

Série n°7 – 3 avril 2025

Structure des matériaux I

Exercice 1 :

Répondez par vrai ou faux aux questions suivantes :

Vrai Faux

a. La viscosité d'un milieu reflète la difficulté de ce dernier à s'écouler : plus le milieu est visqueux, moins il s'écoule facilement.

b. La masse spécifique d'un liquide est très différente du même matériau sous forme solide, car les atomes ou molécules sont beaucoup plus désordonnés.

C'est faux. La densité du liquide est proche de celle du solide ($\pm 10\%$), quand bien même les atomes sont désordonnés. C'est la densité du gaz qui est environ 10^3 fois plus petite que celle de ces deux phases dites « condensées ».

c. Le diamant a la même structure cubique à faces centrées que le sel de cuisine, quand bien même les liaisons sont covalentes dans le premier cas et ioniques pour le deuxième.

Ils ont le même réseau cristallin (fcf), mais le motif est différent : 2 atomes de carbone sur une diagonale $\langle 111 \rangle$ pour le diamant ; un atome Na^+ et 1 atome Cl^- sur une direction $\langle 100 \rangle$ pour le sel de cuisine (voir dessin dans le cours).

d. Dans le système cubique, un plan (001) fait un angle plus grand avec un plan (112) qu'avec un plan (111) .

Dans le système cubique, l'angle θ entre un plan (hkl) et $(h'k'l')$ est égal à l'angle entre leurs normales $[hkl]$ et $[h'k'l']$, soit :

$$\cos \theta = \frac{hh' + kk' + ll'}{(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}(h'^2 + k'^2 + l'^2)^{1/2}}$$

L'angle entre un plan (001) et (112) vaut $\cos^{-1}(1 \times 2/\sqrt{6}) = 35.3$ deg. L'angle entre un plan (001) et (111) vaut $\cos^{-1}(1 \times 1/\sqrt{3}) = 54.7$ deg.

e. Les grains d'un matériau polycristallin monophasé ont tous la même structure cristalline et la même orientation cristallographique.

C'est faux. Les grains d'un matériau monophasé ont la même structure cristalline, mais ce qui les distingue c'est précisément leurs orientations cristallographiques différentes.

f. Un atome de petite taille a tendance à se mettre dans les sites intersticiels d'un réseau cristallin, alors que pour une solution

solide, les atomes de taille similaire se substituent les uns aux autres dans le même réseau.

- g. *L'atome au centre de la maille cubique centrée voit un arrangement d'atomes voisins différent qu'un des atomes aux sommets du cube.*

C'est faux (voir le dessin de la dia No 19 du cours). C'est précisément l'invariance de translation qui fait que ces sites du réseau (centre ou coins) sont équivalents.

- h. *La distance entre des plans (111) est plus grande qu'entre des plans (110) dans un système cubique.*

C'est faux : $d_{(111)} = a/\sqrt{3}$ alors que $d_{(110)} = a/\sqrt{2}$

- i. *Un faisceau de rayons X « blanc » (comportant tout un continuum de longueurs d'onde) impactant un monocristal donne des taches de diffraction qui ont chacune une longueur d'onde (« couleur ») spécifique.*

C'est exact. Suivant la loi de Bragg, l'angle d'incidence θ du faisceau incident étant fixé pour un plan (hkl) donné, de même que l'espacement interplan $d_{(hkl)}$, c'est bien la longueur d'onde $\lambda = 2d_{(hkl)} \sin \theta$ qui doit être choisie pour avoir une interférence constructive.

Exercice 2 : Bromure d'argent et Argent

Le bromure d'argent (AgBr) a la même structure cubique à faces centrées que le sel de cuisine ou l'argent. Dans ce matériau, un pourcentage relativement élevé d'atomes d'argent peuvent se placer en sites intersticiels (Ag_i^+) faisant alors apparaître autant de lacunes (défaut dit de Frenkel). Lorsque des photons tombent sur ce matériau, ils peuvent transformer cet argent interstitiel Ag_i^+ en argent métallique, constituant ainsi une image latente. Après révélation et fixation (pour éliminer l'excès d' AgBr), l'image est alors apparente et forme le négatif des films dits « argentiques ».

