

TD N°2

Exercice 1 :

1/Calculer l'énergie de formation des lacunes de l'aluminium en J.mol^{-1} , sachant qu'à 500°C , la concentration en lacunes est de $7,6.10^{23} \text{ lacunes.m}^{-3}$. La masse atomique de l'aluminium est $M = 27 \text{ g.mol}^{-1}$ et sa masse volumique = $2,7 \text{ g.cm}^{-3}$.

2/On un cristal de fer alpha dont la diffusion du carbone avec une énergie d'activation $E_v = 0,87\text{eV}$, $D_0 = 0,02\text{cm}^2/\text{S}$ et $\nu = 10^{13}\text{S}^{-1}$. Calculer :

a- La concentration en lacune à la température ambiante.

b-Le paramètre Cristallin a.

Exercice 2 :

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

1. A 500°C , le coefficient de diffusion est $D = 4,1.10^{-14} \text{ m}^2 .\text{s}^{-1}$.

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 $D' = 5,3.10^{-13} \text{ m}^2 .\text{s}^{-1}$. Calculer la durée équivalente au traitement précédent. On rappelle que $T \text{ K} = T^\circ\text{C} + 273$

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 $0,143 \text{ nm}$, 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 $\rho = 2700 \text{ kg.m}^{-3}$ et sa masse molaire $M = 27 \text{ g.mol}^{-1}$. On donne le nombre d'Avogadro $N = 6,02.10^{23} \text{ mol}^{-1}$.

Exercice 3:

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

1. Le recuit d'un échantillon de ferrite provoque un dégagement de chaleur de 0,8 J./g.C. 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 : $\rho = 7,8 \text{ g.cm}^{-3}$.

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

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.