

TD №2

Exercice 1 :

On considère la diffusion atomique du cuivre dans l'aluminium. La concentration est donnée suivant la relation : $c = 50 (1 - (u))$ avec $u = x \sqrt{2/Dt}$.

1. A 500 °C, le coefficient de diffusion est $D = 4,1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$.

a. Calculer la concentration en cuivre dans l'aluminium à $x = 0,08 \text{ mm}$ de la surface de séparation au bout d'un temps $t = 50 \text{ heures}$. On donne les valeurs : $\text{erf}(0,4) = 0,4284$ et $\text{erf}(0,5) = 0,5205$

b. Tracer l'allure de la courbe $c = f(x)$ dans l'aluminium.

c. A 600 °C, le coefficient de diffusion est $D' = 5,3 \cdot 10^{-13} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$. Calculer la durée équivalente au traitement précédent. On rappelle que $T \text{ K} = T \text{ °C} + 273$

d. Calculer l'enthalpie ΔH_D de diffusion des atomes de cuivre dans l'aluminium.

2. Le cuivre et l'aluminium suivent le réseau cristallin cubique faces centrées, leurs rayons atomiques sont respectivement 0,128 et 0,143 nm, ils forment des ions Cu^+ et Al^{3+} , le cuivre a pu historiquement se trouver à l'état natif.

a. En utilisant les règles de Hume-Rothery, que peut-on dire des solutions solides primaires cuivre-aluminium ?

b. Retrouver en le calculant le rayon atomique de l'aluminium sachant que sa masse volumique est $\rho = 2700 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ et sa masse molaire $M = 27 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$. On donne le nombre d'Avogadro $N = 6,02 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$.

Exercice 2:

On rappelle que $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ et que la constante des gaz parfaits est $R = 8,32 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$.

1. Le recuit d'un échantillon de ferrite provoque un dégagement de chaleur de $0,8 \text{ J} \cdot \text{g}^{-1}$ attribué à la disparition de dislocations. Une énergie de 6 eV fait disparaître 1 nm de dislocations. Calculer la diminution de la densité de dislocations pendant ce recuit. On donne la masse volumique de la ferrite : $\rho = 7,8 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$.

Calculer la concentration en lacunes pour un cristal de fer α de masse volumique $\rho = 7,8700 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ sachant que la masse volumique est de $7,8814 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ pour le cristal parfait.

Exercice 3 :

1/ L'argent et le cuivre purs cristallisent dans un réseau compact cubique à faces centrées (c.f.c.).

a. Quelle est sa coordinance ?

b. Calculer les paramètres de la maille et les masses volumique $\rho_{\text{(Ag)}}$ et $\rho_{\text{(Cu)}}$. Données : $r_{\text{(Ag)}} = 144 \text{ pm}$, $M_{\text{(Ag)}} = 107,9 \text{ g.mol}^{-1}$, $r_{\text{(Cu)}} = 128 \text{ pm}$, $M_{\text{(Cu)}} = 63,5 \text{ g.mol}^{-1}$.

2/Déterminer le rayon maximal des sphères qu'on peut insérer respectivement dans les sites octaédriques et tétraédriques de ce cristal.

3/Pour une composition particulière, l'alliage CuAg peut présenter la structure ordonnée suivante: les atomes d'argent occupent les sommets et le centre des bases, les atomes de cuivre occupent les centres des faces latérales du parallélépipède de base carrée.

a. Déterminer la composition de l'alliage.

b. Déterminer les paramètres de la maille de l'alliage sachant que les atomes sont tangents suivant les faces.

c. Calculer la masse volumique de l'alliage.

Exercice 4:

Un cristal monoatomique « idéal » est un arrangement d'atomes identiques sur les nœuds d'un réseau infini (réseau cristallin ou réseau de Bravais). Un cristal « réel » est fini. En outre, il présente plusieurs types de défauts. Parmi ces défauts on trouve les « lacunes » (c'est-à-dire l'absence d'un atome d'un nœud du réseau) et les « interstitiels » (présence d'un atome dans un site interstitiel). On se propose de déterminer la concentration des lacunes et des interstitiels pour un cristal monoatomique à une température T fixée sous les hypothèses suivantes :

Le cristal a des dimensions finies mais macroscopiques. Tout effet lié à sa taille finie est négligeable. N est à la fois le nombre total d'atomes et le nombre de sites du réseau ; le nombre de sites interstitiels disponibles est également N .

