

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

1. Vrai ou faux ?

	Vrai	Faux
a. Un polymère thermodurcissable contient des liaisons covalentes entre les chaînes qui empêchent le matériau de fondre lorsqu'il est chauffé. (si on chauffe trop il finit par se dégrader) <i>Vrai : voir définitions dans le cours</i>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
b. Les céramiques ont tendance à former des structures plus complexes et difficiles à cristalliser que les métaux. <i>Vrai : comme les motifs sont souvent plus compliqués, les structures tendent à cristalliser plus difficilement.</i>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
c. La masse molaire d'un polymère dépend du type d'atomes qui le forment, mais pas du degré de polymérisation. <i>Faux : 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.</i>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
d. Un atome interstitiel va se placer dans des positions bien définies qui dépendent de la structure de la maille cristalline. <i>Vrai : selon la structure de la maille, seulement quelques endroits ont une taille suffisante pour accommoder un atome interstitiel.</i>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
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. <i>Vrai : voir les définitions au cours. Il est très important de bien se rappeler des dimensions des nouvelles notions présentées.</i>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
f. Si le module d'Young d'un matériau est grand, cela signifie qu'il est très résistant à la rupture. <i>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).</i>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>

	Vrai	Faux
g. Lors d'une déformation élastique linéaire, le volume du matériau est toujours conservé. <i>Faux : lors d'une déformation élastique linéaire, le volume du matériau change, sauf si son coefficient de Poisson est égal à 0.5.</i>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
h. Le réseau cristallin cubique face centrées correspond à un assemblage d'atomes plus compact que le réseau cubique centré. <i>Vrai : voir les slides du cours, compacité pour CFC est 74% alors qu'elle n'est que de 68% pour le CC.</i>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
i. Le module d'Young d'un polymère est en général très inférieur à celui d'une céramique. <i>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.</i>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

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 la variation relative de la densité du Fer lors de cette transformation. On donne la masse molaire du Fe=56g/mol.
- Calculons tout d'abord le volume occupé par une maille de Fe (CC). Puisque dans un modèle de sphères dures, celles-ci se touchent sur la diagonale du cube dans un cristal CC, on trouve la relation suivante entre le rayon des atomes r_{CC} et le paramètre de maille a_{CC} :

$$4r_{cc} = \sqrt{3}a_{cc}$$

La maille occupe donc :

$$V_{Maillecc} = a_{cc}^3 = \left(\frac{4}{\sqrt{3}}\right)^3 r_{cc}^3 = 0.023\text{nm}^3$$

Le nombre d'atomes par maille CC est deux, la masse volumique est donc donnée par :

$$\rho_{cc} = \frac{2 \cdot m_{Fe}}{V_{Maillecc}} = \frac{2 \cdot 56 \times 10^{-3} \text{ kg mol}^{-1}}{6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1} \cdot 0.023 \times 10^{-27} \text{ m}^3} = 7916 \text{ kg/m}^3$$

Un calcul similaire pour la maille CFC, où les atomes se touchent sur les diagonales des faces du cube, mène au résultat suivant :

$$4r_{cfc} = \sqrt{2}a_{cfc}$$

La maille occupe donc :

$$V_{Maillecfc} = a_{cfc}^3 = \left(\frac{4}{\sqrt{2}}\right)^3 r_{cfc}^3 = 0.0463\text{nm}^3$$

Le nombre d'atomes par maille CFC cette fois-ci est de quatre, la masse volumique est donc donnée par :

$$\rho_{cfc} = \frac{4 \cdot m_{Fe}}{V_{Maillecfc}} = \frac{4 \cdot 56 \times 10^{-3} \text{ kg mol}^{-1}}{6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1} 0.0463 \times 10^{-27} \text{ m}^3} = 8036 \text{ kg/m}^3$$

