Master Chimie de Matériaux

Matériaux oxydes pour les applications électriques et électroniques

P. Marchet marchet@unilim.fr

R. El Bouayadi rachid.elbouayadi@uit.ac.ma





Chapitre 1 QUELQUES NOTIONS DE PHYSIQUE CRISTALLINE

Introduction à l'utilisation des tenseurs dans l'étude des propriétés des cristaux





Introduction à l'utilisation des tenseurs dans l'étude des propriétés des cristaux





Une propriété physique est l'entité qui relie deux grandeurs mesurables, elles mêmes ne représentant aucune propriété particulière

Ces grandeurs mesurables peuvent être des scalaires ou des vecteurs

Exemples:

force = masse x accélération f = m.a

induction magnétique = perméabilité x champ magnétique

B =
$$\mu_0$$
 . **H**

Matériaux isotropes : la propriété est un scalaire

Matériaux anisotropes: la plupart des cristaux étant anisotropes, leurs propriétés physiques seront décrites par des équations tensorielles

induction magnétique = perméabilité x champ magnétique

B =
$$\mu_0$$
 . **H**

1.1 Influence des matériaux magnétiques sur les lignes de champ

On a calculé le champ magnétique crée, dans le vide, au centre d'une bobine plate de N spires circulaires de rayon R et d'axe \vec{x} parcourue par le courant i: $\vec{B} = \mu_0 \frac{Ni}{2R} \vec{x}$.

On définit l'excitation magnétique $\overline{H} = \frac{N \, i}{2 \, R} \, \bar{x}$ qui s'exprime en A/m, elle est caractéristique de la géométrie bobine et indépendante du milieu (ici le vide). Le milieu est caractérisé par la perméabilité μ_0 .

Dans le vide on a : $\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$.

Il existe des matériaux, qui se magnétisent très facilement, c'est-à-dire qui conduisent à une valeur élevée de B avec une valeur faible de H, ce sont les matériaux ferro-magnétiques et ferri-magnétiques.

En simplifiant (hypothèse de linéarité) on peut écrire $\vec{B} = \mu_0 \, \mu_r \, \vec{H}$

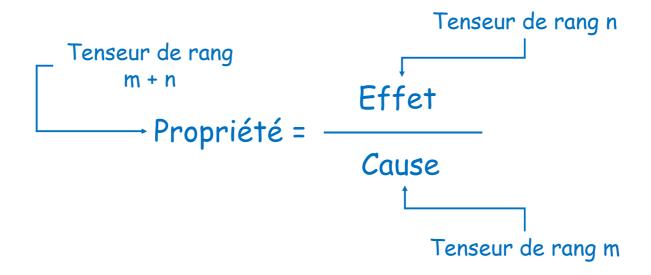
 μ_r est la perméabilité relative du matériau

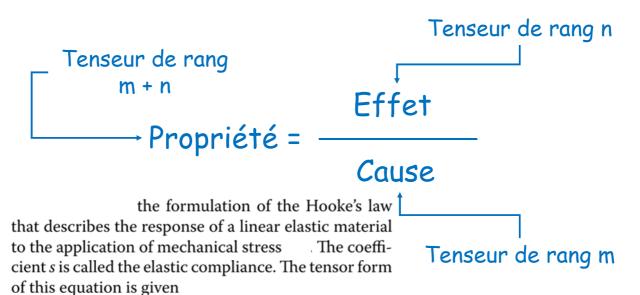
 $\mu = \mu_0 \mu$, est la perméabilité magnétique absolue du matériau

Propriété = Effet (ex : B)

Cause (ex : H)

Cas général des cristaux :

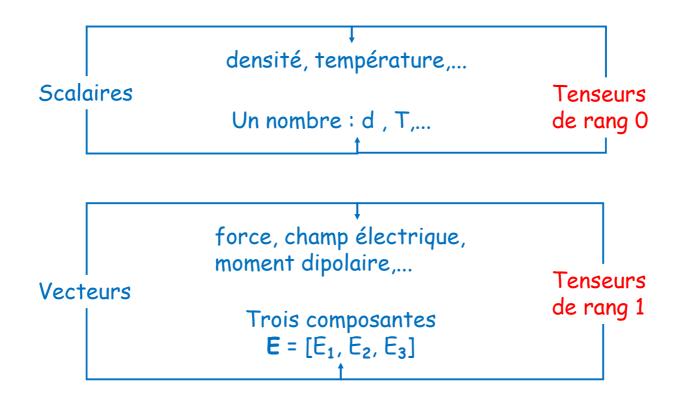




$$\frac{\varepsilon_{mn} = S_{mnpq} \sigma_{pq}}{\text{where: } S_{mnpq} \text{ is the } \underline{\text{compliance } \underline{\text{tensor}}}$$

We notice in the above equation that both stress and strain are second-rank tensors that makes the compliance, *s*, a fourth rank tensor.

Scalaires et vecteurs



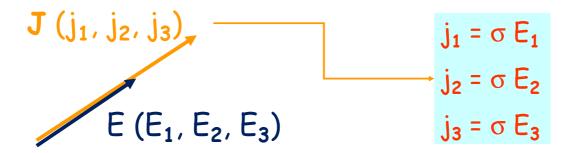
Tenseurs du 2^{ème} rang

Exemple: densité de courant J dans un

conducteur sous champ électrique E

Conducteur
$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$$

J et E sont colinéaires



σ est alors un scalaire = tenseur de rang 0

Tenseurs du 2^{ème} rang

Exemple: densité de courant J dans un conducteur

sous champ électrique E

Conducteur
$$J = \sigma E$$

J et E peuvent être non colinéaires

$$j(j_{1}, j_{2}, j_{3})$$

$$j_{1} = \sigma_{11}E_{1} + \sigma_{12}E_{2} + \sigma_{13}E_{3}$$

$$j_{2} = \sigma_{21}E_{1} + \sigma_{22}E_{2} + \sigma_{23}E_{3}$$

$$j_{3} = \sigma_{31}E_{1} + \sigma_{32}E_{2} + \sigma_{33}E_{3}$$

$$E(E_{1}, E_{2}, E_{3})$$

σ est alors un *tenseur de rang 2*

Tenseurs du 2^{ème} rang

$$j_{1} = \sigma_{11}E_{1} + \sigma_{12}E_{2} + \sigma_{13}E_{3}$$

$$j_{2} = \sigma_{21}E_{1} + \sigma_{22}E_{2} + \sigma_{23}E_{3}$$

$$j_{3} = \sigma_{31}E_{1} + \sigma_{32}E_{2} + \sigma_{33}E_{3}$$

$$\sigma_{11} \quad \sigma_{12} \quad \sigma_{13}$$
 $\sigma_{21} \quad \sigma_{22} \quad \sigma_{23}$

