Chapitre II-Structures métalliques

II-1-Liaison métallique

La liaison métallique peut être décrite par le modèle de bandes qui repose sur l'idée que les orbitales atomiques des atomes se recouvrent et forment une bande d'orbitales moléculaires liante et une bande anti liante. Les orbitales moléculaires liantes qui peuvent être remplies ou semi-remplies forment la bande de valence.

Les orbitales moléculaires anti liantes sont vides dans les métaux et forment la bande de conduction.

Sous l'effet d'un champ électrique, un électron se déplace de la bande de valence vers la bande de conduction laissant un trou positif, ce déplacement est suivi par d'autres déplacements d'électrons ce qui donne la conductivité électrique dans le cas d'un métal conducteur.

Par contre dans les semi-conducteurs, la largeur de la zone d'énergie entre la bande de valence et la bande de conduction est plus importante ce qui nécessite une absorption d'énergie par un léger échauffement par exemple, ce qui permet de donner une certaine conductivité.

Dans les isolants, la largeur de la zone d'énergie entre les deux bandes est tellement grande qu'elle ne permet aucun déplacement électronique.

II-2-Structures cristallines

La majorité des métaux cristallisent selon trois types de structures fondamentales.

Dans cette étude, on assimile les atomes métalliques à des sphères rigides de rayon R.

II-2-1- Structure cubique centré (C.C)

Dans ce type de structures, les atomes se rassemblent suivant un assemblage carré type A-B-A-B où les atomes occupent les sommets et le centre de la maille (fig. 1).

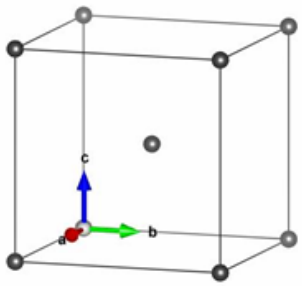


Figure 1 : Maille cubique centrée

a)Compacité de la structure :

La compacité d'une structure est définie comme étant le rapport entre le volume occupé par des atomes de rayon R et le volume de la maille de paramètre a selon la relation suivante :

$$C = \frac{V_{occupé}}{V_{maille}} = \frac{Z.\frac{4}{3}\pi R^3}{a^3}$$

Z est le nombre d'atomes par maille.

Dans ce cas Z= 8 x (1/8) + 1 = 2 atomes/maille

Et vu que le plan de densité maximale est le plan de la diagonale principale (011) (fig. 2), les atomes sont donc tangents suivant la direction de la diagonale principale du cube de paramètre a d'où : 4R=$a\sqrt{3}$ soit R= $a\sqrt{3}/4$

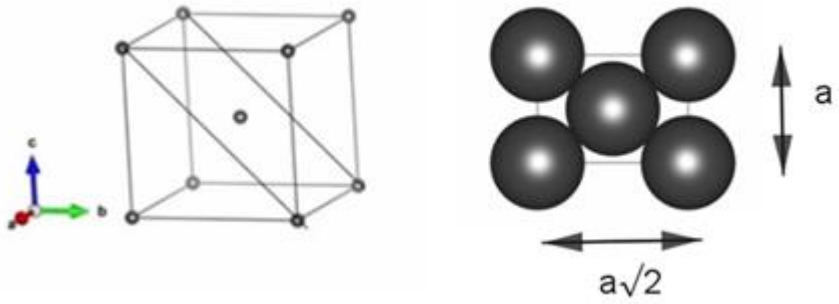


Figure 2: Plan de densité maximale (011)

Si on remplace la formule du rayon R en fonction du paramètre a dans l'expression de la compacité, on obtient une valeur de 0.68.

Donc dans une structure cubique centrée, le volume occupé est de 68%.

b)Coordinence :

La coordinence dans une structure est le nombre des plus proches voisins d'un atome quelconque à la même distance.

Dans une structure cubique centrée, la coordinence est de huit à une distance de $a\sqrt{3}/2$.

c)Masse volumique :

C'est le rapport entre la masse des atomes et le volume de la maille tel que :

$$\rho = \frac{Z \text{ x } M}{N_a \text{x} V_{maille}} = \frac{Z \text{ x } M}{N_a \text{ x } a^3}$$

avec M : masse atomique, N_a : nombre d'Avogadro.

d)Insertion dans les réseaux :

Dans chaque réseau, il ya des interstices qui peuvent être occupés par des atomes différents de ceux qui forment le réseau initial. Selon l'entourage de l'interstice, on distingue deux types de sites :

- **Site octaédrique**

Chaque site est entouré de six atomes formant un octaèdre (fig. 3).

