

# CRISTAUX MÉTALLIQUES

## MODÈLE PARFAIT

### Constats expérimentaux :

Les métaux sont en général :

- bons conducteurs électriques et la conduction diminue quand T augmente
- bons conducteurs thermiques
- denses sauf les alcalins et alcalino-terreux
- plastiques (laminage, forgeage...)

### Liaison métallique : plusieurs modèles

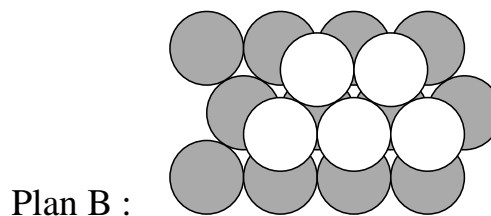
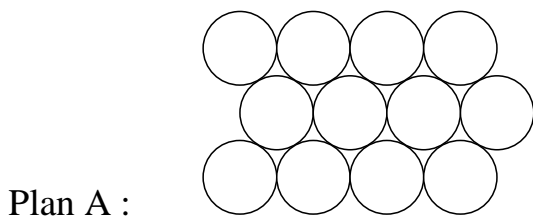
La liaison métallique n'est pas localisée ni dirigée (isotrope)

- modèle du gaz d'électrons
- modèle des bandes

### Plasticité et densité : modèle des sphères dures incompressibles

empilement de sphères identiques

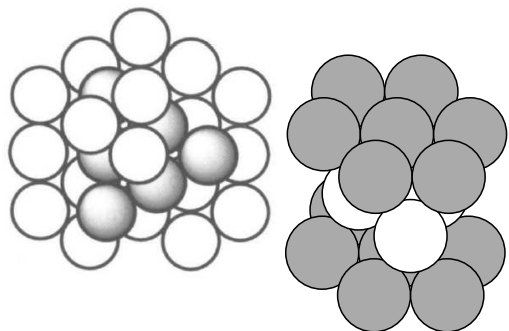
## EMPILEMENTS COMPACTS



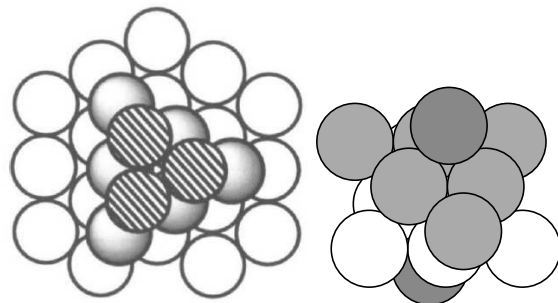
Plan C : 2 possibilités

$C = A$   
empilement : ABABABAB...

$C \neq A$   
ABCABCABC...



structure : hc  
hexagonal compact

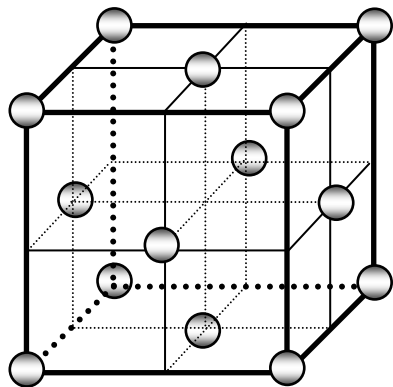


cfc  
cubique à faces centrées

# STRUCTURE CUBIQUE A FACES CENTRÉES

## Empilement compact ABCABC...

### Maille Conventionnelle



Paramètre de la maille :

a : arête du cube

Population Z : 4 atomes / maille

1 atome à chaque sommet :  $8 \cdot 1/8$

1 atome au centre de chaque face :  $6 \cdot 1/2$

Relation entre a et R :  $4R = \sqrt{2} a$

Volume :  $V = a^3$

Coordinance : 12

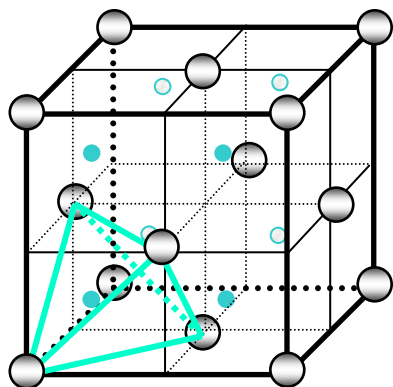
(voisins à  $2R = a\sqrt{2}/2$ )

