# Examen de Structure de la Matière

Vendredi 6 avril 2018 13H30-15H00
Calculatrice et notes de cours autorisées

## 1 Diagramme de Phase du Fer.

La structure cristalline du Fer est très dépendante des conditions de température et de pression. Ainsi le fer n'a pas la même structure dans les conditions ambiantes qu'au centre de la terre où la température atteint 3 000 $^\circ$C et la pression 200 GPa, soit 2 millions de fois la pression atmosphérique (1bar). De même la structure à haute température permet de traiter le fer pour renforcer les propriétés mécaniques une fois refroidis.

### 1.1 Phase $\alpha$ : la ferrite (6 points).

A température ambiante (300 K) et pression ambiante (1 bar), le fer cristallise dans la phase $\alpha$ (notée $Fe-\alpha$) dont le groupe d'espace est $Im\bar{3}m$. Le motif est donc constitué dun seul atome de fer et permet ainsi d'être ferromagnétique en dessous de 770 $^\circ$C : il agit comme un aimant permanent à température ambiante. Cependant sa structure ne permet qu'une faible solubilité du Carbone limitée à 0.035 en masse.

1. Quel est le groupe ponctuel de $Fe-\alpha$ ?
   $m\bar{3}m$
2. À quel système de Bravais appartient-il ?
   Système Cubique
3. Quel est son mode de réseau ?
   Centré I
4. En déduire une condition sur h,k,l pour l'existence d'une raie ?
   h+k+l pair (h+k+l=2n)
5. Combien y a-t-il de noeuds par maille élémentaire ?
   2 noeuds en (0,0,0) et (1/2,1/2,1/2)
6. Exprimer la distance réticulaire $d_{hkl}$ en fonction de $h$, $k$, $l$ et du paramètre de maille $a$.
   $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$
7. Lister les raies existantes (on se limitera aux 5 premières raies par ordre de $d_{hkl}$ décroissant), en indiquant leur multiplicité ainsi que la distance interéticulaire $d_{hkl}$ correspondante (en fonction de $a$).

| $(h,k,l)$ | $m$ | $d_{(h,k,l)}$ |
|---|---|---|
| $(1,1,0)$ | 12 | $a/\sqrt{2}$ |
| $(2,0,0)$ | 6 | $a/2$ |
| $(2,1,1)$ | 24 | $a/\sqrt{6}$ |
| $(2,2,0)$ | 12 | $a/\sqrt{8}$ |
| $(3,1,0)$ | 24 | $a/\sqrt{10}$ |
| $(2,2,2)$ | 8 | $a/\sqrt{12}$ |

8. Donner l'expression de la loi de Bragg.
   $2dsin(\theta) = \lambda$
9. On réalise une expérience de diffraction sur poudre, avec un faisceau incident de longueur d'onde $\lambda$=0.71Å. La première raie de Bragg se situe à un angle $2\theta$=20.15 $^\circ$. En déduire le

paramètre de maille $a$.
Première raie : (1,1,0) avec $d_{(1,1,0)} = a/\sqrt{2}$ donc d'après la loi de Bragg : $a = \frac{\lambda\sqrt{2}}{2sin(\theta)} = 2.87Å$.

10. Calculer le volume moyen occupé par chaque atome de Fe $V_\alpha$ donné par le volume de la maille élémentaire divisé par le nombre de noeud.
$V_\gamma = a^3/2 = 11.82Å^3$

## 1.2 Phase $\gamma$ (5 points).

A pression ambiante (1bar) et en augmentant la température (entre 911 ° C et 1392 ° C), le fer change de structure pour cristalliser dans le groupe d'espace $Fm\bar{3}m$. Cette phase est notée $Fe - \gamma$. Cette structure permet de dissoudre du carbone jusqu'à 2.1 en masse (ou d'autres éléments tels que Mn, Ni, Cu, N ou Zn) permettant d'augmenter la résistance à la corrosion ainsi que les propriétés mécaniques par rapport à l'acier ferritique.

1. Donner le système de Bravais ainsi que le mode de réseau de $Fe - \gamma$.
Système cubique mode Face centré F
2. En déduire une condition sur h,k,l pour l'existence d'une raie ?
h,k,l de même parité
3. Représenter la maille élémentaire ainsi que la famille de plans (1,0,0). S'agit-il d'une famille de plan réticulaire ? Justifier votre réponse.
Il ne s'agit pas d'une famille de plans réticulaires car les plans ne contiennent pas tous les noeuds de la maille.
4. Combien y a-t-il de noeuds par maille élémentaire ?
4 noeuds en (0,0,0), (0,1/2,1/2), (1/2,0,1/2) et (1/2,1/2,0)
5. Lister les raies existantes (on se limitera aux 5 premières raies par ordre de $d_{hkl}$ décroissant), en indiquant leur multiplicité ainsi que la distance interéticulaire $d_{hkl}$ correspondante (en fonction de $a$).

| $(h,k,l)$ | $m$ | $d_{(h,k,l)}$ |
|---|---|---|
| $(1,1,1)$ | 8 | $a/\sqrt{3}$ |
| $(2,0,0)$ | 6 | $a/2$ |
| $(2,2,0)$ | 12 | $a/\sqrt{8}$ |
| $(3,1,1)$ | 24 | $a/\sqrt{11}$ |
| $(2,2,2)$ | 8 | $a/\sqrt{12}$ |

