

Corrigé du Devoir Surveillé de chimie n°9

Partie I : Spectroscopie de l'atome d'hydrogène

1) Pour observer un spectre d'émission, on peut utiliser un tube à décharge, par exemple un tube de Geissler (1855), l'ancêtre des tubes à néon actuels. Le principe est de faire passer un faisceau d'électrons dans un tube dans lequel règne une pression réduite de dihydrogène :

H₂ sous $P \approx 1$ mbar

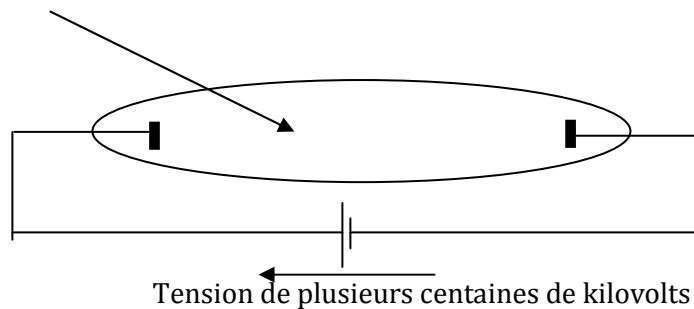


Schéma de principe d'un tube à décharge

Le faisceau d'électrons conduit à l'émission d'une lumière bleutée, qui est analysée au moyen d'un spectroscopie à prisme ou à réseau, ce qui donne le spectre de raies fourni.

2) Les électrons du faisceau, accélérés par la différence de potentiel, brisent des molécules H₂, ce qui conduit à la production d'atomes d'hydrogène excités. Lorsque ces atomes se relaxent, ils émettent leur surplus d'énergie sous forme de photons. Chaque photon possède l'énergie $E = \frac{hc}{\lambda}$. Si certaines valeurs discrètes de longueurs d'onde, donc d'énergie, peuvent être émises par un atome, c'est que celui-ci ne peut se trouver que dans des niveaux d'énergie eux-mêmes discontinus :

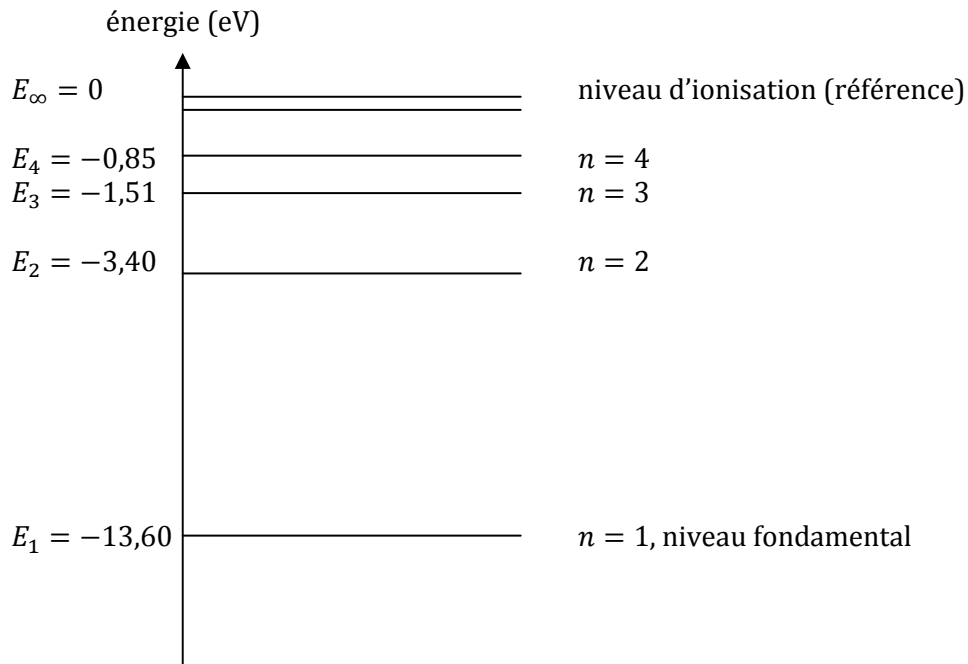
L'énergie de l'électron est quantifiée dans l'atome.

