

Université Mohamed BOUDIAF – M'Sila
Faculté de Technologie
Département Génie Mécanique



Support de cours

Master en Génie des Matériaux

STRUCTURE CRISTALLINE ET DEFAUTS PONCTUELS

Prof. Younès BENARIOUA

2020 - 2021

I. INTRODUCTION

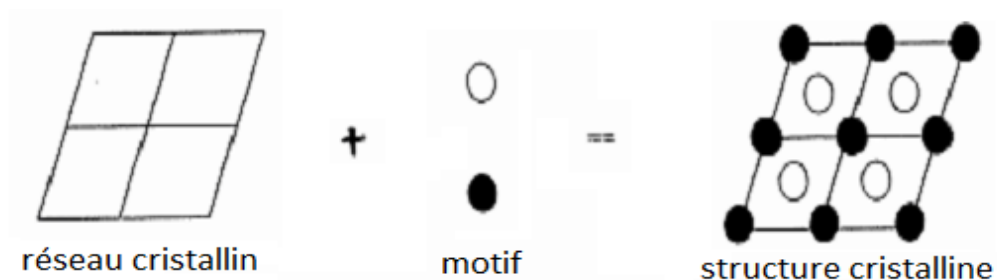
La cristallographie est une science qui étudie au début les minéraux et les matériaux cristallins au point de vue de formation, de croissance, de forme, de structure interne et des propriétés physiques. La cristallographie se dégagait progressivement au 19^{ème} siècle de la minéralogie et se rapprocha de la physique et de la chimie en devenant une science indépendante. L'état cristallin des matériaux a été considéré jusqu'ici comme un empilement parfait d'atomes régulièrement répartis selon un système propre au matériau considéré. Les cristaux métalliques sont en réalité imparfaits et présentent des défauts locaux.

Ces défauts peuvent être classés d'un point de vue géométrique en défauts ponctuels, défauts linéaires et défauts répartis sur une surface interne. Un cristal est défini comme étant un corps solide qui a une structure réticulaire et se composant d'atomes répartis suivant une succession déterminée qui se produit périodiquement dans l'un de plusieurs système cristallins. L'absence structure réticulaire caractérise le corps amorphe qui n'a pas de forme géométrique naturelle. Cet support de cours est destiné avant tout aux étudiants de licence et master en génie des matériaux qui abordent l'étude de la structure cristalline. Il s'adresse aussi aux étudiants des autres paliers d'enseignement supérieur qui voudraient élargir leurs connaissances dans cette matière

II. STRUCTURE CRISTALLINE

II. 1. Introduction

La structure cristalline c'est réseau cristallin contenant un motif d'atomes (nœuds) et l'unité fondamentale de cette structure s'appelle maille élémentaire. Les droites qui passent par des nœuds sont appelées rangées. Tous les nœuds sont groupés dans des plans parallèles équidistants appelés plans réticulaires, la distance entre deux plans voisins de la même famille est la distance inter-réticulaire. La description du cristal nécessite la connaissance du réseau et celle du motif (fig. 1).



