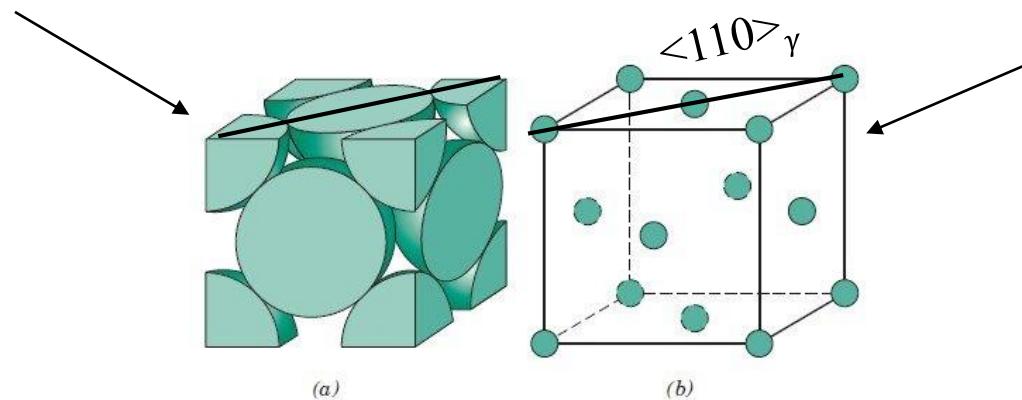


Exercise 1 Solutions

1. Dans le cadre de l'hypothèse selon laquelle les atomes de fer sont des sphères dures de taille invariante:
La direction denses, i.e. de « contact » des sphères est $\langle 110 \rangle_{\gamma} = \langle 111 \rangle_{\alpha} \rightarrow 2 D_{\text{Fe}} = \sqrt{2} a_{\gamma} = \sqrt{3} a_{\alpha}$

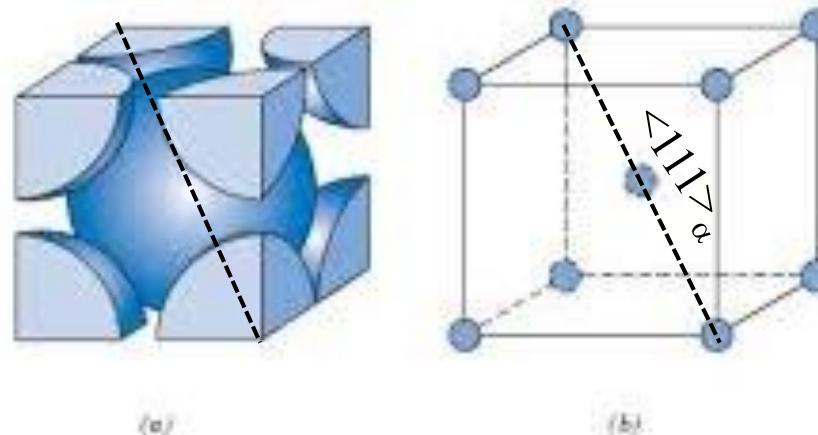
On voit bien ici les directions denses

Structure fcc



On utilise souvent des figures de cellules unité dans lesquelles les atomes sont représentés par des «petits ronds», on a ainsi une meilleure visibilité des positions des atomes, mais on perd une info importante sur leur encombrement sphérique

Structure bcc



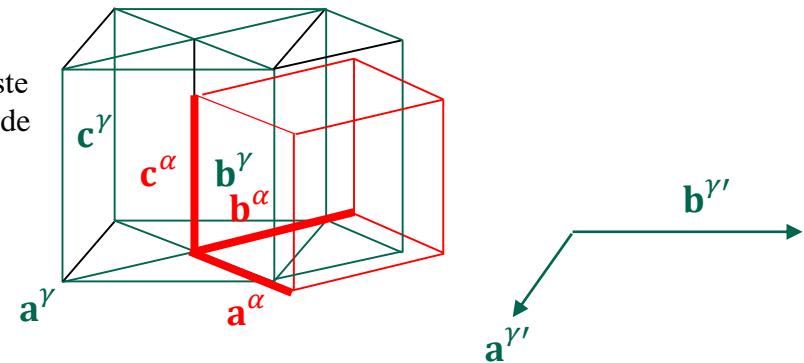
Exercise 1 Solutions

2. Correspondance

Pour la matrice de correspondance, il n'y a pas de calculs à faire, il faut juste bien regarder dans quelles directions de la phase fille, les vecteurs de base de la phase parente sont transformés