3) En prenant pour origine des énergies le niveau d'ionisation (électron porté à l'infini du noyau avec une énergie cinétique nulle), l'énergie que possède l'électron de l'atome d'hydrogène est quantifiée par le nombre quantique principal n de l'orbitale atomique selon la formule :

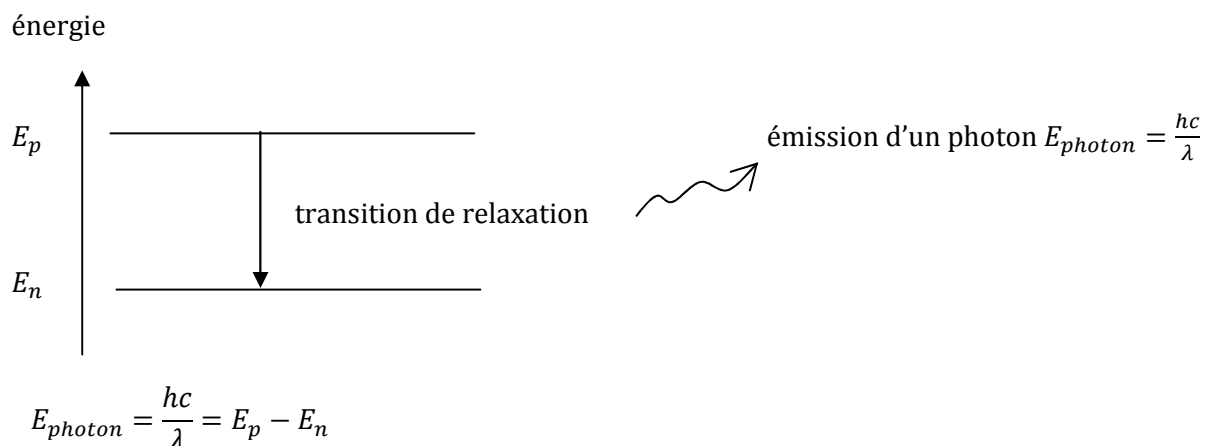
$$E_n = -\frac{A}{n^2}$$

... avec $A = 13,60$ eV.

On peut donc schématiser les niveaux d'énergie :



4) On applique la relation fondamentale de la spectroscopie au passage d'un niveau quelconque p à un niveau plus stable quelconque n . Cette relation exprime que le photon émis possède exactement la différence d'énergie entre les deux niveaux.



On exprime alors l'énergie de chaque niveau avec la formule de la question 3 :

$$\frac{hc}{\lambda} = -\frac{A}{p^2} - \left(-\frac{A}{n^2}\right) = A\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2}\right)$$

Finalement, on trouve :

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{A}{hc} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2}\right)$$

Ceci est bien la relation expérimentale, en identifiant la constante de Rydberg à :

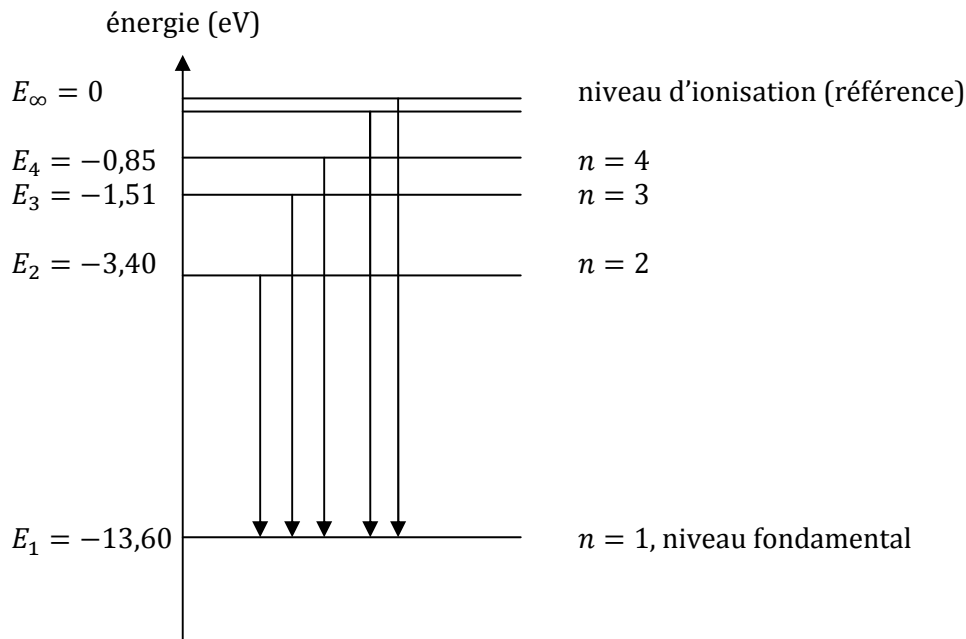
$$R_H = \frac{A}{hc} = 1,09 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$$

Attention : pour l'application numérique, il faut convertir l'énergie A en joules, sachant que $1 \text{ eV} = e \times (1 \text{ V}) = 1,60 \cdot 10^{-19} \text{ J}$. Donc $A = 13,60 \text{ eV} = (13,60 \times 1,60 \cdot 10^{-19}) \text{ J}$.

