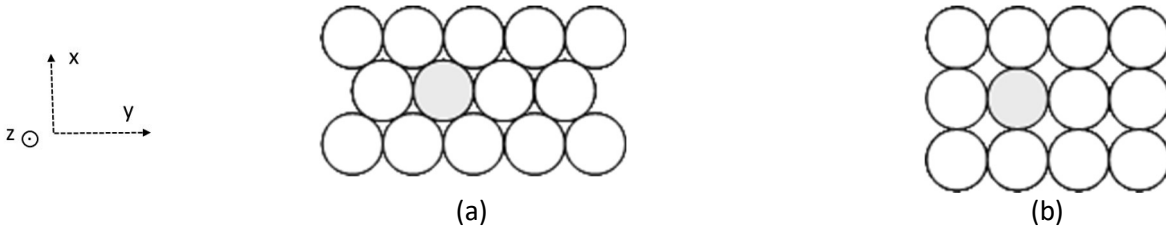


Chapitre 2: Les cristaux métalliques

I/ Généralités

La liaison métallique s'explique par le fait que l'atome métallique est un ion **positif** entouré d'un **nuage électronique**. Ainsi la position d'un atome va dépendre du « jeu » d'attraction- **répulsion** entre ces deux entités. L'assemblage (ou **empilement**) des différents atomes sur une première couche peut se faire de deux façons :



L'empilement **(a)** laisse moins de vide que l'empilement **(b)**, on dit qu'il est plus **compact**.

On va commencer par regarder de près l'empilement le plus compact : l'empilement (a).

II/ Empilement compact

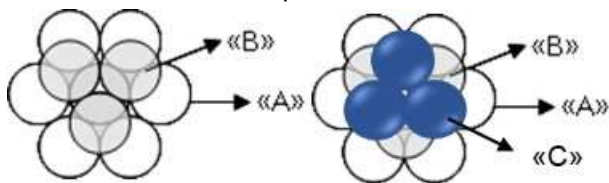
1/ Description

La construction d'une première couche «A», dans le plan (xOy) avec un minimum de **vide**, conduit à un arrangement tel que les centres des sphères forment un triangle équilatéral de côté **2R**. Ceci correspond, pour chaque sphère, à un entourage de **6** sphères intercalées de **6** vides de forme triangulaire : **3** pointés vers le haut (Δ) et **3** pointés vers le bas (∇).

Au-dessus de ces vides, d'autres sphères vont être positionnées pour former une deuxième couche «B» mais seuls trois vides sur six pourront être occupés car la distance entre deux vides est **inférieur à 2R**.

Pour former la troisième couche « C » deux possibilités s'offrent à nous :

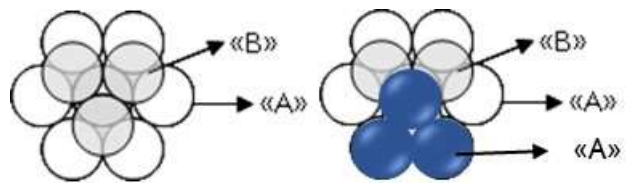
1^{ère} possibilité : On dessine des sphères de telle façon qu'elles ne soient ni dans l'axe des sphères de la couche « A » ni dans l'axe des sphères de la couche « B »



Les sphères que vous venez de dessiner forment une nouvelle couche «C» différentes des couches «A» et «B»

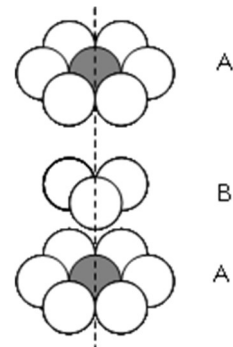
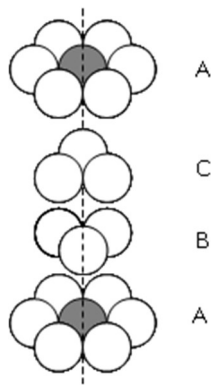
Cette situation correspond à **cubique à faces centrées**.

2^{ième} possibilité : On dessine des sphères de telle façon qu'elles soient dans l'axe des sphères de la couche « A »



Les sphères se positionnent exactement au-dessus des sphères de la couche «A» pour former une seconde couche «A»