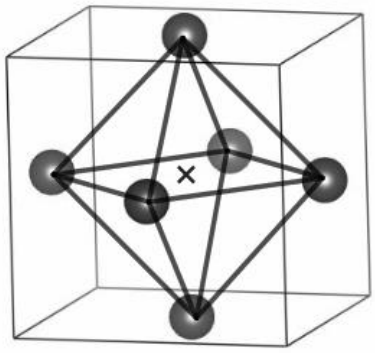


Figure 3: Site octaédrique

- **Site tétraédrique**

Dans ce cas chaque site est entouré de quatre atomes formant un tétraèdre (fig. 4).

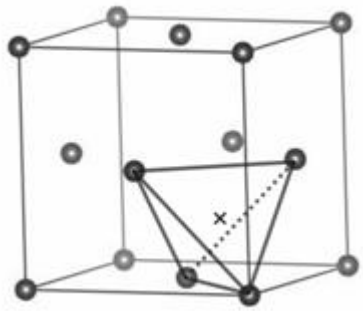


Figure 4 : Site tétraédrique

Dans une structure cubique centrée, les sites octaédriques se situent aux centres des faces et au milieu des arêtes en positions (fig. 5) :

(1/2 1/2 0), (1/2 0 1/2), (0 1/2 1/2), (0 0 1/2), (0 1/2 0) et (1/2 0 0).

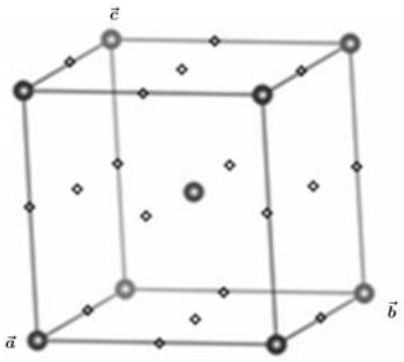


Figure 5: Sites octaédriques dans un réseau cubique centré

Les sites tétraédriques d'une structure cubique centrée sont en positions (fig. 6):

(1/2 1/4 0), (3/4 1/2 0), (1/4 1/2 0), (1/2 3/4 0), (3/4 0 1/2), (1/2 0 3/4), (1/4 0 1/2), (1/2 0 1/4), (0 1/2 1/4), (0 1/2 3/4), (0 1/4 1/2), (0 3/4 1/2).

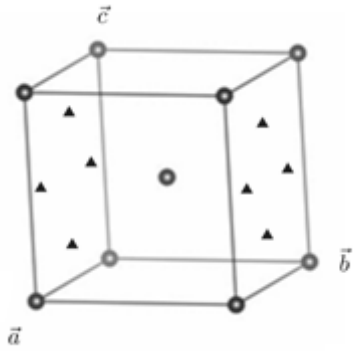


Figure 6: Exemple de sites tétraédriques sur la face (a, c) dans un réseau C.C

II-2-2- Structure cubique à faces centrées (C.F.C)

Cette structure correspond à un assemblage triangulaire A-B-C-A-B-C où les atomes occupent les sommets et les centres des faces (fig. 7).

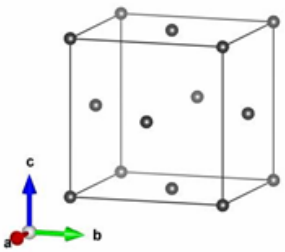


Figure 7: Maille cubique à faces centrées

a)Compacité de la structure :

Le nombre d'atomes par maille :

Z= 8 x 1/8 + 6 x 1/2 = 4 atomes/maille

Et vu que le plan de densité maximale est le plan de la face (1 0 0), les atomes sont donc tangents suivant la direction de la diagonale de la face du cube de paramètre a (fig. 8) d'où : 4R=$a\sqrt{2}$ soit R= $a\sqrt{2}$/4.

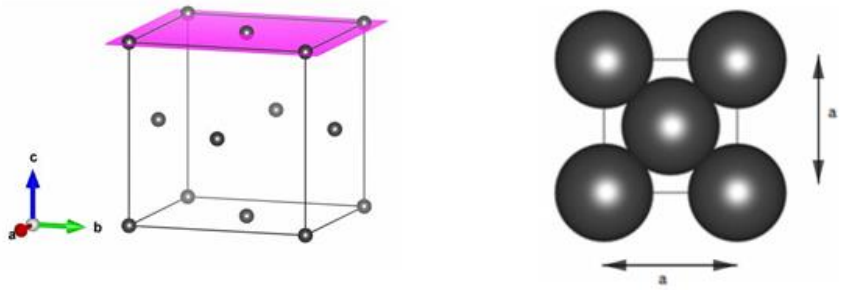


Figure 8: Plan de densité maximale (001)

$$C = \frac{V_{occupé}}{V_{maille}} = \frac{Z.\frac{4}{3}\pi R^3}{a^3} = 0.74$$

La compacité de la structure est de 0.74.