Tenseur du 2ème rang σ_{ii} : composantes du tenseur

 σ_{11} σ_{22} σ_{33} : diagonale principale

$$j_i = \sigma_{ij} E_j$$

Utilisation des tenseurs du 2^{ème} rang

q = cause et p = effet : peuvent être non colinéaires

$$p = [p_1 \ p_2 \ p_3]$$

$$p_1 = T_{11}q_1 + T_{12}q_2 + T_{13}q_3$$

$$p_2 = T_{21}q_1 + T_{22}q_2 + T_{23}q_3$$

$$p_3 = T_{31}q_1 + T_{32}q_2 + T_{33}q_3$$

$$p_1 = T_{31}q_1 + T_{32}q_2 + T_{33}q_3$$

$$T_{ij} = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{bmatrix}$$

Chaque T_{ij} représente une quantité physique qui dépend du repère choisi

Quelques exemples de tenseurs du 2ème rang

Propriété	cause	effet		
Conductivité électrique	Champ électrique	Densité de courant		
Conductivité thermique	Gradient de température	Densité de flux de chaleur		
Permittivité	Champ électrique	Déplacement diélectrique		
Susceptibilité diélectrique	Champ électrique	Polarisation		
Perméabilité	Champ magnétique	Induction magnétique		
Susceptibilité magnétique	Champ magnétique	Aimantation		

Exemples de propriétés et des tenseurs associés

Rang du tenseur	Nb de coefficients	Nature	Exemples
0	1	Scalaire	Densité, température, masse
1	3	Vecteur	Champ électrique, polarisation Déplacement électrique, Coefficients pyroélectriques
2	9	Tenseur	Permittivité, conductivité, Contrainte, déformation
3	27	Tenseur	Coefficients piézoélectriques
4	81	Tenseur	Coefficients élastiques

Contraintes et déformations





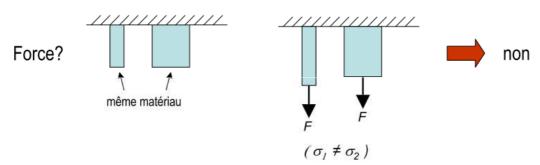


Contraintes et déformations

Introduction

Comment caractériser un effort pour bien représenter les propriétés mécaniques d'un matériau ?

Exemple: traction



Contrainte

$$\sigma = \frac{\text{force appliquée}}{\text{section initiale}} = \frac{F}{S_0}$$
 force F section droite initiale S_0

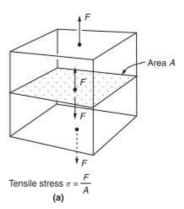
Contraintes et déformations

La contrainte

Une force F est appliquée à un bloc de matériau : F se transmit à travers le bloc, et est compensée par une force opposée (exercée par le support sur le bloc) : support est remplacé par le force opposé. F agit sur les sections du bloc parallèles à la surface d'application : le bloc est dans un état **contraint.**

L'intensité de la contrainte est :

$$\sigma = \frac{F}{A}$$



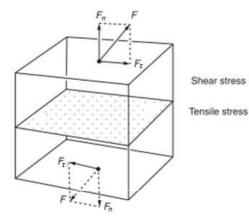
 σ est produite par une force qui tire perpendiculairement à la surface : Contrainte de traction

Contraintes et déformations

si la force fait un angle avec la surface : la force est décomposée en deux composantes :

Une composante normale, qui engendre une contrainte de traction $\sigma = F_n/A$. La contrainte de **cisaillement** τ (*Cission*) égale à F_t/A .

Dimension d'un contrainte $[N/m^2]$ ou pascal, unité trop petite dans la plupart des applications, on utilise souvent $[MN/m^2]$ ou Mpa.



Loi de HOOKE Contraintes et déformations

Définir les constantes élastique (élasticité linéaire)

En traction simple : la déformation en traction est proportionnelle à la contrainte de traction : $\sigma=E\varepsilon_{\rm n}$

E: module de Young.

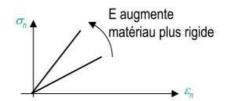
Idem, la déformation de cisaillement est proportionnelle à la cission : $\tau = G\gamma$ G : module de cisaillement.

L'opposé de la dilatation est proportionnel à la pression : $p = -K\Delta$ K : module de compressibilité.

Rqs : les modules ont la même dimension que les contraintes (GPa) La plupart des solides ont une réponse élastique seulement pour les très petites déformations <0,1%).

On a défini **quatre** constantes élastiques, mais pour la plupart des matériaux : $K \sim E$, $v \sim 0.33$ et $G \sim 3E/8$.

Les modules élastiques caractérisent la **rigidité** d'un matériau (résistance à la déformation élastique)



Contraintes et déformations

La déformation

Les matériaux réagissent aux contraintes en se déformant.

Une traction simple entraı̂ne des *déformations* de traction. Le cube s'allonge de u dans la direction de traction.

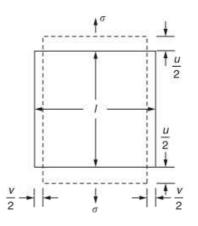
On définit la déformation longitudinale conventionnelle (nominale) par : $\varepsilon_n = \frac{u}{t}$

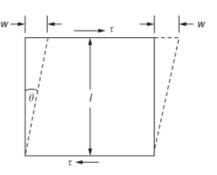
La section du cube sous contrainte diminue : la déformation latérale est décrite par le coefficient de poisson ν :

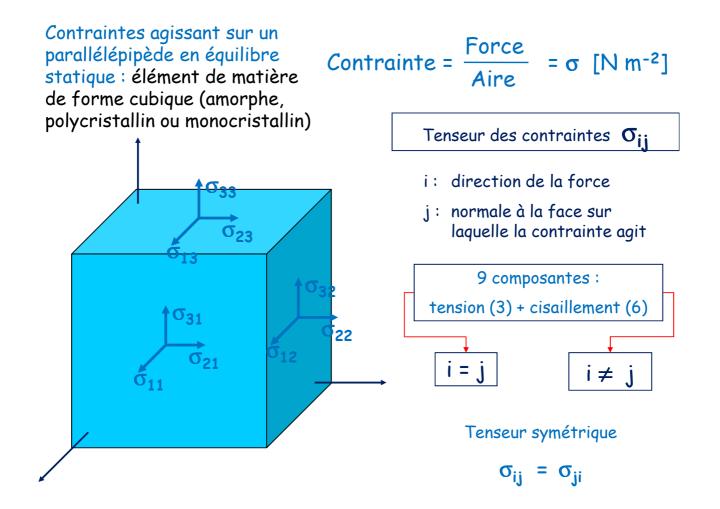
 $v = -rac{ ext{déformation latérale}}{ ext{déformation longitudinale}}$



 θ : angle de cisaillement. $\gamma = \frac{\omega}{l} = \tan \theta$ Déformation élastiques sont toujours très petites : $\gamma = \theta$