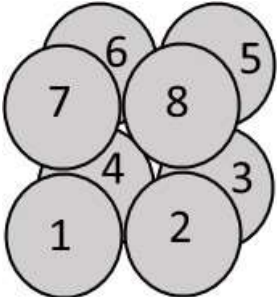
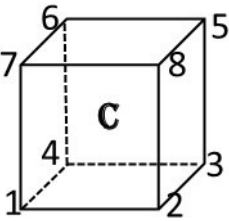
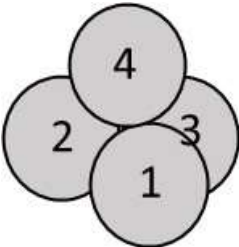
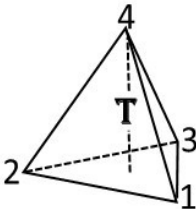
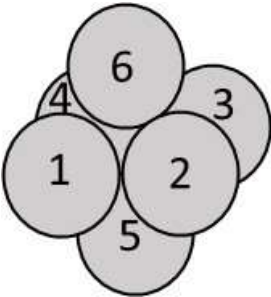
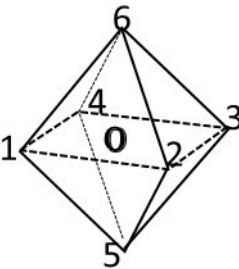
Cette situation correspond à **hexagonal compact**.



Avant de voir de plus près à quel système cristallin correspond chaque empilement, intéressons-nous aux vides laissés par les empilements même les plus compacts.

2/ Les sites interstitiels cristallins

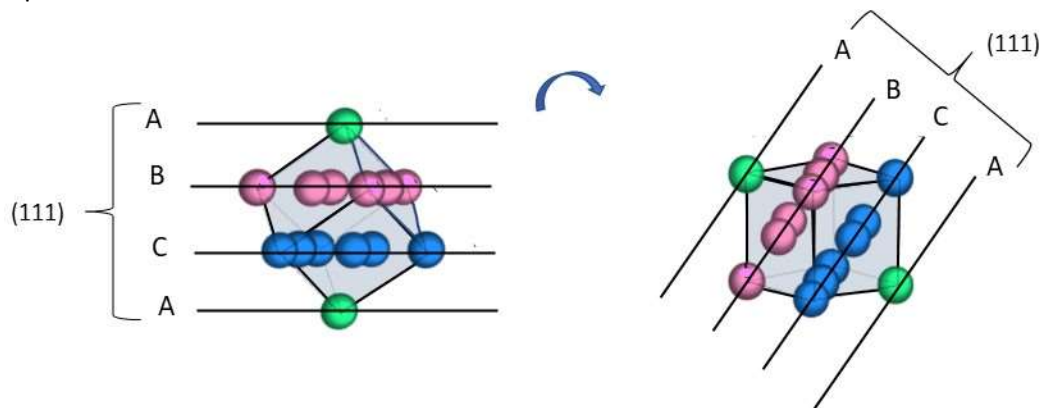
Une maille “contient” nécessairement du vide puisque la compacité, C , est **inférieur 1**. Ce vide, qui peut être occupé par une entité étrangère est appelé **site cristallographique** ou site interstitiel pouvant être cubique, tétraédrique ou octaédrique.

Site cubique, C	Site tétraédrique, T	Site octaédrique, O
Vide créé par des motifs disposés en cube. La coordinnence du site est 8  Motifs disposés en cube  Position du site cubique, C	Vide créé par des motifs disposés en tétraèdre régulier ou non. La coordinnence du site est 4.  Motifs disposés en tétraèdre  Position du site tétraédrique, T	Vide créé par des motifs disposés en octaèdre régulier. La coordinnence du site est 6  Motifs disposés en octaèdre  Position du site octaédrique, O

Maintenant, revenons à nos empilements compacts et commençons par analyser le système cubique à faces centrées : empilement de type ABC (page 12).

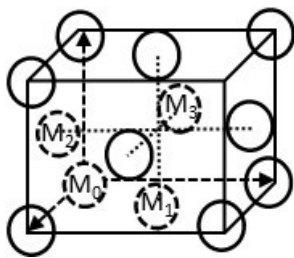
3/ Empilement cubique à faces centrées (cfc)

On représente ci-dessous les couches A, B et C comme vous les avez dessinées plus haut (1^{ère} possibilité) mais en les éloignant pour plus de clarté dans le schéma



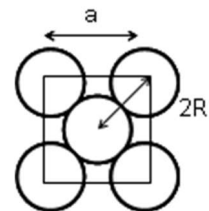
Alors, comment tracer un cfc ?

