Corrigé N° 4 — Semaine du 29 septembre 2025

Structure des matériaux

1. Vrai ou faux ?

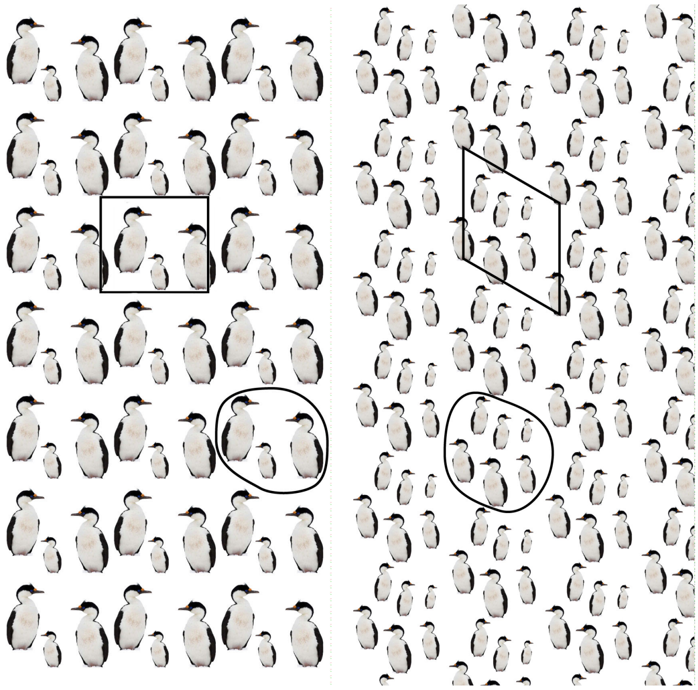
	Vrai	Faux
a. Mis à part quelques exemples de matériaux refroidis très rapidement qui ont la structure interne d'un liquide figé, les métaux à l'état solide sont en général formés d'atomes en arrangement régulier (ordre à longue distance). *Vrai : voir les transparents du cours.*	✓	
b. Les 14 réseaux de Bravais permettent de décrire toutes les structures cristallines connues à ce jour. *Vrai : voir cours, c'est une nomenclature héritée des minéralogistes qui ont classifié les structures rencontrées dans la nature, mais cela correspond aussi à un formalisme mathématique, qui postule que dans un réseau tridimensionnel, il existe une famille de 3 vecteurs, formant une maille primitive, telle que tout point du réseau peut s'exprimer comme une unique combinaison linéaire de ces 3 vecteurs.*	✓	
c. Dans une structure cristalline cubique, toutes les droites appartenant à un plan (hkl) sont orthogonales à la direction [hkl]. *Vrai : la direction [hkl] est orthogonale au plan (hkl), donc à toute droite qui se trouve dans ce plan.*	✓	
d. Dans une structure cubique, le plan (110) est parallèle au plan (010). *Faux : le plan (110) est une diagonale du cube, et le plan (010) est une face du cube.*		✓
e. Si je prends une canette de soda de 300cc et que je remplace le liquide par de l'or solide, la masse de cette canette, au lieu d'être environ 300g avec le liquide, sera de l'ordre de 5.8kg. *Vrai : la masse volumique de l'or est de* $19.3 g/cm^3$*, et le volume de la canette est de* $300 cm^3$*, donc la masse de l'ensemble sera :* $19.3 g/cm^3 \cdot 300 cm^3 = 5790 g$.	✓	