5) Une série de raies est l'ensemble des raies d'émission correspondant aux relaxations arrivant à un niveau n donné, c'est-à-dire **l'ensemble des photons émis lors des transitions $p \rightarrow n$ avec n fixé.**

6) Le domaine ultraviolet contient des longueurs inférieures à celles du visible, soit $\lambda < 400 \text{ nm}$, ce qui correspond à des photons d'énergie **supérieure à $\frac{hc}{\lambda} \approx 3,1 \text{ eV}$** .

La série de raies arrivant sur le niveau $n = 1$ correspond aux écarts énergétiques les plus élevés, avec des transitions d'énergies toutes supérieures à 10 eV. Toutes les raies sont donc situées dans l'UV, c'est la série de Lyman :



La série de Lyman contient l'ensemble des transitions de relaxation vers le niveau fondamental $n = 1$.

La transition la plus énergétique de cette série, donc correspondant à la longueur d'onde la plus courte, est la transition $\infty \rightarrow 1$:

$$\frac{hc}{\lambda_{min}} = E_\infty - E_1 = -E_1 = A$$

$$\lambda_{min} = \frac{hc}{A} = 91 \text{ nm}$$

La transition la moins énergétique, donc correspondant à la longueur d'onde la plus grande, est la transition $2 \rightarrow 1$:

$$\frac{hc}{\lambda_{max}} = E_2 - E_1 = A \left(-\frac{1}{4} + 1 \right) = \frac{3A}{4}$$

$$\lambda_{max} = \frac{4hc}{3A} = 122 \text{ nm}$$

7) Les séries arrivant sur des niveaux $n \geq 3$ possèdent nécessairement toutes des transitions d'énergies inférieures à 1,51 eV, donc leurs photons ont des longueurs d'onde supérieures à 830 nm : elles sont intégralement situées dans l'infrarouge.

La série restante, celle arrivant sur le niveau $n = 2$ est donc la série de Balmer. Elles contiennent des raies dans le domaine du visible et de l'ultraviolet proche, comme on va la vérifier dans les calculs suivants.

La série de Balmer contient l'ensemble des raies d'émission arrivant sur le niveau $n = 2$

Raie de BASE, transition $3 \rightarrow 2$: $\lambda_{3 \rightarrow 2} = \frac{hc}{E_3 - E_2} = \frac{hc}{A} \times \frac{1}{\frac{1}{4} - \frac{1}{9}} = 658 \text{ nm}$

Transition $4 \rightarrow 2$: $\lambda_{4 \rightarrow 2} = \frac{hc}{E_4 - E_2} = \frac{hc}{A} \times \frac{1}{\frac{1}{4} - \frac{1}{16}} = 488 \text{ nm}$

$$\text{Transition } 5 \rightarrow 2 : \lambda_{4 \rightarrow 2} = \frac{hc}{E_5 - E_2} = \frac{hc}{A} \times \frac{1}{\frac{1}{4} - \frac{1}{25}} = 435 \text{ nm}$$

$$\text{Transition } 6 \rightarrow 2 : \lambda_{6 \rightarrow 2} = \frac{hc}{E_6 - E_2} = \frac{hc}{A} \times \frac{1}{\frac{1}{4} - \frac{1}{36}} = 411 \text{ nm}$$

Transition 7 \rightarrow 2 : $\lambda_{6 \rightarrow 2} = \frac{hc}{E_6 - E_2} = \frac{hc}{A} \times \frac{1}{\frac{1}{4} - \frac{1}{49}} = 398 \text{ nm} < 400 \text{ nm}$: dans l'UV... ainsi que toutes les raies suivantes.

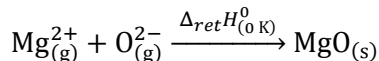
La série de Balmer contient donc 4 raies dans le domaine du visible, aux longueurs d'onde : 658, 488, 435 et 411 nm

L'œil perçoit une couleur obtenue par **synthèse additive** des quatre longueurs d'onde précédentes. L'une d'entre elles étant dans le rouge et les trois autres dans le bleu/violet, la lumière perçue est à dominante bleue.

