

Corrigé N° 4 — Semaine du 30 Septembre 2024

Structure des matériaux

1. Vrai ou faux ?

- | | Vrai | Faux |
|---|-------------------------------------|-------------------------------------|
| a. La viscosité d'un liquide compris entre deux plaques de surface S peut se mesurer par le rapport entre la force F nécessaire pour cisailler une couche de ce liquide à une vitesse v divisée par la surface S, et la vitesse v, divisée par la distance d entre les 2 plaques. | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| <i>Vrai : voir la définition donnée en cours.</i> | | |
| b. En général (sauf pour quelques exceptions comme l'eau), la masse volumique d'un matériau augmente lorsque l'on passe de l'état gazeux à l'état liquide, puis à l'état solide. | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| <i>Vrai : en général, mais il y a d'autres matériaux qui ont cette propriété de se dilater lors de la solidification, le Silicium en particulier.</i> | | |
| c. En refroidissant un matériau rapidement depuis l'état liquide, il est possible de le "figer" dans une structure amorphe qui n'est pas son état de plus basse énergie ("état métastable"). | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| <i>Vrai : même les métaux qui cristallisent dans des structures cristallographiques simples et donc s'ordonnent de façon très rapide, peuvent être rendus amorphe (verres métalliques) si une vitesse de refroidissement assez grande peut être atteinte.</i> | | |
| d. Comme on peut changer le motif à l'envie, on peut trouver une infinité de réseaux de Bravais en trois dimensions. | <input type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> |
| <i>Faux : cette phrase ne veut pas dire grand chose car le motif n'a rien à voir avec la notion de réseau de Bravais. Un cristal c'est un motif + un réseau de Bravais : le motif représente l'entité physique à placer sur un tel réseau pour former le cristal. Un réseau de Bravais a un sens abstrait purement mathématique : un ensemble infini de points invariant par translation selon trois axes non colinéaires. Il n'y a que 14 réseaux de Bravais possibles en 3D, et non pas une infinité.</i> | | |

- | | Vrai | Faux |
|---|-------------------------------------|-------------------------------------|
| e. Dans une structure cubique, toutes les droites d'un plan (hkl) sont perpendiculaires à la direction [hkl]. <i>Vrai : la direction [hkl] étant perpendiculaire au plan (hkl) dans le système cubique, elle est perpendiculaire à toutes les droites de ce plan.</i> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| f. Les métaux cristallisent dans des structures plutôt compactes, d'où leurs masses volumiques élevées. <i>Vrai : les métaux cristallisent dans des structures cubique centré pour certains, mais en grande majorité en cubique faces centrées et hexagonales, les structures les plus compactes.</i> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| g. Tous les solides ont un arrangement régulier d'atomes (ordre à longue distance). <i>Faux : seulement les solides cristallins ont un ordre à longue distance, tandis que les solides amorphes (ou vitreux) sont caractérisés par un ordre à courte distance et désordre à longue distance, comme les liquides.</i> | <input type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> |
| h. Pour caractériser la structure cristallographique d'un matériau, on peut 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). <i>Vrai : 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.</i> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| i. Une structure cubique à faces centrée comporte 4 atomes par maille. <i>Vrai : il y a 8 atomes sur les coins qui chacun participent pour 1/8, 6 atomes sur les faces qui chacun participent pour 1/2.</i> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| j. Une structure polycristalline, ou une poudre faite de petits monocristaux, donnera une image de diffraction formée de points distincts. <i>Faux : dans un polycristal les plans sont orientés dans diverses directions, on obtient des cercles concentriques qui correspondent chacun à un type de plan.</i> | <input type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> |

