Corrigé N° 5 — Semaine du 6 Octobre 2025

Structure des matériaux, élasticité

1. Vrai ou faux ?

		Vrai	Faux
a.	Un atome insterstitiel est un atome qui peut venir se mettre à la place d'un atome existant dans la structure cristalline. *Faux : un atome interstitiel vient se loger dans un espace, un interstice entre des atomes de la maille. C'est l'atome substitutionnel qui vient se mettre à la place d'un autre, formant ainsi une substitution.*	☐	✓
b.	Dans l'acier, le carbone forme le solvant et le fer forme le soluté.*Faux : c'est le contraire, car dans l'acier, le fer forme la majeure partie de l'alliage.*	☐	✓
c.	La masse molaire d'un polymère dépend du type d'atomes qui le forment, mais aussi du degré de polymérisation. *Vrai : la masse molaire d'un polymère dépend du nombre total d'atomes qui forment une molécule, donc du degré de polymérisation. C'est pour cela qu'on peut avoir des masses molaires de l'ordre de milliers de gramme par mole.*	✓	☐
d.	La déformation est le rapport de deux longueurs et est donc sans dimension. La contrainte quant à elle est le rapport de deux forces, et est aussi sans dimension. *Faux : voir les définitions au cours. La phrase est vraie pour la déformation, mais fausse pour la contrainte, qui est le rapport d'une force par une surface et donc en Newton par mètre carré (connu sous le nom de Pascal).*	☐	✓
e.	Si le module d'Young d'un matériau est grand, cela signifie qu'il est très résistant à la rupture. *Faux : si le module d'Young d'un matériau est grand, cela signifie qu'il est très rigide. La résistance représente la contrainte maximale à laquelle le matériau va soit casser, soit se déformer de manière irréversible (plastiquement, par exemple).*	☐	✓
f.	Lors d'une déformation élastique linéaire, la variation de volume du matériau dépend de la valeur de la déformation et du coefficient de Poisson. *Vrai : voir les transparents du cours.*	✓	☐

	Vrai	Faux
g. Le module d'Young d'un polymère est en général très inférieur à celui d'une céramique. *Vrai : voir diagrammes d'Ashby. Pour un polymère on est dans la gamme de quelques MPa à quelques GPa, alors que pour une céramique, on est dans la gamme de quelques centaines de GPa.*	✓	
h. Un fakir de 60 kg peut tranquillement s'endormir sur un lit de 1000 clous (de surface de contact 0.3 mm^2 chacun) sans risquer de se percer la peau (résistance maximale de la peau : 2.5 MPa, l'accélération de la gravité g = 10 m.s^{-2}). *Vrai : Il peut dormir tranquille mais il ne doit pas s'assoir ! On doit simplement vérifier que la contrainte sur la peau est inférieure à sa résistance maximale. La surface de contact totale est donnée par* $S = n_{clous} \cdot S_{clous} = 1000 \cdot 3{\cdot}10^{-7} = 3{\cdot}10^{-4}$ m^2 *(en prenant soin de transformer la surface en mètre carré). La contrainte est donc*	✓	

$$\sigma = mg/S = (60 \times 10)/(3.10^{-4}) = 2\,\text{MPa} < 2.5\,\text{MPa}$$

2. **Atomes interstitiels**

Un atome de Fe a un rayon de 0.127 nm dans la structure CFC. Calculez le rayon maximal que peut avoir un atome interstitiel dans un site octaédrique sans déformer le réseau. Sachant que le rayon d'un atome de Carbone, qui est un des éléments d'alliage bien connu du fer, est d'environ 0.077 nm, est ce que celui-ci va déformer la maille si il entre comme interstitiel ?