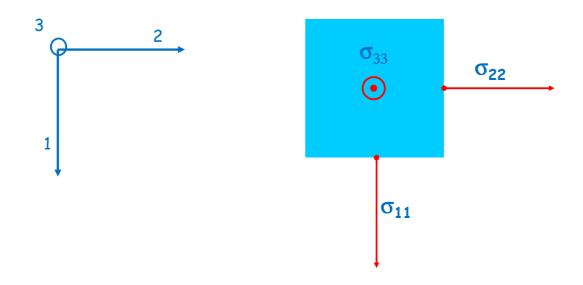






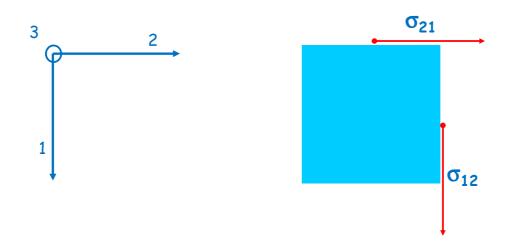
tension

On ne considère ici que des contraintes donnant naissance à des déformations purs ! (pas de mouvement général du corps)



 σ_{ii} = tension (traction ou compression)

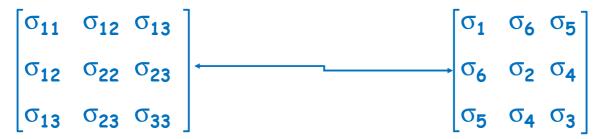
cisaillement

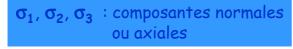


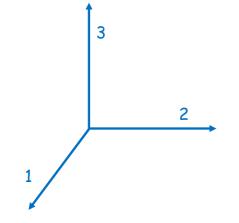
σ_{12} et σ_{21} ont donc le même effet : cisaillement autour de l'axe 3

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji} = cisaillement$$

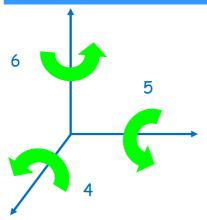




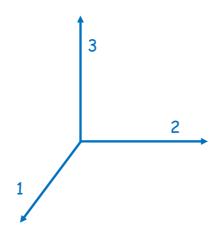




σ_4 , σ_5 , σ_6 : composantes de cisaillement



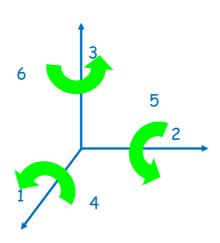
Notation tensorielle

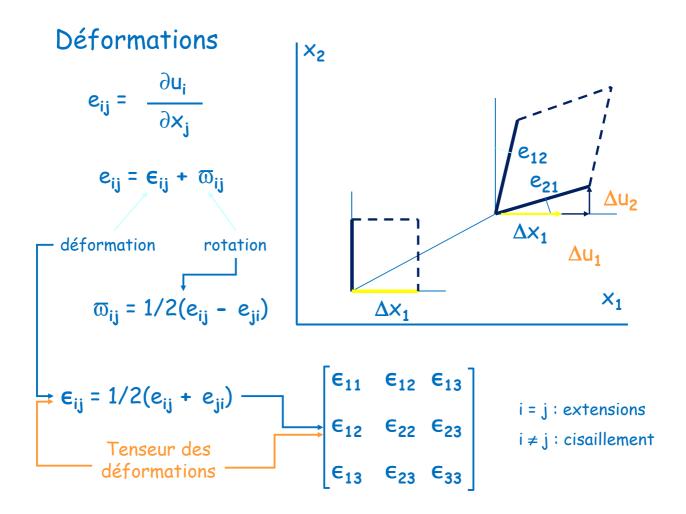


$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \qquad \begin{array}{c} \sigma_{1} & \sigma_{6} & \sigma_{5} \\ \sigma_{6} & \sigma_{2} & \sigma_{4} \\ \sigma_{5} & \sigma_{4} & \sigma_{3} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ \sigma_6 & \sigma_2 & \sigma_4 \\ \sigma_5 & \sigma_4 & \sigma_3 \end{bmatrix}$$

Notation matricielle (Notation de Voigt)





14-1-2 Le tenseur des déformations

Considérons dans un solide deux points voisins A et B, distants de Δx (Figure 14-2). Avant toute déformation les coordonnées de ces deux points sont :

$$(x_i)$$
 pour A et $(x_i + \Delta x_i)$ pour B

Après déformation du solide, quelle qu'en soit la cause, les deux points ont été déplacés l'un par rapport à l'autre et, occupent les positions A' et B' dont les coordonnées sont :

$$A':(x_i+u_i)$$
 $B':(x_i+\Delta x_i+u_i+\Delta u_i)$

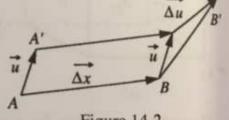


Figure 14-2

La variation de position de B par rapport à A est donnée par $\overline{\Delta u}$ puisque l'on a:

$$\overrightarrow{AB} = \Delta x$$
 $\overrightarrow{A'B'} = \Delta x + \Delta u$ et donc $\overrightarrow{A'B'} - \overrightarrow{AB} = \Delta u$

$$\Delta u_1 = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u_1}{\partial x_2} \Delta x_2$$

$$\Delta u_2 = \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \Delta x_2$$
avec $\Delta u_i \ll \Delta x_j$ quels que soient i et j

Les coefficients $\frac{\partial u_i}{\partial x_k}$ sont notés e_{ik} : ils caractérisent les déplacements de matière aux environs de A.

Quelle est la signification physique des e_{ik} ? Prenons le cas particulier où AB est parallèle à Ox_1 , ce qui implique $\Delta x_2 = 0$. Lorsque B se déplace vers B', la variation de position par rapport à A aura pour composantes Δu_1 et Δu_2 (Figure 14-3, sur laquelle les distances Δu_1 et Δu_2 sont largement exagérées). Ces composantes s'écrivent:

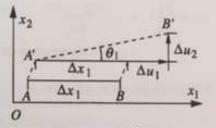


Figure 14-3

$$\Delta u_1 = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \Delta x_1 \quad \text{ov} \quad \frac{\partial u_1}{\partial x_1} = \frac{\Delta u_1}{\Delta x_1} = e_{11}$$

$$\Delta u_2 = \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \Delta x_1 \quad \text{ov} \quad \frac{\partial u_2}{\partial x_1} = \frac{\Delta u_2}{\Delta x_1} = e_{21}$$

La figure 14-3 montre que e_{11} constitue l'allongement relatif du segment AB le long de Ox_1 . D'après cette même figure on a:

$$tg\theta_1 = \frac{\Delta u_2}{\Delta x_1 + \Delta u_1} \approx \frac{\Delta u_2}{\Delta x_1} = e_{21} \approx \theta_1$$

 e_{21} correspond donc à un petit déplacement en rotation d'un élément linéaire parallèle à Ox_1 , vers Ox_2 .