* Les lacunes et les interstitiels sont les seuls défauts présents dans le cristal. On prendra comme zéro de l'énergie l'énergie du cristal sans défauts, et on appellera ϵ_0 l'énergie de formation d'une lacune et ϵ_1 l'énergie de formation d'un interstitiel.

* On admettra que la présence des lacunes ou des interstitiels ne déforme pas le réseau cristallin.

* Le nombre de lacunes et d'interstitiels est identique, puisqu'un atome qui passe en interstitiel crée évidemment une lacune. Ce nombre est N_1 .

* N_1 est grand, mais petit par rapport au nombre total d'atomes N .

Approche microcanonique

1. On prend comme système le cristal : N_1 interstitiels, N_1 lacunes, et $N - N_1$ atomes aux nœuds. Donner la raison pour laquelle il est possible d'utiliser l'approche microcanonique bien que le système ait une température fixée.

2. Déterminer le nombre N_1 en fonction de N , ε_0 , ε_1 et T en utilisant la relation entre la température T , l'entropie et l'énergie E du système.

Approche grand canonique:

3. On considère deux sous-systèmes : les N_1 atomes interstitiels et les $N-N_1$ atomes aux nœuds.

Déterminer la fonction de partition grande canonique des N sites interstitiels (indépendants et discernables) et en déduire N_1 en fonction de ε_1 et du potentiel chimique μ .

4. Déterminer de la même façon $N-N_1$ en fonction de ε_0 et du potentiel chimique μ .

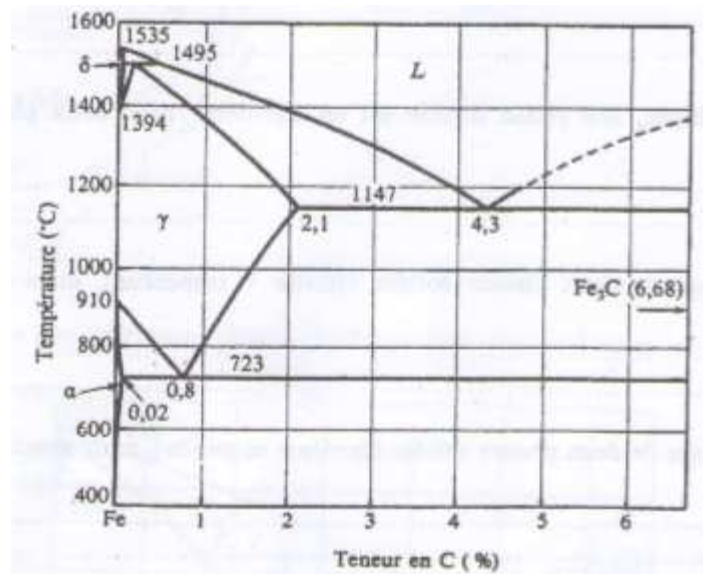
5. Retrouver, à l'équilibre, le résultat de la question 2.

6. Application numérique : déterminer à la température ambiante ($kT \approx 1/40$ eV) le taux d'interstitiels pour $\varepsilon_0 + \varepsilon_1 = 0,25$ eV.

TD N°3

Exercice1

Soit le diagramme Fer -carbone représenté ci-dessous



1 - Quel est ce diagramme binaire, le diagramme Fer-graphite ou le diagramme Fer cementite?

2 - Que représente la ligne de transformation à 1495°C ?

3- Que représente la ligne de transformation à 723°C ?

4-Indiquer le type d'alliage contenant 0.8% de carbone ?

- Quelle est la température de fin de solidification de cet alliage ?
- Quelle est la première phase solide qui apparaît à cette température ?
- Quelle est la température de début de fusion de cet alliage ?

5 - indiquer la nature des différentes phases de chaque domaine du diagramme.

6- À quelle température la solubilité du carbone dans le fer est-elle maximale dans la phase γ ?

7 - Quel est le pourcentage maximum de carbone dans la ferrite α ?

8- À 722°C , quelles sont les proportions des phases formées pour un alliage à 1% de carbone?

Exercice 2 :

Soit le diagramme d'équilibre Mg – Pb.

