

FORME D'ÉQUILIBRE D'UN CRISTAL - CORRECTION

On s'intéresse à déterminer la forme d'équilibre d'un cristal bidimensionnel ayant la structure d'un réseau carré de maille a . L'énergie de surface est associée aux liaisons coupées. On notera J_1 l'énergie d'une liaison entre premiers voisins (arête du carré) et J_2 l'énergie entre seconds voisins (diagonale du carré). On note $\gamma(\theta)$ l'énergie (par unité de longueur) pour une facette d'angle θ avec l'axe des x .

- 1 - Calculer explicitement $\gamma(\theta)$ pour $0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{4}$ en prenant en compte les interactions avec les premiers et les seconds voisins.

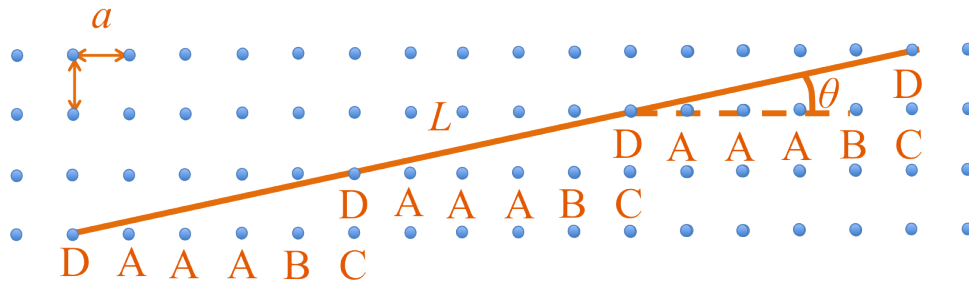


FIGURE 1 – Schéma d'une maille carrée bidimensionnelle

Sachant que la tension de surface $\gamma(\theta)$ est l'énergie à fournir pour créer une surface – à savoir pour casser les liaisons entre les atomes – il faut dénombrer le nombre de liaisons perdues lorsqu'on clive le cristal et calculer l'énergie qu'elles représentent.

- Chaque atome de type A perd 1 J_1 et 2 J_2
- Chaque atome de type B perd 1 J_1 et 1 J_2
- Chaque atome de type C perd 1 J_2
- Chaque atome de type D perd 2 J_1 et 2 J_2

Sur une face du cristal de longueur L , on trouve un atome de type B par ligne, de même pour les atomes de types C et D. Le nombre de lignes = $\frac{L \sin \theta}{a}$.

Pour les atomes de type A, on en trouve un par colonne, sauf sur les colonnes occupées par des atomes de type B ou C (ou D). Le nombre de colonnes occupées par des atomes A = $\frac{L \cos \theta}{a} - 2 \frac{L \sin \theta}{a}$.

On obtient alors une énergie totale :

$$\gamma(\theta) = \frac{E}{L} = \left(\frac{\cos \theta}{a} - 2 \frac{\sin \theta}{a} \right) (J_1 + 2J_2) + \frac{\sin \theta}{a} (3J_1 + 4J_2)$$

$$\gamma(\theta) = \frac{\cos \theta}{a} (J_1 + 2J_2) + \frac{\sin \theta}{a} J_1$$

- 2 - Calculer $\gamma(0)$ et $\gamma(\frac{\pi}{4})$ en prenant en compte les interactions entre premiers et seconds voisins.

$$\gamma(0) = \frac{J_1 + 2J_2}{a} : \text{tous les atomes sont de type A}$$

$$\gamma(\frac{\pi}{4}) = \frac{\sqrt{2}}{2a} (J_1 + 2J_2) + \frac{\sqrt{2}}{2a} (J_1) = \frac{1}{\sqrt{2}a} (2J_1 + 2J_2) = \frac{1}{\sqrt{2}a} (2J_1 + J_2) + \frac{1}{\sqrt{2}a} (J_2).$$

Dans ce cas, le terme en $(2J_1 + J_2)$ qui correspond aux atomes de type D sur les pointes et le terme en J_2 qui correspond aux atomes de type C dans les creux.

- 3 - On veut déterminer la forme d'équilibre et en particulier comparer les formes carrées et octogonales (pour une aire fixée).

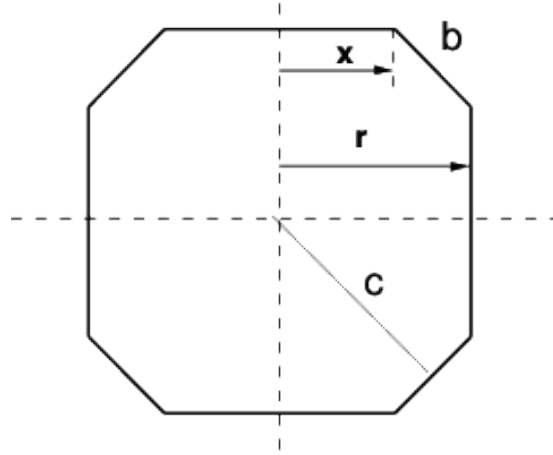


FIGURE 2 – Schéma d'un cristal bidimensionnel

- a - Déterminer b et c en fonction de r et x .