Compacité :  $C = 74\%$

Masse volumique :

$$\rho = \frac{Z \cdot M}{V}$$

### Sites tétraédriques

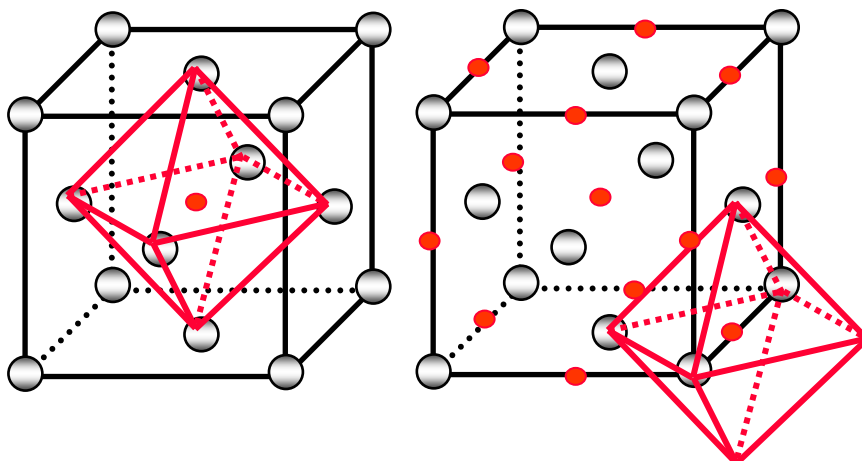


8 sites T par maille

Situés au centre des sous-cubes d'arête  $a/2$

Tétraèdre régulier de côté  $2R$

### Sites octaédriques

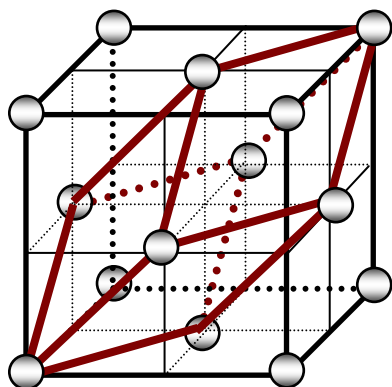


4 sites O par maille

Situés au centre maille et au milieu des arêtes

Octaèdre régulier de côté  $2R = a\sqrt{2}/2$

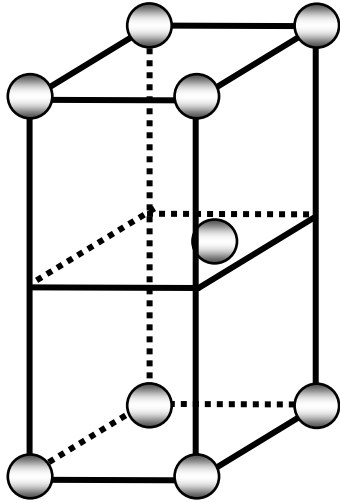
Maille primitive : rhomboèdre  
pas utile pour nous...



# STRUCTURE HEXAGONALE COMPACTE

## Empilement compact ABABAB...

### Maille Conventionnelle = Maille primitive = Maille Hexagonale



Paramètres de la maille :  
 prisme droit à base losange  
 a : côté du losange  
 c : hauteur

Population Z : 2 atomes / maille  
 1 atome à chaque sommet :  $8 \cdot \frac{1}{8}$   
 1 atome dans la maille  
 (1 motif de 2 atomes par maille)

Relation entre a et R :  $2R = a$

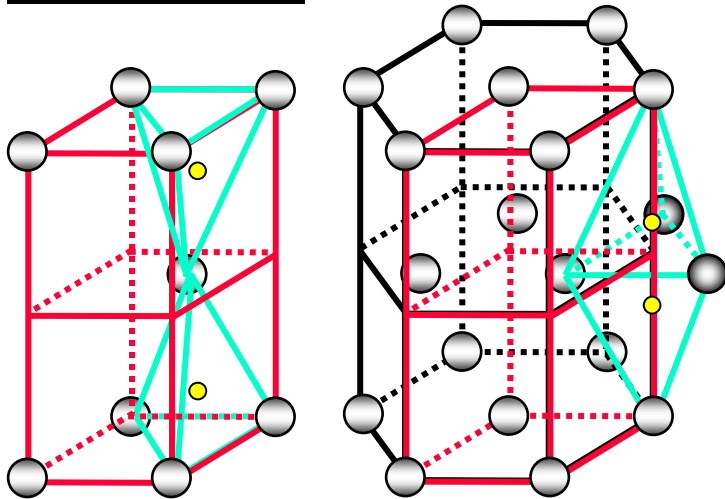
Rapport c/a :  $\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}}$

