Université Mohammed V Agdal
Faculté des Sciences - Rabat
Département de Physique

Année universitaire 2014 - 2015
Sciences de la Matière Physique
Semestre 5

Module 30 — Physique des Matériaux
Evaluation 1 - Correction

Etude de la structure Zr_α.

Partie A

1. Tous les détails des calculs doivent figurer sur la copie :

Dans la base orthonormée $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$:

$$\vec{a} = \frac{a\sqrt{3}}{2}\,\vec{e}_1 + \frac{a}{2}\vec{e}_2$$

$$\vec{b} = -\frac{a\sqrt{3}}{2}\vec{e}_1 + \frac{a}{2}\vec{e}_2 \qquad (\mathbf{0,75\ point})$$

$$\vec{c} = c\vec{e}_3$$

$$V = \vec{a}.\left(\vec{b}\wedge\vec{c}\right) = det\left(\vec{a},\vec{b},\vec{c},\right) = a^2c\begin{vmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2c \qquad (\mathbf{0,5\ point})$$

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{V}\left(\vec{b}\wedge\vec{c}\right) = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\left(\frac{1}{2}\vec{e}_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}\vec{e}_2\right)$$

$$\vec{b}^* = \frac{2\pi}{V}\left(\vec{c}\wedge\vec{a}\right) = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\left(-\frac{1}{2}\vec{e}_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}\vec{e}_2\right) \qquad (\mathbf{0,75\ point})$$

$$\vec{c}^* = \frac{2\pi}{V}\left(\vec{a}\wedge\vec{b}\right) = \frac{2\pi}{c}\vec{e}_3$$

2. Tous les détails des calculs doivent figurer sur la copie :

On a :

$$d(h,k,\ell) = \frac{2\pi}{\left\|\vec{G}(h,k,\ell)\right\|} \qquad (\mathbf{0,5\ point})$$

$$\vec{G}(h,k,\ell) = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + \ell\vec{c}^* \qquad (\mathbf{0,5\ point})$$

$$\vec{G}(h,k,\ell) = h\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\left(\frac{1}{2}\vec{e}_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}\vec{e}_2\right) + k\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\left(-\frac{1}{2}\vec{e}_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}\vec{e}_2\right)\,\vec{e}_2 + \frac{2\pi}{c}\vec{e}_3$$

$$\vec{G}(h,k,\ell) = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}(h-k)\vec{e}_1 + \frac{2\pi}{a}(h+k)\vec{e}_{21}\frac{2\pi\ell}{c}\,\vec{e}_3 \qquad (\mathbf{1\ point})$$

$$\left\|\vec{G}(h,k,\ell)\right\| = \frac{2\pi\sqrt{\frac{4}{3}(h^2+k^2+hk)+\ell^2\frac{a^2}{c^2}}}{a} \qquad (\mathbf{0,5\ point})$$

$$d(h,k,\ell) = \frac{a}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2+k^2+hk)+\ell^2\frac{a^2}{c^2}}} \qquad (\mathbf{0,5\ point})$$

Partie B

1. $a = 0{,}323$ nm et $c = 0{,}515$ nm. Le rayon du zirconium doit vérifier:

$$a = 2r \quad (\mathbf{0,25\ point})$$

$$c = 4\sqrt{\frac{2}{3}}\,r \quad (\mathbf{0,25\ point})$$

$$\begin{cases} r_{Zr} = \dfrac{a}{2} = 0{,}162\ (\mathbf{0,25\ point}) \\ r_{Zr} = \dfrac{\sqrt{3}\,c}{4\sqrt{2}} = 0{,}158\ (\mathbf{0,25\ point}) \end{cases}$$

On déduit alors:

$$r_{Zr} = \frac{0{,}162 + 0{,}158}{2} = 0{,}160\ nm \quad (\mathbf{1\ point})$$

2.

$$\rho_{Zr} = \frac{2M_{Zr}}{V_{maille}} = \frac{4M_{Zr}}{N_A\sqrt{3}.\,a^2.\,c} \quad (\mathbf{1\ point})$$

$$\rho_{Zr} = \mathbf{6,51\ 10^3}\ \mathrm{kg.m^{-3}} \quad (\mathbf{1\ point})$$

L'écart relatif entre la valeur calculée et la valeur expérimentale est :

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = 0{,}5\ \% \quad (\mathbf{1\ point})$$

3. les coordonnées des atomes de Zr, (000) $\left(\frac{2}{3}\frac{1}{3}\frac{1}{2}\right)$:

$$F(h,k,\ell) = f_{Zr}\left[1 + \exp\left(-2i\pi\left(\frac{2h+k}{3} + \frac{\ell}{2}\right)\right)\right] \quad (\mathbf{1\ point})$$

4. Tous les détails des calculs doivent figurer sur la copie ($\mathbf{6 \times 0,5\ points}$) :

(hkl)	(100)	(101)	(111)
$F(h,k,\ell)/f_{Zr}$	$1 + \exp\frac{-4i\pi}{3} = \frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{3}{2} - i\frac{\sqrt{3}}{2}$	0

(hkl)	(200)	(102)	(112)
$F(h,k,\ell)/f_{Zr}$	$\frac{1}{2} - i\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2}$	2

Choisir 4 réflexions tel que $F(h,k,\ell) \neq 0$ parmi les 5 : ($\mathbf{4 \times 0,25\ point}$) :

(hkl)	(100)	(101)	(200)	(102)	(112)

Partie C (0,25 pt par mot clé)

1. Ce sont des matériaux où les atomes (ou les molécules) ne présentent aucun ordre à grande distance mais seulement un ordre à courte distance décrit, comme dans le cas des liquides, par une fonction de distribution. (**1 point**)

2. Certains alliages amorphes présentent des propriétés magnétiques intéressantes et une bonne tenue à la corrosion. (**1 point**)

3. Le diagramme de diffraction des RX du matériau amorphe est différent de celui du matériau cristallin. Il est constitué d'une raie très large diffuse, indiquant l'absence d'unité structurale qui se répéterait identique à elle-même à intervalle périodique dans les trois dimensions, alors que le deuxième présente des pics bien résolu correspondant au réseau tétragonal comme indiqué sur la figure. (**2 points**)

4. A partir du diagramme de DRX d'un matériau amorphe le seul paramètre qui peut être déterminé est la fonction de distribution radiale. Celle-ci est obtenue à partir d'une analyse de Fourier de la courbe expérimentale de la diffraction des rayons X. Elle donne directement le nombre moyen d'atomes qui se trouvent à une distance quelconque d'un atome donné. (**1 point**)