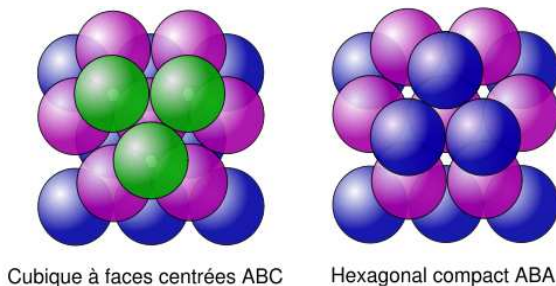


Les structures métalliques



A- Introduction:

Les métaux sont des solides cristallisés qui peuvent être assimilés à un assemblage de sphères rigides.

- ➡ La nature des forces de liaisons qui maintiennent unis les atomes dans un métal est de même type que la liaison covalente, c'est-à-dire mise en commun d'électrons. Cette liaison maintient la cohésion du cristal et explique la forte température de fusion de ce type de composés.
- ➡ Les atomes des métaux sont peu électronégatifs, ils perdent facilement leurs électrons de valences. Ces électrons forment un nuage ou un gaz d'électrons. Ceci explique la forte conductivité des métaux.....

A partir de ces constatations il ressort que les propriétés physiques de ce type de solides (solides métalliques) sont directement liés à leurs structures cristallines et donc à l'agencement des atomes dans les cristaux.

Expliquer les propriétés physiques des solides métalliques revient à expliquer l'organisation des atomes dans leurs structures cristallines!

Structurellement, les métaux forment des structures compactes correspondant à l'entassement de densité maximale de sphères rigides. Suivant le type de disposition de ces sphères et leur empilement on obtient trois symétries différentes:

- ➡ *Système semi compact: cubique centré noté : **CC***
- ➡ *Système compact: Hexagonal compact noté : **HC***
- ➡ *Système compact: Cubique à faces centrées noté : **CFC***

I- Disposition carrée : système semi-compact: Cubique Centré CC:

Il existe deux façons d'agencer les sphères rigides qui peuvent représenter les atomes métalliques:

- Disposition carrée où les atomes s'agencent en générant des vides de forme carrée (figure 1a).
- Disposition triangulaire où les atomes s'agencent en générant des vides de forme triangulaire (figure 1b).

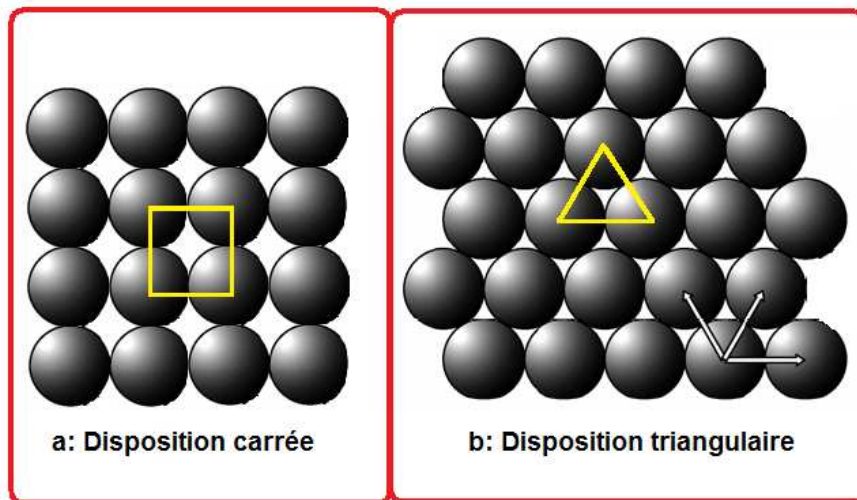


Figure 1: Différentes dispositions dans les structures métalliques

Nous nous intéresserons dans ce premier paragraphe à la disposition carrée qui donne naissance à un système semi-compact : **Le cubique centré CC.**

1- Séquence d'empilement:

Les structures compactes sont obtenues en empilant des couches d'atomes, assimilés à des sphères rigides, de manière que les atomes de la couche supérieure soient placés dans les "vides" ou interstices de la couche inférieure.

D'après la figure 2 :

- ➡ La première couche a des atomes en A (**couche A**) assemblés en disposition carrée créant ainsi des vides de la même forme.
- ➡ les atomes de la seconde couche peuvent se trouver dans ces vides appelés interstices (**couche B**).
- ➡ La troisième couche a des atomes qui occupent les interstices de la couche B et de ce fait, se superposent exactement sur les atomes de la couche A. **La séquence d'empilement est alors AB AB AB...**

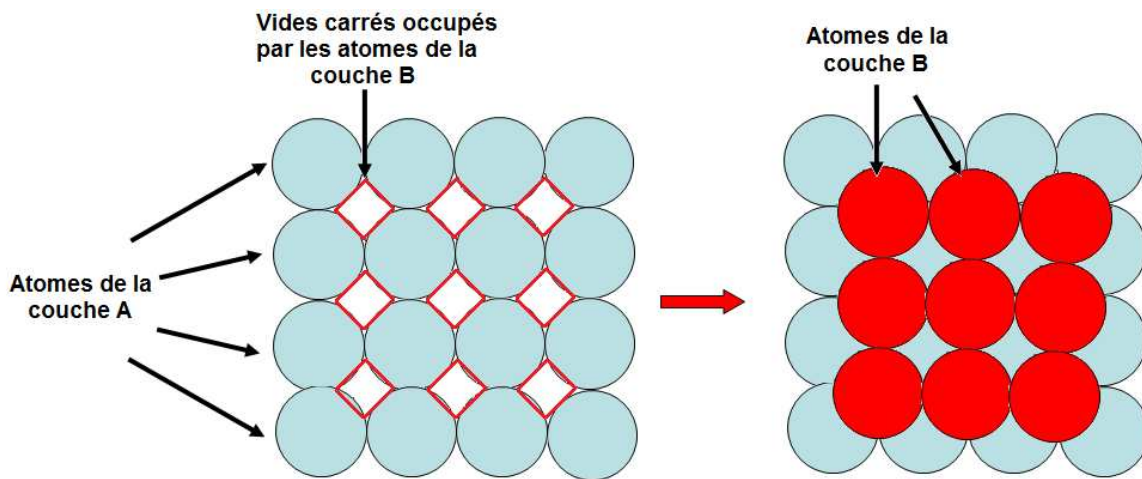


Figure 2 : Empilement AB AB... dans une disposition carrée

2- Calcul de la coordinnence :

Par définition, la coordinnence d'un atome est le nombre de plus proches voisins à la même distance suivant les trois directions de l'espace.