Volume :  $V = \sqrt{2} a^3$

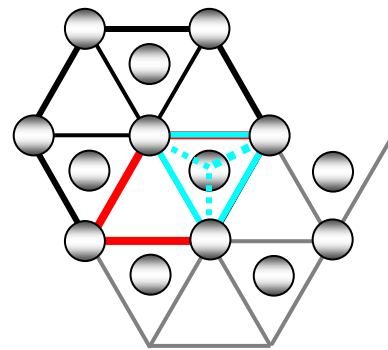
Coordinance : 12  
 (voisins à  $2R = a$ )

Compacité :  $C = 74\%$

### Sites tétraédriques

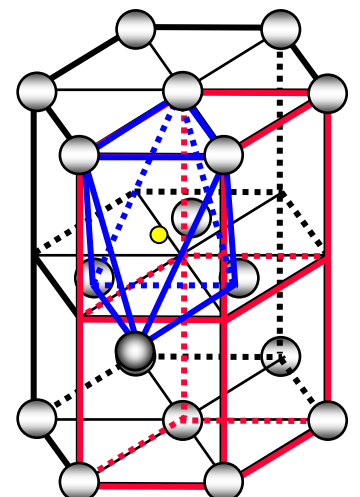
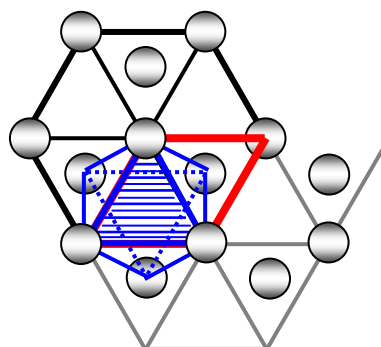


4 sites T par maille  
 2 dans la maille et  $2 \cdot 4 \cdot \frac{1}{4}$  sur les arêtes  
 Tétraèdre régulier de côté  $2R$



### Sites octaédriques

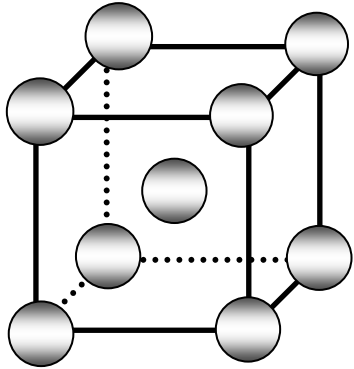
2 sites O par maille  
 Situés dans la maille  
 Octaèdre régulier de côté  $2R$



# STRUCTURE CUBIQUE CENTRÉE

## Empilement non compact

### Maille Conventionnelle



Paramètres de la maille :  $a$

Population Z : 2 atomes / maille  
1 atome à chaque sommet :  $8 \cdot 1/8$   
1 atome dans la maille

Relation entre a et R :  $4R = \sqrt{3} a$

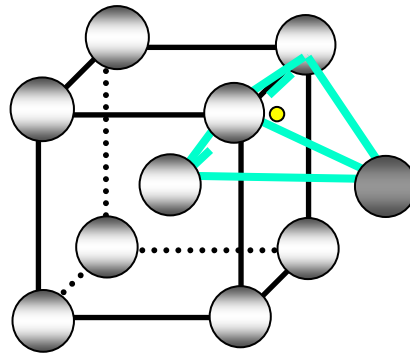
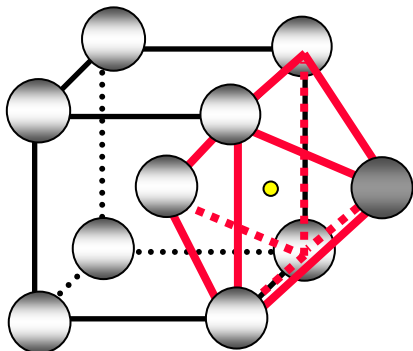
Volume :  $V = a^3$

Coordinance : 8  
(voisins à  $2R = a\sqrt{3}/2$ )

