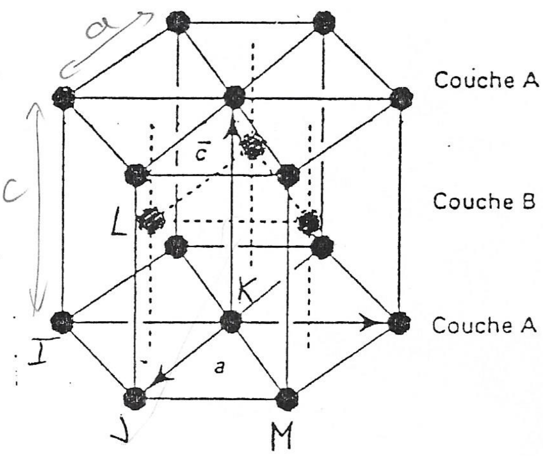
On coupe le long des arêtes

4.) La structure hexagonale compact.

Structure hexagonale caractérisée par les paramètres : a arête de l'hexagone de base, c hauteur de la maille.

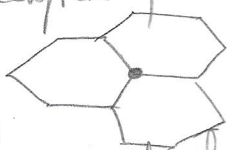
Exemples : Mg, Zn, Cd, Ca_γ.



a) Nombre d'atomes par maille : 3 types d'atomes.

– 12 au sommet de l'hexagone communs à 6 mailles. 3 ds le plan, et 3 ds le plan supérieur ⇒ comptent pour 1/6.

$\boxed{12 \times 1/6 = 2}$

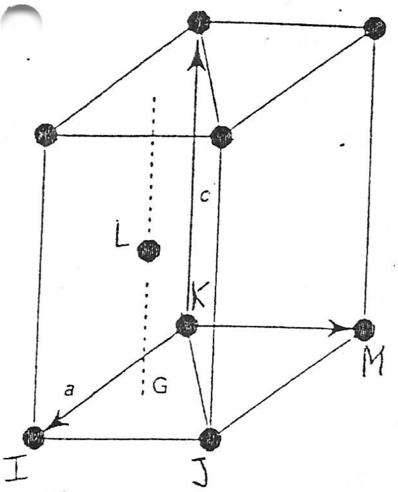


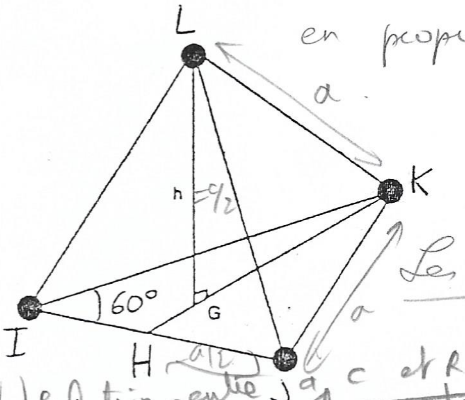
– 2 atomes au centre des hexagones des plans de base qui appartiennent à 2 mailles.

$\boxed{2 \times 1/2 = 1}$

– 3 atomes ds le plan médian qui appartiennent en propre à la maille.

$\boxed{3 \times 1 = 3}$



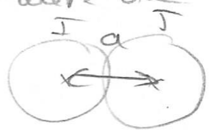


$\Rightarrow$ $\boxed{6 \text{ atomes par maille.}}$

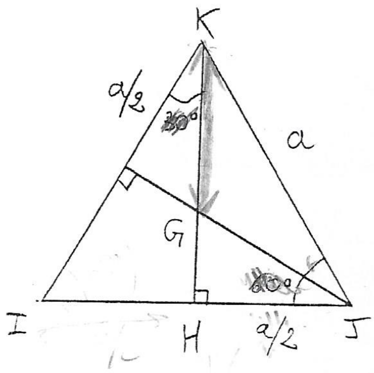
Les plans de densité maximale sont les plans de base (Plans A)

b) Relation entre a, c et R
$\Rightarrow$ les particules sont tangentes suivant l'arête de l'hexagone

$\boxed{a = 2R}$



Relation entre c et a ?

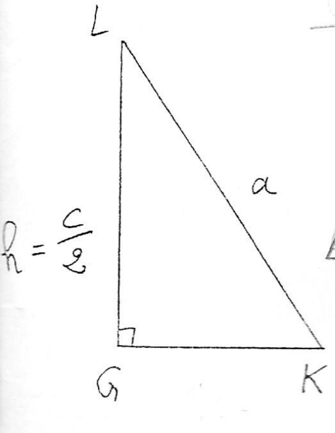


• (I, J, K, L) forme un tétraèdre régulier de côté a. (plus proches voisins donc tous à égale distance).