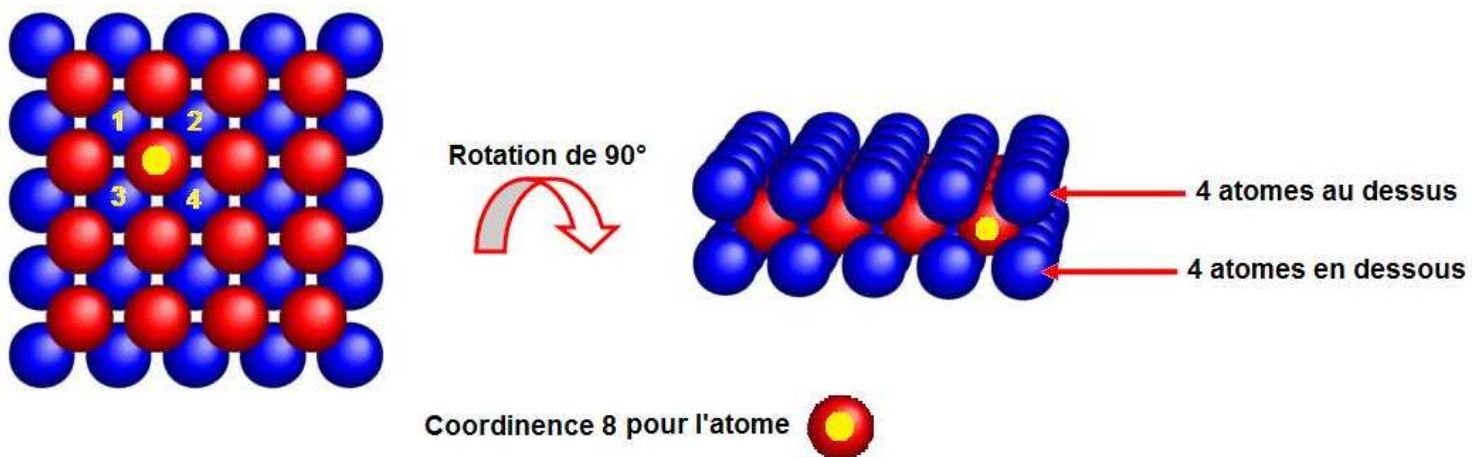


Figure 3: Calcul de la coordinnence d'un atome dans l'empilement AB AB... dans une dispositon carrée

Si on considère l'atome rouge avec un cercle jaune dans la figure ci-dessus, on constate qu'il est entouré, à la même distance, par 4 atomes dans la couche A du bas et 4 atomes dans la couche A du haut. **On obtient donc une coordinnence pour cet atome égale à 8.**

3- Symétrie de l'empilement AB AB... dans une disposition carrée:

La maille décrivant cet empilement est une maille cubique centrée I, qu'on peut noter aussi CC (figure 4).

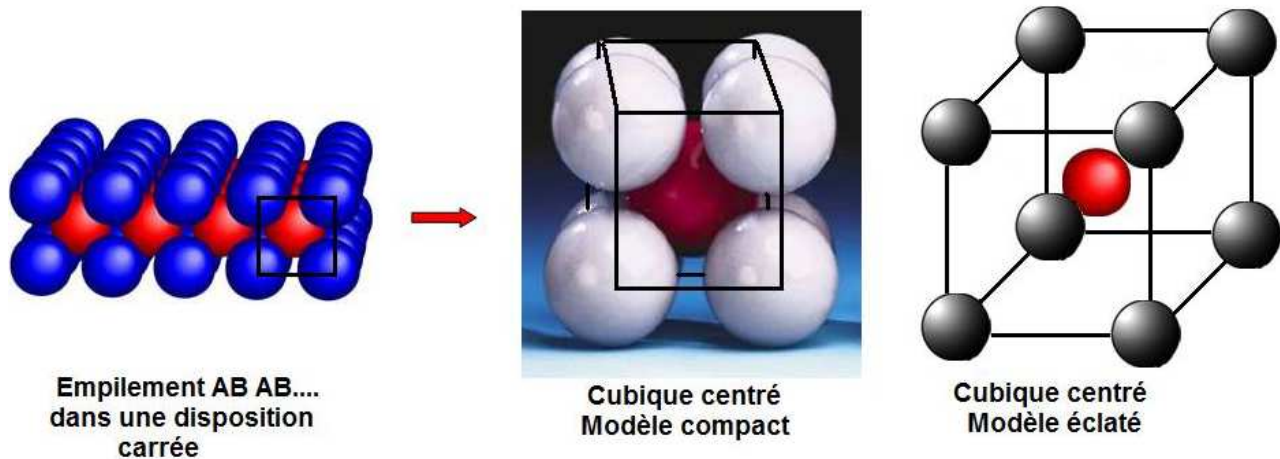


Figure 4: Symétrie de l'empilement AB AB... dans une disposition carrée

- Coordonnées des atomes : au sommet **(000)** et au centre de la maille **(1/21/21/2)**.
- Calcul de la multiplicité: $Z = 8 \times 1/8 + 1 = 2$.
- Détermination du plan de densité maximale : Le plan de densité maximale est le plan qui contient le plus grand nombre d'atomes. Dans le cas du cubique centré, c'est le plan qui contient le plus grand nombre d'atomes est le plan (110) contenant l'atome du centre. **on dit que le plan (110) est la rangée de densité maximale.**
- Détermination de la rangée de densité maximale: De même que pour le plan, la rangée de densité maximale est la rangée qui contient le plus grand nombre d'atomes. Dans cette symétrie c'est la rangée [111] qui passe par l'atome central et contient donc le plus grand nombre d'atomes: **on dit que la rangée [111] est la rangée de densité maximale.**
- Relation rayon atomique-paramètre de maille :

A partir de la rangée de densité maximale et de la figure 5, on peut écrire que :