A partir du motif M_0 placé à l'origine, le reste des motifs (M) sont placés par translation selon :



$$M_1 : \frac{1}{2}\vec{a} + \frac{1}{2}\vec{b}; \quad M_2 : \frac{1}{2}\vec{a} + \frac{1}{2}\vec{c}; \quad M_3 : \frac{1}{2}\vec{b} + \frac{1}{2}\vec{c}$$

En représentant une face, le théorème de Pythagore : $(2R)^2 = a^2 + a^2$ donne : $a = \sqrt{2} R$



Multiplicité Z

$$Z = \left(\frac{1}{8} \times 8\right) + \left(\frac{1}{2} \times 6\right) = 4$$

Compacité

$$C = \frac{Z \times \frac{4}{3}\pi R^3}{a^3} = \frac{\sqrt{2}}{6} \pi = 0,74$$

Coordination

Chaque sphère est entourée de :

6 sphères sur la même couche «A»

3 sphères sur la couche du dessus «B» et

3 sphères sur la couche du dessous «C»

→ Coord = 12

Auto-évaluation

Application 4.1 : Questions à choix multiples

Cochez les propositions justes :

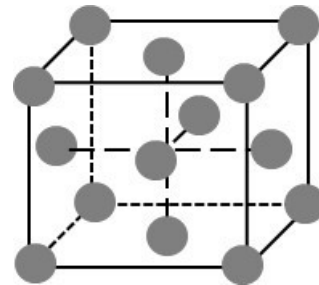
La liaison métallique	☐	s'établit entre des atomes dont les électrons de valence sont facilement libérés.
	☐	est une liaison plus forte que les liaisons covalente et ionique.
	☒	explique l'état ordonné des métaux cristallins.
	☐	ne donne lieu qu'à des empilements compacts de type cubique à face centrées.
Les sites cristallins dans une maille	☒	ont un volume total que l'on peut déduire de la compacité.
	☐	représentent le vide qui ne peut pas être occupé par aucun motif.
	☐	ont toujours la même coordinence que les motifs.
	☒	cubique P sont cubiques.
La maille cubique à faces centrées	☒	correspond à un empilement selon les plans (111)
	☒	est l'un des réseaux les plus fréquemment rencontrés pour les cristaux métalliques
	☒	comporte 4 motifs de coordonnées (0,0,0), (1/2,0,0), (0,1/2,0) et (0,0,1/2)
	☐	présente une compacité de 80%.

Application 4.2 : Sites cristallographiques

Considérons une maille cubique à face centrées.

a/ Cette maille ne comporte pas de sites cubiques. Pourquoi ?

Parce qu'on ne peut pas y trouver de motifs ordonnés en cube.

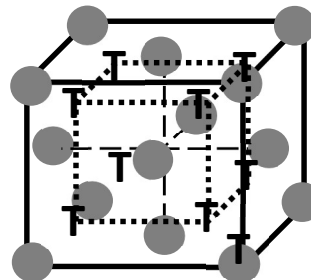
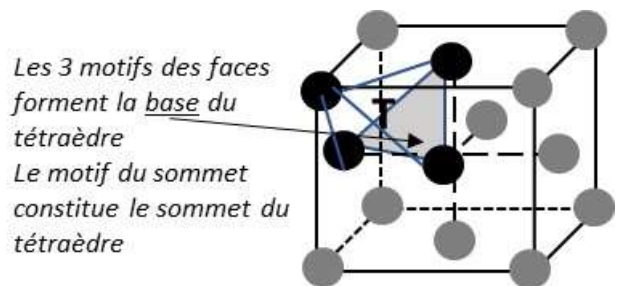


b/ Cette maille comporte des sites tétraédriques. Les motifs fonceés forment le tétraèdre de l'un de ces sites.

- Représentez-le sur la maille et indiquez avec la lettre (T) la position du centre de ce site.
(voir maille ci-contre)
- Combien comptez-vous de sites tétraédriques pour cette maille ?

Comme chaque sommet de la maille est le sommet d'un site tétraédrique, alors chaque maille compte 8 sites tétraédriques.

- Indiquez leur position dans la maille avec la lettre (T).



Les 8 sites tétraédrique forment, si on les relie entre eux, un petit cube d'arête $a/2$

c/ Cette maille (ici en rouge, en bas à gauche) comporte aussi des sites octaédriques. Pour les retrouver, on représente la maille « de travail » avec 3 autres mailles. Les motifs foncés forment l'octaèdre de l'un des sites de la maille « de travail ».

- Représentez-le en indiquant avec la lettre (O) la position du centre de ce site.

(voir maille ci-contre)

- Combien comptez-vous de sites octaédriques pour cette maille (en rouge, en bas à gauche)?

*Comme le site octaédrique se situe au milieu d'une arête (sur la base de l'octaèdre) et comme chaque maille comporte 12 arêtes, alors on compte **12 sites octaédriques mais partagé entre 4 mailles**. Donc nous comptons 3 sites octaédriques de ce type.*

Mais il y a un autre type de site octaédrique qui se trouve au milieu de la maille car les 6 motifs des faces forment un octaèdre.

Il y a donc au total 4 sites par mailles

- Indiquez leur position dans la maille avec la lettre (O).

Chaque site est partagé entre 4 mailles.