La lampe à hydrogène émet une lumière bleutée.

Partie II : Calcul d'une enthalpie réticulaire

1) L'enthalpie réticulaire de MgO est l'enthalpie standard $\Delta_r H^0$ de la réaction de constitution du cristal à partir des ions Mg^{2+} et O^{2-} en phase gazeuse à $T = 0 \text{ K}$:



2) D'après la loi de Kirchhoff :

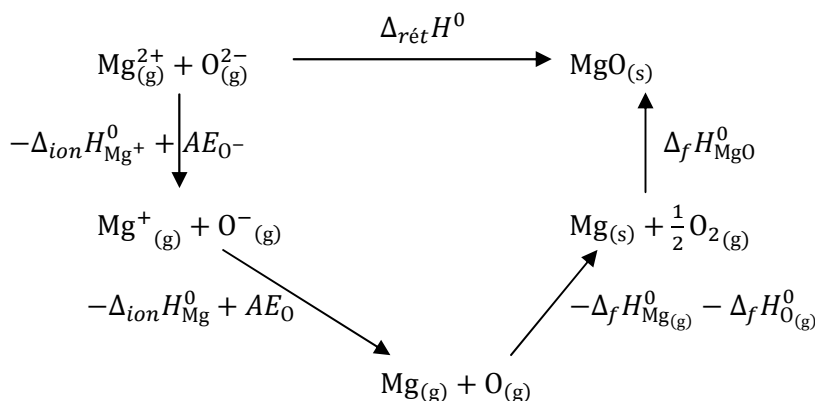
$$\Delta_{ret} H^0_{(T)} = \Delta_{ret} H^0_{(0K)} + \int_0^T \Delta_{ret} C_p^0(T) \cdot dT$$

... avec $\Delta_{ret} C_p^0(T) = C_p^0_{\text{MgO}_{(s)}(T)} - C_p^0_{\text{Mg}_{(g)}^{2+}(T)} - C_p^0_{\text{O}_{(g)}^{2-}(T)}$

3) L'approximation d'Ellingham consiste à négliger le terme $\int_0^T \Delta_{ret} C_p^0(T) \cdot dT$ dans la loi de Kirchhoff devant $\Delta_{ret} H^0_{(0K)}$. Ainsi l'enthalpie réticulaire est considérée indépendante de T :

$$\Delta_{ret} H^0_{(T)} \approx \Delta_{ret} H^0_{(0K)}$$

4) On réalise un cycle faisant intervenir les réactions correspondant aux données de l'énoncé. Dans l'approximation d'Ellingham, on ne se préoccupe pas de la température.



Finalement :

$$\Delta_{ret} H^0 = -\Delta_{ion} H^0_{\text{Mg}^+} + AE_{\text{O}^-} - \Delta_{ion} H^0_{\text{Mg}} + AE_{\text{O}} - \Delta_f H^0_{\text{Mg}_{(g)}} - \Delta_f H^0_{\text{O}_{(g)}} + \Delta_f H^0_{\text{MgO}}$$

Application numérique :

$$\Delta_{ret} H^0 = -3896 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

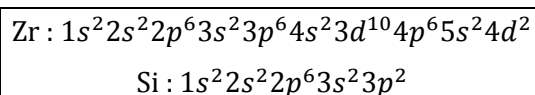
Partie III : Zircon et zirconium

Structure du zircon

1) Pour écrire une configuration électronique, on utilise :

- le principe de Pauli, qui stipule que deux électrons ne peuvent avoir leurs quatre nombres quantiques n , ℓ , m_ℓ et m_s identiques : on ne peut donc placer que deux électrons par orbitale atomique ;
- la règle de Klechkowski, qui est une règle empirique permettant de connaître l'ordre de remplissage des OA : ordre croissant de $n + \ell$ et, en cas d'égalité, ordre croissant de n .

En appliquant ces deux règles, on établit les configurations électroniques demandées :



2) L'oxygène ($Z = 8 : 1s^2 2s^2 2p^4$) est beaucoup plus électronégatif que le silicium et le zirconium. Il tend donc à capter des électrons pour compléter sa couche de valence ; il faut pour cela deux électrons pour atteindre l'ion O^{2-} qui a la configuration électronique du néon ($1s^2 2s^2 2p^6$).

Le zirconium et le silicium cèdent formellement leurs électrons de valence à l'oxygène. Or ils en ont chacun quatre ($5s^2 4d^2$ pour Zr ; $3s^2 3p^2$ pour Si) ; d'où les ions formels obtenus : Zr^{4+} et Si^{4+} .

