

**Partie I : Cours No 4.2**  
**Structure des matériaux (fin)**

**V.Michaud**

**Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne**



# Table des matières

---

- Structure des alliages métalliques
- Structure des céramiques
- Structure des matériaux organiques

# Objectifs du cours

---

- Vous donner des exemples de structures pour les grandes classes de matériaux, et au passage, vous présenter les notions de défauts dans les structures cristallines, de possibilité d'introduire d'autres atomes pour former des alliages.
- Un complément à voir pour bien comprendre et avoir des explications détaillées sur ce sujet ainsi que des exemples est le Mooc de Michel Rappaz (lien donné sur Moodle)

# Structure des pièces métalliques

Si les liquides et les gaz peuvent être considérés comme des mélanges plus ou moins homogènes d'espèces chimiques, il n'en est rien des solides. On observe une micro-structure, puis l'organisation en réseaux des atomes

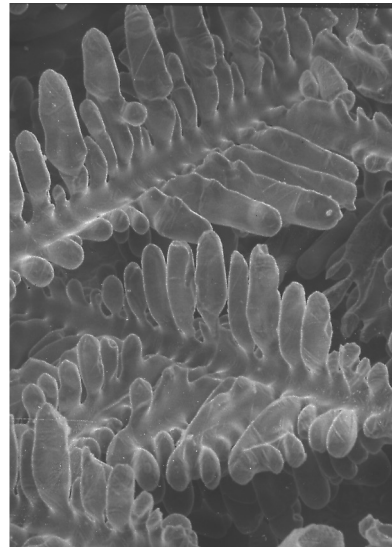
Pièce métallique



Aube de turbine Ni  
(10 cm)



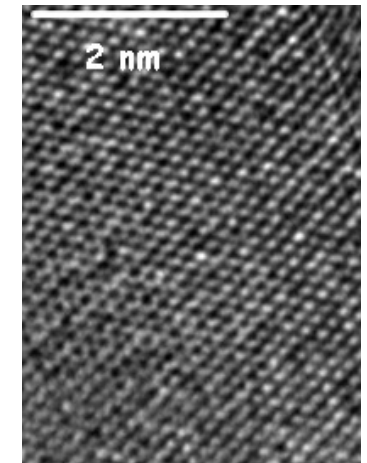
Grains  
(mm)



Dendrites  
(10-100  $\mu\text{m}$ )



Précipités  $\text{Ni}_3\text{Al}$   
(10-100 nm)



Atomes  
(0.1 nm)

Taille décroissante

# Métaux formant des structures Cubiques Centrées

H																	He
Li	Be	Cubique centré										B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po		Rn
Fr	Ra	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb		
		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm								

# Métaux formant des structures CFC

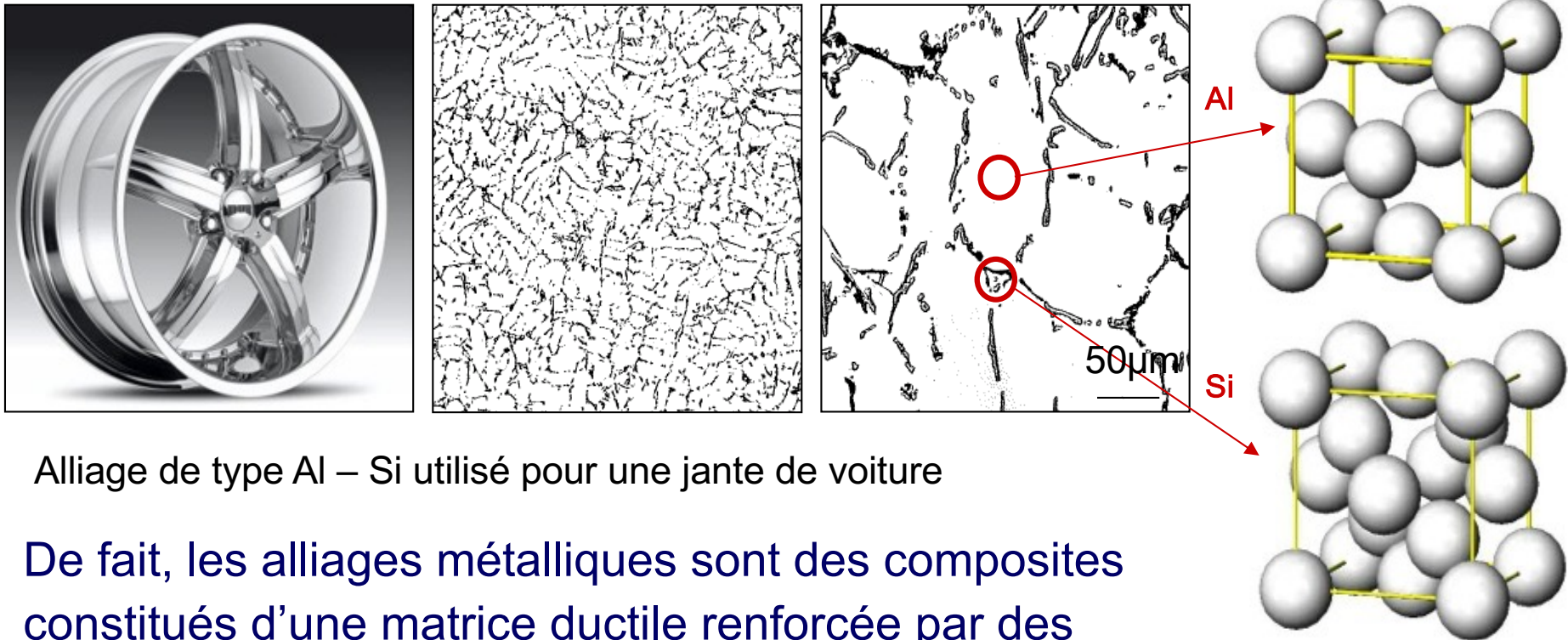
H																	He
Li	Be	Cubique à faces centrées										B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	Structure diamant										Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po		Rn
Fr	Ra	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb		
		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm								