- a. *Sachant que le paramètre de maille de AgBr vaut 5.768 \AA et que les masses molaires de Ag et Br sont respectivement 107.9 et 79.9 g/mole, calculez la masse volumique de ce matériau photosensible.*

Le volume de la maille cubique vaut $V = a^3 = (5.768 \times 10^{-10})^3 = 1.919 \times 10^{-28} \text{ m}^3$. Or la maille cubique à face centrée contient 4 atomes ou molécules (8 sur les coins avec un facteur $1/8 + 6$ sur les faces avec un facteur $1/2$). La masse atomique d'une molécule AgBr vaut :

$$M_{at}^{\text{AgBr}} = \frac{M_m(\text{Ag}) + M_m(\text{Br})}{N_A} = 3.118 \times 10^{-25} \text{ kg}$$

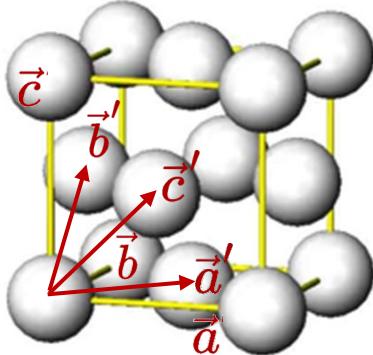
La masse volumique de AgBr vaut donc : $\rho_{\text{AgBr}} = 4 \times M_{at}^{\text{AgBr}} / V = 6'500 \text{ kg/m}^3$

- b. *Inversement, la masse volumique de l'argent étant de 10.5 g/cm^3 , quel est le paramètre de maille ?*

On procède de la même manière : $\rho_{\text{Ag}} = 4 \times M_{at}^{\text{Ag}} / a^3 = 4 \times M_m^{\text{Ag}} / (N_A a^3)$. D'où l'on déduit :

$$a = [4 \times M_m^{Ag} / (N_A \rho_{Ag})]^{1/3} = 4.086 \times 10^{-10} \text{ m} = 4.086 \text{ \AA}$$

- c. Les vecteurs $(\vec{a}', \vec{b}', \vec{c}')$ de la maille élémentaire de la structure cubique à faces centrées sont donnés par : $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ dans le référentiel $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ de la maille cubique. Représentez-les graphiquement dans la maille cubique.



- d. Calculez le volume de la maille élémentaire de ces deux matériaux et vérifiez qu'elle ne contient bien qu'une seule molécule AgBr, respectivement un atome Ag.