Donc dans une structure cubique à faces centrées, le volume occupé est de 74%.

Cette structure est plus compacte que la structure cubique centrée.

b)Coordinence :

Dans une structure cubique à faces centrées, la coordinence est de douze à une distance de $a\sqrt{2}$/2.

c)Masse volumique :

C'est le rapport entre la masse des atomes et le volume de la maille tel que :

$$\rho = \frac{Z \text{ x } M}{N_a \text{x} V_{maille}} = \frac{Z \text{ x } M}{N_a \text{ x } a^3}$$

avec M : masse atomique, N_a : nombre d'Avogadro.

d)Site intersticiels

- Sites octaédriques :

Dans une structure cubique à faces centrées les sites octaédriques sont en positions (fig. 9):

(1/2 1/2 1/2), (1/2 0 0), (0 1/2 0), (0 0 1/2).

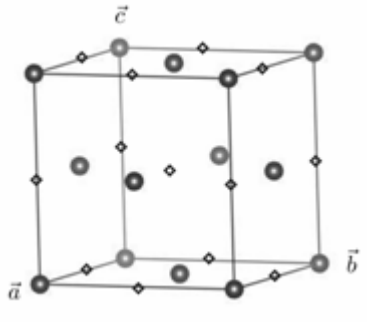


Figure 9: Sites octaédriques dans un réseau C.F.C

- Sites tétraédriques :

Les positions des sites tétraédriques sont en positions (fig. 10):

(1/4 1/4 1/4), (1/4 3/4 1/4), (3/4 1/4 1/4), (3/4 3/4 1/4), (1/4 1/4 3/4), (1/4 3/4 3/4),

(3/4 1/4 3/4), (3/4 3/4 3/4).

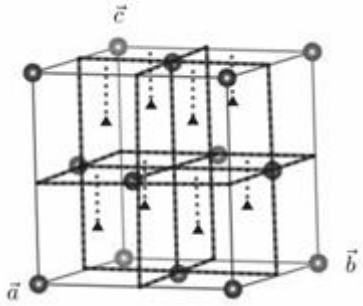


Figure 10: Sites tétraédriques dans un réseau C.F.C

II-2-3- Structure hexagonale compacte (H.C)

Cette structure correspond à un assemblage triangulaire A-B-A-B-

Le réseau peut être décrit par une maille hexagonale élémentaire avec une base losange ou multiple avec une base hexagonale (fig. 11).

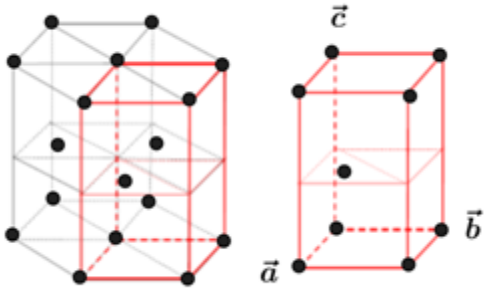


Figure 11 : Structure hexagonale compacte

Dans une maille élémentaire, les atomes sont situés aux sommets de la maille et à l'intérieur de la maille à mi-hauteur c/2 en position (2/3 1/3 1/2) ou (1/3 2/3 1/2) (fig. 12). La projection de ce dernier atome sur le plan de la base coïncide avec le centre de gravité des triangles 1 ou 2 (fig.12).

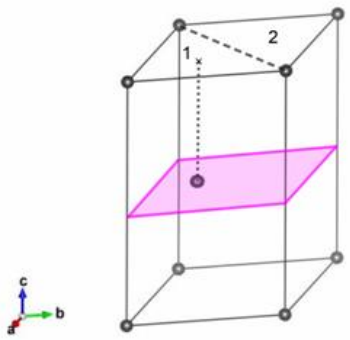


Figure 12: Positions atomiques dans une maille hexagonale élémentaire

a)Compacité

Le nombre d'atomes par maille élémentaire:

Z= 8 x 1/8 + 1 = 2 atomes/maille

Le plan de densité maximale est le plan de la base (0 0 1), les atomes sont tangents suivant le côté du losange (fig. 13) d'où : 2R= a soit R= $a/2$.