On peut envisager une déformation analogue parallèle à Ox_2 : e_{22} sera l'allongement relatif d'un élément linéaire le long de Ox_2 . e_{12} correspondra donc à un petit déplacement en rotation d'un élément linéaire parallèle à Ox_2 , vers Ox_1 , (Figure 14-4).

$$e_{11} = \frac{\Delta u_1}{\Delta x_1}$$
= allongement relatif de AB₁ selon Ox_1

$$e_{22} = \frac{\Delta u'_2}{\Delta x_2}$$
= allongement relatif de AB₂ selon Ox_2

$$e_{12} = \frac{\Delta u'_1}{\Delta x_2} \cong \frac{\Delta u'_1}{\Delta x_2 + \Delta u'_2}$$

$$= tg\theta_2 \cong \theta_2 \text{ rotation de } AB_2$$

$$e_{21} = \frac{\Delta u_2}{\Delta x_1} \cong \frac{\Delta u_2}{\Delta x_1 + \Delta u_1}$$

$$= tg\theta_1 \cong \theta_1 \text{ rotation de } AB_1$$

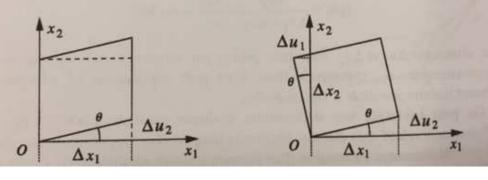
$$e_{21} = \frac{\Delta u_2}{\Delta x_1} \cong \frac{\Delta u_2}{\Delta x_1 + \Delta u_1}$$
Figure 14-4:
Déformation à deux dimensions

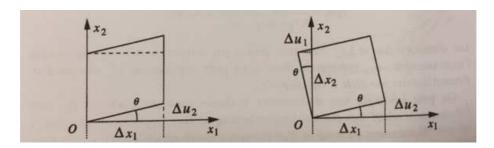
À trois dimensions, nous avons :

$$\Delta u_i = \frac{\partial u_i}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u_i}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial u_i}{\partial x_3} \Delta x_3$$

L'ensemble des neuf grandeurs $\partial u_i/\partial x_k = e_{ik}$ caractérise le déplacement de la matière aux environs de A. Ce sont les composantes d'un tenseur de rang 2. C'est à

comme nous allons le voir, les e_{ik} incluent simultanément les déformations relatives pures dues aux contraintes auxquelles est soumis l'élément de matière et les rotations d'ensemble de cet élément de matière. La figure 14-5 représente une déformation due à un cisaillement simple parallèlement à la direction Ox_2 . La figure 14-6 représente une rotation pure autour d'un axe perpendiculaire au plan Ox_1x_2 .





Ces figures montrent qu'un angle de déformation est caractérisé rigoureusement par la même expression qu'un angle de rotation :

Figure 14-5:
$$e_{21} = \frac{\Delta u_2}{\Delta x_1} = tg\theta = \theta$$
 = angle de déformation

Figure 14-6:
$$e_{21} = \frac{\Delta u_2}{\Delta x_1} = -\frac{\Delta u_1}{\Delta x_2} = -e_{12}$$
 = angle de rotation

l'élément de matière considéré. Puisqu'on ne s'intéresse qu'aux déformations pures, il faut définir des paramètres qui ne contiennent aucune information sur les rotations pures. Écrivons les e_{ik} sous la forme :

$$e_{ik} = \frac{1}{2} \left(e_{ik} + e_{ki} \right) - \frac{1}{2} \left(e_{ki} - e_{ik} \right) \qquad = \varepsilon_{ik} - \rho_{ik}$$

en posant:

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{2} (e_{ik} + e_{ki})$$
 et $\rho_{ik} = \frac{1}{2} (e_{ki} - e_{ik})$

La figure 14-7 montre que, géométriquement, on peut toujours décomposer le déplacement d'un élément de matière en une déformation pure + une rotation pure. Sur la figure, on a pris l'exemple d'un élément initialement carré soumis à une traction selon la diagonale du carré.

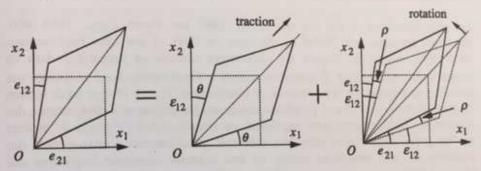


Figure 14-7: déplacement = déformation + rotation

L'angle θ dû au cisaillement est :

$$2\theta = e_{12} + e_{21}$$
$$\theta = \frac{1}{2} (e_{12} + e_{21}) = \varepsilon_{12}$$

L'angle ρ dû à la rotation est : $\rho = e_{21} - \varepsilon_{12} \qquad \rho = \varepsilon_{12} - e_{12}$ $2\rho = e_{21} - e_{12} \implies \rho = \frac{1}{2} (e_{21} - e_{12}) = \rho_{12}$

Dans cet exemple l'angle dû uniquement au cisaillement est donné par $(e_{12}+e_{21})/2$, et l'angle dû uniquement à la rotation est donné par $(e_{21}-e_{12})/2$.

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{2} (e_{ik} + e_{ki})$$
 et $\varepsilon_{ki} = \frac{1}{2} (e_{ki} + e_{ik})$ \Rightarrow $\varepsilon_{ik} = \varepsilon_{ki}$

 ε_{ik} est donc un tenseur symétrique

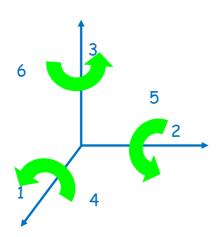
$$\rho_{ik} = \frac{1}{2} \left(e_{ki} - e_{ik} \right)$$
 et $\rho_{ki} = \frac{1}{2} \left(e_{ik} - e_{ki} \right)$ $\Rightarrow \rho_{ik} = -\rho_{ki}$

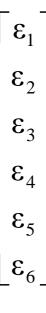
 ρ_{ik} est donc un tenseur antisymétrique. Il est normal d'avoir ρ_{ii} = 0, puisque les e_{ii} correspondent à des allongements purs, donc à des absences de rotation.

 $\Rightarrow \varepsilon_{ik}$ est le tenseur des déformations. Les ε_{ii} représentent des allongements relatifs. Les ε_{ik} ($i \neq k$) représentent des déformations par cisaillement pur.

Le tenseur des déformations étant symétrique, il est caractérisé par six composantes indépendantes. On peut donc le représenter sous forme matricielle

Notation matricielle





14-3-1 Le tenseur rigidité et le tenseur élasticité

Considérons d'abord le cas d'un milieu homogène et isotrope, par exemple une tige métallique, corps polycristallin et de ce fait isotrope. Soumis à une contrainte pure σ selon son axe, la tige va subir un allongement relatif $\varepsilon = \Delta l/l$. Pour des contraintes relativement faibles, la tige se comporte de manière élastique, c'est-àdire que, lors du relâchement de la contrainte, elle va reprendre sa forme initiale. Dans ces conditions, la loi de Hooke indique que contrainte et allongement sont reliés linéairement : $\varepsilon = s \sigma$. Le coefficient s s'appelle constante élastique. On peut exprimer la contrainte en fonction de l'allongement : $\sigma = c\varepsilon$. Le coefficient c s'appelle constante de rigidité : la constante c est également le module d'Young c (Thomas Young, 1773-1829, était un physicien anglais).