$$\mathbf{a}^\gamma \rightarrow \mathbf{a}^{\gamma'} = \mathbf{a}^\alpha - \mathbf{b}^\alpha \quad \mathbf{b}^\gamma \rightarrow \mathbf{b}^{\gamma'} = \mathbf{a}^\alpha + \mathbf{b}^\alpha \quad \mathbf{c}^\gamma \rightarrow \mathbf{c}^{\gamma'} = \mathbf{c}^\alpha$$

Donc immédiatement, $\mathbf{C}^{\alpha \rightarrow \gamma} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$



3. Orientation

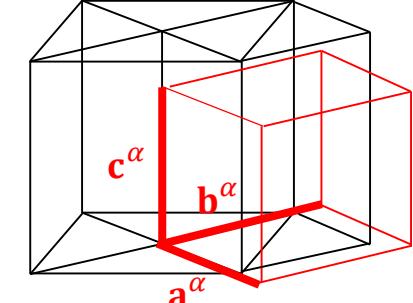
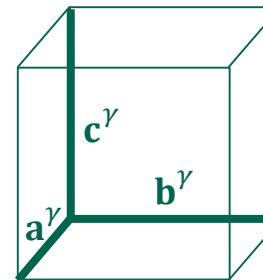
Pour calculer la matrice d'orientation on écrit les vecteurs $\mathbf{a}^\alpha, \mathbf{b}^\alpha, \mathbf{c}^\alpha$ dans la base $(\mathbf{a}^\gamma, \mathbf{b}^\gamma, \mathbf{c}^\gamma)$

$$\mathbf{a}^\alpha = \frac{\mathbf{a}^\gamma + \mathbf{b}^\gamma}{\|\mathbf{a}^\gamma + \mathbf{b}^\gamma\|} \|\mathbf{a}^\alpha\| = \frac{\|\mathbf{a}^\alpha\|}{\|\mathbf{a}^\gamma + \mathbf{b}^\gamma\|} (\mathbf{a}^\gamma + \mathbf{b}^\gamma) = \frac{a_\alpha}{\sqrt{2}a_\gamma} (\mathbf{a}^\gamma + \mathbf{b}^\gamma) = \frac{1}{\sqrt{3}} (\mathbf{a}^\gamma + \mathbf{b}^\gamma)$$

De même pour \mathbf{b}^α .

$$\text{et } \mathbf{c}^\alpha = \frac{\mathbf{c}^\gamma}{\|\mathbf{c}^\gamma\|} \|\mathbf{c}^\alpha\| = \frac{\|\mathbf{c}^\alpha\|}{\|\mathbf{c}^\gamma\|} \mathbf{c}^\gamma = \frac{a_\alpha}{a_\gamma} \mathbf{c}^\gamma = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \mathbf{c}^\gamma$$

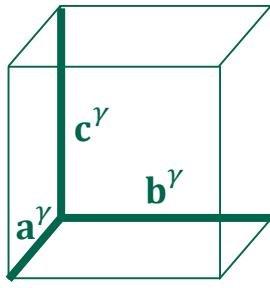
$$\rightarrow \mathbf{T}^{\gamma \rightarrow \alpha} = [\mathbf{B}^\gamma \rightarrow \mathbf{B}^\alpha] = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} & -1/\sqrt{3} & 0 \\ 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2/3} \end{pmatrix}$$



