

Cristallographie – Fiche de cours

1. Solides et structures cristallines

a. Solides cristallins

On appelle solide un système qui a une forme propre

On distingue les solides cristallins (empilement ordonné et régulier d'atomes)

b. Description des structures cristallines

On étudie 4 structures :

- cubique simple (CS)
- cubique centré (CC)
- cubique à face centrée (CFC)
- hexagonal compact (HC)

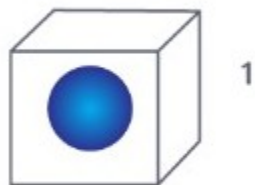
On appelle paramètre de la maille a

On appelle compacité : $c = \frac{\text{volume des atomes}}{\text{volume de la maille}}$

On appelle masse volumique $\rho = \frac{\text{masse des atomes}}{\text{volume de la maille}}$

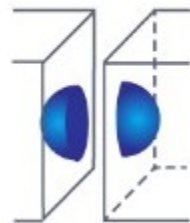
2. Règle d'occupation des atomes

Au centre



1

Sur une face



$\frac{1}{2}$

Sur une arête



$\frac{1}{4}$

Sur un sommet de cube



$\frac{1}{8}$

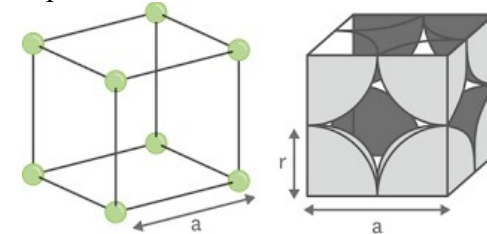
Sur un sommet d'hexagone



$\frac{1}{6}$

3. Maille cubique simple (CS)

1 atome est rangé à chaque sommet du cube



Condition de tangence : Les atomes sont tangents sur une arête du cube

Multiplicité $Z=1$ atome par maille Paramètre de la maille $a=2r$

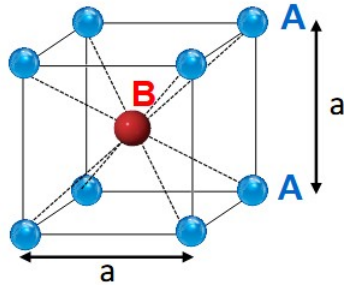
Compacité $c=0,52$

Coordination $C=6$

4. Maille cubique centrée (CC)

1 atome est rangé à chaque sommet du cube

1 atome est placé au centre du cube



Condition de tangence : Les atomes sont tangents et alignés sur la diagonale du cube

Multiplicité $Z=2$ atomes par maille Paramètre de la maille $a = \frac{4r}{\sqrt{3}}$

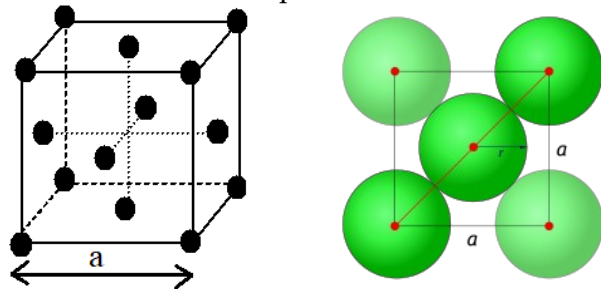
Compacité $c=0,68$

Coordinance $C=8$

5. Maille cubique face centrée (CFC)

1 atome est rangé à chaque sommet du cube

1 atome est placé au centre de chaque face



Condition de tangence : Les atomes sont tangents et alignés sur la diagonale d'une face du cube

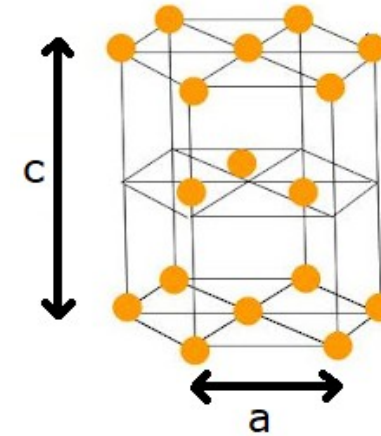
Multiplicité $Z=4$ atomes par maille Paramètre de la maille $a = 2\sqrt{2}r$