Si on considère maintenant le cas d'un cristal, dont les propriétés sont en général anisotropes, il faut faire intervenir le tenseur des contraintes σ_{ij} et le tenseur des déformations ε_{kl} . La loi de Hooke et son « inverse » s'écrivent alors en toute généralité :

 $\varepsilon_{kl} = s_{klij} \, \sigma_{ij}$ et $\sigma_{ij} = c_{ijkl} \, \varepsilon_{kl}$

 s_{klij} est le tenseur élasticité et c_{ijkl} est le tenseur rigidité ; ce sont des tenseurs de

Notation matricielle

Avec des indices contractés S_{nm}

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{\epsilon}_1 \\ \boldsymbol{\epsilon}_2 \\ \boldsymbol{\epsilon}_3 \\ \boldsymbol{\epsilon}_4 \\ \boldsymbol{\epsilon}_5 \\ \boldsymbol{\epsilon}_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} & S_{15} & S_{16} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & S_{24} & S_{25} & S_{16} \\ S_{21} & S_{32} & S_{33} & S_{34} & S_{35} & S_{36} \\ S_{41} & S_{42} & S_{43} & S_{44} & S_{45} & S_{46} \\ S_{51} & S_{52} & S_{53} & S_{54} & S_{55} & S_{56} \\ S_{61} & S_{62} & S_{63} & S_{63} & S_{65} & S_{66} \end{bmatrix}$$

$$\varepsilon_i = S_{ij} \sigma_j$$

Propriétés diélectriques et magnétiques:

Aimantation, Polarisation diélectrique





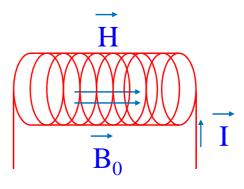
Induction diélectrique et magnétique : dans le vide



$\begin{array}{c|c} + & \rightarrow & - \\ + & E & - \\ + & \rightarrow & - \\ + & - & - \\ + & - & - \end{array}$

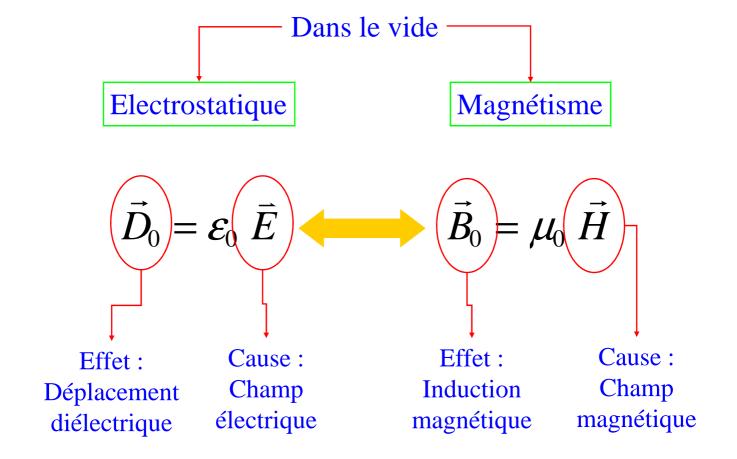
$$ec{D_0} = \mathcal{E}_0 \; ec{E}$$

la densité de charge sur les **plaques** est égale à la valeur du champ **D** entre les plaques

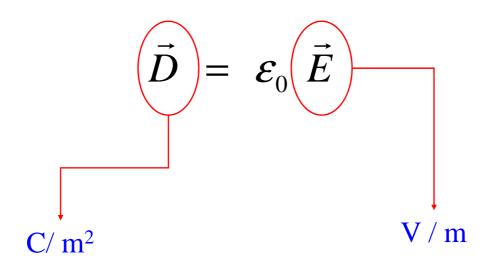


Magnétisme

$$\vec{B}_0 = \mu_0 \ \vec{H}$$



UNITES



1.1 Influence des matériaux magnétiques sur les lignes de champ

On a calculé le champ magnétique crée, dans le vide, au centre d'une bobine plate de N spires circulaires de rayon R et d'axe \vec{x} parcourue par le courant $i: \vec{B} = \mu_0 \frac{Ni}{2R} \vec{x}$.

On définit l'excitation magnétique $\overline{H} = \frac{Ni}{2.R} \vec{x}$ qui s'exprime en A/m, elle est caractéristique de la géométrie bobine et indépendante du milieu (ici le vide). Le milieu est caractérisé par la perméabilité μ_0 .

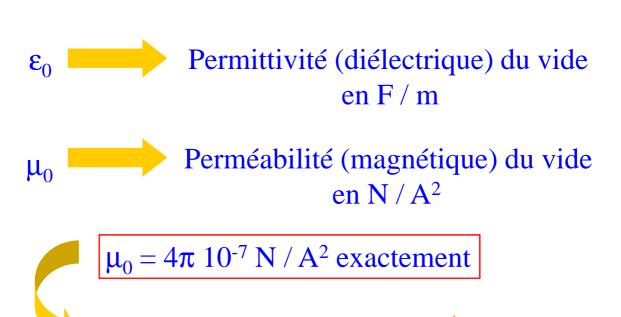
Dans le vide on a : $[\vec{B} = \mu_0 \vec{H}]$.

Il existe des matériaux, qui se magnétisent très facilement, c'est-à-dire qui conduisent à une valeur élevée de B avec une valeur faible de H, ce sont les matériaux ferro-magnétiques et ferri-magnétiques.

En simplifiant (hypothèse de linéarité) on peut écrire $\vec{B} = \mu_0 \mu_r \vec{H}$

μ, est la perméabilité relative du matériau

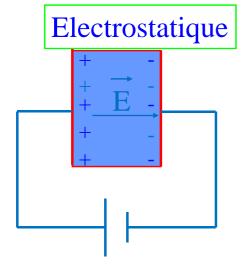
 $\mu = \mu_0 \mu$, est la perméabilité magnétique absolue du matériau



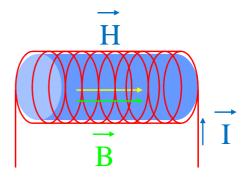
$$\varepsilon_0 \approx 1 / (36\pi \ 10^{9}) \, \text{F} / \text{m}$$

 $\varepsilon_0 \mu_0 C^2 = 1$

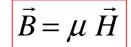
Induction diélectrique et magnétique : dans un milieu matériel