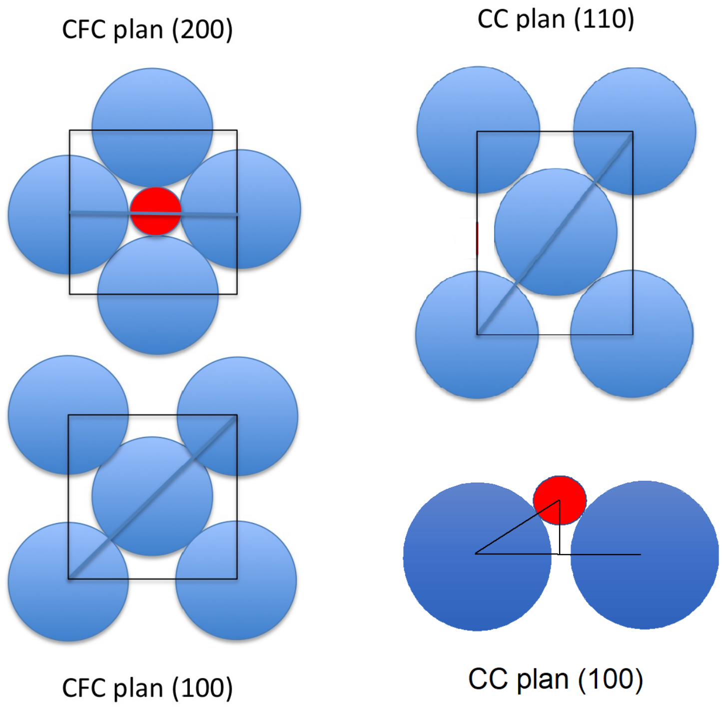
Facultatif : Calculez ce même rayon pour la structure CC, sachant que dans cette structure, le rayon d'un atome de Fe est 0.124 nm et que les sites interstitiels sont les sites tétraédriques qui se trouvent en position ($0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{4}$).

Solution : Les atomes interstitiels, pour CFC et CC peuvent occuper les sites montrés à la figure ci-dessous en rouge. (sites octaédriques pour CFC et sites tétraédriques pour CC). Si on considère un plan (200), on constate que dans la structure CFC le rayon maximal d'un atome interstitiel r_i satisfait la relation :

$$2r_{i,CFC} + 2r_{0,CFC} = a = 2\sqrt{2}r_{0,CFC}$$

Dans la structure CFC, les atomes se touchent suivant la diagonale d'une face (voir le plan (100)), de longueur $\sqrt{2}a = 4r_{0,CFC}$, donc $a = 2\sqrt{2}r_{0,CFC}$. On a donc :

$$r_{i,CFC} = r_{0,CFC}(\sqrt{2} - 1) = 0.414r_{0,CFC} = 0.053\,\text{nm}$$



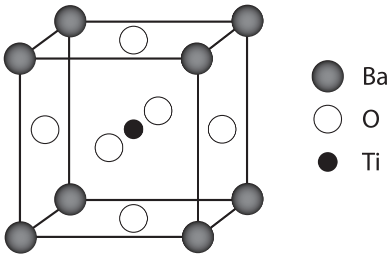
Donc l'atome de carbone, qui est plus grand que l'espace interstitiel, va déformer la maille si il se place à cet endroit, et créer quelques distortions. On verra plus tard que celui-ci aura donc une solubilité assez faible dans un cristal CFC (on verra plus tard que l'on peut monter a 1.2%, et au max à 2.1% à haute température)) et encore plus faible dans une structure CC (pour laquelle on peut monter à 0.022% de carbone). Dans la structure CC, dans le plan (100) on a :

$$r_{i,CC} + r_{0,CC} = \sqrt{\left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{4}\right)^2}\, a$$

Dans un plan (110), les atomes de fer se touchent suivant la diagonale du cube, de longueur $\sqrt{3}a = 4r_{0,CFC}$, donc $a = 4/\sqrt{3}r_{0,CC}$. On obtient :

$$r_{i,CC} = \left(\sqrt{\frac{5}{3}} - 1\right) r_{0,CC} = 0.29 r_{0,CC} = 0.036\,\mathrm{nm}$$