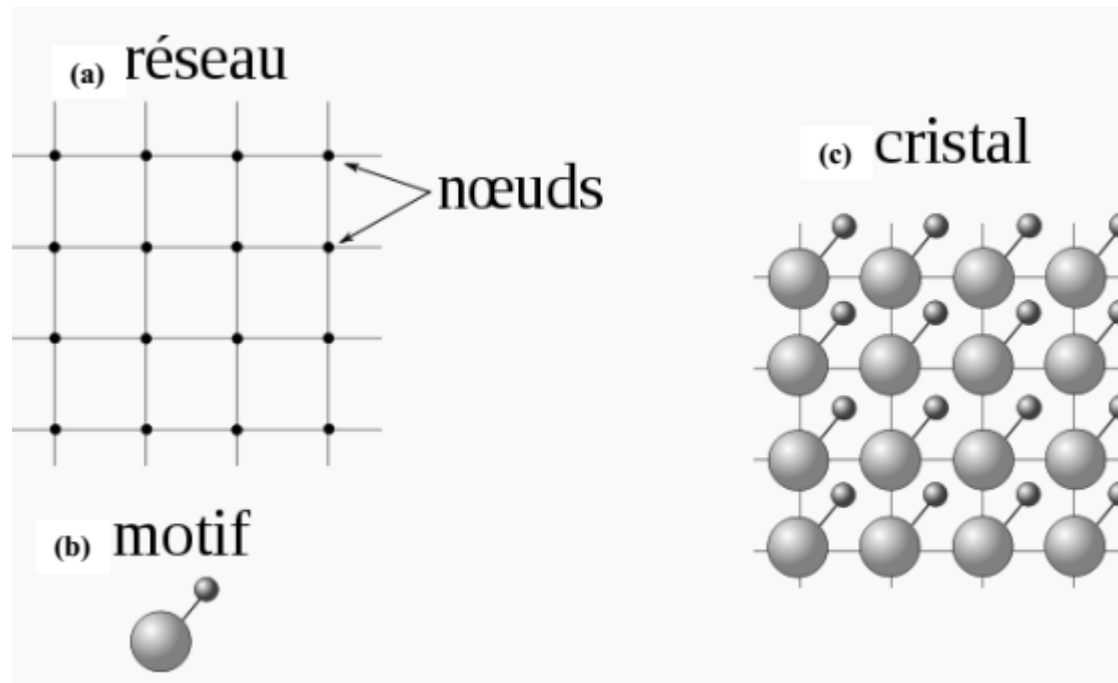
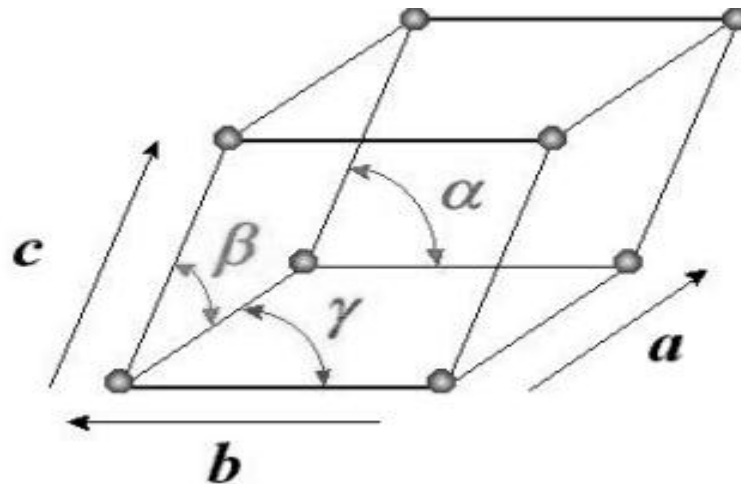


Figure 8. Représentation à 2 dimensions : (a) réseau (b) motif
(c) structure cristalline (cristal)

Pus clairement la figure ci-dessous présente un cristal qui englobe le réseau et le motif

II. 2. Maille élémentaire

Du point de vue géométrique, à deux dimension, la maille est le plus petit parallélogramme qui suffit à décrire le plan, cette maille est définie par les vecteurs a et b et l'angle compris entre ces deux vecteurs. A trois dimensions, la maille est la plus petite entité (volume) correspondant à un parallélépipède, elle est définie par trois vecteurs a , b et c (les périodes suivant les axes ox , oy et oz , respectivement) non coplanaires et trois angles α , β et γ (Fig. 2). Avec cette maille on peut remplir tout l'espace du cristal sans laisser des lacunes.



Du point de vu physique, une maille est le plus petit groupement de constituants (atomes, ions ou molécules) suffisant pour décrire tout le cristal.