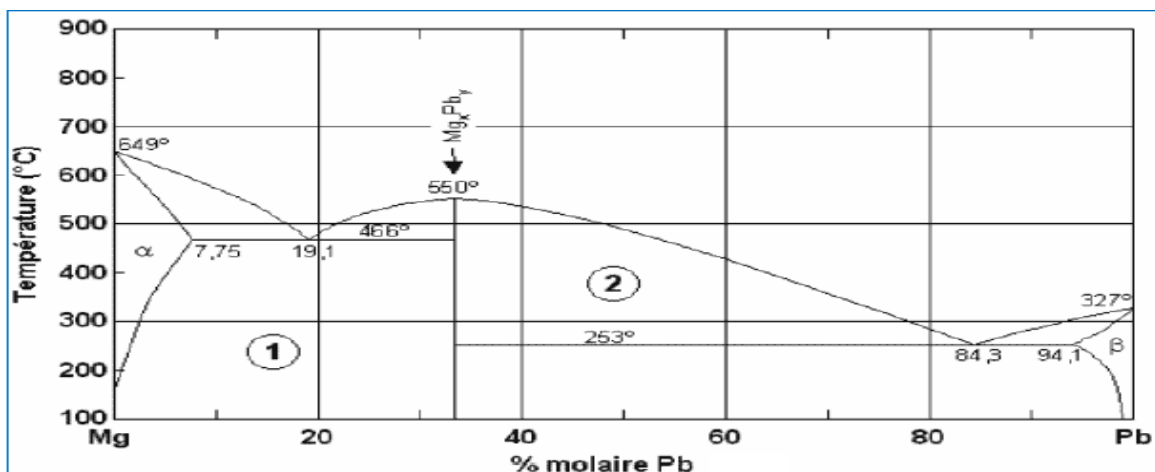
1- Quelle est la formule chimique du composé Mg_xPb_y ?

2- Quelles sont les phases en présence dans les domaines numérotés 1 et 2 sur le diagramme ?

3- À quelle température la solubilité du Pb dans le Mg est-elle maximale ?

4- Combien y a-t-il de réactions eutectiques dans ce diagramme ? Écrivez ces réactions, indiquez leur température et les compositions des phases en présence.

5- Tracer l'allure de la courbe de solidification de cet alliage, en identifiant les variances de chaque domaine présent.



Exercice 3:

Calculer la dimension du rayon critique r^* du germe sphérique de taille critique lorsque le cuivre solidifie par germination homogène et la variation de l'enthalpie libre. La chaleur latente de fusion du cuivre est égale à $1628 \cdot 10^6 \text{ J m}^{-3}$ et son énergie spécifique interfaciale vaut $177 \cdot 10^{-3} \text{ J m}^{-2}$. En première approximation, la germination homogène se produit lorsque le degré de surfusion ΔT est voisin de $0,2 T_m$ (K).

2-Calculer la variation de l'enthalpie libre ΔG .

3-Calculer la dérivée de ΔG par rapport au rayon critique $\left(\frac{d(\Delta G)}{dr_0}\right)$

Exercice 4 :

La théorie d'Avrami permet d'exprimer la cinétique globale de transformation d'un milieu en entités morphologiques d'une géométrie donnée (sphères par exemple). En ce sens, elle est donc universelle, et particulièrement utilisée pour traiter les problèmes de cristallisation. Sous sa forme la plus générale, la fraction volumique transformée en entités s'écrit :

$$F(t) = 1 - \exp [- V(t)]$$

où $V(t)$ serait la fraction volumique transformée si les entités pouvaient apparaître et croître complètement indépendamment les unes des autres (les germes peuvent être activés dans des zones déjà transformées et les entités peuvent s'interpénétrer en conservant leur forme).

a) On considérera un cas simple. Les entités sont des sphères qui apparaissent instantanément à partir de N_0 germes par unité de volume, avec deux types de croissance :

- la vitesse de croissance G est constante (cas des polymères),
- la vitesse de croissance G est gouvernée par la diffusion (cas des métaux). $R = A\sqrt{t}$

Donner dans les deux cas l'expression de $V(t)$. Montrer que l'on obtient l'expression classique :

$$F(t) = 1 - \exp [- kt^n]$$

b) Dans le cas d'un matériau totalement cristallin, $F(t)$ représente le taux de cristallinité en volume $F_c(t)$ à l'instant t . Ce n'est plus le cas lorsque les entités morphologiques sont que partiellement cristallisées. Montrer que si le taux de cristallinité est constant à l'intérieur des entités, on peut établir une relation simple entre $F(t)$ et $F_c(t)$.