$$4R = a\sqrt{3} \text{ d'où } R = \frac{a\sqrt{3}}{4}$$

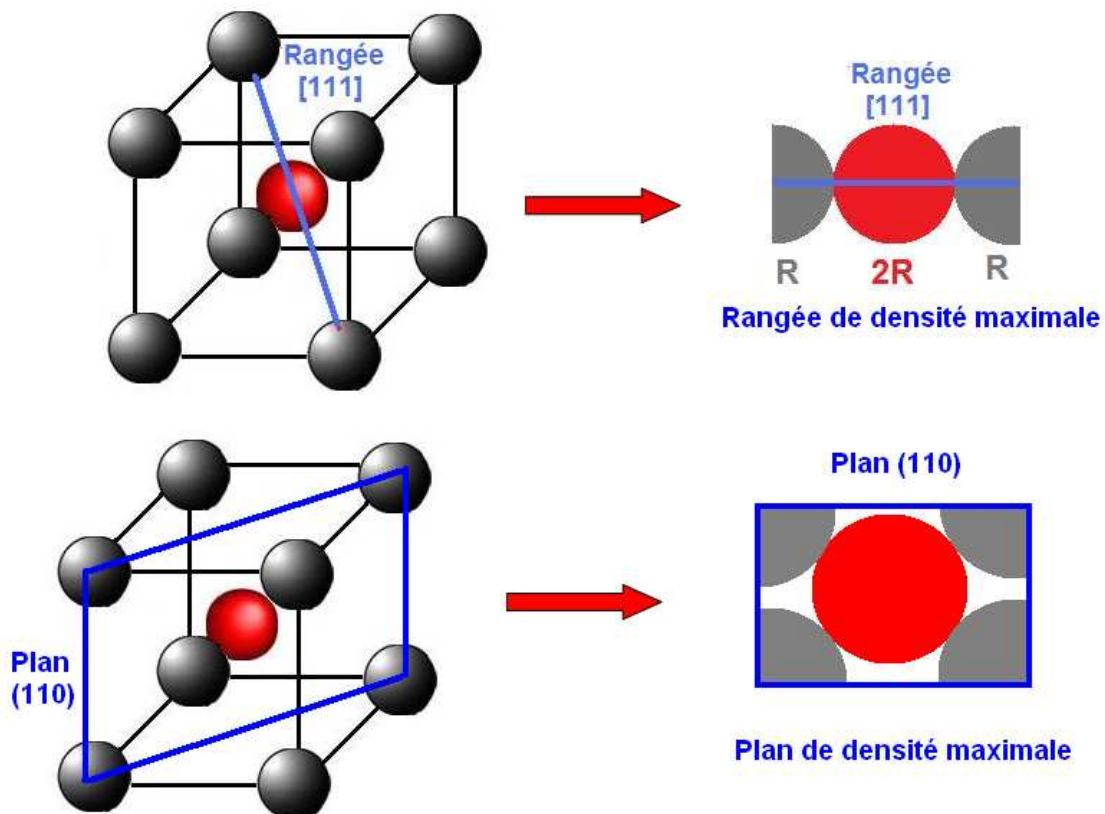


Figure 5: Rangée et plan de densité maximale

➔ Calcul de la compacité : La compacité est la fraction de volume occupé par la matière. Elle définit donc le pourcentage de volume occupé par l'ensemble des atomes dans la maille, d'où la formule :

$$f = \frac{Z \times \text{volume de l'atome}}{\text{volume de la maille}}$$

L'atome étant assimilé à une sphère, son rayon s'écrit :

$$V = \frac{4}{3}\pi R^3$$

En remplaçant dans la formule de la compacité on obtient:

$$f = \frac{Z \times \frac{4}{3} \pi R^3}{a^3}$$

D'autre part on a :

$$4R = a\sqrt{3} \text{ d'ou } R = \frac{a\sqrt{3}}{4}$$

D'où :

$$f = \frac{2 \times 4 \pi \left(\frac{a\sqrt{3}}{4} \right)^3}{3a^3}$$

En simplifiant dans cette formule on obtient :

$$f = 0.68$$

On a donc 68% du volume de la maille occupé et 32% vide. On dit que la symétrie cubique centrée est pseudo-compacte.

II- Disposition triangulaire :

1- Système Hexagonal compact HC :

4- Séquence d'empilement:

D'après la figure 6 :

- ➡ La première couche a des atomes en A (**couche A**) assemblés en disposition triangulaire créant ainsi deux types de vides représentés par des triangles « *apex vers le haut* » et des triangles « *apex vers le bas* ».
- ➡ Pour les atomes de la seconde couche, ils peuvent se trouver dans un seul type de vide, soit apex vers le haut ou apex vers le bas (**couche B**).
- ➡ Pour la troisième couche on a deux possibilités :
 - Les atomes occupent le même type d'interstices que les atomes de la

couche B et de ce fait, on obtient une couche décalée par rapport à la couche A appelée **couche C**. **La séquence d'empilement est alors ABC ABC ABC...** (*Système cubique à faces centrées CFC*).

- Les atomes de la troisième couche occupent le deuxième type d'interstices, différent par rapport à ce qui a été occupé par les atomes de la couche B. On obtient dans ce cas une couche qui se superpose parfaitement avec la couche A. **La séquence d'empilement est alors AB AB AB...** (*Système hexagonal compact HC*).

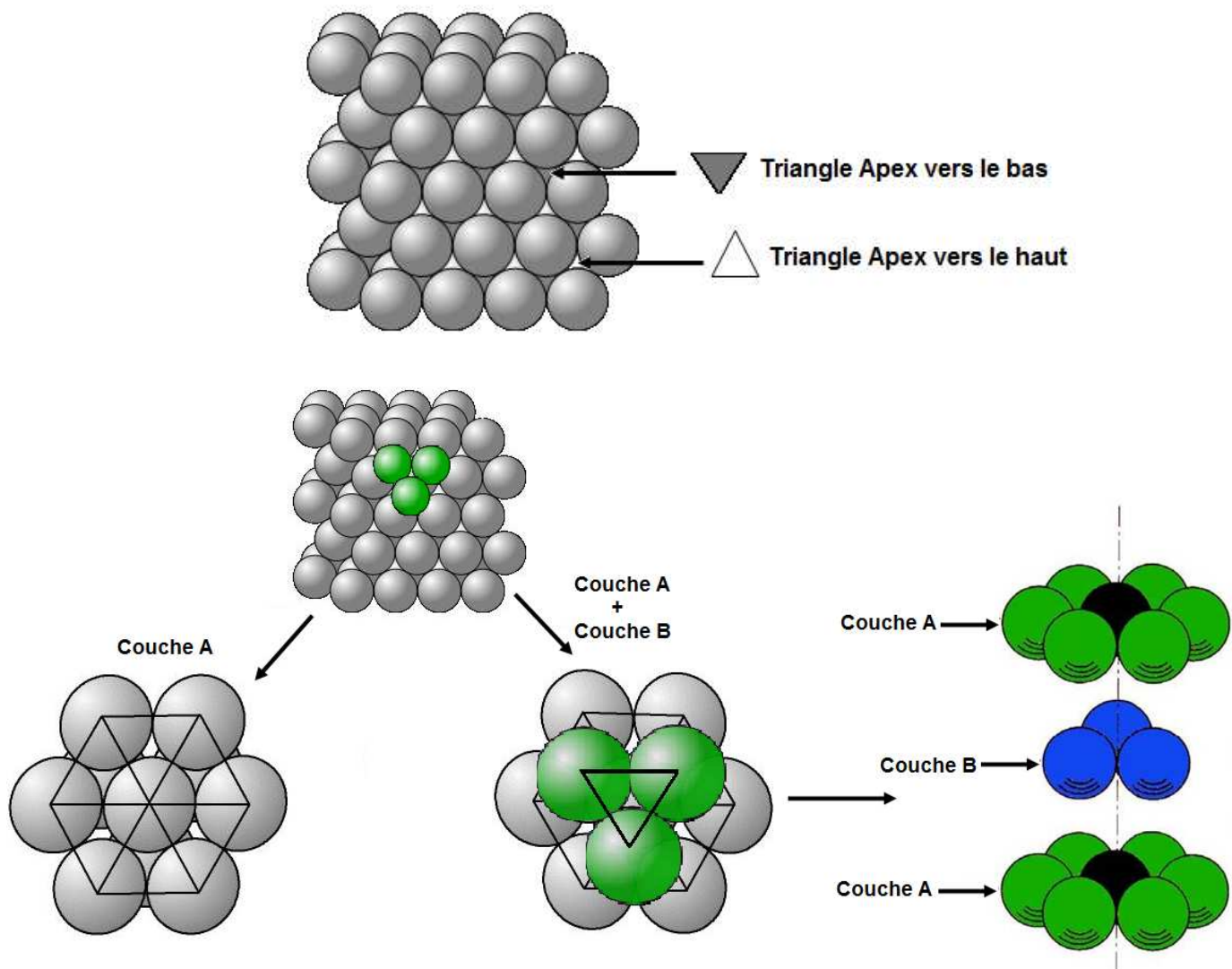
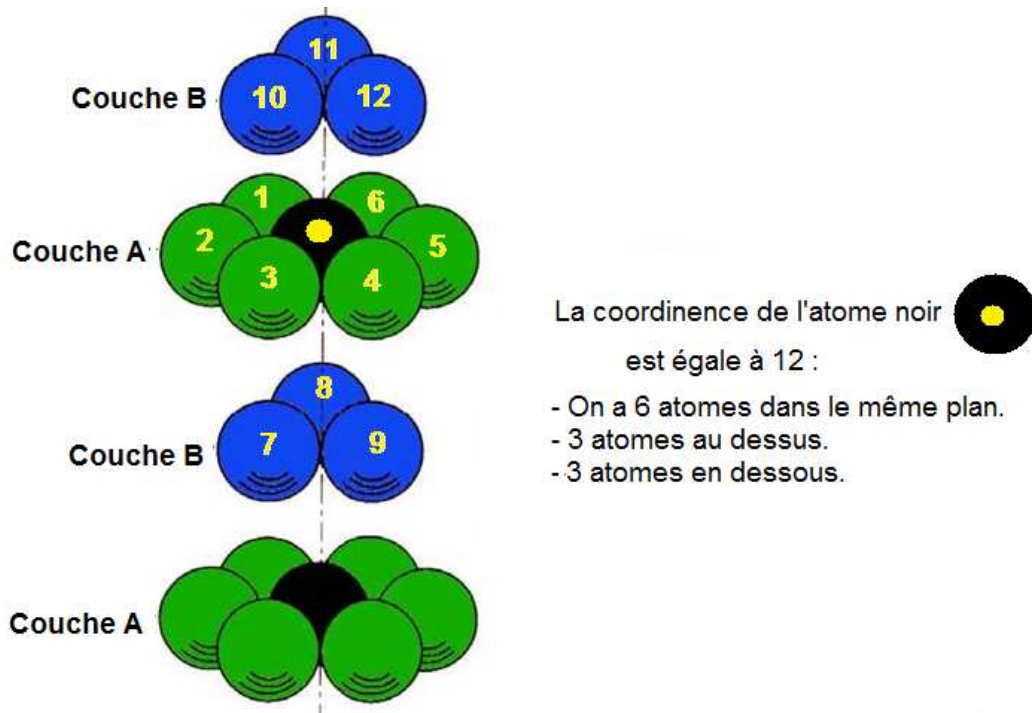