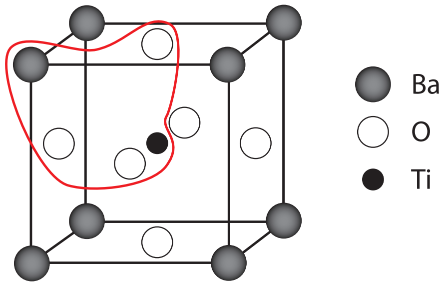
3. **Structure des céramiques**
La structure du titanate de baryum ($BaTiO_3$) est schématisée ci-dessous. Le titanate de baryum est un oxyde de baryum et de titane. Découvert à la fin des années 40, il est le premier oxyde ferroélectrique simple connu et reste



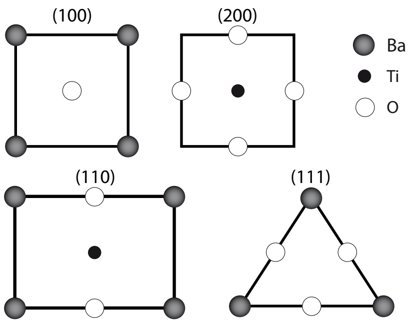
aujourd'hui un matériau modèle pour l'étude de la ferroélectricité. De plus, il ne contient pas de Plomb comme les céramiques piézoélectriques PZT et est donc à priori moins nocif pour l'environnement.

a. Quel est son réseau cristallographique ? Il s'agit d'une structure cubique simple.

b. Entourez le motif.



c. Dessinez comment sont positionnés les atomes dans les plans (100), (200), (110) et (111).



d. Calculez le paramètre de maille a, sachant que la masse volumique du $BaTiO_3$ vaut $\rho = 6000\,\mathrm{kg\,m^{-3}}$.

Réponse : La masse volumique est donnée par la masse des atomes de la maille, divisée par le volume de la maille, et donc le paramètre de maille est calculé par la racine cubique du volume :

$$a = \sqrt[3]{\frac{1 \cdot 0.137\,\mathrm{kg\,mol^{-1}} + 1 \cdot 0.048\,\mathrm{kg\,mol^{-1}} + 3 \cdot 0.016\,\mathrm{kg\,mol^{-1}}}{6.02 \times 10^{23}\,\mathrm{atomes\,mol^{-1}} \cdot 6000\,\mathrm{kg\,m^{-3}}}} \simeq 4\text{Å}$$

4. **Le polyéthylène**

Un polyéthylène (PE) d'une masse molaire de $150\,000\,\mathrm{g\,mol^{-1}}$ a été obtenu par polymérisation. On donne les masses atomiques (molaires) : C $12\,\mathrm{g\,mol^{-1}}$, H $1\,\mathrm{g\,mol^{-1}}$

a. Calculez son degré de polymérisation, c'est-à-dire le nombre de monomères dont une chaîne est constituée. Pour déterminer le degré de polymérisation, il faut connaître le nombre de blocs dont la chaîne est constituée. Dans ce cas, il suffit donc de diviser la masse molaire de la chaîne M_n par la masse molaire du monomère M_m. Pour le PE, le monomère est constitué de deux atomes de carbone et quatre atomes d'hydrogène. Sa masse molaire est donc donnée par :

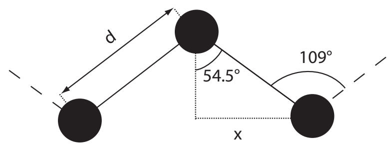
$$M_m = 2M_\mathrm{C} + 4M_\mathrm{H} = 2 \times 12\,\mathrm{g\,mol^{-1}} + 4 \times 1\,\mathrm{g\,mol^{-1}} = 28\,\mathrm{g\,mol^{-1}}$$

On trouve donc pour le degré de polymérisation :

$$n_\mathrm{PE} = \frac{M_n}{M_m} = \frac{150\,000\,\mathrm{g\,mol^{-1}}}{28\,\mathrm{g\,mol^{-1}}} = 5357$$

b. En admettant que les liaisons C-C sont dans une conformation zigzag plane et que l'angle de liaison entre les atomes de carbone est égal à 109° pour respecter l'hybridation sp^3, calculez la longueur d'une de ces chaînes de PE. On vous donne la longueur de la liaison covalente entre les atomes de carbone, qui est de 0.154 nm.