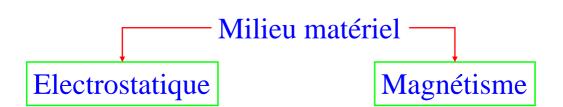


Magnétisme



$$\vec{D} = \varepsilon \ \vec{E}$$





$$\frac{D}{D_0} = \frac{C}{C_0} = \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{E}_0} = \boxed{\mathcal{E}_r}$$

Permittivité (diélectrique) relative

$$\frac{B}{B_0} = \frac{\mu}{\mu_0} = \mu_r$$

Perméabilité (magnétique) relative

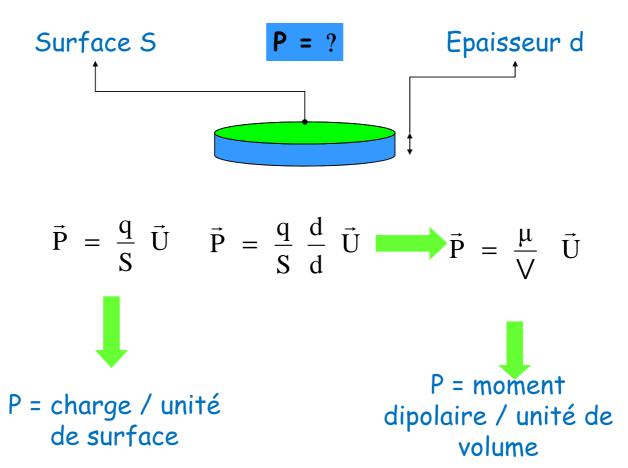
 ε_r et μ_r sans dimension

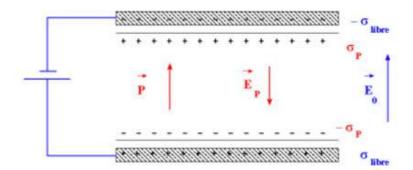
5.8 Les vecteurs polarisation et déplacement

Soit un matériau dont chaque élément de volume $d\vartheta$ possède le moment dipolaire \overline{dp} , on définit le vecteur polarisation par $\overline{P} = \overline{dp} \over d\vartheta$ qui s'exprime en $coulomb/m^2$ (ou en $debye/m^3$) homogène à une densité surfacique de charge. Ce vecteur polarisation est aussi homogène à $\varepsilon_0.\overline{E}$ qui s'exprime aussi en $coulomb/m^2$ (pour une charge ponctuelle, $\varepsilon_0.\overline{E} = \frac{q}{4\pi x^2}$). On définit ainsi le vecteur déplacement $\overline{D} = \varepsilon_0.\overline{E} + \overline{P}$ qui, par superposition, permet de prendre en compte les effets du champ électrique appliqué à la matière et de l'influence propre de la matière. Ce vecteur est nommé déplacement car, dans un milieu isolant, il contribue au déplacement des barycentres des charges positives et négatives et des dipôles. Il ne s'agit pas d'un déplacement permanent de charges mobiles (comme pour un courant électrique).

Pour de nombreux matériaux la polarisation acquise par la matière est proportionnelle au champ électrique appliqué : $\vec{P} = \chi . \vec{E} = \varepsilon_0 . \alpha . \vec{E}$ alors $\vec{D} = \varepsilon_0 . \vec{E} + \vec{P} = \varepsilon_0 . \vec{E} + \varepsilon_0 . \alpha . \vec{E} = \varepsilon_0 . (1 + \alpha) . \vec{E} = \varepsilon_0 . \varepsilon_r . \vec{E}$ $\varepsilon_s = 1 + \alpha$ est la permittivité diélectrique du matériau

permittivité diélectrique relative du matériau. Il caractérise la réduction du champ électrique dans le matériau par rapport à la valeur qu'il aurait dans le vide.



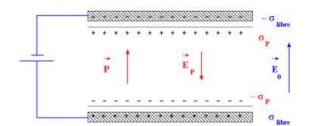


- Les charges libres des armatures créent le champ $\vec{E}_0 = \frac{\sigma_{libre}}{\varepsilon_0} \vec{u}_z$
- ullet $E_{\mathcal{O}}$ induit dans le diélectrique une polarisation P de même sens
- Il apparaît sur les faces du diélectrique des densités de charges de polarisation $\sigma = \vec{P} \cdot \vec{n} = \pm P$
- Ces charges créent un autre champ dans le diélectrique

$$\vec{E}_P = \frac{-\sigma_P}{\varepsilon_0} \, \vec{u}_z = -\frac{\vec{P}}{\varepsilon_0}$$



• E_{ρ} est de sens opposé à E_{o}



■ Le champ total dans la plaque vaut :

$$\vec{E} = \vec{E}_0 + \vec{E}_P = \vec{E}_0 - \frac{\vec{P}}{\varepsilon_0}$$

■ Généralisation : le champ E_ρ créé par la polarisation est toujours de sens opposé à E_O (loi de modération). On l'appelle champ dépolarisant (même s'il n'est associé à aucun mécanisme de dépolarisation)



Electrostatique

Magnétisme

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E}$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H}$$

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$$

$$ec{B} = \mu_0 \left(\vec{H} + \vec{M} \right)$$

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \chi_e \vec{E}$$

$$\vec{M} = \chi \vec{H}$$

$$\vec{D} = \mathcal{E}_0 \left(1 + \chi_e \right) \vec{E}$$

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \left(1 + \chi_e \right) = \mathcal{E}_0 \mathcal{E}_r$$

$$\vec{B} = \mu_0 \left(1 + \chi \right) \vec{H}$$

$$\mu = \mu_0 \left(1 + \chi \right) = \mu_0 \mu_r$$

Relations entre les propriétés d'équilibre thermiques, électriques et mécaniques des cristaux



Relations entre les propriétés d'équilibre thermiques, électriques et mécaniques des cristaux

In this chapter, we will investigate how solids respond to the applications of external agents leading to the origin of novel effects that are exploited in a number of ways to develop new devices and their applications. We can define two types of agent–effect relationship: the first being the interactions arising from electric field (E), mechanical stress (X), and temperature (T); and second consisting of E, X, and magnetic field (H). Both categories form the backbone for a variety of applications. For example, the E-X-T relationship gives rise to multiple interesting phenomena having significant impacts on the electronic and mechanical technology, sensor and detectors, and harvesting of green energy.

Fundamentals of Electroceramics: Materials, Devices, and Applications, First Edition. R. K. Pandey. © 2019 The American Ceramic Society, Inc. Published 2019 by John Wiley & Sons, Inc. Companion website: www.wiley.com/go/Pandey/Fundamentals_Electroceramics

Variable cause Variable effet	€	σ	۵	Е	5	۲
σ	Elasticité		Effet piézo- électrique		Dilatation thermique	
E						
Е	Effet piézo-		Propriétés		Effet pyro-	
D	électi	rique	diélectriques		électrique	
Т	Effet piézo- calorique		Effet électro- calorique		Capacité calorifique	
S						

Electric Field (E), Mechanical Stress (X), and Temperature (T) Diagram: Heckmann Diagram

The interaction of solids with each of these three agents can manifest itself in variety of ways. They are the foundations for the origin of primary and coupled effects exhibiting some unique electronic, thermal, and mechanical properties. There are three principal effects and six associated coupled effects. It is not a trivial task to present them in a unified and consistent way. This problem was solved in 1925 by G. Heckmann of Germany who invented a diagram, which now bears his name, representing all the effects that can occur in solid when subjected to the interactive forces of E-X-T [1].