b est la diagonale d'un carré de côté $(r - x)$. On obtient donc : $b = \sqrt{2}(r - x)$
 c est la diagonale d'un carré de côté $x + \frac{r - x}{2}$. On obtient donc $c = \sqrt{2}(\frac{x}{2} + \frac{r}{2}) = \frac{x + r}{\sqrt{2}}$

- b - Déterminer la surface S de ce polygone en fonction de x et r .

$$S = (2r)^2 - 2(r - x)^2 = 4r^2 - 2r^2 + 4rx - 2x^2 = 2r^2 + 4rx - 2x^2$$

- c - Déterminer l'énergie de contour E en fonction de x et r .

$$E = \gamma.L = 4 \times 2x\gamma(0) + 4 \times \sqrt{2}(r - x)\gamma(\frac{\pi}{4}) = 8x\gamma(0) + 4\sqrt{2}(r - x)\gamma(\frac{\pi}{4})$$

- d - Déterminer la valeur de $\frac{x}{r}$ qui minimise l'énergie de contour (à aire fixée). Comparer les formes d'équilibre dans les cas $J_2 = 0$ et $J_2 \neq 0$.

Pour minimiser l'énergie à aire fixée, on impose deux conditions : $dE = 0$ et $dS = 0$

$$\begin{cases} \frac{\partial E}{\partial x}dx + \frac{\partial E}{\partial r}dr = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial x}dx + \frac{\partial S}{\partial r}dr = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \frac{\partial E}{\partial x} \frac{\partial S}{\partial x}dx + \frac{\partial E}{\partial r} \frac{\partial S}{\partial x}dr = 0 & (1) \\ \frac{\partial S}{\partial x} \frac{\partial E}{\partial x}dx + \frac{\partial S}{\partial r} \frac{\partial E}{\partial x}dr = 0 & (2) \end{cases}$$

En soustrayant (2) à (1), on obtient :

$$\frac{\partial E}{\partial x} \frac{\partial S}{\partial r} = \frac{\partial E}{\partial r} \frac{\partial S}{\partial x}$$

Or on a :

$$\frac{\partial E}{\partial r} = \gamma(\frac{\pi}{4})4\sqrt{2} \qquad \frac{\partial S}{\partial r} = 4r + 4x$$

$$\frac{\partial E}{\partial x} = 8\gamma(0) - \gamma\left(\frac{\pi}{4}\right)4\sqrt{2} \quad \frac{\partial S}{\partial x} = 4r - 4x$$

En remplaçant chaque terme par leur expression, on a alors :

$$\frac{\partial E}{\partial x} \frac{\partial S}{\partial r} = \frac{\partial E}{\partial r} \frac{\partial S}{\partial x} \Rightarrow \frac{x}{r} = \frac{\sqrt{2}\gamma\left(\frac{\pi}{4}\right) - \gamma(0)}{\gamma(0)} \quad (3)$$

On avait écrit précédemment : $\gamma(0) = \frac{J_1 + 2J_2}{a}$ et $\gamma\left(\frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}a}(2J_1 + 2J_2)$

— si $J_2 = 0$, on a que : $\frac{x}{r} = \frac{\frac{2J_1}{a} - \frac{J_1}{a}}{\frac{J_1}{a}} = 1 \Rightarrow x = r \Rightarrow$ on a un carré comme forme d'équilibre.

— si $J_2 \neq 0$, on a que : $\frac{x}{r} = \frac{J_1}{J_1 + 2J_2} \leq 1 \Rightarrow x \leq r \Rightarrow$ on a un octogone.

e - Pour quelles valeurs de J_2 la forme d'équilibre est-elle un octogone parfait ?

On a un octogone est parfait lorsque tous ses côtés ont la même longueur. On a alors : $2x = b \Rightarrow \sqrt{2}(r - x) = 2x \Rightarrow r = (1 + \sqrt{2})x$.

En remplaçant dans l'expression : $\frac{x}{r} = \frac{J_1}{J_1 + 2J_2}$, on obtient : $J_2 = \frac{J_1}{\sqrt{2}}$.

f - Déterminer le rapport $\frac{c}{r}$. Montrer qu'il est égal à $\frac{\gamma\left(\frac{\pi}{4}\right)}{\gamma(0)}$.

L'équation (3) donne : $\frac{x}{r} = \frac{\sqrt{2}\gamma\left(\frac{\pi}{4}\right) - \gamma(0)}{\gamma(0)}$, on en déduit que $\frac{\sqrt{2}\gamma\left(\frac{\pi}{4}\right)}{\gamma(0)} = \frac{r+x}{r}$

d'où $\frac{\gamma(0)}{r} = \frac{\sqrt{2}}{r+x}\gamma\left(\frac{\pi}{4}\right) = \frac{\gamma\left(\frac{\pi}{4}\right)}{c}$ et on retrouve le formule de Wulff.