Compacité $c=0,74$

Coordinance $C=12$

6. Maille hexagonale compact (HC)

Les atomes sont placés sur 3 plans sur le principe de l'empilement de sphères



Condition de tangence 1 : Les atomes sont tangents sur une arête de l'hexagone

Condition de tangence 2 : pour un hexagone parfait $\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}}$

Multiplicité $Z=6$ atomes par maille Paramètre de la maille $a=2r$

Compacité $c=0,74$

Coordinance $C=12$

7. Sites cristallographiques

La partie non occupée des réseaux cristallographiques est appelée site interstitiel

a. Réseau cubique

- 1 site cubique au centre du réseau
- coordinance : $C=8$

b. Réseau cubique à face centrée

- 8 sites tétraédriques (centres de petits cubes) ; coordinance : $C=4$
- 4 sites octaédriques (au centre et au milieu des arêtes) : $C=6$

Conditions de tangence :

- site tétraédrique : diagonale du petit cube
- site octaédrique : arête du cube
- site cubique : diagonale du cube

8. Structure de diamant

Maille CFC pour laquelle 4 atomes se placent au centre des tétraèdres

Multiplicité $Z=8$ atomes par maille

Paramètre de la maille $a = \frac{8}{\sqrt{3}} r$

Compacité $c=0,34$

Coordinance $C=4$

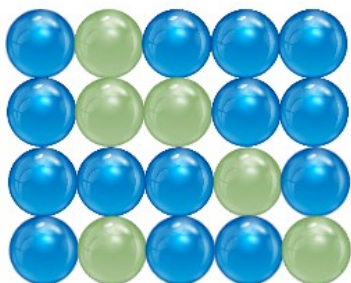
9. Alliages

a. Définition

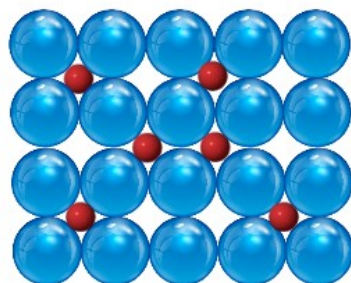
Un alliage est l'incorporation d'éléments chimique à un métal

Il existe 2 catégories d'alliages :

- alliages de substitution



- alliages d'insertion

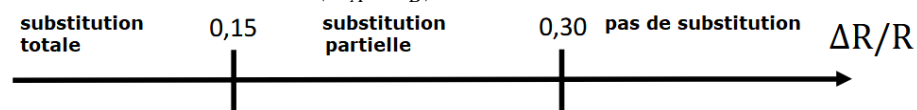


b. Alliages de substitution

Règles de Hume-Rothery

- formule brute : $A_x B_y$
- A et B doivent avoir la même structure cristalline et une électronégativité voisine

- On détermine $\frac{\Delta R}{R} = \frac{|R_A - R_B|}{(R_A + R_B)/2}$

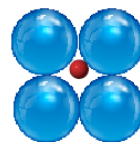


Loi de Vegard

Le paramètre de la maille varie lors d'une substitution

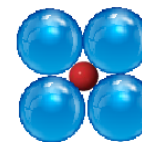
$$a_{A_x B_y} = a_A \cdot \frac{x}{x+y} + a_B \cdot \frac{y}{x+y}$$

c. Alliages d'insertion

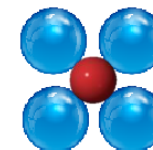


$R_B < \text{taille du site}$

Arrangement instable



$R_B = \text{taille du site}$



$R_B > \text{taille du site}$

Arrangements stables

B sera stable dans un site tétraédrique si $\frac{R_B}{R_A} \approx 0,225$

B sera stable dans un site octaédrique si $\frac{R_B}{R_A} \approx 0,414$

B sera stable dans un site cubique si $\frac{R_B}{R_A} \approx 0,732$