Matériaux: de la chimie aux propriétés

Série N° 5 — Semaine du 7 Octobre 2024 Structure des matériaux/Elasticité

1. Vrai o	u faux	?
-----------	--------	---

		Vrai	Faux
a.	Un polymère thermodurcissable contient des liaisons covalentes entre les chaines qui empêchent le matériau de fondre lorsqu'il est chauffé (si on chauffe trop il finit par se dégrader).		
b.	Les céramiques ont tendance à former des structures plus complexes et difficiles à cristalliser que les métaux.		
c.	La masse molaire d'un polymère dépend du type d'atomes qui le forment, mais pas du degré de polymérisation.		
d.	Un atome interstitiel va se placer dans des positions bien définies qui dépendent de la structure de la maille cristalline.		
e.	La déformation est le rapport de deux longueurs et est donc sans dimension. La contrainte quant à elle a la dimension d'une pression, soit une force par unité de surface.		
f.	Si le module d'Young d'un matériau est grand, cela signifie qu'il est très résistant à la rupture.		
g.	Lors d'une déformation élastique linéaire, le volume du matériau est toujours conservé.		
h.	Le réseau cristallin cubique face centrées correspond à un assemblage d'atomes plus compact que le réseau cubique centré.		
i.	Le module d'Young d'un polymère est en général très inférieur à celui d'une céramique.		

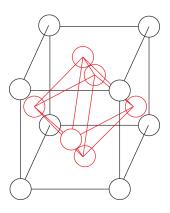
2. Fer et acier

a. Le fer subit une transformation en phase solide à 912 °C, en passant du système cubique centré (CC) de la ferrite plus stable en dessous de cette température au système cubique à faces centrées (CFC) de l'austénite, plus stable au dessus de cette température. Sachant que les rayons respectifs des atomes de fer dans la maille CC et de fer dans la maille CFC sont égaux à 0.124 nm et 0.127 nm respectivement, calculer

Matériaux: de la chimie aux propriétés

la variation relative de la densité du Fer lors de cette transformation. On donne la masse molaire du Fe=56g/mol. $R\acute{e}ponse: 1.5\%$

b. Pour produire de l'acier, le fer est additionné de carbone, celui-ci occupant des sites interstitiels dans le cristal de fer. Calculer le rayon maximal de la sphère pouvant être insérée dans l'interstice octaédrique de la structure CFC du fer. Pour vous aider, la figure ci-contre montre la maille CFC et l'emplacement de l'espace interstitiel, mais attention, les sphères qui représentent les atomes ne sont pas à l'échelle. Vous pouvez commencer par dessiner un plan (200) et voir comment les atomes y sont répartis, sachant que les 4 atomes de Fe dans ce plan se touchent. Réponse: 0.053 nm

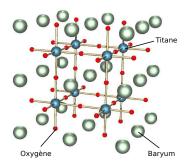


- c. Sachant que l'interstice tétraédrique de la structure CC du fer peut contenir une sphère de rayon maximal de 0.036 nm, que peut-on en déduire au sujet de la solubilité du carbone (donc la facilité avec les atomes de carbone pourront se glisser dans les mailles du fer) dans ces deux structures? Le rayon de l'atome de carbone est d'environ 0.077 nm.
- d. Facultatif : Calculez le rayon de l'interstice tétraédrique pour la structure CC, sachant que dans cette structure, les sites interstitiels se trouvent en position $(0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{4}).Réponse:0.036\,nm$

3. Structure d'une céramique

Le titanate de baryum est un oxyde de baryum et de titane. Il cristallise dans une structure particulière appelée pérovskite. Découvert à la fin des années 40, il est le premier oxyde ferroélectrique simple connu et reste aujourd'hui un matériau modèle pour l'étude de la ferroélectricité. La structure du titanate de baryum (présentée dans les notes de cours) est schématisée ci-dessous, avec une maille dessinée avec les atomes de titane a chaque coin.