Figure 6: Empilement AB AB... dans une disposition triangulaire

5- Calcul de la coordinnence :



6- Symétrie de l'empilement AB AB... dans une disposition triangulaire:

La maille décrivant cet empilement est une maille hexagonale compacte, qu'on peut noter aussi HC (figure 7).

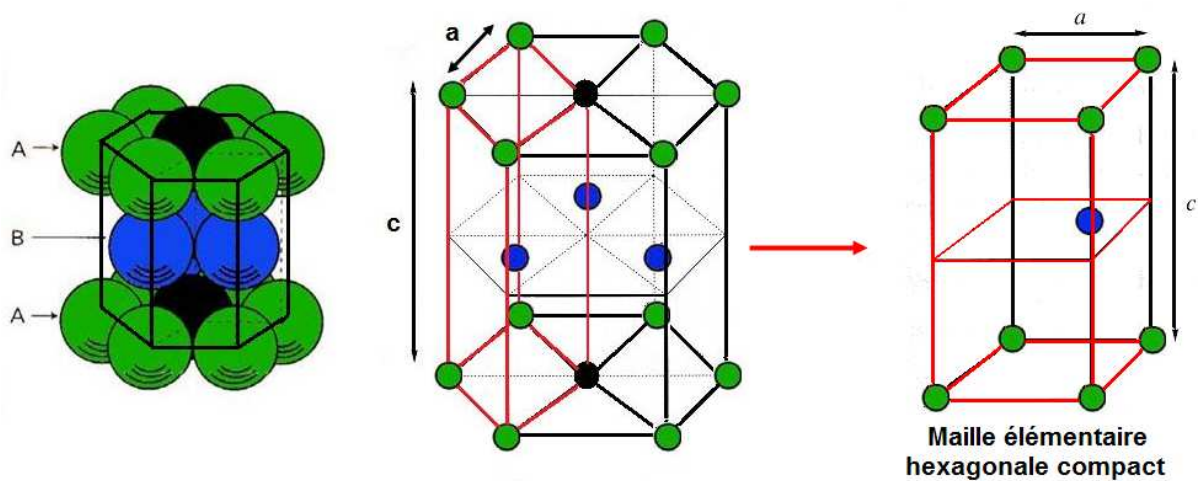


Figure 7: Symétrie Hexagonale compacte d'un empilement ABAB... dans une disposition triangulaire

- ➔ Coordonnées des atomes : au sommet **(000)** et au centre de la maille **(1/32/31/2)** ou **(2/31/31/2)**.
- ➔ Calcul de la multiplicité: $Z = 8 \times 1/8 + 1 = 2$.
- ➔ Détermination du plan de densité maximale :
Le plan de densité maximale dans l'hexagonal compact est le plan (001)
- ➔ Détermination de la rangée de densité maximale: les rangées de densité maximale sont la rangée [110] et [100].

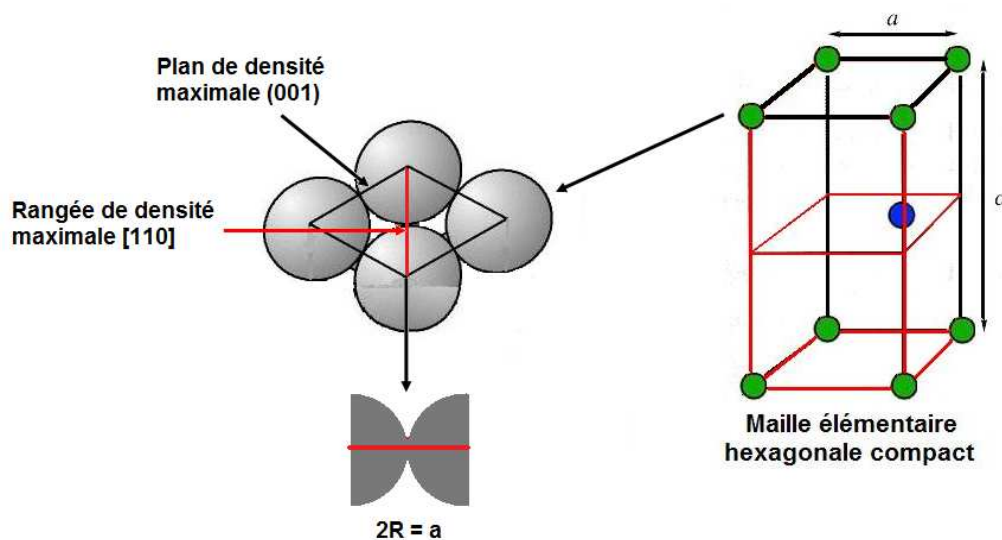


Figure 8: Rangée et plan de densité maximale dans le HC

- ➔ Relation rayon atomique-paramètre de maille :

A partir de la rangée de densité maximale et de la figure 8, on peut écrire que :

$$a = 2R$$

- ➔ Calcul de la compacité :

$$f = \frac{Z \times \text{volume de l'atome}}{\text{volume de la maille}}$$

$$V = a^2 c \sin 120^\circ$$

On démontrera que la relation entre les deux paramètres c et a est:

$$\frac{c}{a} = 1.63$$

En utilisant la relation $a = 2R$ on obtient une compacité $f = 0.74$.

