jikl} \sigma_{kl} \rightarrow M_{ijkl} = M_{jikl} \\ \varepsilon_{ij} &= M_{ijkl} \sigma_{kl} = M_{ijlk} \sigma_{lk} \rightarrow \sigma_{kl} = \sigma_{lk} \end{aligned}$$

Une démonstration similaire est possible pour le tenseur des rigidités:

$$\begin{aligned} M_{ijkl} &= M_{jikl} = M_{ijlk} \\ L_{ijkl} &= L_{jikl} = L_{ijlk} \end{aligned}$$

L'existence d'une énergie de déformation associée de façon biunivoque à un état de déformation ou un état contrainte donné permet d'énoncer une condition de symétrie supplémentaire pour les tenseurs d'élasticité.

Références

- [1] M. Dupeux, " Aide-mémoire de science des matériaux ", Dunod, Paris, (2008).
- [2] H. Mathieu, H. Fanet, "*Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques*", Edition Masson, Paris, (2009).
- [3] P. Bordet, "*Rappels de cristallographie*", EDP Sciences, (2008).
- [4] N. Millot, J. Niépce, "*Cristallographie géométrique*", Tec &Doc, Lavoisier.
- [5] A. RASKIN, "Support de Cours: *Rappels atomistiques, structure des métaux, des alliages et des céramiques*", Université Médicale Virtuelle Francophone, (2010).
- [6] F. Sidoroff, "*Mécanique des milieux continus*", École Centrale de Lyon, France, (1980).
- [7] C. Kittel, "*Physique de l'état solide*", Dunod, Paris, (1998).
- [8] A. Britel, F. Bennani, "Support de Cours: *Cristallographie géométrique et Cristallochimie I*", Faculté des sciences Dharel Mahraz, Fes, (2019).
- [9] L. Boumia, "Support de Cours: *Physique de la matière condensée I*", Centre universitaire de Tissemsilt.
- [10] J. P. Mercier, G. Zambelli, W. Kurz, "*Introduction à la science des matériaux*", Presses Polytechniques et Universitaire Romandes, (2002).
- [11] P. Fleurat-Lessard, "*Le solide réel*", Chimie du Solide Agrégation de Chimie (2011).
- [12] J. C. Charmet, "*Mécanique du solide et des matériaux: Elasticité-Plasticité-Rupture*", ESPCI - Laboratoire d'Hydrodynamique et Mécanique Physique.
- [13] M. F. Ashby, "*Choix des matériaux en conception mécanique*", Dunod, Paris, (2000).
- [14] J. Philibert, A. Vignes, Y. Bréchet, P. Combrade, "*Métallurgie, du minerai au matériau*", Masson, Paris, (1998).