Fundamentals of Electroceramics: Materials, Devices, and Applications, First Edition. R. K. Pandey. © 2019 The American Ceramic Society, Inc. Published 2019 by John Wiley & Sons, Inc. Companion website: www.wiley.com/go/Pandey/Fundamentals_Electroceramics

PRINCIPAL EFFECT

The three corners of the larger triangle are occupied by the agents E, X, and T, respectively. The smaller triangle has its corners labeled as electrical displacement (D), mechanical strain (x), and entropy (S). These six parameters form three groups that are (i) between electric field (E) and displacement (D); (ii) between stress (X) and strain (x); and (iii) between temperature (T) and entropy (S). They are called the three *principal effects*.

Principal effect No. 12 Permittivity (ϵ) is a fundamental property of all solids, but it plays a very special role in the field of dielectric materials like an oxide.

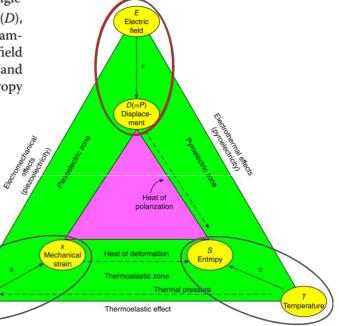
 $D = \epsilon E$

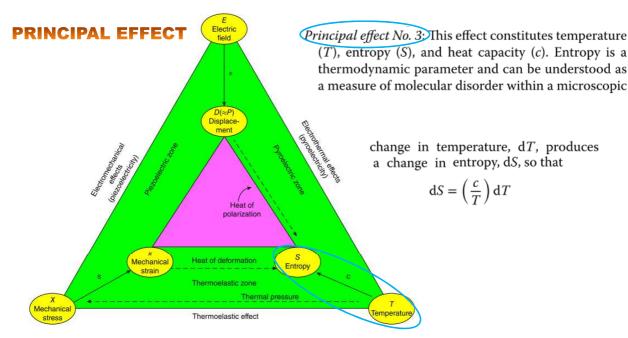
Since both *D* and E are first rank tensors, also be expressed as

 $D_i = \epsilon_{ij} E_j$

The relationship between displacement (*D*) and entropy (*S*) is called heat of polarization

Heckmann Diagram





The relationship between displacement (D) and entropy (S) is called heat of polarization and similarly between the strain (s) and entropy (S) it is called the heat of deformation.

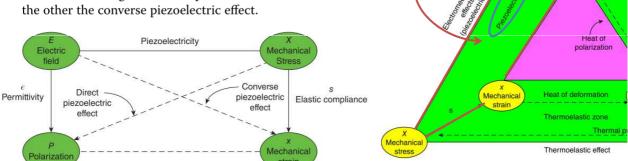
Fundamentals of Electroceramics: Materials, Devices, and Applications, First Edition. R. K. Pandey. © 2019 The American Ceramic Society, Inc. Published 2019 by John Wiley & Sons, Inc. Companion website: www.wiley.com/go/Pandey/Fundamentals_Electroceramics

COUPLED EFFECT

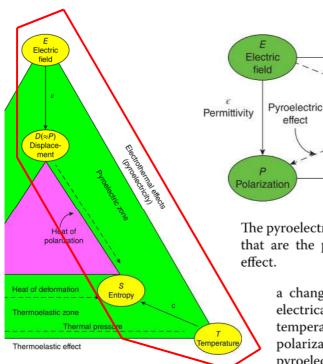
Besides these three *principal effects*, there are six secondary effects that form the group of *coupled effects*. They reside in the three zones identified in Figure 5.1 as the pyroelectric zone, the piezoelectric zone, and the thermoelastic zone. Each of these zones contains two *coupled effects*.

Piezoelectric Zone -

Figure 5.2 is the detailed version of piezoelectric zone. We see here that there are two types of piezoelectric effects: one being the direct piezoelectric effect, and the other the converse piezoelectric effect.



Pyroelectric Zone



polarization

The pyroelectric zone consists of the two coupled effects that are the pyroelectric effect and the electrocaloric effect.

Heat of

Electrothermal effects (Pyroelectricity)