Compacité :  $C = 68\%$

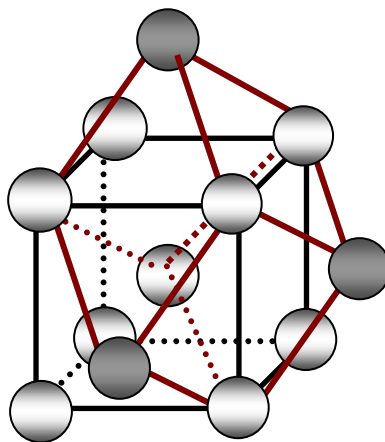
### Sites tétraédriques

12 sites T par maille  
Situés sur les faces de la maille  
Tétraèdre non régulier



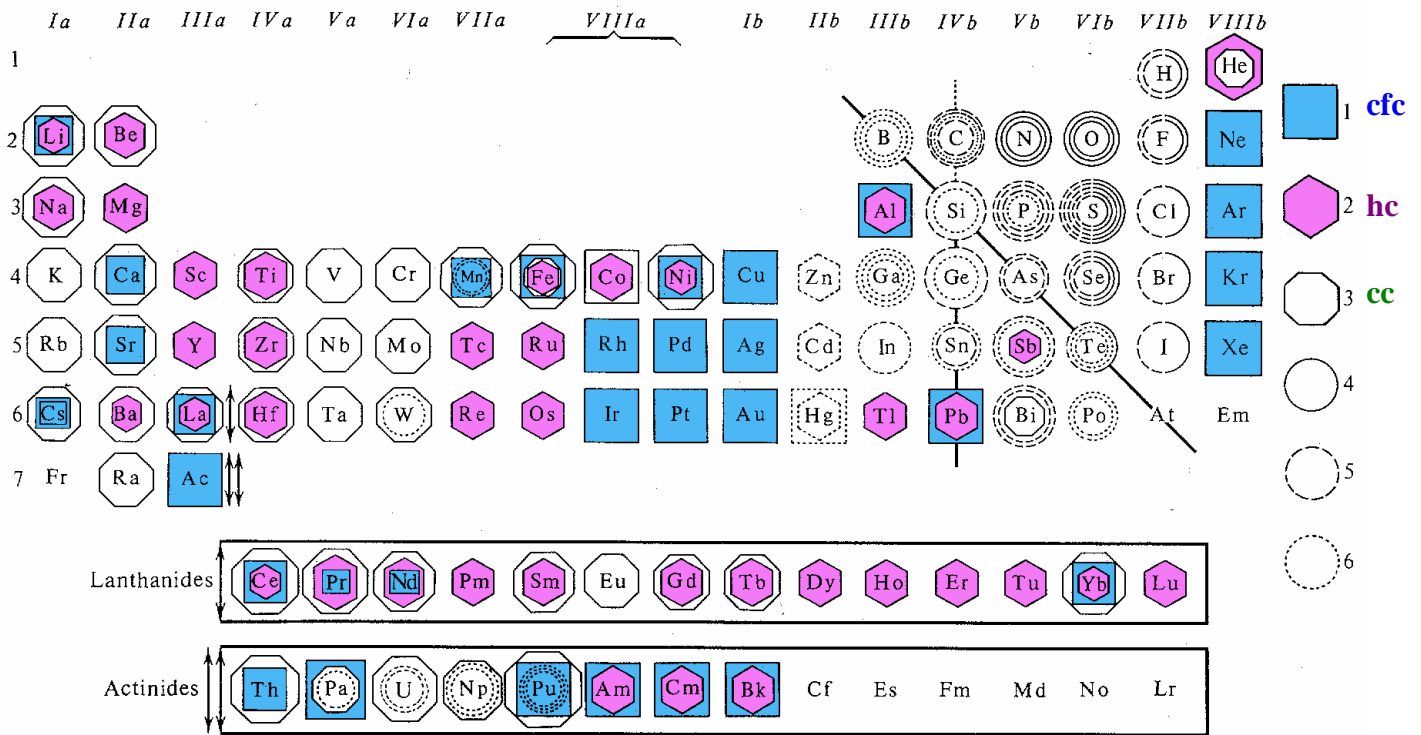
### Sites octaédriques

6 sites O par maille  
Situés au centre des faces et au milieu des arêtes  
Octaèdre non régulier



Maille primitive : rhomboèdre  
pas utile pour nous...