3) Le rayon ionique est défini à partir des mesures expérimentales des distances inter-ioniques $d = r_+ + r_-$ par cristallographie, et en choisissant un rayon ionique de référence (par exemple $r_{O^{2-}} = 140$ pm en coordinence 6 dans l'échelle de Goldschmidt).

4) On applique la définition précédente :

$$d(\text{Zr} - \text{O}) = r_{\text{Zr}^{4+}} + r_{\text{O}^{2-}} \text{ et } d(\text{Si} - \text{O}) = r_{\text{Si}^{4+}} + r_{\text{O}^{2-}}$$

$r_{\text{O}^{2-}}$ n'est pas fourni, mais on l'élimine en soustrayant ces égalités :

$$d(\text{Zr} - \text{O}) - d(\text{Si} - \text{O}) = r_{\text{Zr}^{4+}} - r_{\text{Si}^{4+}}$$

$$r_{\text{Si}^{4+}} = r_{\text{Zr}^{4+}} - d(\text{Zr} - \text{O}) + d(\text{Si} - \text{O}) = 0,25 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

La coordinence du silicium est de 4 : cela signifie que

$$\text{chaque ion } \text{Si}^{4+} \text{ est en contact avec 4 ions } \text{O}^{2-}.$$

5) On énonce les définitions du cours...

Une **maille élémentaire** est une unité de base parallélépipédique à partir de laquelle on peut engendrer tout le cristal uniquement par des translations.

Elle est définie par une origine O et trois vecteurs de base \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} .

Ayant défini une maille élémentaire unitaire (la plus petite possible) d'origine O , on peut définir l'ensemble des points O' tels que $\vec{OO'} = n\vec{a} + m\vec{b} + p\vec{c}$, avec n, m, p entiers relatifs. Les points O' sont appelés des **nœuds**.

L'ensemble des nœuds constitue le **réseau cristallin** (ensemble de points d'environnement identique).

6) Une maille est centrée si elle possède un nœud en son centre en plus de son origine (elle contient donc deux nœuds).

C'est donc une maille double, c'est-à-dire qu'on aurait pu choisir une maille de volume deux fois plus petit, à placer sur chacun des nœuds, pour décrire le cristal, mais alors les propriétés de symétries auraient été moindres.

7) On calcule la masse volumique du zircon, qui correspond à la masse d'une maille (qui contient 4 entités ZrSiO_4) divisée par le volume d'une maille ($V = abc = a^2c$ car c'est un parallélépipède rectangle à base carrée) :

$$\rho = \frac{4 \times (M_{Zr} + M_{Si} + 4M_O)}{N_a \times a^2 c} = 4,7 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$$

$d = 4,7 > 2,65$: le zircon peut effectivement former des « placers ».

Incorporation d'impuretés dans les zircons naturels

8) Le plus simple est de dire :

- que le module d'Young est homogène à une pression (unité SI : Pa) donc le numérateur de l'exponentielle peut s'exprimer, en unités SI, en $\text{Pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$;
- que RT est homogène à $\frac{PV}{n}$ dans la loi des gaz parfaits... on peut donc l'exprimer aussi en $\text{Pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$ en unités SI...

L'argument de l'exponentielle est sans dimension.

9) Intuitivement, plus le rayon du cation du cation M^{4+} est proche de celui du cation à substituer, plus la substitution est facile. Ceci est confirmé par la formule de D_i fournie : plus $|r_i - r_0|$ est faible, plus l'argument de l'exponentielle est élevé (car il est négatif), donc plus D_i est élevé (la concentration de l'élément augmente dans le minéral par rapport au milieu de croissance).

On voit tout d'abord que les trois cations fournis ont un rayon beaucoup plus proche de celui de Zr^{4+} ($0,85 \cdot 10^{-10}$ m) que de celui de Si^{4+} ($0,25 \cdot 10^{-10}$ m) :

Les cations se substituent plus facilement au zirconium.

Et d'après la proximité des rayons avec la valeur $0,85 \cdot 10^{-10}$ m, on déduit immédiatement l'ordre décroissant de facilité d'incorporation :

$$\text{Hf}^{4+} > \text{U}^{4+} > \text{Th}^{4+}$$

10) Il s'agit d'une simple application numérique appliquée au rayon de U^{4+} . On trouve :

$$D_{U^{4+}} = 705$$

En notant $C_{i,min}$ et $C_{i,mil}$ les concentrations massiques dans le minéral et le milieu de croissance respectivement, on a :

$$D_{U^{4+}} = \frac{C_{U^{4+},min}}{C_{U^{4+},mil}}$$

Or $D_{U^{4+}} = 705 > 1$, donc $C_{U^{4+},min} > C_{U^{4+},mil}$:

U^{4+} a tendance à se concentrer dans le minéral plutôt que dans le milieu de croissance.