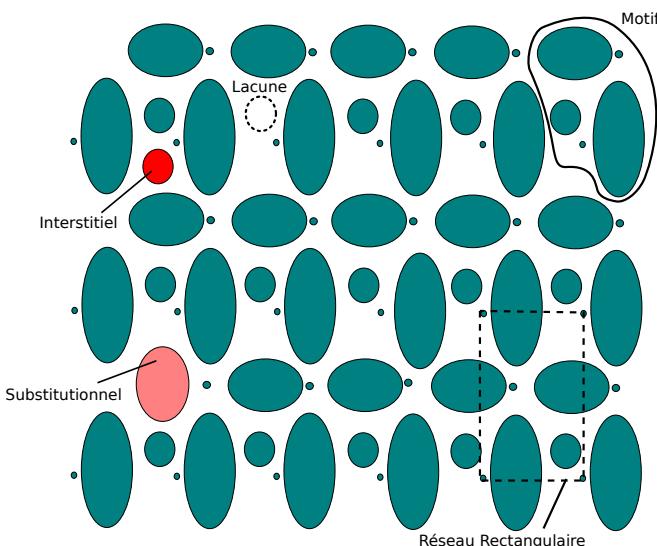
2. Motif, réseau et défauts

- a. Dessinez la maille élémentaire et le motif du réseau bidimensionnel ci-dessous et déterminez son type (hexagonal, rectangulaire ou carré).

Voir figure. C'est une maille rectangulaire, car si on prend un élément de motif, on peut le déplacer dans les directions x et y selon la maille rectangulaire pour faire tout le pavage du plan.

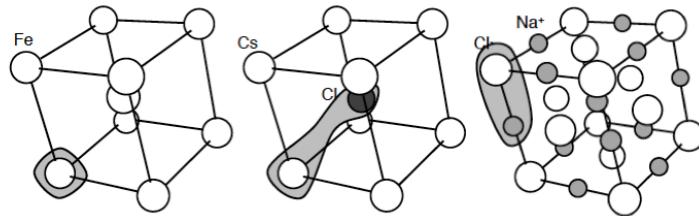
- b. Le réseau présente des défauts ponctuels. Identifiez-les et indiquez les sur le dessin (il y en a trois, on verra dans le cours 4.2 et suivants le rôle de ces défauts...).

Voir figure, il y a plusieurs défauts dans cette structure. On verra aux cours suivants comment les identifier et leur rôle, mais vous savez déjà les repérer !



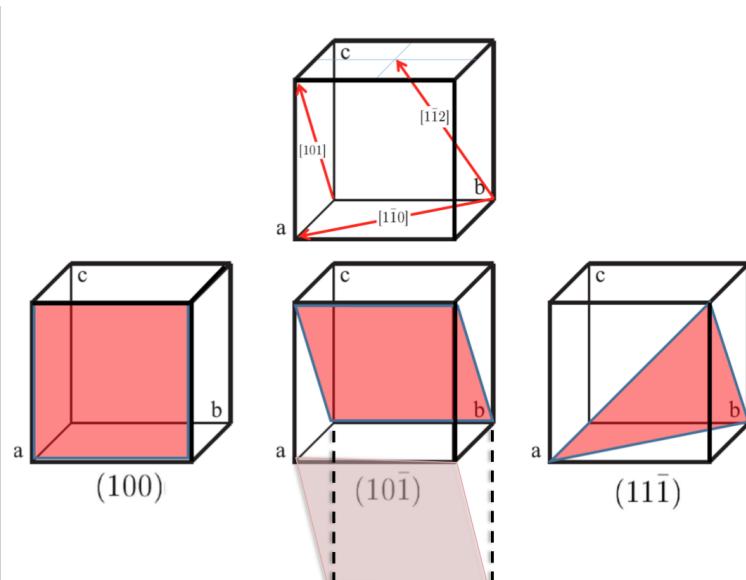
- c. Déterminez le type de réseau cristallin (cubique, cubique centré ou cubique à faces centrées) et les motifs des structures tridimensionnelles ci-dessous. Donnez pour chaque le nombre de motifs par maille.

La première structure est celle du fer simple : c'est un réseau cubique centré, le motif est constitué d'un seul atome de fer répété aux noeuds du réseau. Il y a 2 atomes en propre à la maille (1 au centre + 8 aux sommets du cube, partagés avec 8 voisins, donc $8 \times 1/8 = 1$). La deuxième structure est celle de CsCl. L'atome au centre de la maille n'est pas de même nature que ceux aux sommets. Le réseau est donc cubique-simple, avec un motif constitué de 2 atomes : Cs + Cl. Il y a 1 motif par maille : $8 \times 1/8 = 1$ atome Cs aux sommets et 1 atome Cl au centre. La dernière structure est celle du sel, NaCl. Les atomes sur les sommets et faces du cube sont de même nature (ici Cl), c'est donc un réseau cubique à faces centrées. Il y a 4 atomes de Cl sur ces sommets et faces. Les atomes Na sont situés au milieu des arêtes du cube : il y a 12 arêtes et chaque atome compte pour $1/4$, donc 3 atomes Na en propre sur les arêtes, et un atome Na au centre. Il y a donc 4 atomes de Na au total, ce qui correspond bien à 4 motifs Na+Cl dans la maille.