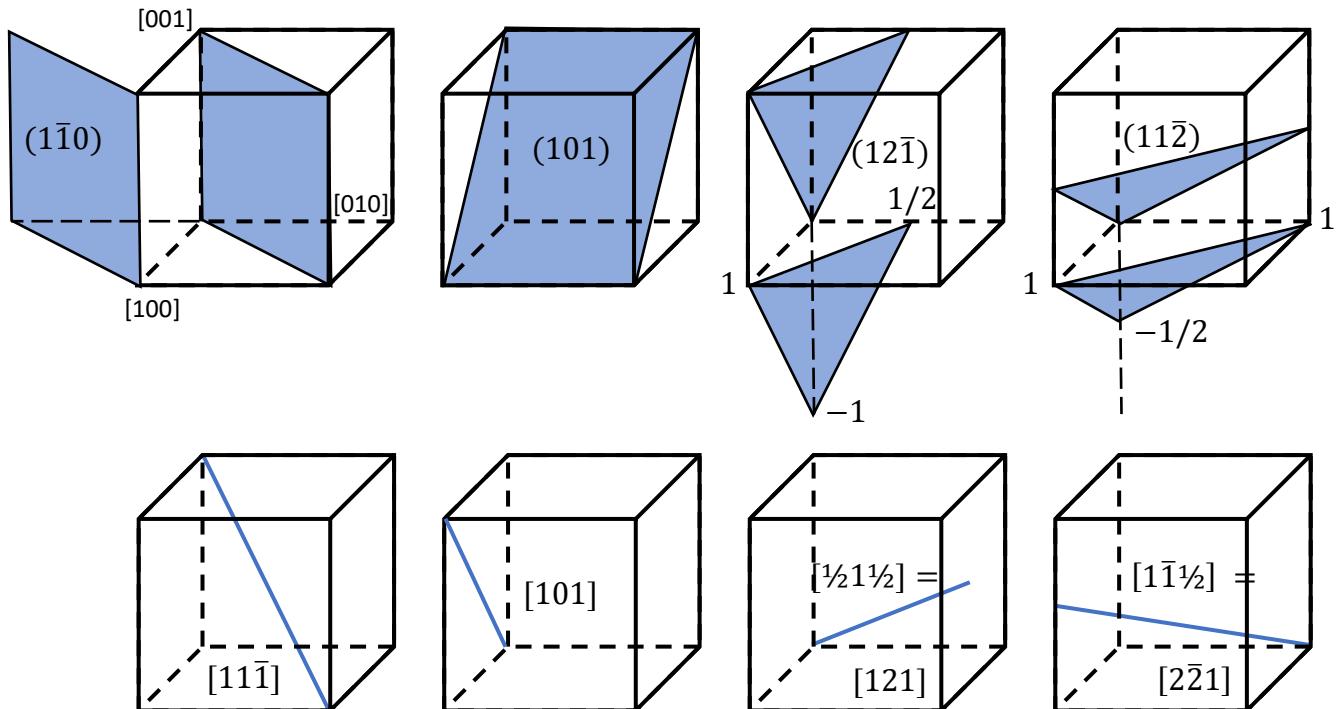
La maille élémentaire a un volume donné par $(\vec{a}' \times \vec{b}') \cdot \vec{c}'$. Le produit mixte donne :

$$(\vec{a}' \times \vec{b}') \cdot \vec{c}' = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{4}$$

Le volume de la maille élémentaire valant le quart de la maille cubique, et la maille cubique contenant 4 AgBr ou 4 Ag, elle ne contient bien qu'un seul AgBr ou un Ag.

Exercice 3 : Indices de Miller

- a. Déterminez les indices de Miller des plans et directions des configurations dessinées ci-dessous pour le système cubique.



b. Montrez qu'une direction $[hkl]$ est perpendiculaire à un plan (hkl) dans le système cubique.

Sous forme vectorielle, la direction $[hkl]$ est représentée par $h\vec{a} + k\vec{b} + l\vec{c}$. Pour qu'un plan lui soit perpendiculaire, il faut et il suffit que deux de ses directions le soient. Dans le plan (001) , une direction du plan est donnée par $(h^{-1}\vec{a} - k^{-1}\vec{b})$. Le produit scalaire de cette direction avec $[hkl]$ donne :

$$(h\vec{a} + k\vec{b} + l\vec{c}) \cdot (h^{-1}\vec{a} - k^{-1}\vec{b}) = \vec{a}^2 - \vec{b}^2 = 0$$

puisque les vecteurs de base sont tels que $|\vec{a}| = |\vec{b}| = |\vec{c}|$ et que $\vec{a} \cdot \vec{b} = \vec{a} \cdot \vec{c} = \vec{b} \cdot \vec{c} = 0$.

De même, dans le plan (100) , la direction $(k^{-1}\vec{b} - l^{-1}\vec{c})$ est perpendiculaire à $[hkl]$ pour les mêmes raisons. Donc, le plan (hkl) ayant deux directions indépendantes perpendiculaires à $[hkl]$, il est perpendiculaire à cette direction dans le système cubique.

Exercice 4 : Diffraction aux rayons X d'un monocristal cubique

Un rayonnement « blanc » (spectre continu de longueurs d'ondes) est dirigé selon la direction $[00\bar{1}]$ d'un monocristal cubique, dont le paramètre de maille vaut $a = 4\text{\AA}$.