Afin de calculer la longueur des chaînes, il faut considérer la géométrie des liaisons :



Dans le plan du zigzag, on sait que :

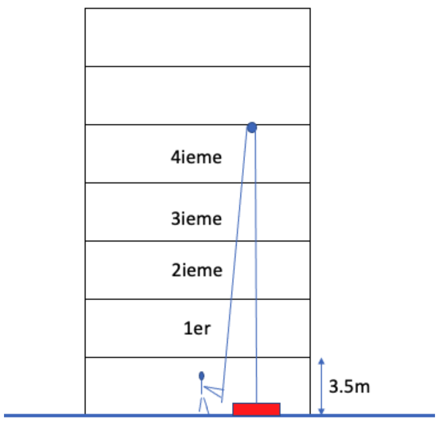
$$x = d \sin(54.5°)$$

Une chaîne de PE polymérisée à partir de 5357 monomères contient en fait le double de liaisons C-C puisque le monomère lui-même en contient déjà une. Elle aura donc une longueur de :

$$L_{\mathrm{PE}} = x \times (2n-1) = 0.154\,\mathrm{nm} \times \sin(54.5°) \times 2 \times 5357 = 1343\,\mathrm{nm} = 1.34\,\mu\mathrm{m}$$

Remarquez que pour n grand, on simplifie en disant que 2n-1 est a peu près égal à 2n.

5. **Corde pour une poulie**
Venant d'emménager au 4ème étage d'un immeuble sans ascenseur, vous décidez d'acheter et d'installer une poulie pour monter vos affaires par le balcon. Au magasin, il ne reste plus qu'une cordelette en nylon de diamètre 4 mm et de longueur 40 mètres. On vous donne la limite d'élasticité, c'est à dire la valeur maximale de contrainte que l'on peut avoir pour rester dans le cadre d'une déformation réversible, qui est de 60 MPa et le module d'élasticité est de 3 GPa, et le coefficient de Poisson ν est de 0.35. On va simplifier en négligeant la hauteur de la charge et de la personne qui tire la corde, et aussi on ne tient pas compte de l'angle potentiel de la corde avec la verticale (les deux bouts de corde parallèles et selon la direction de la gravité, qu'on prendra égale a $10ms^{-2}$).



a. Pouvez-vous utiliser cette cordelette sachant que vous vous limiterez à des charges de 100 kg et que la hauteur d'un étage est de 3,5 mètres ? Pour cela, regardez si la corde est assez longue pour faire un aller retour entre le trottoir et le plafond du 4 ième étage, puis calculez d'abord la force, ensuite la contrainte dans la corde avec la charge de 100kg et comparer à la contrainte max autorisée.

La cordelette est suffisamment longue pour faire un aller-retour jusqu'au plafond du 4ème étage de l'immeuble : $h = 3,5$ m $\times$ (4étages $+$ 1RDC) $= 17,5$ m, pour un aller, et donc pour l'aller -retour, on a besoin de 35m.
La force appliquée est $F = mg = 100kg * 10ms^{-2} = 1000N$. La contrainte est alors $\sigma = F/S = 1000/(\pi 2^2) = 79.6N/mm^2 = 79.6MPa$.
Sachant que la charge donnera lieu à une contrainte plus grande que la limite d'élasticité du matériau, je ne pourrai pas lever des charges de 100kg sans risquer de déformer plastiquement (ou peut être rompre) la cordelette. Façon alternative de calculer cela : La charge maximale avant plastification sera de :
$60 \times 10^6 N/m^2 \times 3 \times (4 \times 10^{-3})^2/4 = 720$ N
Cette valeur étant inférieure aux 1000 N désirés, une charge de 100 kg entraînerait un début d'endommagement du nylon (la cordelette ne reviendrait pas tout à fait à sa longueur d'origine une fois déchargée).