Le plan médian est situé à égale distance des 2 plans de base, donc) $\boxed{h = LG = \frac{c}{2}}$

• G proj de L sur IJK est aussi le barycentre de IJK triangle équilatéral.

$\Rightarrow$ L'intersection des hauteurs est également l'intersection des bissectrices (= médiatrices). $KG = \frac{2}{3} KH$.



ΔJHK Pythagore $KH = \sqrt{a^2 - \left(\frac{a}{2}\right)^2} = \frac{a\sqrt{3}}{2} \Rightarrow KG = \frac{2}{3}\frac{a\sqrt{3}}{2}$ $\boxed{KG = \frac{a}{\sqrt{3}}}$

ΔLGK Pythagore $\left(\frac{c}{2}\right)^2 + KG^2 = a^2 \Rightarrow \frac{c^2}{4} + \frac{a^2}{3} = a^2$

$c^2 = \frac{2a^2}{3} \times 4$ $\boxed{c = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}} a}$ $\boxed{c \simeq 1{,}633a \quad c \simeq 3{,}266R}$

(ou $KG = \frac{2}{3}$ …

c) Compacité

$$\boxed{V_{atomes} = 6 \times \frac{4}{3}\pi R^3}$$

↳ nbd atomes / maille.

$$V_{maille} = 6 \times \text{Aire } IJK \times c$$
$$= 6 \times \left(\frac{a}{2} \times KH\right) \times c$$

or $\boxed{KH = \frac{a\sqrt{3}}{2}}$ ds le triangle IJK

$$= 6 \times \left(\frac{a}{2} \times \frac{a\sqrt{3}}{2}\right) c = \frac{3\sqrt{3}}{2} a^2 c$$

$$V_{maille} = 6 \times \frac{a}{2} \times \frac{a\sqrt{3}}{2} \times \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}} a$$

$$= a^3 \times 3\sqrt{2}$$

$$\boxed{V_{maille} = 8R^3 \times 3\sqrt{2}}$$

Compacité $\mathcal{C} = \frac{V_{atome}}{V_{maille}} = \frac{6 \times \frac{4}{3}\pi R^3}{3\sqrt{2} \times 8R^3}$ $\boxed{\mathcal{C} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0{,}74}$

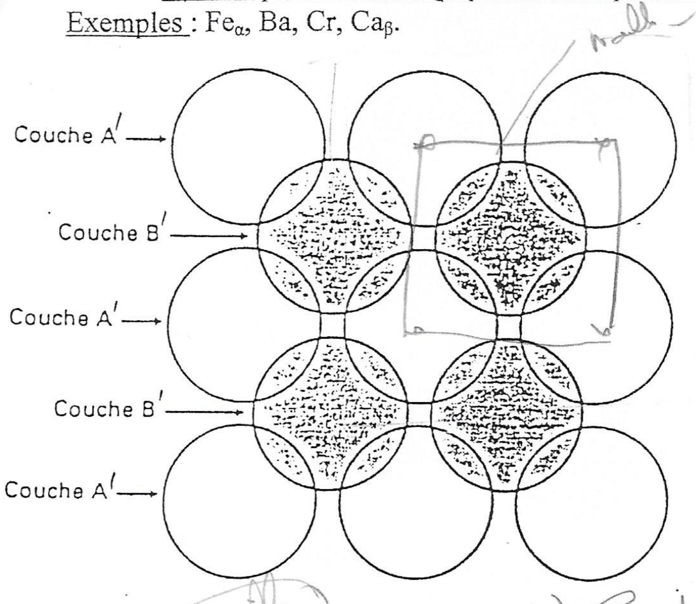
Même compacité que le cfc
Pas très étonnant, même mode d'empilement des atomes, même coordinence.

Autre ex : $\boxed{\text{He pour } T < 1\text{ K et } P > 25\text{ atm}}$

Ts les atomes ne sont pas tangents entre eux.

5.)Exemple d'assemblage pseudo-compact : la structure cubique centrée. Maille cubique d'arête a

Exemples : Fe_α, Ba, Cr, Ca_β.



a) Nombre d'atomes par maille

- 8 atomes au sommet du cube communs à 8 cubes (comptant pour 1/8)