Une maille cristalline quelconque (triclinique : $\mathbf{a} \neq \mathbf{b} \neq \mathbf{c}$ et $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$) est définie par six paramètres cristallographiques, à savoir les paramètres linéaires (trois vecteurs \mathbf{a} , \mathbf{b} et \mathbf{c}) et les paramètres angulaires (trois angles α , β et γ), tels que :

$$\alpha = \{\bar{\mathbf{b}}, \bar{\mathbf{c}}\}, \quad \beta = \{\bar{\mathbf{a}}, \bar{\mathbf{c}}\} \text{ et } \gamma = \{\bar{\mathbf{a}}, \bar{\mathbf{b}}\}$$

Le volume de cette maile est le module du produit mixte suivant

$$\mathbf{V} = (\bar{\mathbf{a}}, \bar{\mathbf{b}}, \bar{\mathbf{c}}) = \bar{\mathbf{a}} \cdot (\bar{\mathbf{b}} \wedge \bar{\mathbf{c}}) = \bar{\mathbf{b}} \cdot (\bar{\mathbf{c}} \wedge \bar{\mathbf{a}}) = \bar{\mathbf{c}} \cdot (\bar{\mathbf{a}} \wedge \bar{\mathbf{b}})$$

Qui donne la l'expression de \mathbf{V} comme suit:

Qui donne la l'expression de V comme suit:

$$V = a \cdot b \cdot c [1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma]^{1/2} .$$

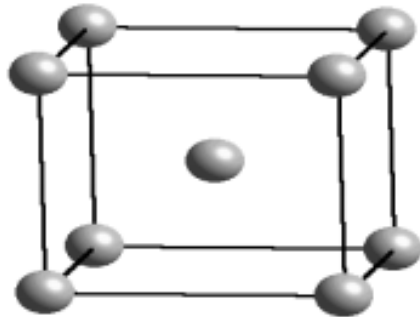
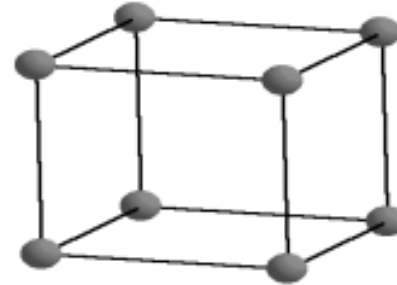
La position occupée par un atome dans la maille s'appelle un nœud.

On distingue deux types de mailles, simple et multiple (Fig. 3) :

- Une maille simple contient seulement des nœuds aux sommets de la maille.
- Une maille multiple contient plus des nœuds aux sommets soit au centre du volume, soit aux centres de toutes les faces soit aux centres de deux faces opposées

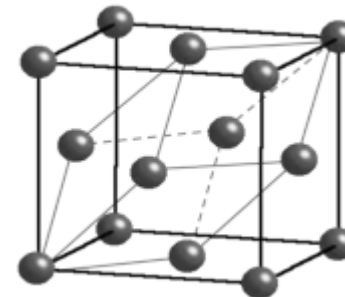
A trois dimensions pour le système cubique on distingue trois structures qui sont (Fig. 3) :

Cubique P
Cubique simple (cs)
Maille simple (primitive)
Nombre de nœuds : 1
(1/8) à chaque sommet : $8 \times (1/8) = 1$



Cubique I
Cubique centrée (cc)
Maille multiple
Nombre de nœuds : 2
(1/8) à chaque sommet : $8 \times (1/8) = 1$
Centre du cube : 1

Cubique F
Cubique à faces centrées (cfc)
Maille multiple
Nombre de nœuds : 4
(1/8) à chaque sommet : $8 \times (1/8) = 1$
(1/2) sur chaque face :
 $6 \times (1/2) = 3$



II. 3. Les systèmes cristallins et les réseaux de Bravais

Bien avant la description atomique des cristaux et avec une périodicité dans les trois directions de l'espace, Auguste Bravais (1848) a montré que le nombre de systèmes cristallins possibles était très limité. Il a répertorié 14 types de réseaux qui sont des variantes de seulement 7 systèmes cristallins.

