

Physique 10 - Module 21
Elément 1 : Introduction à la Physique des Matériaux
Correction de l'évaluation 1

Exercice 1 : Quelques structures de l'oxyde de nickel

1. Caractéristiques de la structure

- Le motif de la structure est composé de deux atomes un atome de Ni et un atome d'oxygène O.
- Remplissage de sites octaédriques donne une coordinence (6,6) pour chaque ion.
- La masse volumique de l'oxyde de nickel :

$$\rho_{mi} = \frac{4 \cdot (M(O) + M(Ni))}{N_A \cdot a^3}$$

$$\rho_{mi} = 6,24 \cdot 10^3 \text{ kg.m}^{-3}$$

- On calcule l'écart relatif entre les deux valeurs :

$$\frac{\Delta \rho}{\rho} = \frac{\rho_{ma} - \rho_{mi}}{\rho_{ma}}$$

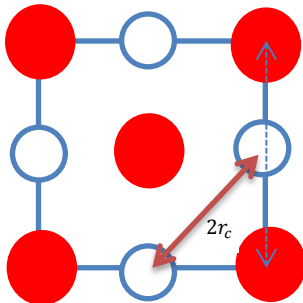
$$\frac{\Delta \rho}{\rho} = 6,5\%$$

- L'écart entre les deux valeurs est dû à la précision dans la détermination du paramètre du réseau.

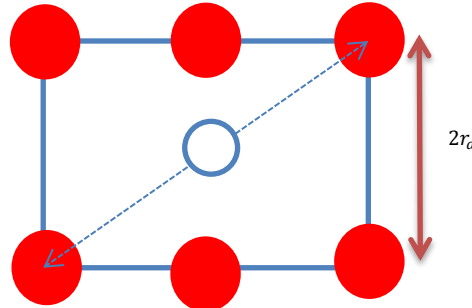
2. Stabilité de la structure

- Dans ce type de structure le contact est uniquement mixte **anion-cation** donc les contacts **anion-anion** et **cation-cation** sont exclus, on a deux contacts anion-cation possibles : le premier suivant l'arête du cube et le deuxième le long de la grande diagonale.

- Contact suivant l'arête :



- Contact suivant la diagonale du cube :



$$\begin{cases} r_a + r_c = \frac{a}{2} \\ 2r_c \leq \frac{\sqrt{2}}{2} \end{cases} \text{ ce qui donne } \sqrt{2} - 1 \leq \frac{r_c}{r_a} = x$$

$$\begin{cases} r_a + r_c = \frac{a\sqrt{3}}{2} \\ 2r_a \leq a \end{cases} \text{ ce qui donne } \frac{r_c}{r_a} = x \leq \sqrt{3} - 1$$

Soit : $0,414 \leq x \leq 0,732$

- Pour l'oxyde de nickel on a :

$$x = \frac{76}{140} = 0,543$$

La condition est bien vérifiée pour l'oxyde de nickel.

- On assimile les ions à des sphères de rayons r_a et r_c .

$$C = \frac{4 \cdot \left(\frac{4}{3} \pi r_a^3 + \frac{4}{3} \pi r_c^3 \right)}{a^3}$$

$$C = 0,671$$

3. Alliage Ni-Li-O

a. L'alliage obtenu est un alliage de substitution car des atomes de nickel ont été remplacés par des atomes de lithium.

b. le rayon ionique du lithium Li^+ étant supérieur à celui de Ni^{3+} , le contact sera O–Li–O.

$$a_\alpha = 2 \cdot (r_{\text{O}^{2-}} + r_{\text{Li}^+})$$

$$a_\alpha = 4,18 \cdot 10^2 \text{ pm.}$$

c. La masse volumique de l'oxyde :

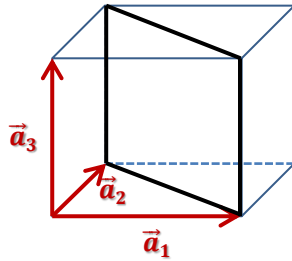
$$\rho_\alpha = \frac{4 \cdot M(\text{O}) + 2 \cdot (M(\text{Li}) + M(\text{Ni}))}{N_A \cdot a_\alpha^3}$$

$$\rho_\alpha = 4,43 \cdot 10^3 \text{ kg.m}^{-3}$$

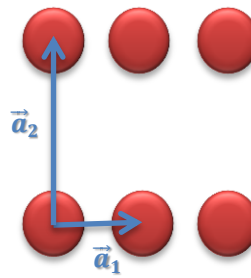
Exercice 2 : Diffraction par un réseau plan d'atomes de nickel

1. Etude du réseau plan

a. Le plan d'indices (110) est représenté en trait noir.



b. La distribution des atomes :



Réseau rectangulaire primitif

$$a_1 = a \frac{\sqrt{2}}{2} = 2,49 \text{ \AA}$$

$$a_2 = a = 3,52 \text{ \AA}$$

$$\phi = 90^\circ$$

c. On choisit une base orthonormée $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$.

$$\vec{a}_1 = a_1 \vec{i}$$

$$\vec{a}_2 = a_2 \vec{j}$$

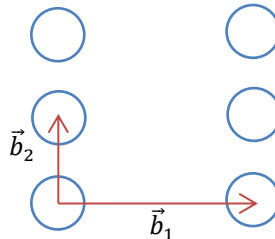
$$\vec{a}_3 = \vec{k}$$

On applique la définition du réseau réciproque :

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a_1} \vec{i} \quad b_1 = 2,52 \text{ \AA}^{-1}$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a_2} \vec{j} \quad b_2 = 1,78 \text{ \AA}^{-1}$$

$$\vec{b}_3 = \vec{k}$$



En fait le réseau réciproque est un faisceau de droites parallèles et normales au plan $(\vec{b}_1, \vec{b}_2)$. Dans ce plan la trace de ces droites sont des points que l'on déduira de l'origine par des translations $\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2$.

2. Diffraction d'un rayonnement par ce réseau plan

a. $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ A.N. $k = 4,46 \text{ \AA}^{-1}$

b. La condition de diffraction de Laue :

le vecteur $\vec{k}' - \vec{k}$ est un vecteur du réseau réciproque, Il existe un vecteur $\vec{G}$ du réseau réciproque tel que:

$$\Delta \vec{k} = \vec{G}$$

Ce qui équivaut à écrire :

$$2\vec{k} \cdot \vec{G} + \vec{G}^2 = 0$$

c. Construction d'Ewald

- On trace le vecteur $\vec{k}$ parallèlement au faisceau incident.
- Son extrémité est placée sur un nœud du réseau réciproque.
- On trace une sphère dont le rayon $R = \|\vec{k}\|$.
- Les nœuds du réseau réciproque, interceptés par la sphère d'Ewald, donneront les indices des réflexions susceptibles d'être observées.

d. D'après les questions a. et c. le rayon de la sphère est $R = 4,46 \text{ \AA}^{-1}$.

e. L'intersection entre la sphère et le réseau réciproque est un cercle de centre C et de rayon $4,46 \text{ \AA}^{-1}$ représenté sur la figure ci-dessous.

f. Les nœuds interceptés par la sphère d'Ewald sont les nœuds relatifs aux réflexions $(3,2)$ et $(3, \bar{2})$.

g. L'angle $(\vec{k}', \vec{k})$ est égale au double de l'angle de diffraction de Bragg.

On déduit l'angle de diffraction de Bragg :

$$\theta = \sin^{-1} \left(\frac{\|\vec{G}\|}{2\|\vec{k}\|} \right)$$

$$\theta = 69,5^\circ$$

Construction d'Ewald