Donc pour le HC on a : 74% de volume occupé et 26% de volume vide.

2- Système cubique à face centrée CFC :

7- Séquence d'empilement:

D'après la figure 8 :

- ➔ La première couche a des atomes en A (**couche A**) assemblés en disposition triangulaire créant ainsi des vides triangulaires de deux types.
- ➔ Pour les atomes de la seconde couche, ils peuvent se trouver dans un seul type de vide (**couche B**).
- ➔ Pour la troisième couche, les atomes occupent le même type d'interstices que les atomes de la couche B et de ce fait, on obtient une couche décalée par rapport à la couche A appelée **couche C**. **La séquence d'empilement est alors ABC ABC ABC...** (Système cubique à faces centrées CFC).

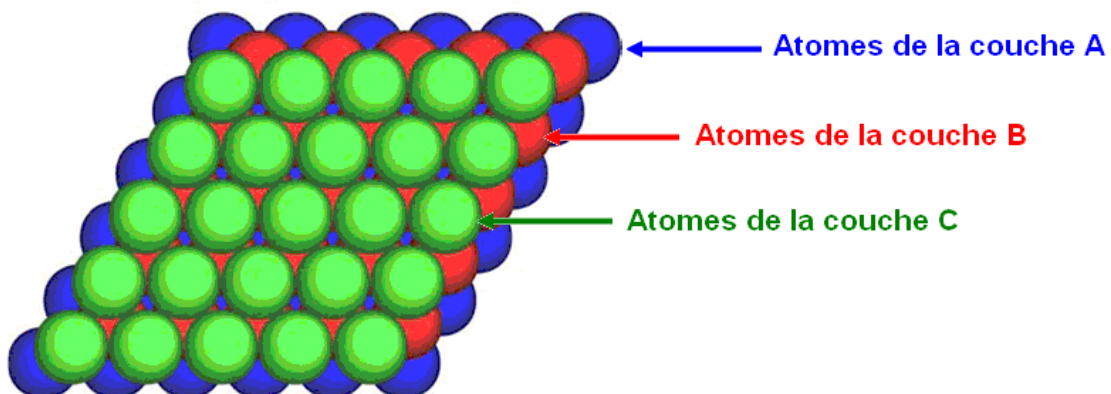
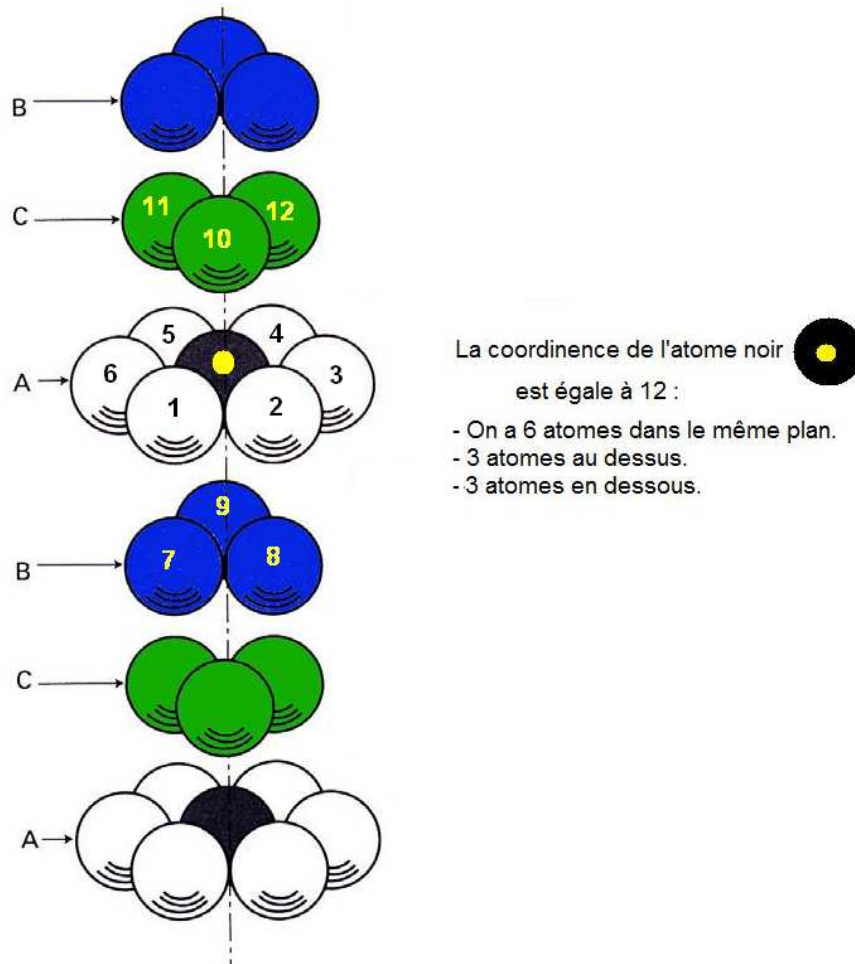


Figure 9 : Empilement ABC ABC... dans une disposition carrée

8- Calcul de la coordinnence :



9- Symétrie de l'empilement ABC ABC... dans une disposition triangulaire:

La maille décrivant cet empilement est une maille cubique à faces centrées (figure 10).