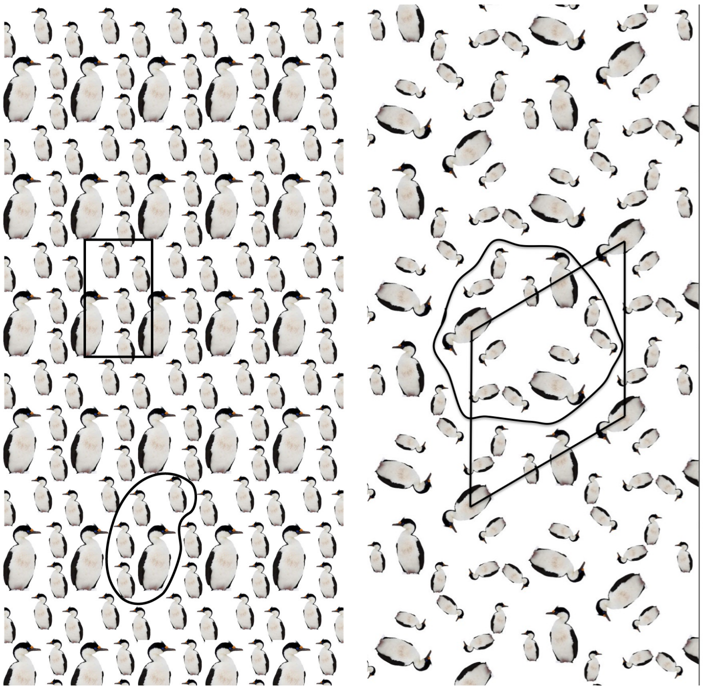
	Vrai	Faux
f. Pour caractériser la structure cristallographique d'un matériau, il faut utiliser des rayons X de longueur d'onde comparable à la distance caractéristique entre les atomes de ce matériau, soit de l'ordre de 0.1 nm (ou 1 Å $= 10^{-10}$m). *Vrai : Il faut bien se souvenir des ordres de grandeurs dans la matière : la distance entre atomes et entre plans d'atomes est de l'ordre de l'Angstrom, et c'est aussi la longueur d'onde des rayons X qui permettent d'interagir avec les plans cristallins.*	✓	
g. Une structure monocristalline (tout l'échantillon est formé d'un seul cristal) donnera un schéma de diffraction sous la forme de points distincts. *Vrai :dans un monocristal, on a une seule orientation par plans, donc chaque plan donnera un point, et on aura plusieurs points sur le même cercle qui correspondent à une famille de plans. Dans un polycristal les plans sont orientés dans diverses directions, on obtient alors des cercles concentriques qui correspondent chacun à un type de plan.*	✓	
h. Si un faisceau monochromatique de rayons X est incident sur plusieurs couches d'atomes espacées régulièrement d'une longueur d, l'angle de diffraction augmente lorsque d augmente*Faux : l'angle diminue quand la distance d augmente, voir la loi de Bragg.*		✓

2. **Motif et réseau en 2D** Le cormoran impérial est un oiseau de mer qui habite les régions australes, de la Patagonie à la péninsule Antarctique. Il vit en colonies de plusieurs milliers d'oiseaux qui sont parfois tellement denses qu'elles forment une structure qui peut s'assimiler à un réseau cristallin.

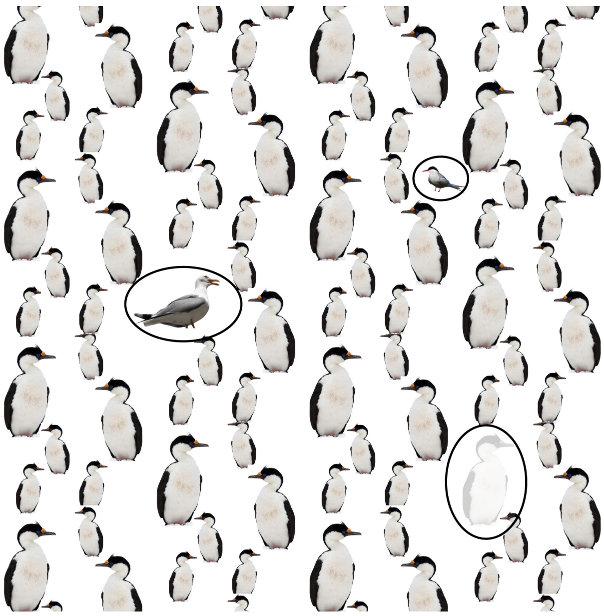
Colonie de la Isla Chata, près de Puerto Deseado en Patagonie.
©http ://www.patagonia-incognita.org