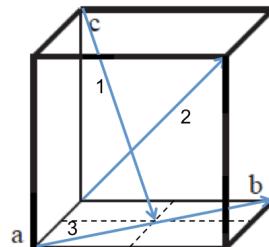


3. Plans et directions

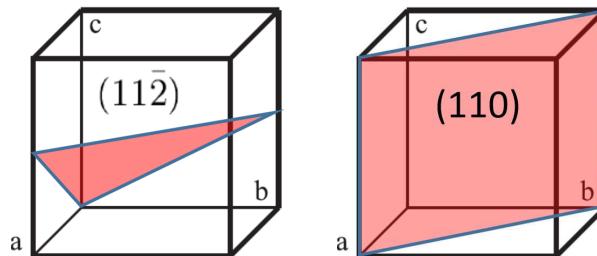
- a. Dessinez les directions $[101]$, $[1\bar{1}0]$ et $[1\bar{1}2]$ ainsi que les plans (100) , $(10\bar{1})$ et $(11\bar{1})$ dans les cubes ci-dessous.



- b. Trouvez les indices de Miller des directions (notées 1, 2 et 3) représentées dans le cube ci-dessous. Quel est l'angle entre les directions 1 et 3? A quel plan appartiennent-elles?
- Les indices de Miller des directions 1, 2 et 3 sont $[11\bar{2}]$, $[111]$, et $[\bar{1}10]$. Il apparaît que le produit scalaire des directions 1 et 3 est nul (le produit scalaire est : vecteur u . vecteur v = x.x' + y.y' + z.z' = 1.(-1)+1.1+(-2).0=0) ce qui signifie que ces directions sont perpendiculaires. Elles appartiennent au plan (111) .



c. Quels sont les indices de Miller des plans suivants :



4. Nickel Le nickel est un élément cubique à faces centrées.

- a. Etant donné sa masse molaire $M_A = 58.7 \text{ g mol}^{-1}$ et son paramètre de maille $a_0 = 352.4 \text{ pm}$, calculez sa masse volumique théorique.

Une maille élémentaire CFC contient 4 atomes propres : huit huitièmes de sphère pour chaque atome situé aux sommets du cube et six demi-sphères pour chaque face. La masse des atomes contenues dans une maille se calcule donc comme suit :

$$\frac{M_A}{N_A} = 4 \cdot \frac{58.7 \times 10^{-3} \text{ kg mol}^{-1}}{6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}} = 39 \times 10^{-26} \text{ kg}$$

En divisant la masse de la maille par son volume, on obtient la masse volumique théorique :

$$\rho = \frac{m}{a_0^3} = \frac{39 \times 10^{-26} \text{ kg}}{(352.4 \times 10^{-12} \text{ m})^3} = 8.91 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$$

- b. Dans un tel cristal combien de plans de la famille $\{111\}$ non-parallèles existe-t-il ? Il existe quatre plans non-parallèles, (111) , $(\bar{1}11)$, $(1\bar{1}1)$ et $(11\bar{1})$. Les autres plans de la même famille, $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$, $(1\bar{1}\bar{1})$, $(\bar{1}1\bar{1})$ et $(\bar{1}\bar{1}1)$ leur sont respectivement parallèles .

- c. Calculez l'angle entre ces plans.