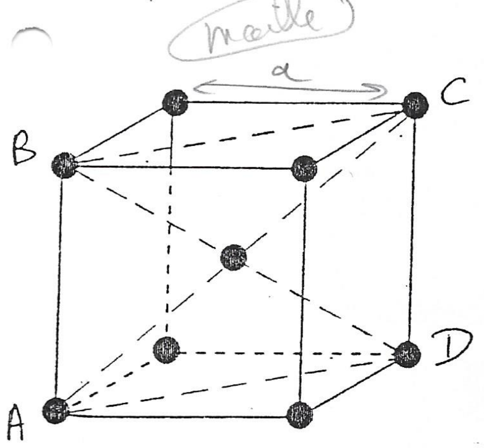
$$\boxed{8 \times \frac{1}{8} = 1}$$

- 1 atome au centre du cube appartient en propre à la maille

$$\boxed{1}$$

$\Rightarrow$ $\boxed{\text{2 atomes par maille}}$

b) Coordinence 8 : pour l'atome central, 4 au dessus, 4 en dessous



c) Relation a, R

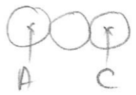
~~Les plans de densité maximale sont les plans types ABCD~~

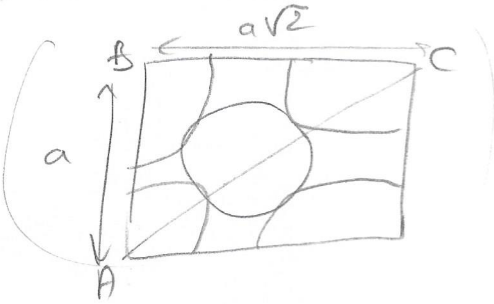
Les particules sont tangentes suivant la diagonale AC.

Pythagore $BC^2 = a^2 + a^2 = 2a^2$ $BC = a\sqrt{2}$

$AC^2 = AB^2 + BC^2 = a^2 + 2a^2 = 3a^2$ $\boxed{AC = a\sqrt{3}}$

$4R = a\sqrt{3}$ $\Rightarrow$ $\boxed{a = \frac{4R}{\sqrt{3}} \simeq 2{,}3R}$





d) Compacité

$$V_{atome} = 2 \times \frac{4}{3}\pi R^3$$

$$V_{maille} = a^3 = \frac{4^3 R^3}{3\sqrt{3}}$$

$$\mathcal{C} = \frac{V_{atome}}{V_{maille}} = 2 \times \frac{4}{3}\pi R^3 \times \frac{3\sqrt{3}}{4^3 R^3} \Rightarrow \boxed{\mathcal{C} = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} = 0{,}68}$$

68% de l'espace est effectivement occupé par les atomes.

$\Rightarrow$ Il y a 32% de vide délimité par des lacunes octaédriques de forme non régulière.

L'assemblage est moins compact que les cfc et hc (il est "pseudo-compact").

2 types d'alliages :
- alliage d'insertion : Le 2e type d'atome occupe les lacunes du réseau principal

≠ alliage de substitution : on remplace des atomes du réseau principal par le 2nd type d'atomes

6.) Sites intersticiels des réseaux compacts

a) Définitions

Sites intersticiels (ou lacunes) : espaces vides ou interstices localisés entre les atomes. Dans ces lacunes peuvent se loger des atomes d'un autre type (ex : alliage fer-carbone). Il existe deux types de lacunes :

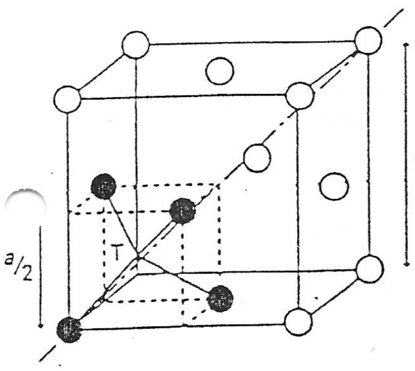
- site tétraédrique: espace délimité par quatre sphère tangentes, dont les centres sont au sommet d'un tétraèdre régulier.
- site octaédrique : espace délimité par six sphères tangentes :

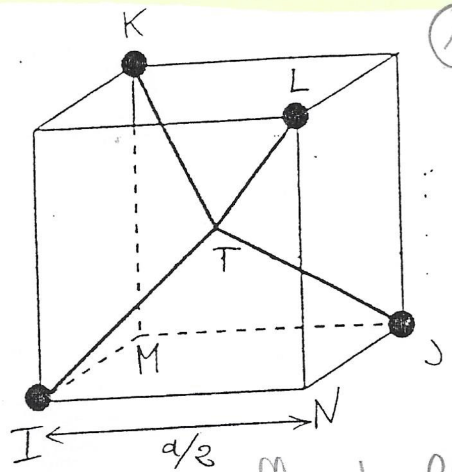
  trois dans le plan supérieur dont les centres forment un triangle équilatéral

  trois dans le plan inférieur dont les centres forment aussi un triangle équilatéral décalé de $\pi/3$.

b) Les lacunes du réseau cfc (les lacunes du réseau hc sont hors prog)

