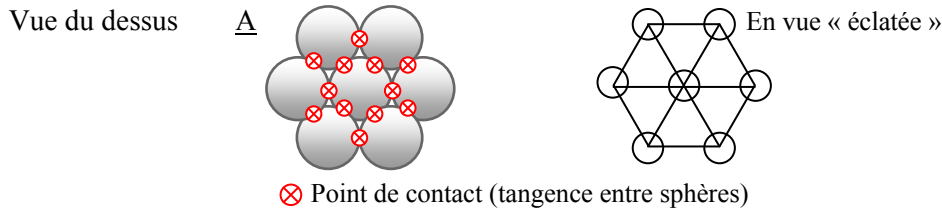


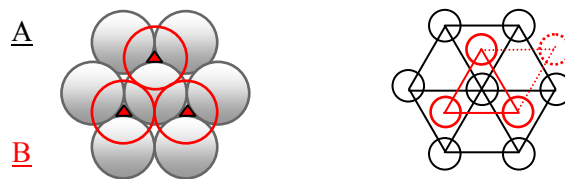
Empilements

Hypothèse : on considère les atomes comme des sphères dures indéformables de rayon R .

Dans un plan A, l'empilement le plus compact possible est obtenu lorsque les sphères sont tangentes. Leurs centres forment des triangles équilatéraux de côté $a=2R$. Une sphère a alors 6 voisins.



Au dessus du plan A, une seule solution possible, plan B, dans lequel chaque sphère B est au contact de 3 sphères du plan A. Les sphères B sont localisées à la verticale des barycentres des triangles équilatéraux qui décrivent le plan A.



On forme alors des tétraèdres (3A + 1B)

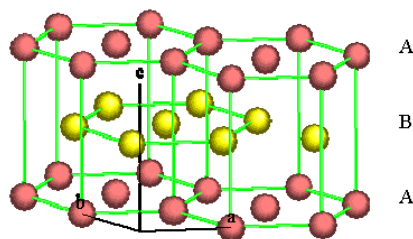
ou

on forme des octaèdres (3A + 3B)

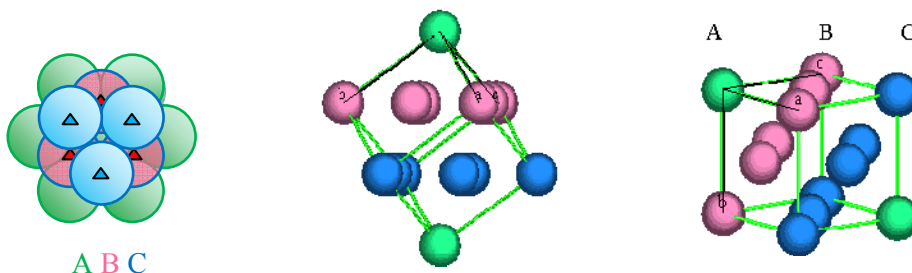


Au dessus du plan B, il existe deux possibilités :

1. Soit on retrouve un plan de type A dans lequel les sphères vont être strictement à la verticale de celles du plan A. On parle alors d'empilement ABAB... et de maille hexagonale compacte. La structure HC est celle des petits alcalino-terreux (Be, Mg) de très nombreux métaux (Sc, Ti, Co, Y, Zr, Ru, Cd, La et Ln, Hf, Re, OS, Tl, etc...) et l'hélium (sous pression !).



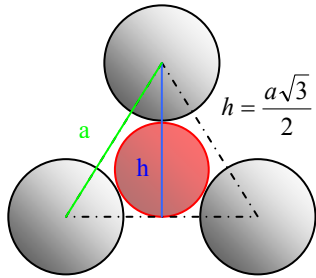
2. Soit on occupe les positions à la verticale des centres du plan A non occupés par le plan B. On parle alors d'empilement ABCABC... et de la maille cubique faces centrées. C'est la structure de quelques alcalino-terreux (Ca, Sr), de l'aluminium, des métaux de transition tels que : Fe, Ni, Cu, Pd, Ag, Yb, Au - du thorium et des gaz rares.