Dans un système cubique, un plan est toujours normal à la direction ayant les mêmes indices de Miller. L'angle entre les plans est donné par l'angle entre les normales qui se calcule aisément à l'aide du produit scalaire :

$$\cos \phi = \left(\frac{\vec{a} \cdot \vec{b}}{\|\vec{a}\| \cdot \|\vec{b}\|} \right)$$

En prenant par exemple les directions [111] et [1̄11], on obtient :

$$\phi = \arccos \left(\frac{1 \cdot (-1) + 1 \cdot 1 + 1 \cdot 1}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 1^2} \cdot \sqrt{(-1)^2 + 1^2 + 1^2}} \right) = \arccos \left(\frac{1}{3} \right) = 70.52^\circ$$

- d. En considérant que le cristal est un empilement de sphères denses, quelle compacité (espace occupé par les atomes vs. espace total) atteint-on ?

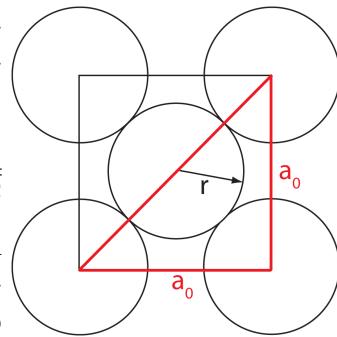
Comme mentionné plus haut, une maille contient quatre atomes/sphères, la compacité est donc simplement donnée par la fraction du volume des sphères par le volume total de la maille :

$$c = \frac{4 \cdot \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r^3}{a_0^3}$$

Pour un arrangement CFC dense, les sphères se touchent en des points situés sur les faces du cube. On détermine ainsi le rapport entre a_0 et r :

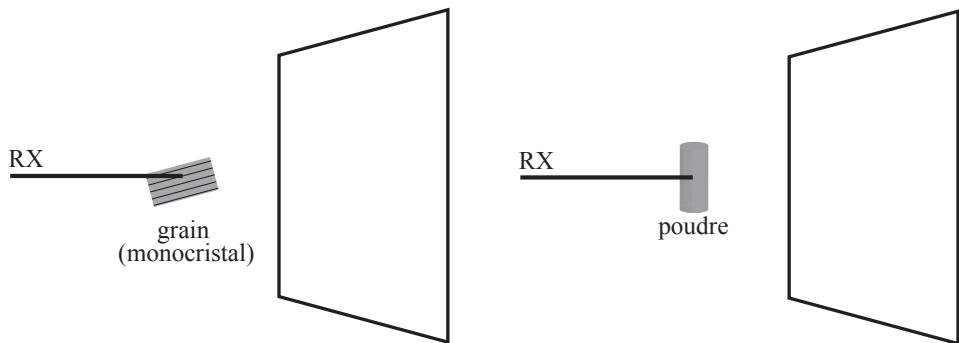
$$(4r)^2 = a_0^2 + a_0^2 \Rightarrow r = \frac{a_0}{\sqrt{8}} = \frac{a_0}{2\sqrt{2}}$$

En réinjectant cette dernière relation dans la précédente, on obtient finalement une compacité de 74%, soit 26% de vide.



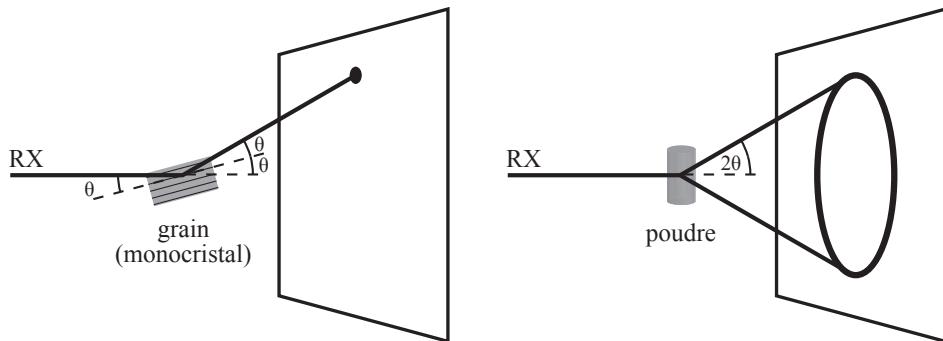
5. Diffraction

On considère la diffraction d'une poudre de cuivre polycristalline sous un faisceau de rayons X de longueur d'onde λ .



- a. Pour un petit grain dont un plan donné hkl diffracte le faisceau incident, dessinez une trajectoire possible du faisceau diffracté sur le schéma de gauche ci-dessus et indiquez l'angle de diffraction sur le même schéma.