1 Lacune tétraédrique : T centre de la lacune = centre du tétraèdre.



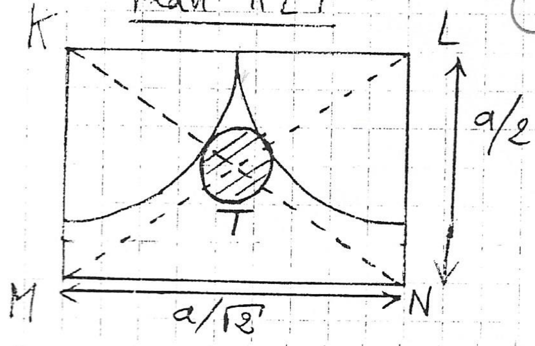


(1) Nombre de lacunes

8 lacunes tétraédriques appartenant en propre à la maille situées au centre de 8 cubes secondaires d'arête $\frac{a}{2}$.

(2) Pb : quelle est la taille de la particule que l'on peut placer dans cette lacune, son centre étant en T

Plan KLT



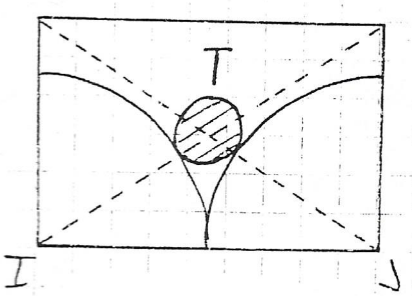
Pythagore : $KL^2 = \left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2 = 2\frac{a^2}{4} = \frac{a^2}{2} \Rightarrow \boxed{KL = \frac{a}{\sqrt{2}}}$

$LM^2 = KM^2 + KL^2$

$LM^2 = \left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{\sqrt{2}}\right)^2 = \frac{a^2}{4} + \frac{a^2}{2} = \frac{3a^2}{4}$

Plan IJT (⊥ à KLT)

$\Rightarrow \boxed{LM = \frac{\sqrt{3}\,a}{2}}$



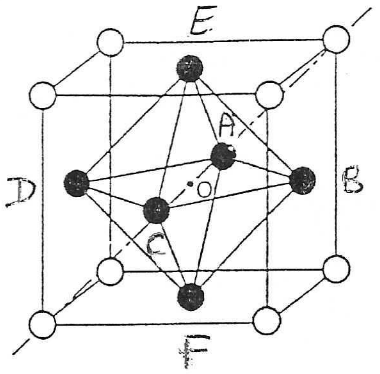
Dans un tel site, on peut placer une sphère de rayon r tq $\boxed{2r + 2R = LM}$

(la sphère est bloquée par K et L ds un plan diagonal, I et J ds l'autre plan diagonal ⊥

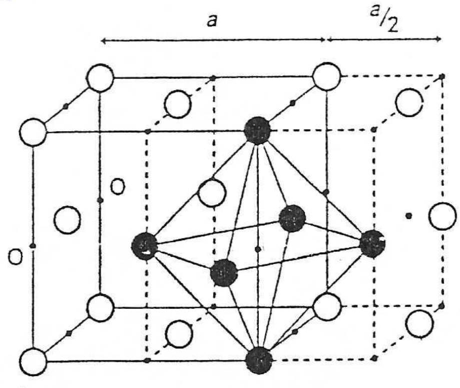
$\Rightarrow r = \frac{LM}{2} - R$ et $\boxed{a = 2\sqrt{2}R}$ (cf 3)

$r = \frac{\sqrt{3}a}{2\times 2} - R = \frac{\sqrt{3}}{4}\times 2\sqrt{2}R - R$ $\boxed{r = \left(\sqrt{\frac{3}{2}} - 1\right)R}$ $\boxed{r = 0{,}225\,R}$

2- Lacune octaédrique



Site au centre de la maille



Site au milieu d'une arête

① 4 lacunes octaédriques

– 1 située au centre du cube, appartenant en propre à la maille.

– les autres ont leur centre situé au milieu d'une arête et elles sont communes à 4 cubes (dans le m̂ plan horizontal)

$\Rightarrow$ 12 arêtes $\times \frac{1}{4} = 3$.

② Quelle est la taille de la particule que l'on peut placer en O

Ds le plan médian : ABCD. $BD = \boxed{AC = a}$

On peut placer ds cette lacune une sphère de rayon r

tq $2r + 2R = AC \Rightarrow r = \frac{AC}{2} - R \Rightarrow \boxed{r = \frac{a}{2} - R}$

$\boxed{a = 2\sqrt{2}R} \Rightarrow r = \sqrt{2}R - R$

$\boxed{r = (\sqrt{2}-1)R \simeq 0{,}414 R}$