a. Dans les colonies (réseaux) de cormorans ci-dessous, trouvez le motif et entourez le, et dessinez la maille élémentaire (les trois premières sont assez faciles, la dernière image est facultative pour les mordus...). Réponse : Les réseaux sont de type (dans l'ordre) : carré, oblique, rectangulaire et oblique. Le motif du 4ieme contient 3 sous-motifs identiques obtenus par rotation. Mais pour conserver un motif qui se déplace par translation, il faut prendre le motif qui contient les 3 sous-motifs.



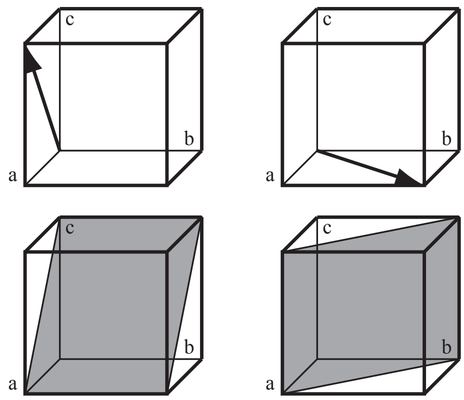


b. Trouver et identifier trois défauts présents dans la colonie (réseau) de cormorans ci-dessous. Comment pourrait-on appeler ce type de défauts (ca sera dans le cours 4.2 !) ? Les trois défauts sont : un goéland substitutionnel (à la place d'un cormoran), une sterne arctique interstitielle (entre les cormorans) et une lacune (un cormoran qui manque).

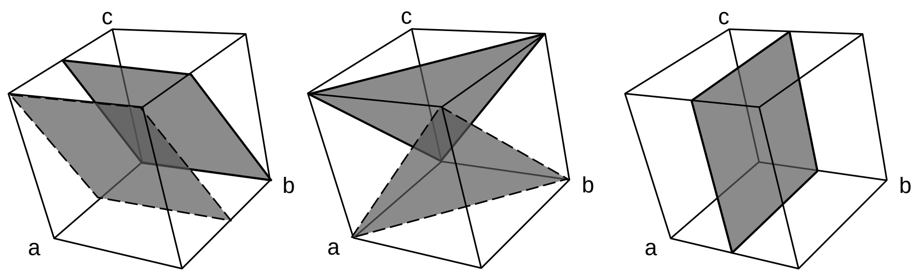


3. Indices de Miller

a. Dessinez les directions [101] et [110] ainsi que les plans (101) et (110) dans les cubes ci-dessous. Voir le dessin ci-dessous avec les directions [101] et [110] ainsi que les plans (101) et (110) .



b. On considère les plans marqués en gris dans les mailles cubiques simples données ci-dessous. Donnez les indices de Miller $(hk\ell)$ correspondants pour chacun de ces plans. Les indices de Miller $(hk\ell)$ correspondants pour chacun de ces plans sont donnés ci-dessous.

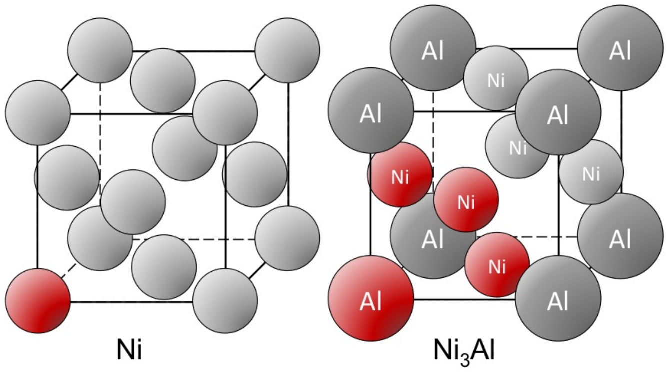


$(20\bar{1})$ $(11\bar{1})$ (020)