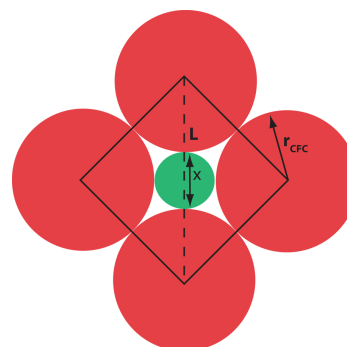
La différence relative de densité est donc directement donnée par la différence des masses volumiques (puisque la densité est donnée par rapport à la masse volumique de l'eau), et il faut voir pour quelle transformation on calcule cette différence. Si on regarde comment est la différence de densité quand on passe de CFC à CC, on aura :

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{\rho_{cc} - \rho_{cfc}}{\rho_{cfc}} = -1.5\% \text{ environ.}$$

Si on passe de CC à CFC, on aura :

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{\rho_{cfc} - \rho_{cc}}{\rho_{cc}} = 1.5\% \text{ environ.}$$

- 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. L'espace qui conditionnera la taille maximale de la sphère qu'il est possible de loger dans le site octaédrique peut être visualisé dans une coupe selon un plan (020). La distance L se trouve aisément par Pythagore :



$$L^2 = 4r^2 + 4r^2 = 8r^2 \quad \Rightarrow \quad L = 2\sqrt{2}r$$

Ainsi le rayon de la sphère interstitielle est donné par :

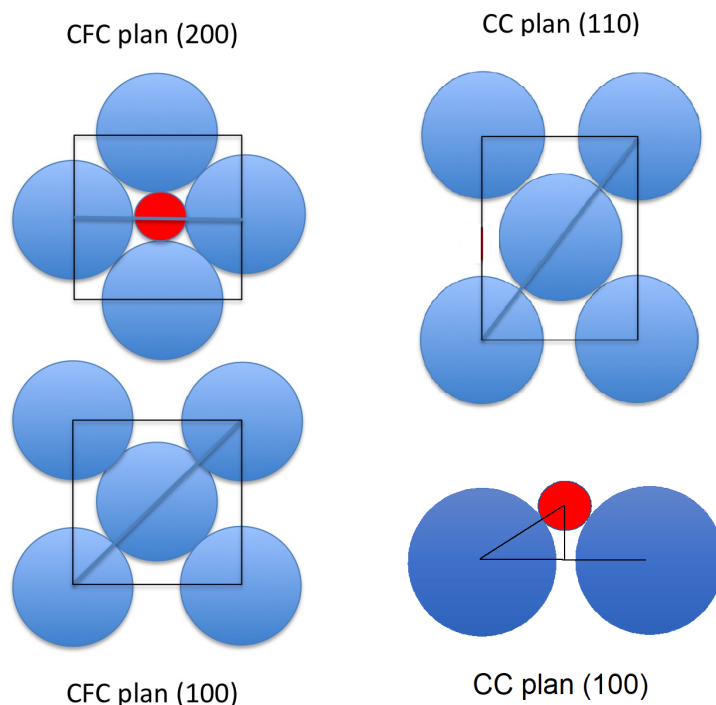
$$r_{ocfc} = \frac{x}{2} = \frac{L - 2r}{2} = r(\sqrt{2} - 1) = 0.053 \text{ nm}$$

- 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.

On constate que l'espace disponible est plus grand dans la structure CFC que dans celle du cristal CC, mais il est dans les deux cas très petit par rapport au rayon atomique du carbone. Celui-ci aura donc une solubilité assez faible dans un cristal CFC (on verra plus tard que l'on peut monter à 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).

- 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 $(0 \frac{1}{2} \frac{1}{4})$

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 tétraédrique pour CC).



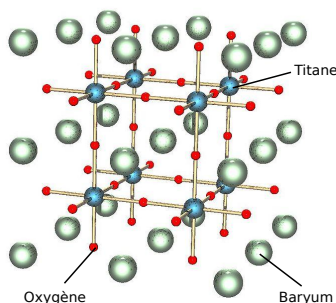
Dans la structure CC, dans le plan (100) on a :

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

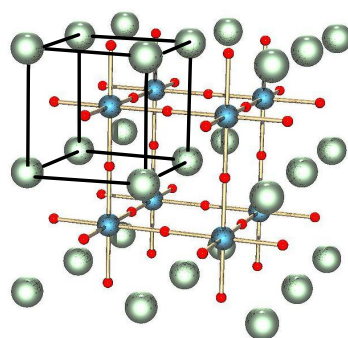
Dans un plan (110), les atomes de fer se touchent suivant la diagonale du cube, de longueur $\sqrt{3}a = 4r_{0,CC}$, donc $a = 4/\sqrt{3}r_{0,CC}$. On obtient :

$$r_{i,CC} = \left(\sqrt{\frac{5}{3}} - 1\right) r_{0,CC} = 0.29r_{0,CC} = 0.036 \text{ nm} \quad (2)$$

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 à chaque coin.