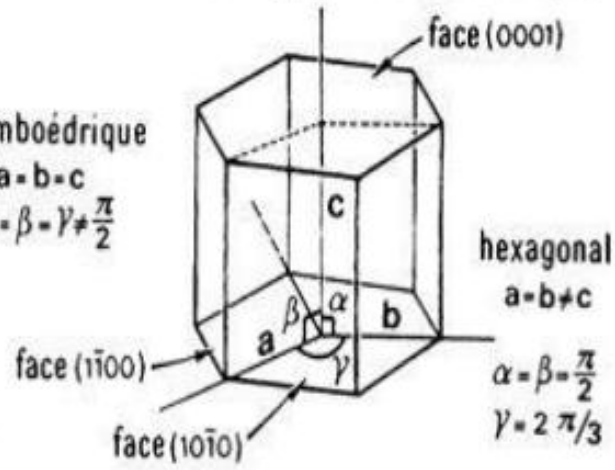
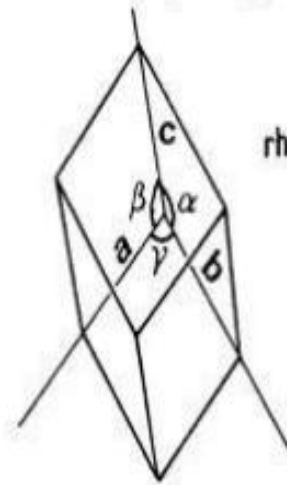
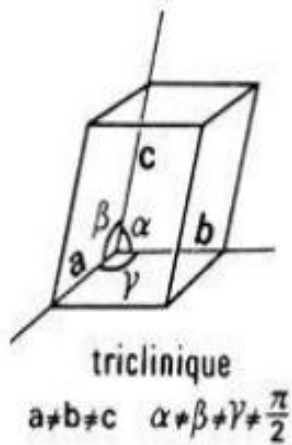
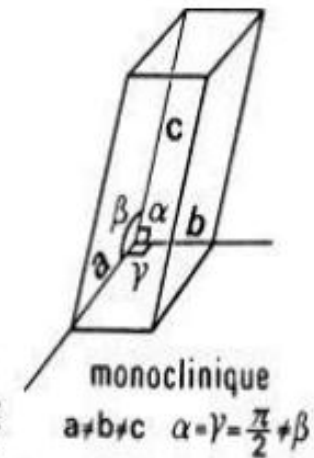
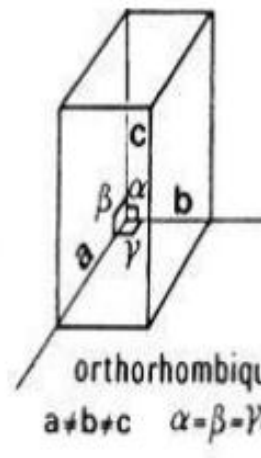
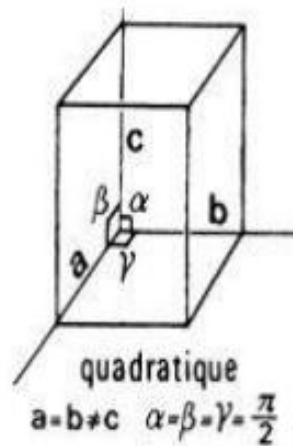
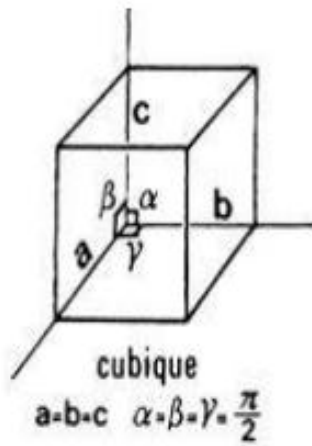
Les 7 systèmes cristallins sont engendrés par les différentes combinaisons possibles d'un côté entre les paramètres linéaires (a , b et c) et de l'autre côté entre les paramètres angulaires (α , β et γ). Ainsi dans la nature, seulement 7 formes polyédriques de base, 7 briques élémentaires, permettent de construire l'infinité structurale des minéraux.