Interstices

Les sphères grises de rayon R_a sont les atomes – Les sphères rouges de rayon R_i sont les interstices

N=3 : interstice créé par 3 atomes formant un **triangle équilatéral** de paramètre a .



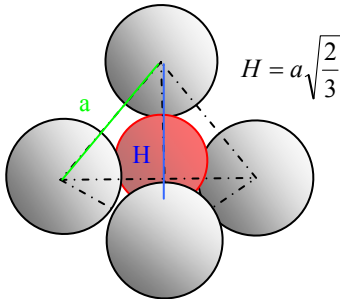
Relation entre R_i et R_a : $R_i + R_a = \frac{2}{3}h = \frac{2}{3} \frac{a\sqrt{3}}{2} = \frac{a}{\sqrt{3}}$ (I)

Relation de Contact : $a \geq 2R_a$ (II)

D'où $\sqrt{3}(R_i + R_a) \geq 2R_a$

$$\frac{R_i}{R_a} \geq \left(\frac{2}{\sqrt{3}} - 1 \right) = 0.154$$

N=4 : interstice créé par 4 atomes dormant un **tétraèdre régulier** de paramètre a



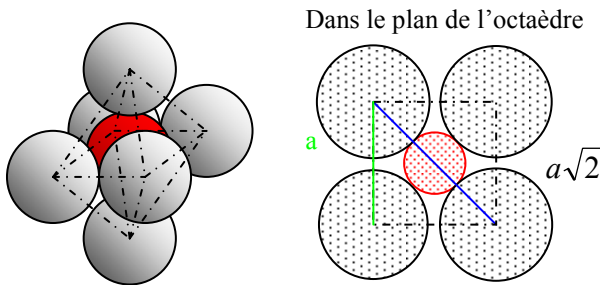
Relation entre R_i et R_a : $R_i + R_a = \frac{3}{4}H = \frac{3}{4}a\sqrt{\frac{2}{3}} = \frac{a\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}$ (I)

Relation de Contact : $a \geq 2R_a$ (II)

D'où $\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}}(R_i + R_a) \geq 2R_a$

$$\frac{R_i}{R_a} \geq \left(\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} - 1 \right) = 0.225$$

N=6 : interstice créé par 6 atomes formant un **octaèdre régulier** de paramètre a .



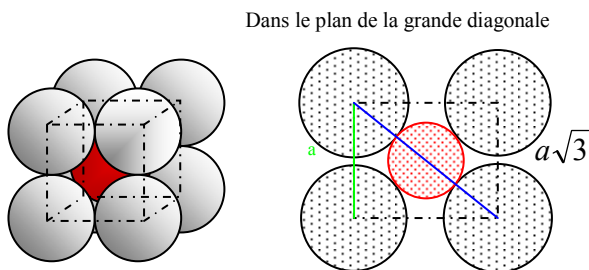
Relation entre R_i et R_a : $R_i + R_a = \frac{a\sqrt{2}}{2}$ (I)

Relation de Contact : $a \geq 2R_a$ (II)

D'où $\frac{2}{\sqrt{2}}(R_i + R_a) \geq 2R_a$

$$\frac{R_i}{R_a} \geq (\sqrt{2} - 1) = 0.414$$

N=8 : interstice créé par 8 atomes formant un **cube** de paramètre a .



Relation entre R_i et R_a : $R_i + R_a = \frac{a\sqrt{3}}{2}$ (I)

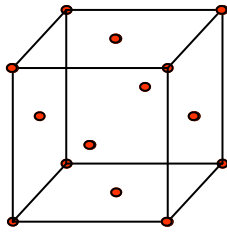
Relation de Contact : $a \geq 2R_a$ (II)

D'où $\frac{2}{\sqrt{3}}(R_i + R_a) \geq 2R_a$

$$\frac{R_i}{R_a} \geq (\sqrt{3} - 1) = 0.732$$

R_i/R_a	0.154	0.225	0.414	0.732	1
N	3	4	6	8	
Type		ZnS 1/2 des sites Td	NaCl Tous les sites Oh	CsCl Tous les cubiques	