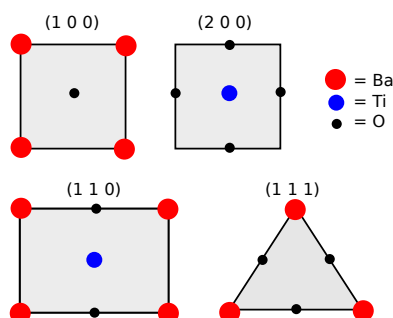


- a. Quelle est la formule brute du titanate de Baryum (et donc le motif de la maille) ? Pour vous aider, vous pouvez décaler l'origine de la maille sur un atome de baryum.



Dans une maille il y a $\frac{1}{8} \cdot 8 = 1$ atome de baryum, 1 atome de titane au milieu et $\frac{1}{2} \cdot 6 = 3$ atomes d'oxygène. La formule est donc BaTiO_3 .

- 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 du BaTiO_3 vaut $\rho = 6000 \text{ kg m}^{-3}$.

Réponse : le paramètre de maille est calculé par

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

4. Cable de treuil

Le câble d'un treuil en acier a une section utile de 20 mm^2 . Il doit être utilisé pour soulever une charge de 200kg.

- a. Calculez la contrainte dans la section du câble.

La contrainte est donnée par :

$$\sigma = \frac{F}{A} = \frac{200 \times 9.81}{20} = 98.1 \text{ MPa}$$

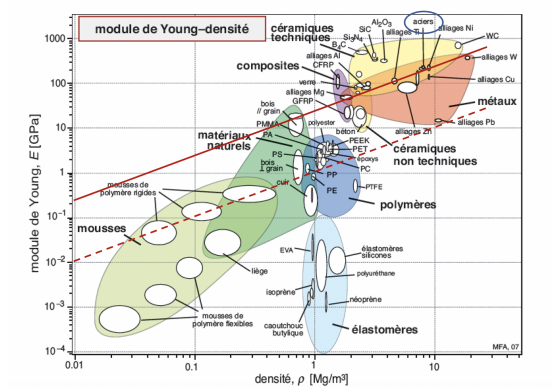
- b. Le module d'Young de l'acier est $E = 210 \text{ GPa}$, calculez quelle est la déformation du câble, et son allongement si il a une longueur initiale de 1m.

On a donc $\varepsilon = \frac{\sigma}{E} = \frac{98.1}{210000} = 4.6 \times 10^{-4} = 0.046\%$. Et donc l'allongement est $\Delta L = L \cdot \varepsilon = 0.46 \text{ mm}$.

- c. Ceci dit, l'acier à une masse volumique assez élevée, et on aimerait réduire la masse du câble 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.

Pour choisir le matériau un matériau équivalent en traction, il faut comparer l'indice de rigidité spécifique E/ρ des matériaux proposés. Au lieu de le faire numériquement, une méthode graphique plus rapide consiste à tracer sur la carte d'Ashby donnée des droites de pente 1.

$$\frac{E}{\rho} = m = cte \Rightarrow E = m \cdot \rho \Rightarrow \log E = \log m + \log \rho$$