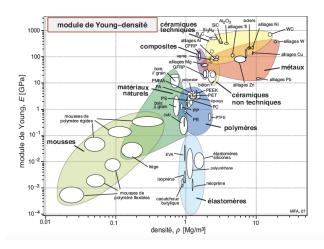
- a. Quelle est la formule brute du titanate de Baryum (et donc le motif de la maille)? Pour vous aider, vous pouvez délacer l'origine de la maille sur un atome de baryum.
- b. Représentez schématiquement la structure des atomes dans les plans (100), (200), (110) et (111), en prenant l'origine du repère sur un atome de baryum.
- c. Calculez le paramètre de maille a, sachant que la masse volumique vaut $\rho=6000\,{\rm kg\,m^{-3}}$ et que les masses atomiques du Ti, du Ba et de ${\rm O_2}$ valent respectivement $48\,{\rm g\,mol^{-1}}$, $137\,{\rm g\,mol^{-1}}$ et $32\,{\rm g\,mol^{-1}}$. Réponse :4Å



4. Cable de treuil

Le cable d'un treuil en acier a une section utile de $20mm^2$. Il doit être utilisé pour soulever une charge de $200 \mathrm{kg}$.

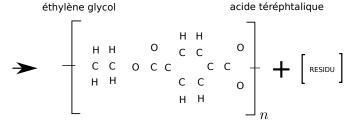
- a. Calculez la contrainte dans la section du cable lors de la traction de la charge de $200 \text{kg.} R\acute{e}ponse: 98.1 MPa$
- b. Le module d'Young de l'acier est E=210GPa, calculez quelle est la déformation du cable, et son allongement si il a une longueur initiale de 1m. Réponse pour l'allongement :0.46mm



- c. Ceci dit, l'acier à une masse volumique assez élevée, et on aimerait réduire la masse du cable car ce treuil est destiné à être installé sur un véhicule dont on voudrait minimiser la masse totale. Cherchez sur la carte d'Ashby quel matériau pourrait être équivalent en termes de rigidité spécifique, il faut donc trouver les matériaux qui ont un rapport E/ρ similaire.
- d. Quel autre critère devrait on prendre en compte pour choisir un matériau alternatif?

5. Polyéthylène téréphtalate (PET)

Le polyéthylène téréphtalate est obtenu par réaction entre de l'éthylène glycol $(C_2H_6O_2)$ et de l'acide téréphtalate $(C_8H_6O_4)$.



Poly(éthylène téréphtalate)

- a. Complétez la réaction du PET avec les liaisons appropriées (simples et doubles) et indiquez le résidu de la réaction.
- b. Calculez la masse molaire d'un monomère.
- c. La production de 10^3 bouteilles en plastique de 10 g chacune se fait avec du PET ayant un degré de polymérisation n=250. Calculez la masse totale de résidu qui est libérée lors de l'élaboration du PET. Réponse :1.8kg

6. Calcul théorique du module d'élasticité- à faire si vous avez encore le temps, sinon à faire à l'occasion ou pendant les révisions...

On considère les liaisons atomiques décrites par le potentiel de Lennard-Jones :

$$V = \varepsilon_0 \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right]$$

Petite note, attention, ici, r_0 est la distance d'équilibre entre 2 atomes (et non pas le rayon d'un atome comme dans l'exercice 2). Pour un réseau cubique simple d'atomes de paramètre de maille $a=2\,\text{Å}$ interagissant entre eux avec un tel potentiel, calculez le module d'élasticité E correspondant. Pour cela, il faut procéder par étapes :

- a. Calculez d'abord la force exercée par un atome sur l'autre en fonction de la distance le long d'une arête de la maille cubique (calcul déjà fait dans d'autres exercices).
- b. A partir de cette force, calculez la contrainte correspondante que l'on doit exercer pour séparer les atomes, en prenant l'hypothèse que la surface du cube sur laquelle s'applique cette force est aussi un carré de coté a.

Propédeutique V. Michaud Automne 2024 **Matériaux: de la chimie aux propriétés** IMX

c. Le module d'élasticité est la pente, prise au point de position $r_0=a$, de la courbe contrainte-déformation, donc finalement la dérivée, prise au point r_0 , de la courbe, soit $E=\frac{d\sigma}{d\varepsilon}\big|_{r_0}$. On vient de calculer la contrainte, on peut estimer la déformation selon une direction [100] du cristal comme un incrément de déplacement δr , divisé par r.

d. Si on prend comme hypothèse que $\varepsilon_0 = 1eV$ et $r_0 = a$, calculez la valeur du module théorique ainsi obtenu. Comparez la valeur avec ce que l'on trouve sur le diagramme d'Ashby. Qu'en pensez-vous? Pour mémoire, $1eV = 1.6 \ 10^{-19} \ J$.