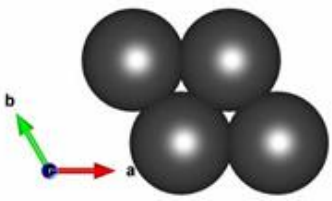


Figure 13: Plan de densité maximale (001)

$$C = \frac{V_{occupé}}{V_{maille}}$$

$$V_{maille} = \vec{a}.(\vec{b} \wedge \vec{c}) = a^2 c\sqrt{3}/2$$

$$C = \frac{Z.\frac{4}{3}\pi R^3}{a^2 c\sqrt{3}/2}$$

b)Coordinence

D'une façon générale la coordinence est de six, mais dans une structure hexagonale compacte idéale, la coordinence est de douze à une distance égale à a d'où un rapport c/a égale à 1.633. Dans le triangle rectangle AGB (fig. 14) on a : $d^2 = BG^2 + AG^2$ (théorème de pythagore)

$$BG = c/2$$

$AG = \frac{2}{3}AH$ (AH: hauteur du triangle AEF et G son centre de gravité).

$$AG = \frac{2}{3}a \sin 60 = \frac{2}{3}a\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right) = \frac{a\sqrt{3}}{3}$$

Par conséquent : $d^2 = (\frac{c}{2})^2 + (\frac{a\sqrt{3}}{3})^2 = \frac{c^2}{4} + \frac{a^2}{3}$

pour que la structure soit idéalement compacte, il faut que d soit égale à a d'où :

$$a^2 = \frac{c^2}{4} + \frac{a^2}{3}, \text{ soit } \frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1.633$$

On remplace dans la relation de la compacité par $\frac{c}{a} = 1.633$, on obtient une valeur de 0.74.

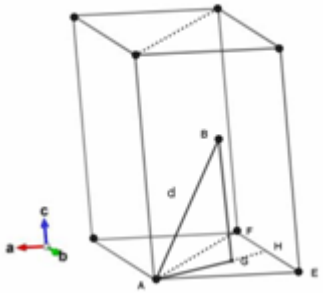


Figure 14 : Rapport c/a dans une structure H.C idéale

c)Masse volumique

$$\rho = \frac{Z.M}{N_a.V_{maille}} = \frac{Z.M}{N_a.a^2 c\sqrt{3}/2}$$

d)Sites interstitiels

Pour une maille hexagonale élémentaire où les atomes sont en position:(0 0 0) et (1/3 2/3 1/2) .

- **Sites octaédriques**

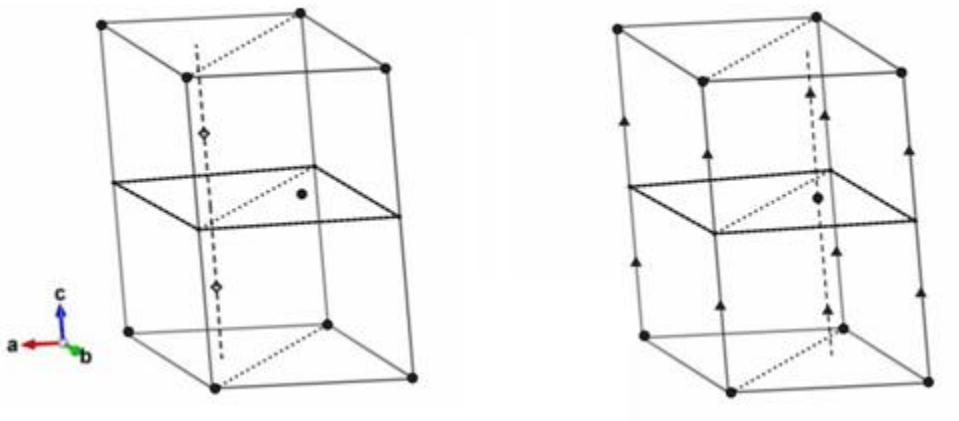
Les sites octaédriques sont situés en (2/3 1/3 3/4) et (2/3 1/3 1/4) (fig.15-).

- **Sites tétraédriques**

Il existe quatre sites tétraédriques:

-Deux sites à l'intérieur de la maille formés par trois sommets et un atome à l'intérieur en positions :(1/3 2/3 1/8) et (1/3 2/3 7/8) (fig. 15).

-Deux sites sur l'arête formés par un sommet et trois atomes à l'intérieur en positions : (0 0 3/8) et (0 0 5/8) (fig. 15).



sites octaèdrique sites tétraédriques

Figure 15: Sites octaédriques et tétraédriques dans un réseau H.C

II-3-Alliages

Ce sont des mélanges dont l'un des constituants au moins est un métal. On distingue deux types d'alliages :

II-3-1-Alliages de substitution (solutions solides)

Ce type d'alliages est obtenu lorsque des atomes d'un métal sont substitués par des atomes d'un métal différent avec divers proportions. Ces alliages sont obtenus lorsque les atomes des métaux sont de taille proche.

Exemple : alliage cuivre-or Au-Cu, utilisé en bijouterie.

II-3-2-Alliages d'insertion

Ce type d'alliage est obtenu par insertion d'atomes de petite taille dans les interstices du réseau métallique (sites octaédriques ou tétraédriques). L'insertion peut s'accompagner d'une déformation du réseau.

Exemple : la ferrite qui est une solution solide de carbone dans du fer α de réseau cubique centré avec un pourcentage de carbone très faible.