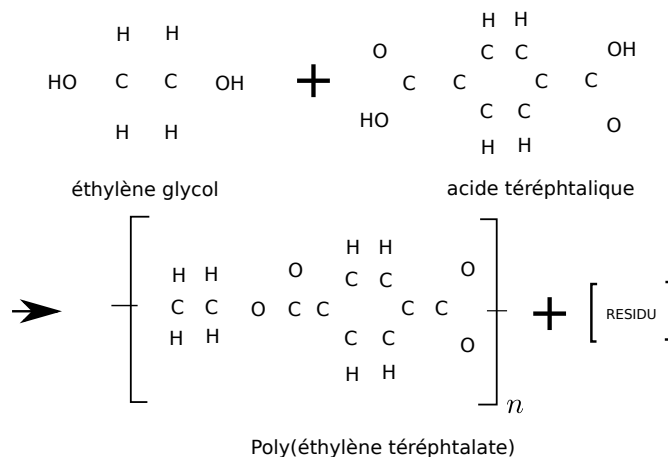
On trouve alors des alliages de titane, d'aluminium, de magnésium, des composites renforcés de fibres (CFRP), du bois, qui ont une densité plus faible.

- d. Quel autre critère devrait on prendre en compte pour choisir un matériau alternatif?

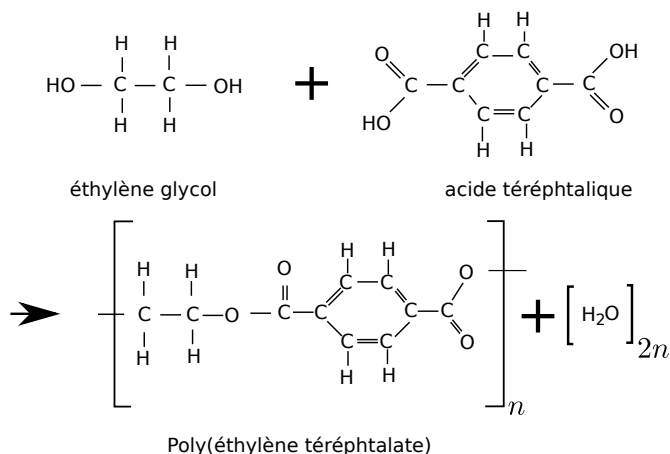
Le coût, la flexibilité (si le câble doit être enroulé sur un treuil), la résistance à l'abrasion, et il faut aussi bien sur s'assurer que le câble ne se déformera pas plastiquement sous la charge en question, donc la limite d'élasticité doit être supérieure à 100 MPa environ et il faut vérifier qu'il ne se déforme pas trop (donc un haut module). En fait beaucoup des câbles sont encore en acier, on peut aussi trouver des câbles en composites (fils d'aciers dans une résine ou un élastomère, ou fibres de carbone ou d'aramide). Mais le coût restera aussi une composante importante du choix.

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 ($C_8H_6O_4$).



- a. Complétez la réaction du PET avec les liaisons appropriées (simples et doubles) et indiquez le résidu de la réaction. Réaction du PET :



Il y a perte d'eau à chaque étape et il s'agit pour votre information d'une polymérisation par condensation (polycondensation).

- b. Calculez la masse molaire d'un monomère.

La masse molaire du monomère de PET ($\text{C}_{10}\text{H}_8\text{O}_4$) se calcule comme suit :

$$M_m(\text{PET}) = 10 \times 12 + 8 \times 1 + 4 \times 16 = 192 \text{ g mol}^{-1}$$

- 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.

La masse molaire du PET est de $0.192 \times 250 = 48 \text{ kg mol}^{-1}$. La production de 10^3 bouteilles de 10 g, soit 10 kg, correspond alors à $10/48 = 0.2$ mole de PET. Deux molécules d'eau sont libérées à chaque monomère de PET formé, ce qui fait donc 500 molécules d'eau par molécule de PET. La formation de 0.2 mole de PET entraîne donc la libération d'un résidu de $500 \times 0.2 = 100$ moles d'eau, correspondant à une masse de $100 \times 18 \text{ g mol}^{-1} = 1.8 \text{ kg}$.

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 $a = 2 \text{ \AA}$ 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 côté 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 $E = \left. \frac{d\sigma}{d\varepsilon} \right|_{r_0}$. 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 :

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

Donc

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

- d. Si on prend comme hypothèse que $\varepsilon_0 = 1\text{eV}$ 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, $1\text{eV} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$.

Avec l'application numérique, on trouve $E=1440 \text{ GPa}$. 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].