Cubique Faces Centrées



Coordinnence: c'est le nombre d'atomes plus proche voisin. Un atome sommet a pour voisins les 3×2 atomes des sommets adjacents et les 3×2 atomes des centres des faces adjacentes. **C=12**

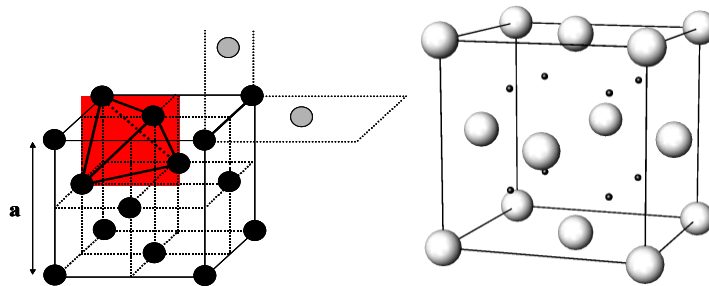
Multiplicité : nombre d'atome par maille cristalline. Chaque atome de sommet (il y en a 8) appartient à 8 mailles et contribue donc pour 1/8 dans la maille et chaque atome de face (il y en a 6) appartient à 2 mailles et contribue donc pour 1/2 dans la maille, soit au total :
 $Z = 8 \times (1/8) + 6 \times (1/2) \Leftrightarrow Z = 4$ **atomes par maille.**

Condition de tangence : la tangence des atomes est selon la diagonale d'une face, soit $4r = a\sqrt{2}$

Compacité : $\tau = \text{volume occupé par la matière} / \text{volume de la maille}$

$$\left. \begin{array}{l} \bullet V_{\text{matière}} = 4 \times \frac{4}{3} \pi r^3 = \frac{16}{3} \pi r^3 \\ \bullet V_{\text{maille}} = a^3 \end{array} \right\} \tau_{\text{CFC}} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 74\%$$

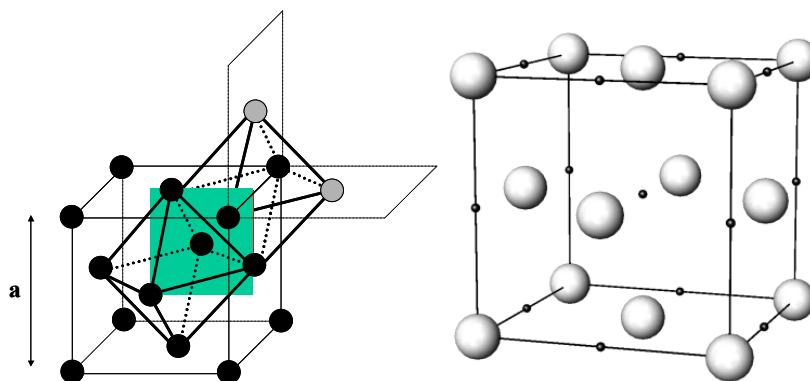
Dénombrement des sites tétraédriques : un site Td est créé par 1 atome sommet et 3 atomes centrés. Le site Td est entièrement compris dans la maille CFC. Il y a 8 sommets par conséquent il y a **8 sites tétraédriques par maille CFC.**



Dénombrement des sites octaédriques : plusieurs types possibles

- 1 Site Oh créé par les 8 atomes centrés. Ce site appartient entièrement à la maille car il est situé en son centre.
- 12 Sites Oh créés par 2 atomes sommets, deux atomes centrés et 2 atomes centrés d'une maille adjacente. Ces sites comptent pour 1/4 car ils appartiennent à 4 mailles. Ils sont situés aux milieux des arêtes. Il y a 12 arêtes dans un cube donc il y a $12 \times 1/4 = 3$ sites de ce type.