b. Avant de charger avec 100 kg, vous testez votre construction avec une charge moitié de 50 kg. Calculez la déformation, et l'allongement de la corde de nylon, sachant que vous considérez une longueur de corde de 35 mètres entre la personne en bas, la poulie en haut et retour vers votre charge en bas. De combien dois-je tirer la corde avant que la charge ne se soulève ?
Déformation : $\varepsilon_L = \Delta L/L = \sigma/E$, avec $\sigma = 39.8MPa$. On a donc (en mettant tout en MPa), $\varepsilon_L = 39.8/3000 = 0.013 = 1.3\%$. L'allongement sera alors : $\Delta L = L\varepsilon_L = 35 * 0.013 = 0.46m$. Je devrai donc tirer la corde sur 46cm avant que la charge de 50kg ne se soulève.

c. Quelle est la variation de diamètre de la corde dans ce cas ? Pour cela, prenez l'hypothèse que la corde est de section carrée de coté $b = 3.5mm$
ν est défini par $-\varepsilon_a/\varepsilon_L$, donc $\varepsilon_a = -\varepsilon_L \nu = -0.00455$. On peut évaluer la variation de coté comme $\Delta b = b\varepsilon_a = -0.0159mm$. Le diamètre diminue donc un peu.

d. Quelle est la variation de volume de la corde sous charge de 50kg, en considérant encore une section carrée de coté b ? Pourquoi est-elle non nulle ?
La variation de volume (en mm^3) est donnée par : $\Delta V = V_{final} - V_{initia}l = L_{final} * (b_{final})^2 - L * (b)^2 = 35.46 * 1000 * (3.48)^2 - 35000 * (3.5)^2 = 430422 - 428750 = 1672mm^3$. Le volume augmente donc un peu, puisque le coefficient de Poisson ne vaut pas 0.5 Physiquement, cela signifie que les liaisons entre les molécules sont distendues sous la charge dans la direction de la charge (et les atomes se rapprochent un peu dans l'autre direction, mais moins, donc globalement le volume augmente lorsque le matériau est sous charge). On peut aussi calculer la variation de volume en passant par la formule indiquée au cours :

$$\Delta V = V_0(1-2\nu)\varepsilon_L = 428750(0.3)0.013 = 1672mm^3.$$

6. **Calcul théorique du module d'élasticité**
On considère les liaisons atomiques décrites par le potentiel de Lennard-Jones :

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

Pour un réseau cubique simple d'atomes de paramètre de maille a =2 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. La force d'attraction entre deux atomes est donnée par :

$$F(r) = -\frac{dV}{dr} = -12\,\varepsilon_0 \left(-\frac{r_0^{12}}{r^{13}} + \frac{r_0^6}{r^7}\right)$$

La force que nous devons exercer pour séparer deux atomes est donc la force exactement opposée, -F

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.
Dans un réseau cubique simple soumis à une traction selon [100], il y a une liaison entre atomes pour chaque surface de maille élémentaire, donc sur une surface $A = r_0^2 = a^2$. La contrainte vaudra alors :

$$\sigma(r) = \frac{-F}{A} = \frac{12\varepsilon_0}{r_0^2}\left(-\frac{r_0^{12}}{r^{13}} + \frac{r_0^6}{r^7}\right)$$

Remarquez que la contrainte est nulle pour $r = r_0$.

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. Le module d'élasticité E est la pente de la courbe de traction proche de la position d'équilibre. Il est donc donné par :

$$E = \frac{d\sigma}{d\varepsilon}\bigg|_{r_0} = \frac{d\sigma}{dr/r_0}\bigg|_{r_0} = r_0\frac{d\sigma}{dr}\bigg|_{r_0} = \frac{12\varepsilon_0}{r_0}\left(13\frac{r_0^{12}}{r^{14}} - 7\frac{r_0^6}{r^8}\right)\bigg|_{r_0}$$

Donc

$$E = \frac{72\varepsilon_0}{r_0^3} = \frac{72\varepsilon_0}{a^3}$$

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.
Avec l'application numérique, on trouve E=1440 GPa. C'est un peu vers le haut de ce que l'on trouve comme module pour les matériaux cristallins, mais on est dans le bon ordre de grandeur pour un matériau parfait et mono-cristallin tiré selon la direction [100].