Toutefois, si leurs formes sont semblables d'un minéral à l'autre, elles varient par leurs dimensions. Longueur, largeur, hauteur d'une maille sont spécifiques à chaque forme chimique cristalline.

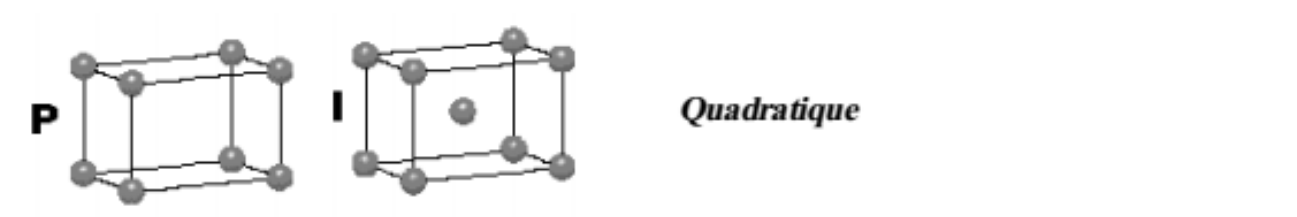
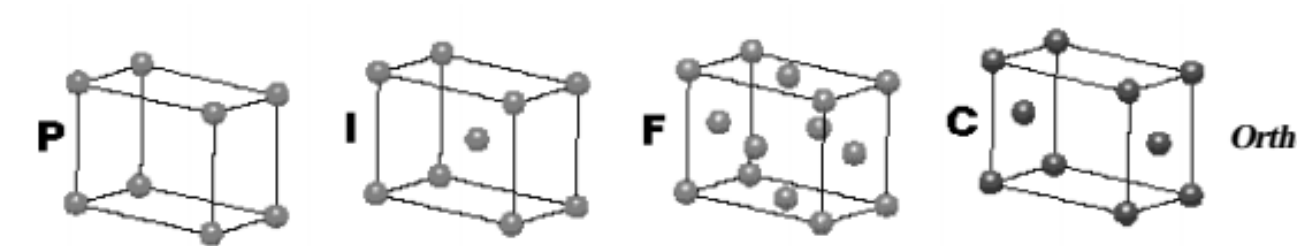
La maille est parfois primitive (P) avec un seul site par maille. Si un deuxième site existe au centre de la maille, c'est une maille centrée (I). Lorsque chacune des 6 faces comportent un site (F), ce site étant commun à deux mailles contigües, cela fait 4 sites par maille. On rencontre parfois aussi des mailles avec seulement deux faces centrées (C ; B et A), soit 2 sites par maille.

Pour ce dernier type on compte seulement un seul type C, B ou A. Donc en fin, on compte 4 mode de réseau (P, I, F et C). Toutes les combinaisons possibles entre les 7 systèmes cristallines avec les 4 modes de réseaux aboutissant aux 14 réseaux de Bravais. Voici ces 14 types de réseaux (Fig. 5).

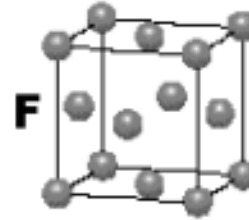
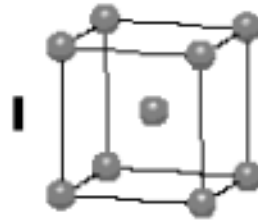
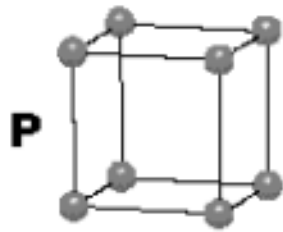
Les systèmes cristallins



Les réseaux cristallins de Bravais



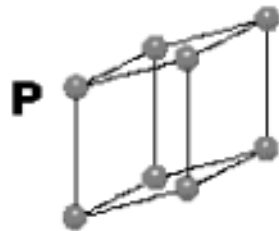
Les réseaux cristallins de Bravais (suite)



Cubique



*Hexagonal
Maille simple losange*



*Trigonal
(Rhomboédrique)*