Et enfin, pour $C_{U^{4+},mil} = 1 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$, on trouve la concentration de U^{4+} dans le minéral :

$$C_{U^{4+},min} = D_{U^{4+}} \times C_{U^{4+},mil} = 705 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$$

Désintégrations radioactives de l'uranium et datation du zircon

11) Deux atomes sont dits isotopes si leurs noyaux ont

le même nombre de protons (même élément chimique)
mais des nombres de neutrons, donc des nombres de masse différents.

Une désintégration radioactive est un processus nucléaire **élémentaire** de décomposition, **ne nécessitant pas de choc** :

Elle est donc d'ordre 1 et *a priori* indépendante de la température.

12) On pose l'équation différentielle d'une cinétique d'ordre 1 :

$$v = -\frac{d[^{235}\text{U}]}{dt} = \lambda_{235}[^{235}\text{U}]$$

On peut écrire l'équation ainsi :

$$\frac{d[^{235}\text{U}]}{[^{235}\text{U}]} = -\lambda_{235} \cdot dt$$

... et l'intégrer entre deux instants t_0 et t_1 :

$$\int_{[^{235}\text{U}]_{t_0}}^{[^{235}\text{U}]_{t_1}} \frac{d[^{235}\text{U}]}{[^{235}\text{U}]} = -\lambda_{235} \int_{t_0}^{t_1} dt$$

... ce qui donne :

$$\ln[^{235}\text{U}]_{t_1} - \ln[^{235}\text{U}]_{t_0} = -\lambda_{235}(t_1 - t_0)$$

On en déduit les lois horaires :

$$[^{235}\text{U}]_{t_1} = [^{235}\text{U}]_{t_0} \cdot \exp(-\lambda_{235}(t_1 - t_0))$$

$$[^{238}\text{U}]_{t_1} = [^{238}\text{U}]_{t_0} \cdot \exp(-\lambda_{238}(t_1 - t_0))$$

D'où le rapport des abondances demandé :

$$\boxed{\frac{[^{235}\text{U}]_{t_1}}{[^{238}\text{U}]_{t_1}} = \frac{[^{235}\text{U}]_{t_0}}{[^{238}\text{U}]_{t_0}} \exp((\lambda_{238} - \lambda_{235})(t_1 - t_0))}$$

Si on note t_1 l'instant actuel, pour lequel $\frac{[^{235}\text{U}]_{t_1}}{[^{238}\text{U}]_{t_1}} = 10^{-2}$, alors à l'instant $t_0 = t_1 - 2 \cdot 10^9$ an, une application de la formule précédente montre que le rapport valait :

$$\boxed{\frac{[^{235}\text{U}]_{t_0}}{[^{238}\text{U}]_{t_0}} = \frac{[^{235}\text{U}]_{t_1}}{[^{238}\text{U}]_{t_1}} \exp((\lambda_{235} - \lambda_{238})(t_1 - t_0)) = 0,054}$$

Ce rapport est bien supérieur à 3% : l'uranium que l'on trouvait il y a 2 milliards d'années serait considéré aujourd'hui comme de l'uranium « enrichi ».

13) On note t_0 l'instant initial, où l'on considère que le zircon vient de se former et est désormais un système fermé dans lequel ^{235}U se transforme en ^{207}Pb et ^{238}U se transforme en ^{206}Pb . Un simple bilan de matière montre que la quantité de plomb formée est égale à la quantité d'uranium désintégrée pour chaque isotope, soit :

$$[^{207}\text{Pb}]_{t_1} = [^{235}\text{U}]_{t_0} - [^{235}\text{U}]_{t_1} = [^{235}\text{U}]_{t_0} (1 - \exp(-\lambda_{235}(t_1 - t_0)))$$

$$[^{206}\text{Pb}]_{t_1} = [^{238}\text{U}]_{t_0} - [^{238}\text{U}]_{t_1} = [^{238}\text{U}]_{t_0} (1 - \exp(-\lambda_{238}(t_1 - t_0)))$$