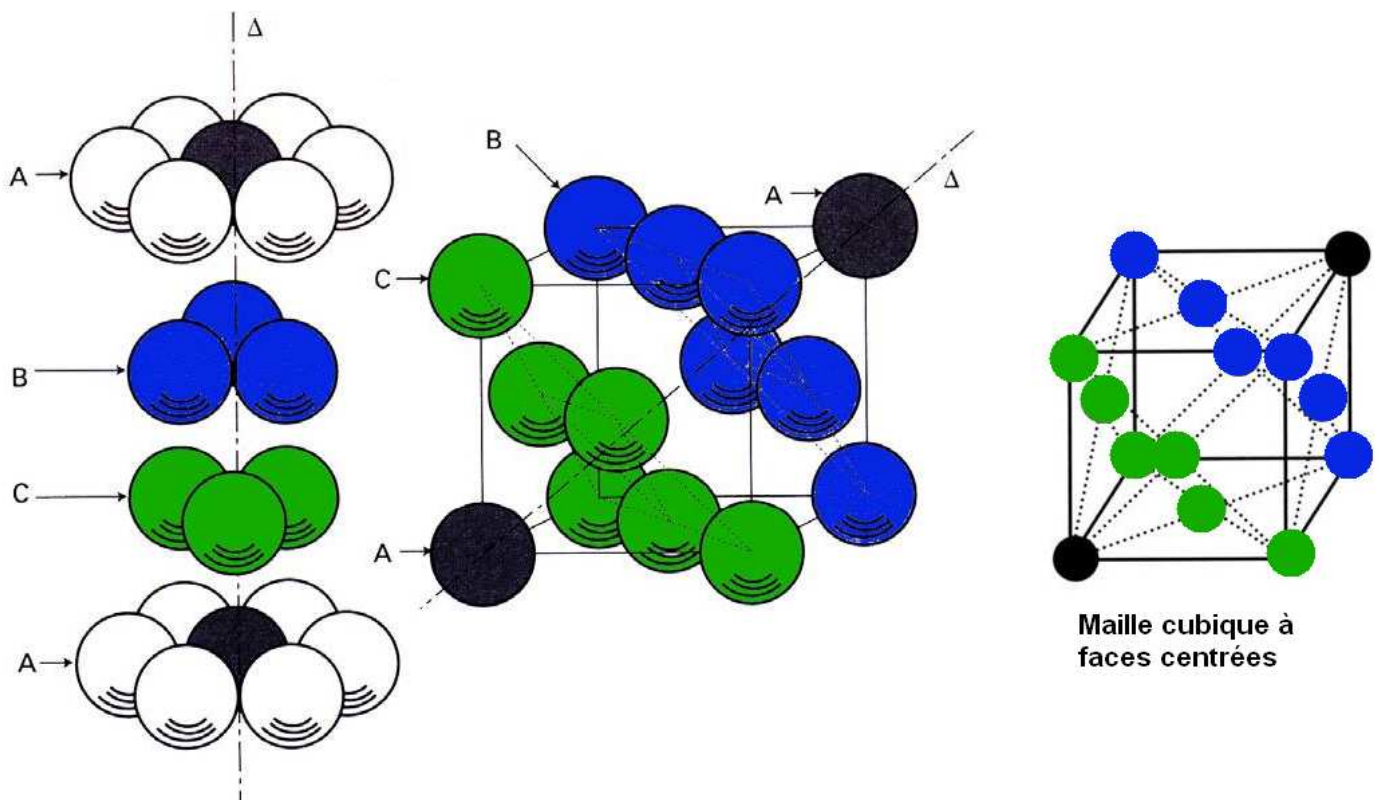


Figure 10 : Symétrie cubique à faces centrée dans un empilment ABC ABC...

- Coordonnées des atomes : au sommet **(000)** et au centre des faces **(001/2), (01/20) et (1/200)**.
- Calcul de la multiplicité: $Z = 8 \times 1/8 + 4 \times 1/2 = 4$.
- Détermination du plan de densité maximale :
Le plan de densité maximale dans l'hexagonal compact est le plan (001)
- Détermination de la rangée de densité maximale: la rangée de densité maximale est la rangée [110].

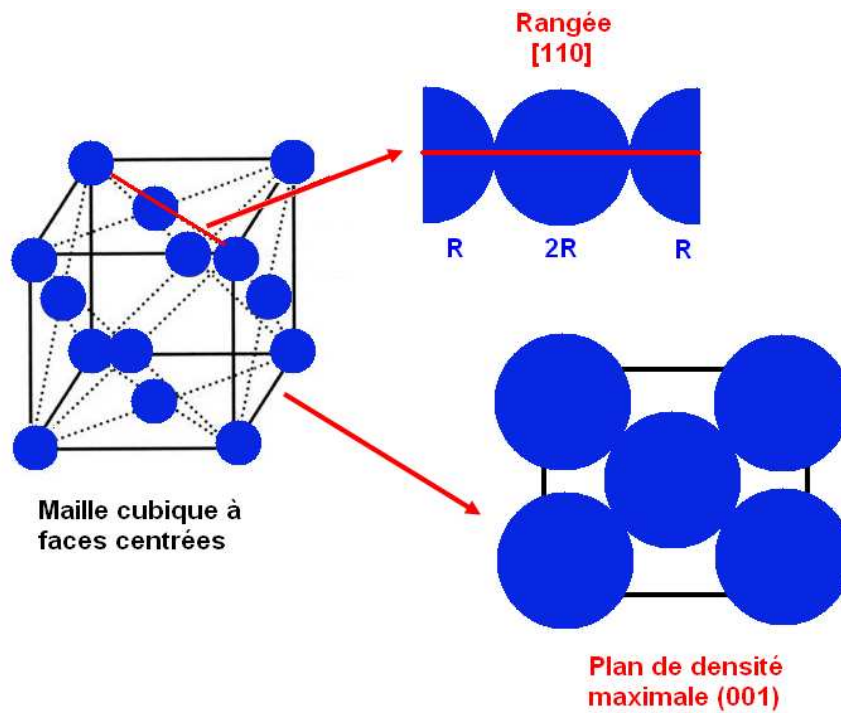


Figure 11 : Plan et Rangée de densité maximale dans un CFC

➡ Relation rayon atomique-paramètre de maille :

A partir de la rangée de densité maximale et de la figure 11, on peut écrire que :

$$4R = a\sqrt{2} \text{ d'où } a = \frac{4R}{\sqrt{2}}$$

➡ Calcul de la compacité :

$$f = \frac{Z \times \text{volume de l'atome}}{\text{volume de la maille}}$$

L'atome étant assimilé à une sphère, son rayon s'écrit :

$$V = \frac{4}{3}\pi R^3$$

En remplaçant dans la formule de la compacité on obtient:

$$f = \frac{Z \times \frac{4}{3} \pi R^3}{a^3}$$

D'autre part on a :

$$4R = a\sqrt{2} \text{ d'où } a = \frac{4R}{\sqrt{2}}$$

D'où :

$$f = \frac{4 \times 4 \pi \left(\frac{a\sqrt{2}}{4}\right)^3}{3a^3}$$

En simplifiant dans cette formule on obtient :

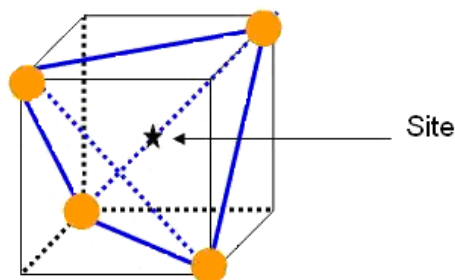
$$f = 0.74$$

On a donc 74% du volume de la maille occupé et 26% vide. On dit que la symétrie cubique à faces centrées est une symétrie compacte.

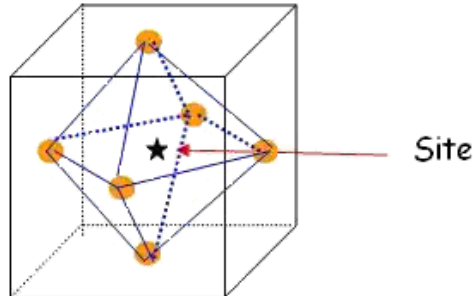
III-Sites interstitiels :

Les **sites interstitiels** sont, en quelque sorte, les espaces vides entre les atomes. On distingue deux formes parmi les sites interstitiels : les sites **octaédriques** et les sites **tétraédriques**. Les sommets de ces sites correspondent au centre des atomes.

➡ **Sites tétraédriques** : Un site est dit tétraédrique s'il est délimité par un tétraèdre formé par quatre atomes voisins.



- **Sites octaédriques** : Un site est dit octaédrique s'il est délimité par un octaèdre formé par six atomes voisins.



1- Sites interstitiels dans une symétrie cubique centrée:

a- Sites octaédriques S.O:

On distingue deux types de sites octaédriques dans une maille cubique centrée:

- Au centre des faces, formé par l'assemblage de 4 atomes aux sommets de la face en question et deux atomes au centre de deux mailles adjacentes (fig. 12).

