Activité S2 E.1 : Arrangement cubique

Autour du cube

Un grand nombre de solides ont un arrangement régulier de leurs atomes (ou ions) dans une symétrie cubique ; il faut donc mettre en évidence les propriétés géométriques du cube.

Présentation géométrique

➔ En premier lieu, on définit une base vectorielle pour laquelle les trois vecteurs ont la même norme et font tous des angles droit (90°) : base orthonormée. Cela permet de caractériser :

- les 8 sommets ;
- les 12 arêtes du cube.

➔ En deuxième lieu, on définit deux types de diagonales :

- les diagonales des six faces carrées (2 par face) ;
- les grandes diagonales du cube qui relient deux sommets opposés du cube (4 par cube).

➔ En troisième lieu, on positionne certains points caractéristiques :

- les 12 milieux des arêtes ;
- les 6 centres des faces (intersection des 2 diagonales d'un face) ;
- le centre du cube (intersection des 4 grandes diagonales du cube).

activité S2 E.1.1. Représentation en perspective du cube

1°) Dessinez en perspective cavalière un cube et faites apparaître tous les points caractéristiques et les éléments de géométrie définis ci-dessus. Pour éviter dans cette représentation la superposition de certains points caractéristiques, vous devez prendre une longueur d'arête égale à un nombre impair de carreaux et un angle différent de 45°.

2°) Représenter sur trois dessins différents les plans de coupe (à plat) correspondant à une face, un plan médian parallèle à cette face et un plan sécant contenant deux des diagonales du cube. On y placera les points caractéristiques précédents appartenant à ces plans de coupe.

3°) Si on note a la longueur d'une arête du cube, donnez précisément les distances égales :

- à une diagonale de face ;
- à une grande diagonale du cube ;
- au segment reliant le centre d'une face à l'un de ses sommets ;
- au segment reliant le centre du cube à l'un de ses sommets ;
- au segment reliant le centre du cube au centre d'une face.

Le cube dans le modèle des sphères dures

Dans le modèle des sphères dures, on considère que les atomes sont sphériques et indéformables. Il y a tangence entre ceux qui sont les plus proches voisins, on définit alors une distance de contact $d_{contact}$ qui est égale à 2 R (rayon de l'atome).
Si ces atomes (d'un seul type) se placent dans un environnement de géométrie cubique, on peut alors trouver une relation entre le paramètre du cube qui n'est rien d'autre que la norme d'un des vecteurs de la base vectorielle que l'on appelle la longueur de l'arête a et le rayon de l'atome que l'on notera simplement R.

Pour cela, il faut préciser la position des atomes dans l'environnement cubique ; en fait, on rencontre généralement trois cas simples :

- des atomes centrés sur les 8 sommets <=> cube simple ou primitif ;
- des atomes centrés sur les 8 sommets + 1 au centre du cube <=> cube centré ;
- des atomes centrés sur les 8 sommets + 6 au centre des faces <=> cube faces centrées.

activité S2 E.1.2. Relation entre a et R pour les trois types d'environnement cubique

1°) Pour chaque environnement cubique, choisissez et dessinez un plan de coupe qui fait apparaître la distance de contact. Dans ces dessins les atomes sphériques seront représentés par des cercles tangents de rayons R.

2°) Déduisez de ces représentations la relation entre R et a pour chaque environnement cubique.

<u>Notion de sites interstitiels</u>

Un réseau hôte constitué de sphère S (en fait, les atomes) de rayon R dans un environnement géométrique régulier (polyèdre) dont le centre est non occupées définit un site interstitiel :

- si le polyèdre est un cube, on parle de site cubique, noté C ;
- si le polyèdre est un octaèdre, on parle de site octaédrique, noté O ;
- si le polyèdre est un tétraèdre, on parle de site tétraédrique, noté T.

Dans le modèle des sphères dures, les atomes sont tangents le long des arêtes des polyèdres. Par contre, le centre du polyèdre (inoccupé par définition) est un espace vide.
Pour évaluer la taille de cette cavité, on choisit de calculer la distance limite entre le centre du polyèdre et la surface des atomes sphériques qui l'entoure. Cette distance est assimilée à un rayon R_{site} qui caractérise alors le site interstitiel correspondant et qui physiquement représente une entité hypothétique sphérique placée au centre du polyèdre et tangente aux atomes de rayon R qui l'entourent.
Le rayon du site interstitiel R_{site} dépend du type de site et du rayon R des atomes ; il est plus ou moins grand et pour des sites interstitiels réguliers entourés d'atomes de même rayon R on démontre que : $\mathbf{R_{cubique} > R_{octaédrique} > R_{tétraédrique}}$.

activité S2 E.1.3. Relation entre a et R pour les trois types d'environnement cubique

1°) Pour les trois types de polyèdre, dessinez un cube en perspective cavalière, puis positionnez les centres des atomes du polyèdre et enfin les arêtes du polyèdre :

- cube => site cubique : 8 atomes aux sommets du cube ;
- octaèdre => site octaédrique : 6 atomes aux centres des faces du cube ;
- tétraèdre => site tétraédrique : 4 atomes sur les sommets du cube (jamais sur la même arête).

2°) Sur les trois dessins précédents faites apparaître le centre du polyèdre qui est par définition le site interstitiel. Que remarque-t-on ?

3°) Choisissez et dessinez un plan de coupe pour faire apparaître la distance limite définit ci-dessus. Dans ces dessins les atomes sphériques seront représentés par des cercles de rayons R et le site interstitiel par une cercle de rayon R_{site}.

4°) Déduisez de ces représentations la relation entre R et R_{site} pour chaque polyèdre.