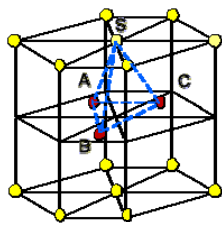
Au total, il y a **4 sites octaédriques par maille CFC.**



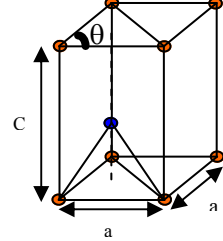
2Z sites Td pour Z sites Oh

Hexagonale Compact

Maille triple

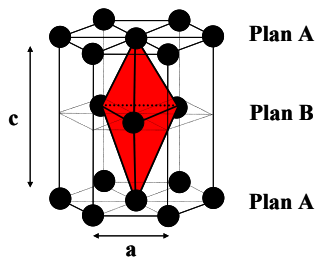


Maille élémentaire



Relation entre le paramètre c et le paramètre a : dans le td bleu $h=c/2$ avec $h=a\sqrt{(2/3)}$ d'où
 $c = 2a\sqrt{2/3} = a\sqrt{8/3}$

Multiplicité : nombre d'atome par maille cristalline



Plan A $Z = 3$ (atomes du plan B)

+ $2 \times 1/2$ (les centres des faces A sont partagés avec les mailles au dessus et au dessous de celle qui est dessinée)

+ $12 \times 1/6$ (la moitié inférieure de l'atome individualisé sur la fig. 16 est partagée entre 3 mailles).

$\Rightarrow Z = 6$ atomes par maille triple (2 pour la maille élémentaire)

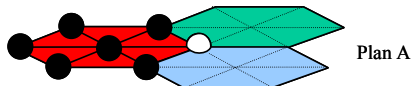
Condition de tangence : la tangence des atomes est le long d'une arête, soit $2r = a$

Compacité : $\tau =$ volume occupé par la matière / volume de la maille = **0,74 = 74%**

avec volume occupé par la matière : il y a 2 atomes par maille élémentaire,

soit $V_{\text{matière}} = 2 \times 4/3 \times \pi \times r^3 = 16/3 \times \pi \times r^3$

Volume de la maille hexagonale :



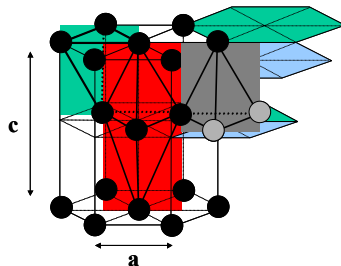
$$V_{hc} = c \times S_{\text{hexagone}} = c \times 2 \times S_{\text{losange}} = c \times 6 \times S_{\text{triangle équilatéral}}$$

$$V_{hc} = 6c \left(\frac{1}{2} a h_{tr} \right) = 6c \left(\frac{1}{2} a a \sqrt{3/2} \right)$$

$$V = 3 a^2 c \sqrt{3/2}$$

$$\text{Or } c = a\sqrt{8/3} \text{ d'où } V_{\text{maille hc}} = 3 a^3 \sqrt{2}$$

Dénombrement des sites tétraédriques : plusieurs types possibles



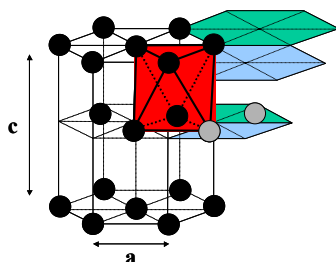
2 sites Td ayant pour base les atomes de la couche B. Ils appartiennent entièrement à la maille.

6 sites Td ayant pour sommet l'un des trois atomes de la couche B. appartiennent entièrement à la maille

12 sites Td ayant un sommet des faces A. Ces sites sont partagés entre trois mailles.

Au total, il y a $2 \times 1 + 6 \times 1 + 12 \times 1/3 = 12$ sites tétraédriques par maille triple (ou 4 sites Td par maille élémentaire)

Dénombrement des sites octaédriques :



6 sites octaédriques ayant pour arête un segment entre 2 (des 3) atomes B de la maille. Ces sites sont entièrement dans la maille. Il y a donc **6 sites octaédriques par maille triple HC**

2Z sites Td pour Z sites Oh