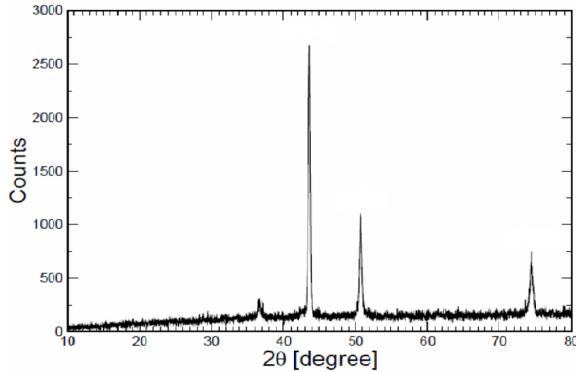
Le faisceau incident est diffracté par le plan (hkl) satisfaisant la loi de Bragg, dont la normale \vec{n} forme un angle de $90^\circ - \theta$ avec le faisceau incident. L'angle entre le faisceau incident et le faisceau diffracté est donc de 2θ



- b. Comment se présente l'ensemble des faisceaux diffractés de tous les grains situés dans le faisceau et satisfaisant la condition de Bragg (schéma de droite) ?

Dans la poudre, les grains sont orientés de façon aléatoire et seuls ceux ayant le plan (hkl) satisfaisant la loi de Bragg vont diffracter le faisceau incident. Cela définit un cône d'ouverture 2θ ayant comme axe le faisceau incident. Ceci est valable pour un plan, et dans un matériau réel, plusieurs plans de la même famille vont diffracter, d'où la présence de plusieurs points distincts même pour un monocrystal.

- c. En utilisant un diffractomètre avec une longueur d'onde $\lambda=1.54 \text{ \AA}$, on obtient le spectre de diffraction suivant :



Le paramètre de maille du cuivre vaut 3.6 \AA . Sachant que pour un réseau CFC on observe des pics seulement pour les plans avec des indices hkl tous pairs ou tous impairs, à quelles familles de plans correspondent les 3 pics visibles (diffraction de premier ordre) ?

Sur le spectre de diffraction, on observe des pics pour $2\theta = 43.5, 50.5$, et 74.5° . La condition pour la diffraction étant donnée par la loi de Bragg :

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

ces pics correspondent à des valeurs de d_{hkl} de respectivement 2.08 , 1.805 et 1.27 \AA .

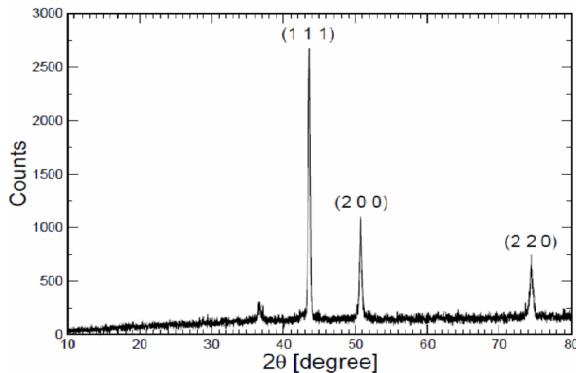
Pour un réseau cubique, la distance entre plan se calcule selon

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

Pour les premières familles de plans avec des hkl tous impairs ou tous pairs :

| h | k | l | $d_{hkl} [\text{\AA}]$ |
|-----|-----|-----|------------------------|
| 1 | 1 | 1 | 2.09 |
| 2 | 0 | 0 | 1.81 |
| 2 | 2 | 0 | 1.28 |

Et donc :



- d. Si on regarde le spectre plus large (pas visible sur la figure donnée ici), on trouve encore un pic de diffraction à $2\theta=89.93^\circ$. Quel pourrait être le plan qui donne ce pic de diffraction ?

Pour le pic de diffraction à $2\theta=89.93^\circ$, on procède de même, la distance correspondante est $d_{hkl}=1.089 \text{ \AA}$. Donc, $h^2 + k^2 + l^2 = \left(\frac{a}{d_{hkl}}\right)^2 \approx 11$. Le plan (311) est donc une possibilité (ou (131), ou (113)..).