Les coordonnées de ces sites sont :

$$(1/2 \ 1/2 \ 0), (1/2 \ 0 \ 1/2) \text{ et } (0 \ 1/2 \ 1/2)$$

- Au milieu des arêtes, formé par quatre atomes des centres de 4 mailles adjacentes et deux atomes aux sommets de l'arête en question (fig 12).

Les coordonnées de ces sites sont :

$$(1/2 \ 0 \ 0), (0 \ 0 \ 1/2) \text{ et } (0 \ 1/2 \ 0)$$

Le nombre des S.O est : **$6 \times 1/2 + 12 \times 1/4 = 6$**

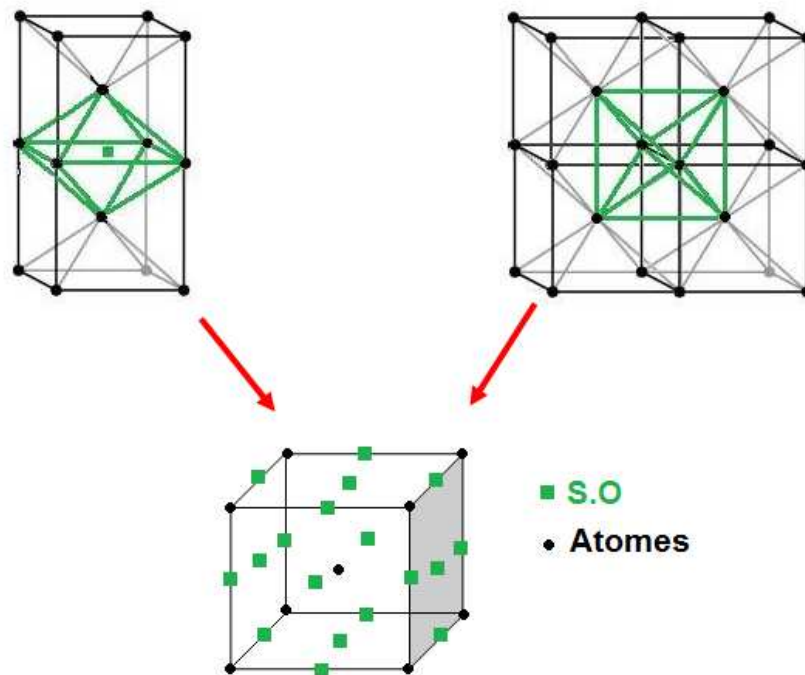


Fig. 12 : Sites Octaédriques dans une maille cubique centrée

b- Sites tétraédriques S.T:

Dans une maille cubique centrée on a 4 S.T par face et ce par l'assemblage de deux atomes du centre de deux mailles adjacentes et deux sommets:

Les coordonnées de ces sites sont (*voir les positions 1, 2, 3 et 4 sur la figure en dessous*) :

Pour la face (bc) :

1 : $(0 \frac{1}{2} \frac{3}{4})$; **2** : $(0 \frac{3}{4} \frac{1}{2})$; **3** : $(0 \frac{1}{2} \frac{1}{4})$; **4** : $(0 \frac{1}{4} \frac{1}{2})$.

Pour la face (ac) :

$(\frac{1}{4} 0 \frac{1}{2})$, $(\frac{3}{4} 0 \frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{4})$, $(\frac{1}{2} 0 \frac{3}{4})$

Pour la face (ab) :

$(\frac{1}{4} \frac{1}{2} 0)$, $(\frac{3}{4} \frac{1}{2} 0)$, $(\frac{1}{2} \frac{1}{4} 0)$, $(\frac{1}{2} \frac{3}{4} 0)$

Le nombre de ST est : **$4 \times 6 \times \frac{1}{2} = 12$**

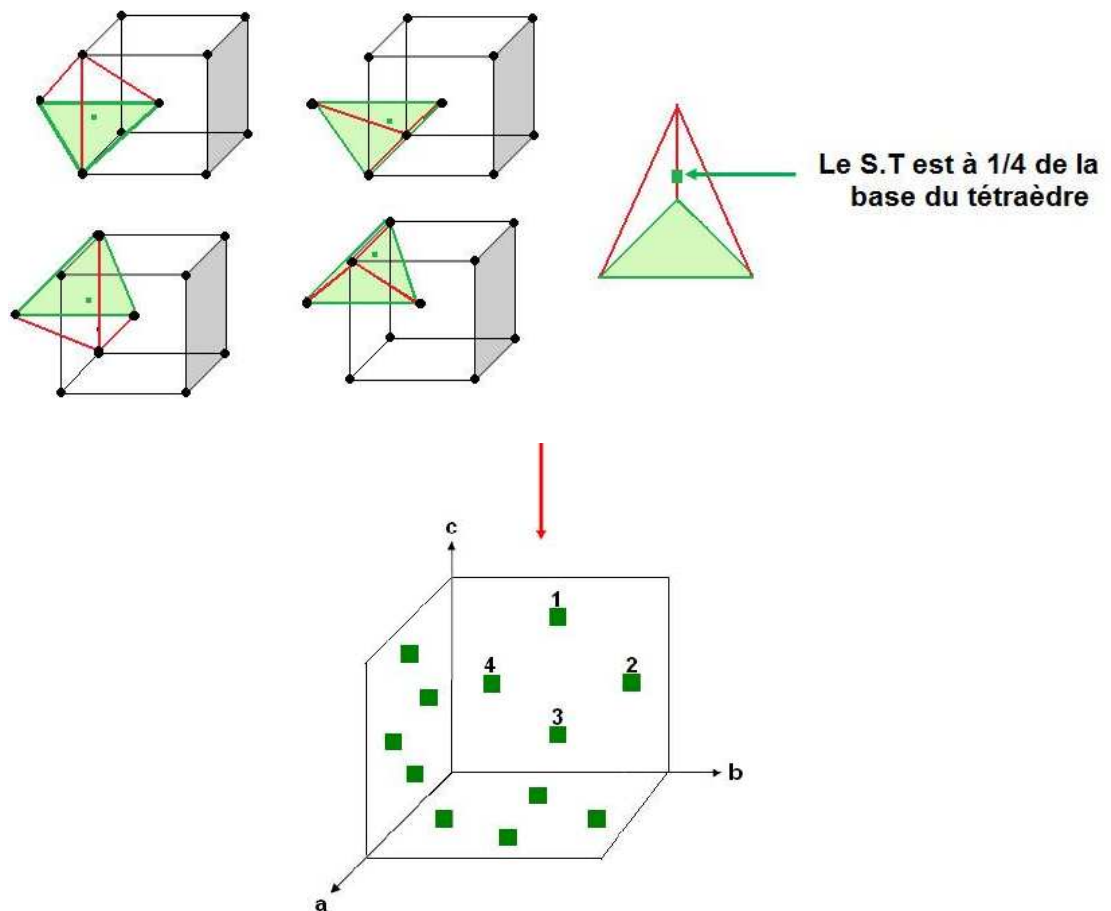


Fig.13 : Sites tétraédriques dans la maille cubique centrée

2- Sites interstitiels dans une symétrie hexagonale compacte :

a- Sites octaédriques S.O:

Dans une maille hexagonale compacte on a deux sites octaédriques par maille élémentaire et donc 6 sites par grande maille.