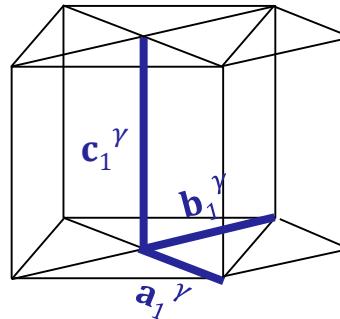
Exercise 1 Solution

4. Distortion

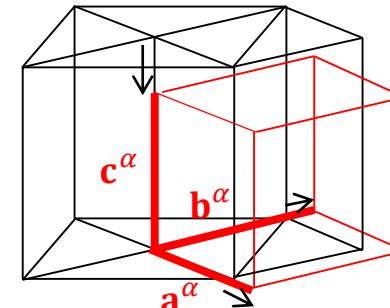
\mathbf{F}_0^γ peut être trouvée directement par la relation $\mathbf{C}^{\alpha \rightarrow \gamma} = \mathbf{T}^{\alpha \rightarrow \gamma} \mathbf{F}^\gamma$,
Mais on peut aussi la calculer en prenant une base intermédiaire:



γ (fcc)



$\mathbf{B}_1^\gamma = (\mathbf{a}_1^\gamma, \mathbf{b}_1^\gamma, \mathbf{c}_1^\gamma)$



α (bcc)

On prend comme base intermédiaire $\mathbf{B}_1^\gamma = (\mathbf{a}_1^\gamma, \mathbf{b}_1^\gamma, \mathbf{c}_1^\gamma)$; sa matrice de passage est $[\mathbf{B}^\gamma \rightarrow \mathbf{B}_1^\gamma] = \begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

Après distorsion $\mathbf{B}_1^\gamma = \mathbf{B}^\alpha$. Cette base n'est pas orthonormée mais ce n'est pas grave.

En travaillant dans la base \mathbf{B}_1^γ , la matrice de distorsion est diagonale. Les valeurs de la matrice sont les coefficients de multiplication

$$\text{entre la norme des vecteurs de bases (« après » / « avant ») , soit } \mathbf{F}_1^\gamma = [\mathbf{B}_1^\gamma \rightarrow \mathbf{B}_1^{\gamma \rightarrow \alpha}] = \begin{pmatrix} \frac{a^\alpha}{\frac{\sqrt{2}}{2}a_\gamma} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{a^\alpha}{\frac{\sqrt{2}}{2}a_\gamma} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{c_\alpha}{c_\gamma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2/\sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 2/\sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2/3} \end{pmatrix}$$

On en déduit que $\mathbf{F}^\gamma = [\mathbf{B}^\gamma \rightarrow \mathbf{B}_1^\gamma] \mathbf{F}_1^\gamma [\mathbf{B}^\gamma \rightarrow \mathbf{B}_1^\gamma]^{-1} = \begin{pmatrix} 2/\sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 2/\sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2/3} \end{pmatrix}$

Exercise 1 Solution

5. Calculs sur les directions. Pas besoin de compliquer les calculs, il suffit juste d'appliquer la matrice de correspondance:

$$\mathbf{u}/\mathbf{B}_0^\gamma = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} \rightarrow \mathbf{u}'/\mathbf{B}_0^\alpha = \mathbf{C}_0^{\alpha \rightarrow \gamma} \mathbf{u}/\mathbf{B}_0^\gamma = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix}$$

6. Calculs sur les plans. Idem, mais avec la correspondance pour les plans, soit $(\mathbf{C}_0^{\alpha \rightarrow \gamma})^* = (\mathbf{C}_0^{\alpha \rightarrow \gamma})^{-t}$:

$$\mathbf{g}/\mathbf{B}_0^\gamma = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \mathbf{g}'/\mathbf{B}_0^\alpha = (\mathbf{C}_0^{\alpha \rightarrow \gamma})^{-t} \mathbf{g}/\mathbf{B}_0^\gamma = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

7. Changement de volume. Dans le modèle de sphères dures de diamètre constant, $\frac{V'}{V} = \text{Det}(F) = \frac{4\sqrt{2}}{3\sqrt{3}} \approx 1.088 \Rightarrow 8.8\%$. Cette valeur est supérieure aux valeurs mesurées 4% \Rightarrow Les atomes de Fe ont un diamètre qui se réduit légèrement lorsqu'ils passent de la phase fcc à la phase bcc. Une explication très simplifiée est que le nombre de liaisons dans la phase bcc est 8 au lieux de 12 dans la phase fcc; comme les liaisons sont moins nombreuses, elles sont plus fortes et les atomes plus rapprochés.