D'où le rapport demandé :

$$\boxed{\frac{[^{207}\text{Pb}]_{t_1}}{[^{206}\text{Pb}]_{t_1}} = \frac{[^{235}\text{U}]_{t_0}}{[^{238}\text{U}]_{t_0}} \cdot \frac{1 - \exp(-\lambda_{235}(t_1 - t_0))}{1 - \exp(-\lambda_{238}(t_1 - t_0))}}$$

14) On peut exprimer le rapport précédent en fonction du rapport actuel connu $\frac{[^{235}\text{U}]_{t_1}}{[^{238}\text{U}]_{t_1}}$ d'après la relation de la question 12 :

$$\frac{[^{207}\text{Pb}]_{t_1}}{[^{206}\text{Pb}]_{t_1}} = \frac{[^{235}\text{U}]_{t_1}}{[^{238}\text{U}]_{t_1}} \exp((\lambda_{235} - \lambda_{238})(t_1 - t_0)) \cdot \frac{1 - \exp(-\lambda_{235}(t_1 - t_0))}{1 - \exp(-\lambda_{238}(t_1 - t_0))}$$

... relation que l'on simplifie :

$$\frac{[^{207}\text{Pb}]_{t_1}}{[^{206}\text{Pb}]_{t_1}} = \frac{[^{235}\text{U}]_{t_1}}{[^{238}\text{U}]_{t_1}} \cdot \frac{\exp((\lambda_{235} - \lambda_{238})(t_1 - t_0)) - \exp(-\lambda_{238}(t_1 - t_0))}{1 - \exp(-\lambda_{238}(t_1 - t_0))}$$

$$\frac{[^{207}\text{Pb}]_{t_1}}{[^{206}\text{Pb}]_{t_1}} = \frac{[^{235}\text{U}]_{t_1}}{[^{238}\text{U}]_{t_1}} \cdot \frac{\exp(\lambda_{235}(t_1 - t_0)) - 1}{\exp(\lambda_{238}(t_1 - t_0)) - 1}$$

Par conséquent, la mesure du taux $\frac{[^{207}\text{Pb}]_{t_1}}{[^{206}\text{Pb}]_{t_1}}$ du zircon permet de dater le minéral, c'est-à-dire de déterminer $(t_1 - t_0)$, seule inconnue dans la formule précédente.

Amorphisation du zircon par auto-irradiation : aspects thermodynamiques

15) Un solide amorphe est un solide où il n'existe pas d'arrangement régulier des atomes au niveau microscopique, par opposition à l'état cristallin. Il est isotrope et ressemble à un liquide figé. L'exemple le plus caractéristique d'un solide amorphe est le verre.

16) L'enthalpie H d'un système est définie à partir de l'énergie interne U par :

$$H = U + PV$$

D'après le premier principe pour un système macroscopiquement au repos, la variation d'énergie interne est égale à la somme du travail et de la chaleur échangés pendant une transformation :

$$\Delta U = W + Q$$

Donc la variation d'enthalpie s'exprime :

$$\Delta H = \Delta U + \Delta(PV) = W + Q + \Delta(PV)$$

Dans le cas d'une transformation isobare, $P = \text{Cte}$ donc $\Delta(PV) = P\Delta V$ et le travail (s'il n'y a que des forces pressantes) est $W = -P\Delta V$. Donc :

$$\Delta H = -P\Delta V + Q + P\Delta V = Q$$

Pour une transformation isobare où le seul travail est celui des forces pressantes, la chaleur échangée par le système est égale à sa variation d'enthalpie :

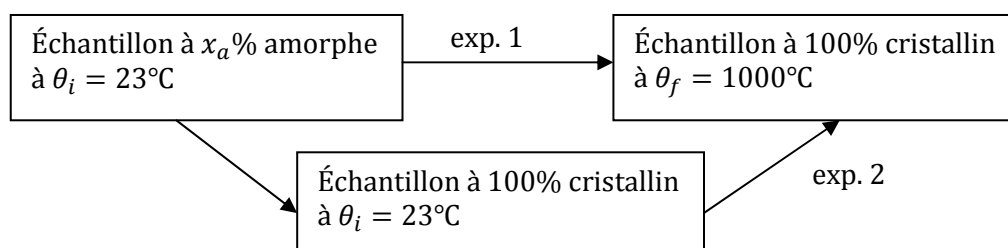
$$\text{une mesure de } Q \text{ donne donc } \Delta H.$$

17) L'échantillon est initialement à $\theta_i = 23^\circ\text{C}$.