4. Alliages de nickel pour les aubes de turbines

Les aubes de turbines des étages les plus chauds d'un moteur d'avion ou d'une turbine à gaz sont faits à partir d'un alliage à base de nickel et de beaucoup d'autres éléments (Al, Ti, W, Re, etc). Nous simplifions le problème en considérant qu'il s'agit d'un alliage fait de Ni et Al. Par un traitement thermique adéquat, une deuxième phase se forme à l'intérieur du nickel sous forme de très petits précipités (typiquement quelques centaines de nm). Cette phase correspond à une structure ordonnée Ni_3Al. Les deux structures cristallographiques sont représentées ci-dessous. On donne aussi la masse molaire des atomes de Al et Ni, respectivement de 27 et 58.8 g/mole. On demande de répondre aux questions suivantes, qui pour certaines demandent un peu de réflexion (en préparation du cours 4.2 de jeudi) :

a. Quels sont le réseau et le motif pour le Ni et pour le Ni_3Al ? Le réseau du nickel est cubique à faces centrées et le motif est constitué d'un seul atome répété sur les noeuds du réseau. Pour Ni_3Al, le réseau est cubique simple car les atomes sur les faces ne sont pas de même nature que ceux situés sur les sommets du cube. Le motif est alors constitué d'un atome Al (sur un des sommets), avec 3 atomes de Ni sur les faces attenantes du cube (mis en rouge). Pour identifier le réseau cristallin (avant le motif), il faut prendre les atomes de même nature.



b. Combien d'atomes en propre sont contenus dans la maille de base du Ni et Ni_3Al ? Pour cela, il vous faudra compter les atomes présents sur le dessin, mais considérer que certains sont partagés avec d'autres mailles, donc ne comptent que pour une partie dans le cube dessiné ici. Dans la maille du nickel, nous avons 8 atomes sur les sommets, mais chaque atome appartient aussi aux 4 mailles au dessus et 3 mailles autour. Donc, $8 \times (1/8) = 1$, donc un seul atome compte pour les sommets. Il y a en plus 6 atomes sur les faces, mais appartenant également chacun à une maille voisine, donc $6 \times (1/2) = 3$, soit 3 atomes en propre. Au total, nous avons donc 4 atomes propres à la maille de Ni. Pour Ni_3Al, on procède de même. Il y aura donc un seul atome de Al et 3 atomes de Ni par maille, ce qui donne bien le composé Ni_3Al que l'on retrouve à la fin.

c. Sachant que les paramètres de maille (c'est à dire la longueur du coté du cube) du nickel et de Ni_3Al sont presque les mêmes ($a = 3.52$ Å), calculez la masse volumique de chacune de ces phases. Connaissant les masses molaires M_{Al} et M_{Ni}, pour trouver la masse volumique, il suffit de calculer la masse atomique en divisant par le nombre d'Avogadro, puis de multiplier par le nombre d'atomes propres à la maille et finalement diviser par le volume de la maille. On a donc pour le nickel :

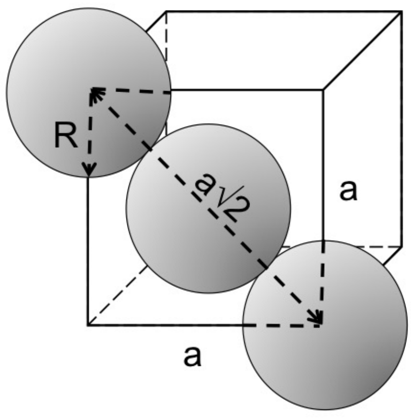
$$\rho_{Ni} = \frac{4 \times M_{Ni}}{N_A \times a^3} = \frac{4 \times 0.0588}{6.02 \cdot 10^{23} \times (3.52 \cdot 10^{-10})^3} = 8958 \text{ kg/m}^3$$

Et pour Ni_3Al :

$$\rho_{Ni_3Al} = \frac{3 \times M_{Ni} + M_{Al}}{N_A \times a^3} = 7735 \text{ kg/m}^3$$