Leurs coordonnées sont : $(\frac{1}{3} \frac{2}{3} \frac{1}{4})$ et $(\frac{1}{3} \frac{2}{3} \frac{3}{4})$.

Le nombre de SO est : **2**

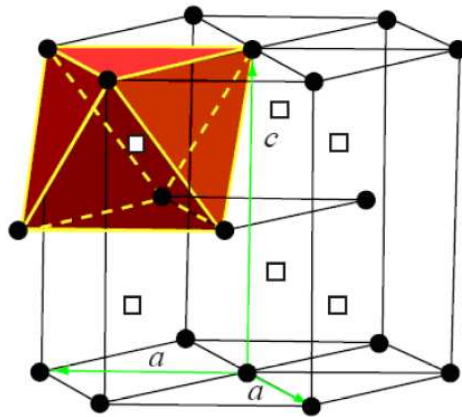


Fig.14 : Sites octaédriques dans la maille hexagonale compacte

b- Sites tétraédriques S.T:

Dans une maille hexagonale compacte on a deux types de sites tétraédriques :

- A sommet commun : un atome du plan B forme un sommet commun à deux tétraèdres.
- A base commune : trois atomes du plan B forment une base triangulaire commune à deux tétraèdres.

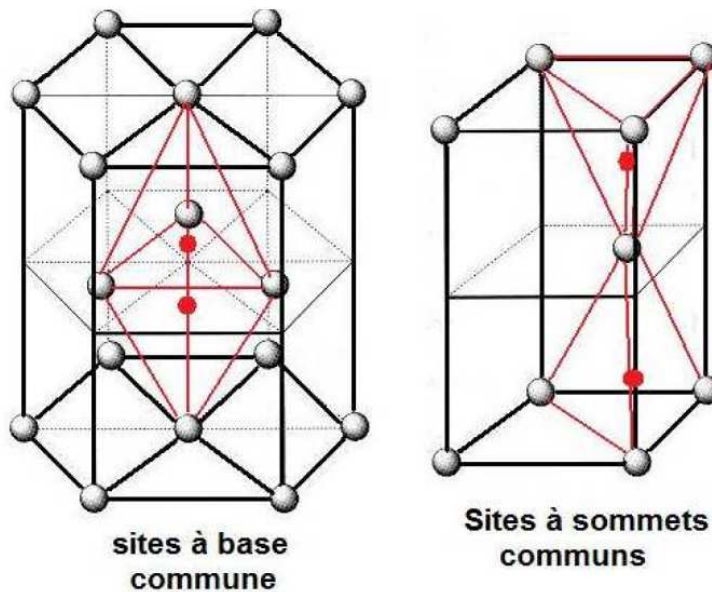


Fig.15 : Sites tétraédriques dans la maille hexagonale compacte

Les coordonnées de ces sites sont :

- A base commune : $(0\ 0\ \frac{3}{8})$ et $(0\ 0\ \frac{5}{8})$.
- A sommet commun : $(\frac{2}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{8})$ et $(\frac{2}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{7}{8})$

Le nombre de S.T est : **4**

3- Sites interstitiels dans une symétrie cubique à faces centrées :

a- Sites octaédriques S.O:

On distingue deux types de sites octaédriques dans une maille cubique à faces centrées:

- ➡ Au centre de la maille formé par les 6 atomes des centres des faces.

Les coordonnées de ces sites sont :

$$(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2})$$

- ➡ Au milieu des arêtes, formé par quatre atomes des centres de 4 faces adjacentes et deux atomes aux sommets de l'arête en question (fig 12).

Les coordonnées de ces sites sont :

$$(\frac{1}{2}\ 0\ 0), (0\ 0\ \frac{1}{2}) \text{ et } (0\ \frac{1}{2}\ 0)$$

Le nombre des S.O est : **$6 \times \frac{1}{2} + 12 \times \frac{1}{4} = 6$**

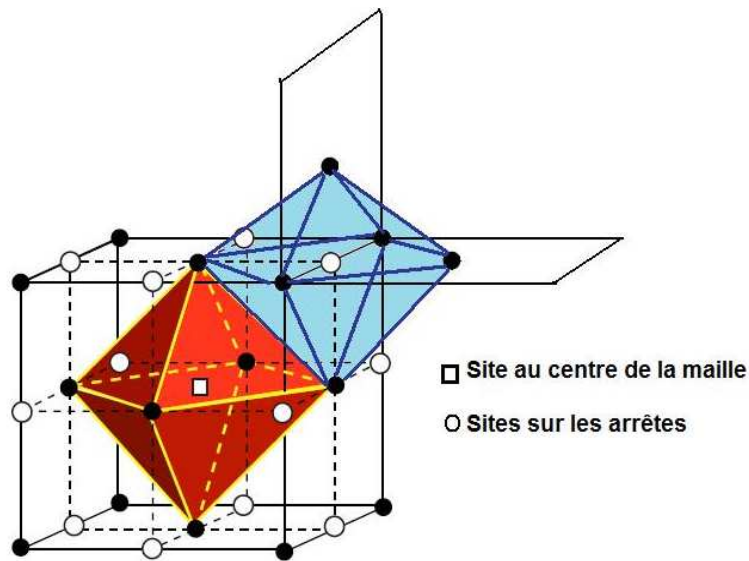


Fig. 16 : Sites octaédriques dans une maille cubique à faces centrées

b- Sites tétraédriques S.T:

Dans une maille cubique à faces centrées on a 8 S.T à l'intérieur de la maille, chaque site est formé par un sommet et les centres des 3 faces communes à ce sommet :

Les coordonnées de ces sites sont :

$$\left(\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}\right), \left(\frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4}\right), \left(\frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}\right), \left(\frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4}\right)$$

$$\left(\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4}\right), \left(\frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4}\right), \left(\frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4}\right), \left(\frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4}\right)$$

Le nombre des S.T est : **8**

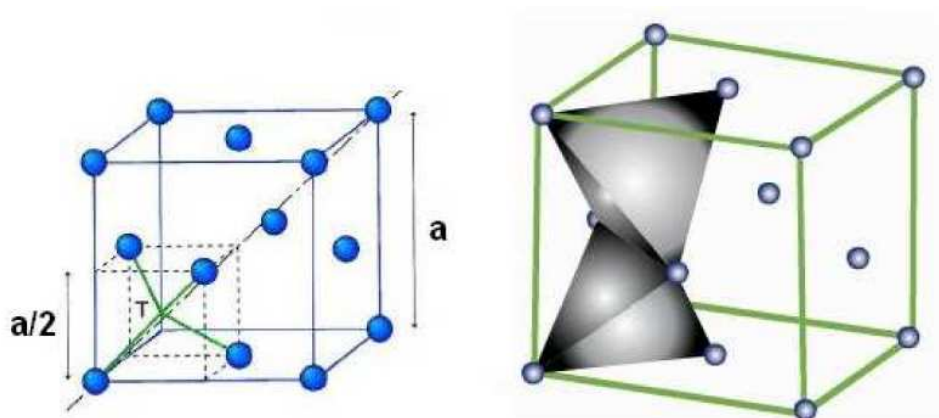


Fig. 17 : Sites tétraédriques dans une maille cubique à faces centrées