6. On réalise la même expérience de diffraction sur poudre que sur le $Fe - \alpha$. La première raie de Bragg se situe à un angle $2\theta$=19.3 ° . En déduire le paramètre de maille $a$.
Première raie : (1,1,1) avec $d_{(1,1,1)} = a/\sqrt{3}$ donc d'après la loi de Bragg : $a = \frac{\lambda\sqrt{3}}{2sin(\theta)} = 3.67Å$.
7. Calculer le volume moyen occupé par chaque atome de Fe $V_\gamma$ donné par le volume de la maille élémentaire divisé par le nombre de noeud.
$V_\gamma = a^3/4 = 12.36Å^3$
8. Comparer ainsi la densité du Fer des phases $Fe - \gamma$ et $Fe - \alpha$. Le résultat est-il cohérent avec le fait qu'il est plus facile d'incorporer du carbone dans la phase $Fe - \gamma$ ?
la densité de la phase $Fe - \gamma$ est plus faible, permettant d'insérer plus facilement du carbone entre les sites de Fe.

## 1.3 Phase $\epsilon$ (9 points).

La phase haute pression du fer, notée $Fe - \epsilon$ n'a pas d'application particulière. Elle est principalement étudiée par les géologues pour comprendre la structure du noyau terrestre, dont le fer est la composante principale. En effet, au delà de 12 GPa ($\approx$ 1.2 $10^5$bars), le fer cristallise dans le groupe d'espace $P6_3/mmc$. Le motif est alors constitué de 2 atomes de Fer en (1/3,2/3,3/4) et (2/3, 1/3, 1/4) et les paramètres de mailles sont $a$=2.58Å et $c$=4.21Å.

1. Quel est le groupe ponctuel de $Fe-\epsilon$ ?
   $6/mmm$
2. Donner le système de Bravais ainsi que le mode de réseau de $Fe-\epsilon$.
   Système hexagonal mode Primitif P
3. A quoi correspondent les éléments de symétrie $6_3$ et $c$ ?
   $6_3$ : rotation de $2\pi/6$ puis translation de c/2, $c$ : miroir perpendiculaire à a+b et translation de c/2
4. La maille est représentée dans le plan (a,b) pour z=1/4 sur la Fig. 2 en Annexe. Indiquer les vecteurs $\vec{a}$ et $\vec{b}$ du réseau direct ainsi que les vecteur $\vec{a}^*$ et $\vec{b}^*$ du réseau réciproque sur cette figure.
5. Combien y a-t-il de noeuds par maille élémentaire ?
   1 noeud en (0,0,0)
6. Exprimer la distance réticulaire $d_{hkl}$ en fonction de $h$, $k$, $l$ et des paramètres de maille $a$, $c$ et $\gamma$.
   $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2+k^2+hk)+l^2(\frac{a}{c})^2}} = \frac{ac}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2+k^2+hk)c^2+l^2a^2}}$
7. Donner l'expression du facteur de structure $F_{hkl}$ pour $Fe-\epsilon$. On notera $f_{Fe}$ le facteur de diffusion atomique du Fer.
   $F_{h,k,l} = f_{Fe}\left[e^{i2\pi(\frac{h}{3}+\frac{2k}{3}+\frac{3l}{4})} + e^{i2\pi(\frac{2h}{3}+\frac{1k}{3}+\frac{l}{4})}\right] = f_{Fe}e^{i2\pi(\frac{h}{3}+\frac{2k}{3}+\frac{3l}{4})}\left[1+e^{i2\pi(\frac{h-k}{3}-\frac{l}{2})}\right]$
8. Montrer que pour h=k, l'intensité est nulle pour l impair.
   $F_{h,h,l} = f_{Fe}e^{i2\pi(h+\frac{3l}{4})}\left[1+e^{-i\pi l}\right] = 0$ si l impair.
9. Lister les raies existantes (on se limitera aux 4 premières raies par ordre de $d_{hkl}$ décroissant), en indiquant leur multiplicité ainsi que la distance interéticulaire $d_{hkl}$ correspondante (en fonction de $a$).

| $(h,k,l)$ | $m$ | $d_{(h,k,l)}$ |
|---|---|---|
| $(1,0,0)$ | 6 | $a$ |
| $(0,0,2)$ | 2 | $c/2$ |
| $(1,0,1)$ | 12 | $ac/\sqrt{\frac{4}{3}c^2+a^2}$ |
| $(1,0,2)$ | 12 | $ac/\sqrt{\frac{4}{3}c^2+2a^2}$ |

10. En utilisant la loi de Bragg, calculer l'angle $2\theta$ attendu pour les 2 premières raies (on prendra $\lambda$=0.71Å. Comparer au résultat expérimental de la Fig. 1.
    $2\theta_{1,0,0} = 2sin^{-1}(\frac{\lambda}{2a}) = 18.28^\circ$ et $2\theta_{1,0,0} = 2sin^{-1}(\frac{\lambda}{c}) = 19.42^\circ$
11. Indexer les 4 premières raies du diffractogramme Fig. 1. (Annexe 1).
    Dans l'ordre : (1,0,0), (0,0,2) (1,0,1) et (1,0,2).
12. Sachant que $F_{(0,0,2)} \approx 0.97$ et $F_{(1,0,1)} \approx 0.76$, calculer l'intensité pour ces deux raies. Comparer au résultat expérimental de la Fig. 1.
    $I = m_{(h,k,l)}|F_{(h,k,l)}|^2$ avec $m_{(h,k,l)}$ la multiplicité.