T Temperature

Entropy

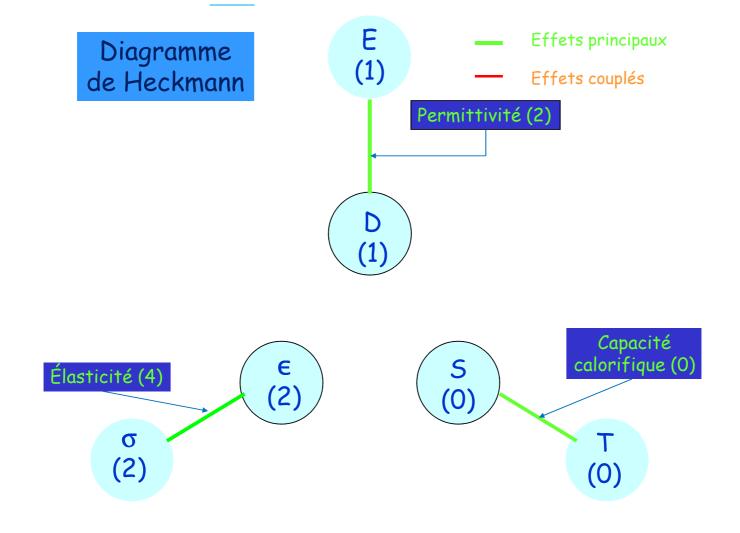
Heat capacity

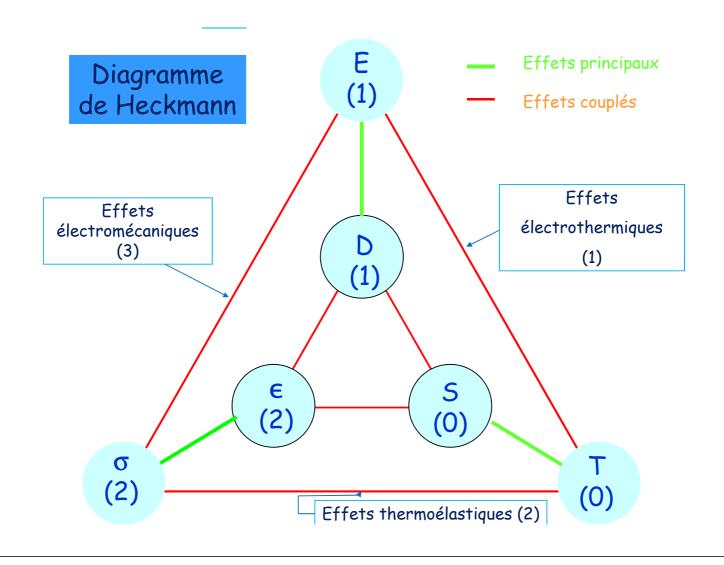
Electrocaloric

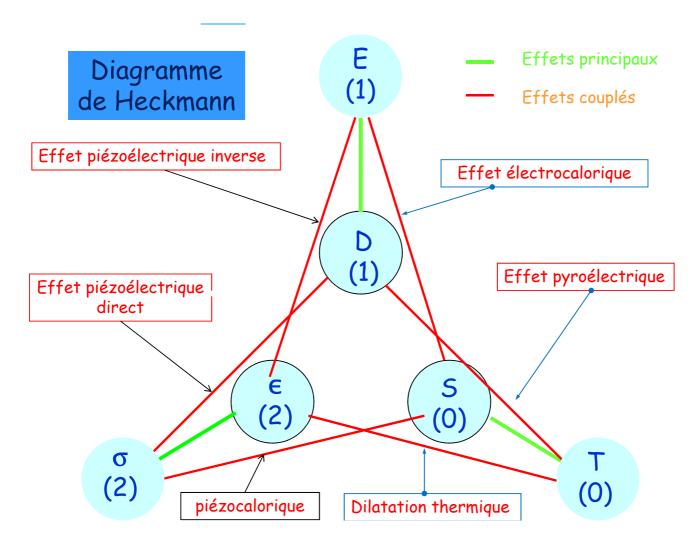
effect

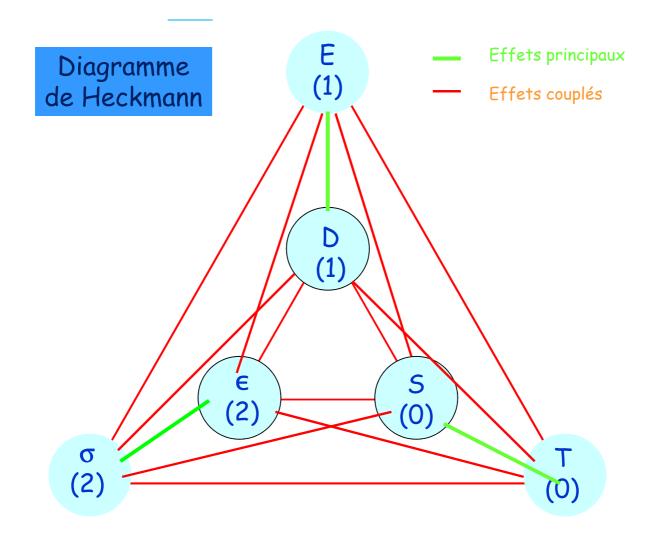
In pyroelectric materials, a change in temperature can induce a change in the electrical polarization. The relationship between the temperature gradient (dT) and the change in resulting polarization (dP) is linear with the coefficient being the pyroelectric coefficient, P(T). Mathematically expressed, it is given by Eq. (5.6).

$$dP_i = P_i(T)dT$$









Effets principaux

Variation de température dT → Variation d'entropie dS

$$dS = \frac{C}{T}dT$$

Capacité calorifique

Variation du champ électrique dE_j Variation du déplacement électrique dD;

$$dD_{i} = \epsilon_{ij}dE_{j}$$

Permittivité

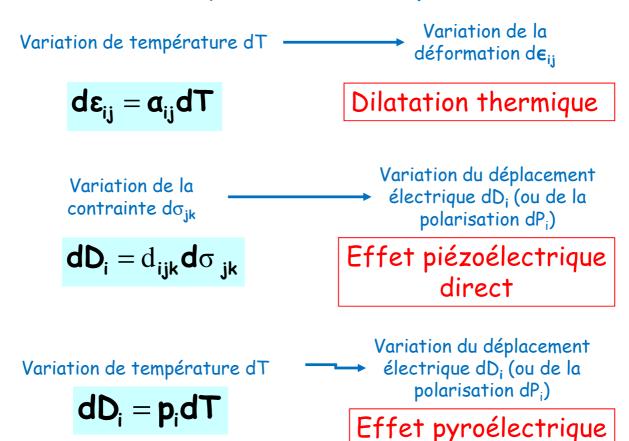
Variation de la contrainte $d\sigma_{kl}$

Variation de la déformation d ϵ_{ij}

$$d \in_{ij} = s_{ijkl} d\sigma_{kl}$$

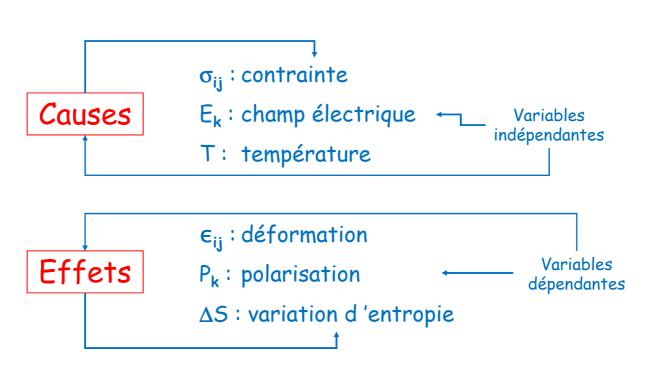
Elasticité

Quelques effets couplés



Un peu de thermodynamique

Dans un cristal



Un peu de thermodynamique (suite)

Enthalpie
$$G = H - TS - E_k P_k - \sigma_{ij} \epsilon_{ij}$$

libre
$$dG = -\epsilon_{ij} d\sigma_{ij} - P_k dE_k - S dT$$

Le système est complètement
$$G$$
 est une fonction d'état défini par σ , E et T

$$dG = - \mathbf{\epsilon}_{ij} \ d\sigma_{ij} - P_k \ dE_k - S \ dT = (\partial G/\partial \sigma_{ij})_{E,T} \ d\sigma_{ij} + (\partial G/\partial E_k)_{\sigma,T} \ dE_k + (\partial G/\partial T)_{\sigma,E} \ dT$$

$$(\partial G/\partial \sigma_{ij})_{E,T} = - \mathbf{\epsilon}_{ij} \qquad (\partial G/\partial E_k)_{\sigma,T} = - P_k \qquad (\partial G/\partial T)_{\sigma,E} = - S$$

Un peu de thermodynamique (suite et fin)

Pour les cristaux, la plupart de ces grandeurs sont des grandeurs tensorielles traduisant leurs propriétés

Les propriétés des cristaux sont liées à leur symétrie

Principe de Neumann

Les éléments de symétrie de toute propriété physique d'un cristal doivent contenir les éléments de symétrie du groupe ponctuel du cristal