# POLYMORPHISME DES MÉTAUX



**Fig. 2.1.** Structures of the elements arranged according to the periodic system. The structures are denoted by the following symbols: (1) cubic close packing; (2) hexagonal close packing; (3) body-centered-cubic packing; (4) molecular structure; (5) structure with coordination number 8-N; (6) other structures. If a substance has several modifications, the transition from the external to the internal symbol corresponds to a transition from a high- to low-temperature modification and, then, to the modification existing at high pressures. Some modifications which are less common or have not been investigated enough are not presented

## ALLIAGES

### Définitions

#### Solution solide de substitution (SSS) :

Les atomes du métal M2 se substituent aléatoirement ou pas aux atomes du métal M1. L'alliage formé constitue une unique phase solide (cf binaires avec solutions solides). Une SSS s'observe si M1 et M2 ont des propriétés physiques et chimiques voisines.

Exemples : Fe-Ni, Cu-Ag, Ag-Au  
Or à 18 carats : 50/50 Au-Cu (cfc)

#### Solution solide d'insertion (SSI) :

Les atomes M2 se logent dans les sites interstitiels formés par les atomes du métal M1. L'alliage formé constitue une unique phase solide (cf binaires avec solutions solides). En théorie, une SSI s'observe si la taille de M2 est plus petite que celle du site. En pratique M2 peut être plus "gros", dans ce cas il s'insère "en force" et déforme le cristal hôte. M2 est souvent un non-métal (H, C...).

Exemple : austénite (2,1% de C dans les sites octaédriques du fer  $\gamma$  cfc)

Les rayons des sites interstitiels n'étant que de quelques dixièmes de celui des atomes M1, seuls de petits atomes pourront entrer en solution d'insertion dans les métaux usuels et dans les sites les plus gros.

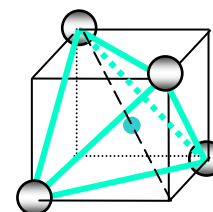
	H	O	N	C	B
Rayon atomique (angstrom)	0,30	0,66	0,71	0,77	0,87

### Sites tétraédriques dans les structures compactes

Tétraèdre régulier de côté  $2R$  dans les structures cfc et hc.

Astuce prendre cfc et dire :  $4R = \sqrt{2} a$

$$R + R_T = \frac{\sqrt{3}}{2} a$$



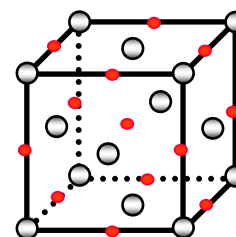
$$\boxed{R_T = 0,22.R}$$

### Sites octaédriques dans les structures compactes

Octaèdre régulier de côté  $2R$  dans les structures cfc et hc.

Astuce prendre cfc et dire :  $4R = \sqrt{2} a$

$$2R + 2R_O = a$$



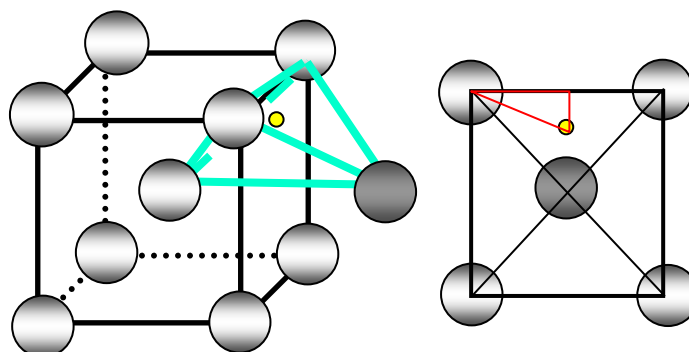
$$\boxed{R_O = 0,41.R \quad \text{et} \quad R_O > R_T}$$

### Sites tétraédriques dans la structure cc

Tétraèdre NON régulier

Dessiner la face carrée puis théorème de Pythagore

$$\boxed{R_T = 0,29.R}$$



### Sites octaédriques dans la structure cc

Octaèdre NON régulier

Base carrée de côté  $a$

Hauteur globale  $a$  (c'est la grandeur limitante)

$$2R + 2R_O = a$$

$$\boxed{R_O = 0,15.R \quad \text{et} \quad R_O < R_T !!!}$$