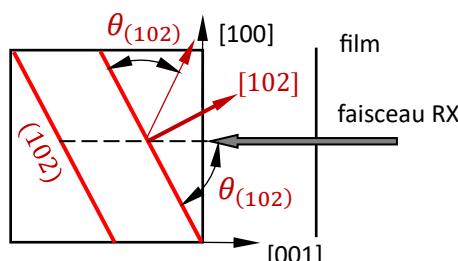
a. Quelle sera la longueur d'onde sélectionnée par des plans (102) , (103) et (104) pour le spot de diffraction constructive de ces plans ?

Ces plans ont des distances interatomiques données par :

$$d_{(102)} = \frac{a}{(1^2 + 2^2)^{1/2}} = \frac{a}{\sqrt{5}} = 1.789 \text{\AA} ; \quad d_{(103)} = \frac{a}{\sqrt{10}} = 1.265 \text{\AA} ;$$

$$d_{(104)} = \frac{a}{\sqrt{17}} = 0.970 \text{\AA}$$

Pour illustrer la situation, on place l'axe $[010]$ perpendiculairement à la feuille. Les plans (102) apparaissent alors comme des droites :



Par ailleurs, les angles θ entre la direction inverse du faisceau incident ($[001]$) et ces plans (hkl) sont donnés par :

$$\theta_{(hkl)} = \frac{\pi}{2} - \cos^{-1}([h, k, l] \cdot [001]) = \sin^{-1} \left(\frac{l}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \right)$$

D'où : $\theta_{(102)} = \frac{\pi}{2} - \cos^{-1}(1 \times 2/\sqrt{5}) = \sin^{-1}(1 \times 2/\sqrt{5}) = 63.43^\circ$;

$$\text{Et : } \theta_{(103)} = \sin^{-1}(1 \times 3/\sqrt{10}) = 71.57^\circ; \quad \theta_{(104)} = \sin^{-1}(1 \times 4/\sqrt{17}) = 75.96^\circ$$

Suivant la loi de Bragg, $2d_{(hkl)} \sin \theta_{(hkl)} = \lambda$ (on prend $n = 1$ pour l'ordre de diffraction), les longueurs d'onde sélectionnées par ces plans sont alors :

$$\lambda_{(102)} = 3.2 \text{ \AA}; \quad \lambda_{(103)} = 2.4 \text{ \AA}; \quad \lambda_{(104)} = 1.882 \text{ \AA}$$

- b. Un film est placé à $D = 5 \text{ mm}$ devant la surface du cristal. Quelle sera la position correspondante des trois spots de diffraction de ces plans sur le film ?

Le faisceau diffracté (représenté pour le plan (102) sur la figure) fait un angle de $2(\pi/2 - \theta) = (\pi - 2\theta)$ avec le faisceau incident. Emis proche de la surface, il va frapper le film à une distance z de la trace du faisceau incident donné par $D \tan(\pi - 2\theta)$. On aura donc les positions :

$$z_{(102)} = 6.67 \text{ mm}; \quad z_{(103)} = 3.75 \text{ mm}; \quad z_{(104)} = 2.67 \text{ mm}$$

- c. Si l'on considère maintenant les plans (012), (013) et (014), puis les plans $(\bar{1}02)$, $(\bar{1}03)$ et $(\bar{1}04)$, et enfin les plans $(0\bar{1}2)$, $(0\bar{1}3)$ et $(0\bar{1}4)$, représentez graphiquement les taches de diffraction sur le film. Qu'en déduisez-vous ?

Ces plans étant de même nature, les calculs restent les mêmes mais les spots de diffraction vont apparaître tournés de 90° , 180° et 270° dans le plan du film. Ces taches de diffraction auront donc l'allure (approximative) ci-dessous : Elles reflètent bien la symétrie d'ordre 4 autour d'un axe [001].