La première chute dans le calorimètre conduit à une recristallisation complète de la fraction amorphe, ainsi qu'à un changement de température puisque la température finale de l'échantillon est de $\theta_f = 1000^\circ\text{C}$.

Puisque l'expérience est menée une deuxième fois sur le même échantillon, celui-ci est déjà totalement cristallin. La deuxième expérience n'est donc qu'un changement de température de θ_i à θ_f .

On peut schématiser ces deux expériences sur le cycle suivant :



Comme l'indique le schéma, la deuxième expérience correspond à un changement de température de l'échantillon 100% cristallin, de θ_i à θ_f , sous pression constante. Dans ce cas, la mesure de ΔH_2 permet d'obtenir la capacité calorifique molaire $C_{p,m}$ de l'échantillon cristallin. En effet, si on suppose $C_{p,m}$ indépendant de la température, alors on peut écrire :

$$\Delta H_2 = n_0 C_{p,m} (\theta_f - \theta_i)$$

... où $n_0 = 1$ mol est la quantité de matière de l'échantillon.
En prenant la valeur moyenne de $\Delta H_2 \approx 126,6$ kJ, on trouve :

$$C_{p,m} = \frac{\Delta H_2}{n_0 (\theta_f - \theta_i)} = 130 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$$

18) La différence d'enthalpie ΔH_0 entre le zircon à $x_a\%$ amorphe et le zircon à 100% cristallin à $\theta_i = 23^\circ\text{C}$ correspond à la première étape du cycle dessiné précédemment. Ainsi :

$$\Delta H_1 = \Delta H_0 + \Delta H_2, \text{ donc :}$$

$$\Delta H_0 = \Delta H_1 - \Delta H_2$$

La transformation étant isotherme et isobare, on peut également exprimer ΔH_0 à partir de l'enthalpie d'amorphisation ($\Delta_{am}H$, que l'on assimilera à sa grandeur standard $\Delta_{am}H^0$) :

$$\Delta H_0 = (x_a n_0) \times (-\Delta_{am}H^0)$$

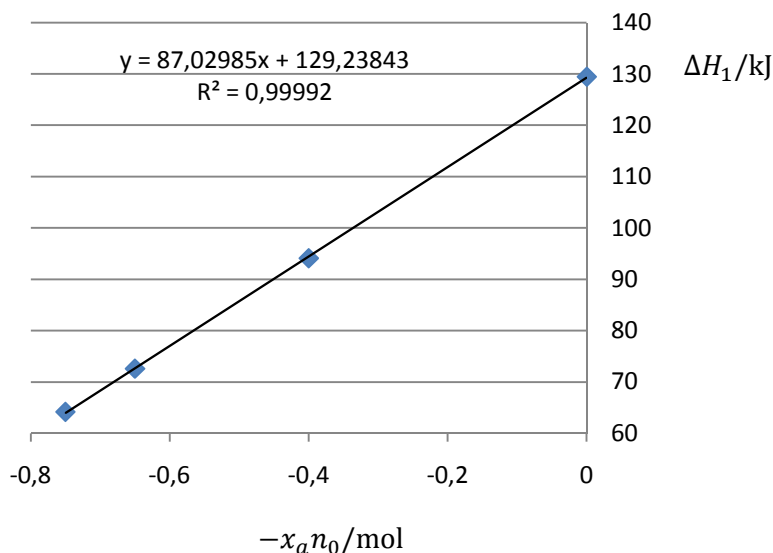
On trouve donc :

$$-x_a n_0 \Delta_{am}H^0 = \Delta H_1 - \Delta H_2$$

... que l'on peut écrire :

$$\Delta H_1 = \Delta H_2 - x_a n_0 \Delta_{am}H^0$$

Ainsi, en portant ΔH_1 en fonction de $-x_a n_0$, on doit obtenir une droite de pente $\Delta_{am}H^0$, que l'on détermine par régression linéaire :



Graphes de ΔH_1 en fonction de la quantité de matière de fraction amorphe

Les points sont très bien alignés, ce que confirme un très bon coefficient de corrélation ($R^2 = 0,99992$, très proche de 1). On peut donc donner avec confiance deux chiffres significatifs pour $\Delta_{am}H^0$ (pente de la droite de régression) :

$$\Delta_{am}H^0 = +87 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$\Delta_{am}H^0 > 0$: l'amorphisation est donc endothermique. La recristallisation étant le processus inverse :

La recristallisation du zircon est une réaction exothermique.

On remarque en outre que l'ordonnée à l'origine permet de retrouver ΔH_2 .