Et pour info, la densité est simplement la masse volumique divisée par celle de l'eau, $\rho_{eau} = 1000$ kg/m^3, et donc la densité du Nickel est de 8.958 et celle de Ni_3Al est de 7.735.

d. Question en plus facultative (car on verra cela en cours 4.2) : En considérant que le cristal de Ni est un empilement compact de sphères dures, le long de quelles directions cristallographiques vont-elles se toucher ? Quel sera alors leur rayon par rapport au paramètre de maille ? Pour cela il faut considérer que les sphères dessinées ici sont trop petites (pour mieux voir où elles sont situées) et considérer qu'elles peuvent être grossies toutes de manière identique jusqu'à ce qu'elles se touchent sur une direction donnée (qui est la direction dense). Si le cristal de nickel est assimilé à un ensemble compact de sphères dures, elles vont se toucher selon les diagonales des faces, soit des directions $\langle 110 \rangle$. Or la diagonale d'une face de la maille vaut $\sqrt{2}a$ et sera égale à la somme du diamètre de la sphère au milieu de la face et des deux rayons des sphères situées sur les sommets, donc $4R$. Le rayon de la sphère dure vaudra donc $R{=}a\sqrt{2}/4{=}a/(2\sqrt{2})$.



5. **Or**
A température ambiante, l'or a une structure cristalline cubique à faces centrées. Vous avez lu quelque part que son paramètre de maille est de 408 pm. Vous proposez de faire des expériences de diffraction pour vérifier la valeur du paramètre de maille.

   a. On dispose d'une source de rayon X de longueur d'onde $\lambda = 1.5418\,\text{Å}$. Calculer l'angle attendu pour la réflection par les plans (001) et (200) en considérant que seulement le premier ordre (n=1) va diffracter. On calcule les angles à l'aide de la loi de Bragg en considérant les diffractions de premier ordre ($n = 1$) :

$$\lambda = 2d_{hkl}\sin\theta$$

$$\sin\theta = \frac{\lambda}{2d_{hkl}} = \frac{\lambda}{2a_0}\sqrt{h^2+k^2+l^2}$$

   D'où on tire :

$$\theta_{(001)} = 10.89^\circ$$

$$\theta_{(200)} = 22.20^\circ$$

   En toute rigueur, (et merci à l'un des étudiants d'avoir remarqué cela), on ne devrait pas avoir de réflexion pour le plan (001) pour un cubique face centré, ce plan donne lieu a une extinction, et donc il aurait fallu répondre qu'il n'y a pas de réflexion en ce plan...Mais nous n'avons pas vu cela en cours, donc j'aurais du proposer un autre plan, comme (111) qui marche. Seuls les plans qui ont des indices tous pairs ou tous impairs peuvent mener a une réflexion des rayons X pour la structure CFC, du fait de symétries dans les mailles qui donnent lieu à des interférences destructives.

   b. Après l'expérience, au lieu des points de diffraction des deux familles de plans, vous trouvez des cercles sur l'écran de projection. Pourquoi ? C'est parce qu'il s'agit d'un échantillon polycristallin, ou bien plus probablement d'une poudre de petits cristaux d'or. Dans la poudre, les cristallites sont orientées de façon aléatoire et seules celles ayant des plans (hkl) satisfaisant la loi de Bragg avec une normale $\vec{n}$ faisant un angle $(90^\circ - \theta)$ avec le faisceau incident vont diffracter. Cela définit un cône d'ouverture 2θ ayant comme axe le faisceau incident. Les rayons ainsi diffractés ressortent de l'échantillon selon ce cône et forment des cercles sur un écran de projection.

   c. En retrouvant les valeurs des angles sur l'écran de projection, vous trouvez que l'angle pour la famille de plan (001) est de 11.65°. Quelle est alors la valeur plus précise du paramètre de maille, selon vos observations ? On sait que l'angle pour la famille de plan (001) est de 11.65°. Or refait alors le calcul précédent, mais cette fois on connait θ et on retrouve a=382 pm.