# Métaux formant des structures Hexagonales

H																	He
Li	Be	Hexagonal										B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po		Rn
Fr	Ra	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb		
		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm								

# Structure des alliages métalliques

Les alliages métalliques sont constitués d'un **solvant**, élément principal (Fe, Al, Cu, Mg, ...) et d'éléments additionnels de **soluté**.



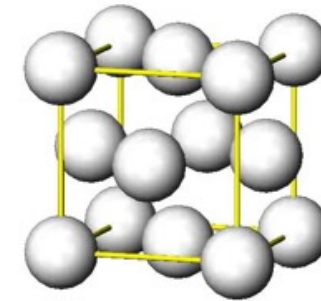
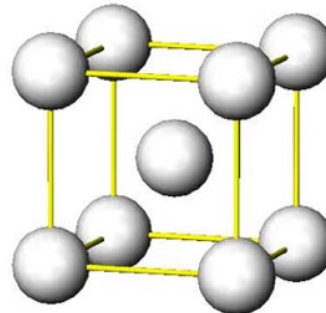
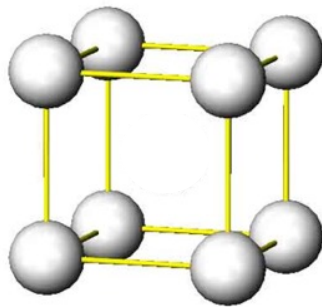
Alliage de type Al – Si utilisé pour une jante de voiture

De fait, les alliages métalliques sont des composites constitués d'une matrice ductile renforcée par des précipités plutôt durs. La matrice métallique adopte la structure **cubique à faces centrées**, **cubique centrée** ou **hexagonale compacte**.

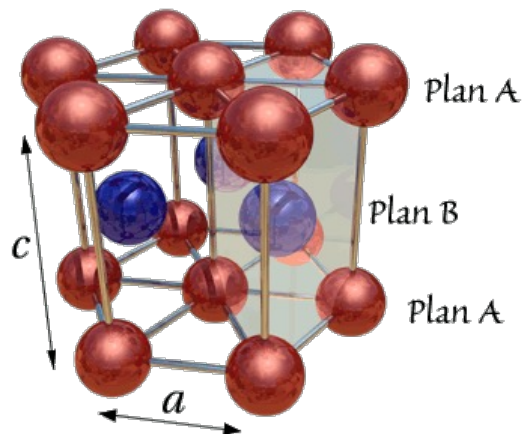
# Structure des alliages métalliques

Deux nouvelles notions importantes:

Le nombre de coordination: le nombre de plus proches voisins



Les plans d'empilement compact



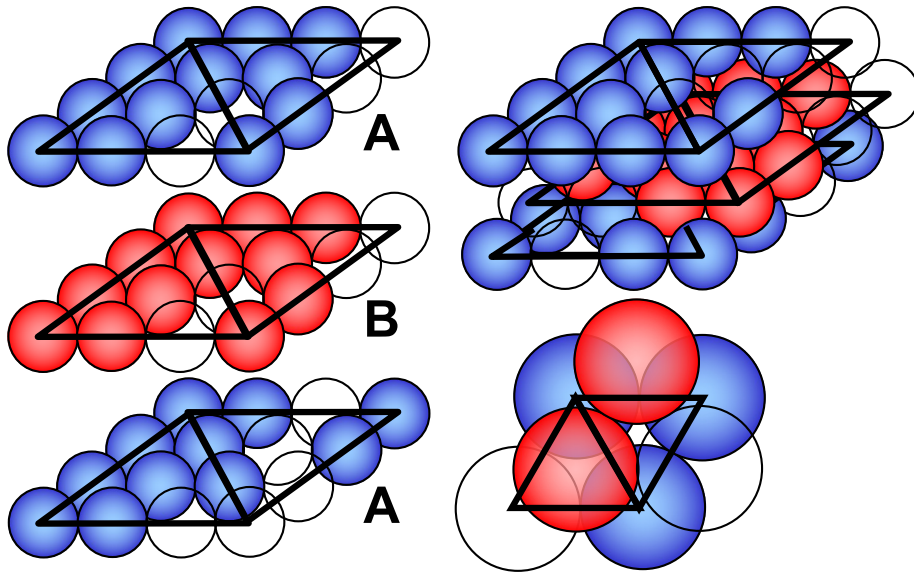
Structure Hexagonale compacte: (pour info)

-Coordination: 12

-Empilement de plans d'arrangement hexagonal selon les plans (0001)

# Structure des alliages métalliques

Les arrangements cfc ou hexagonal compact (hc) correspondent à un **empilement dense de sphères**.

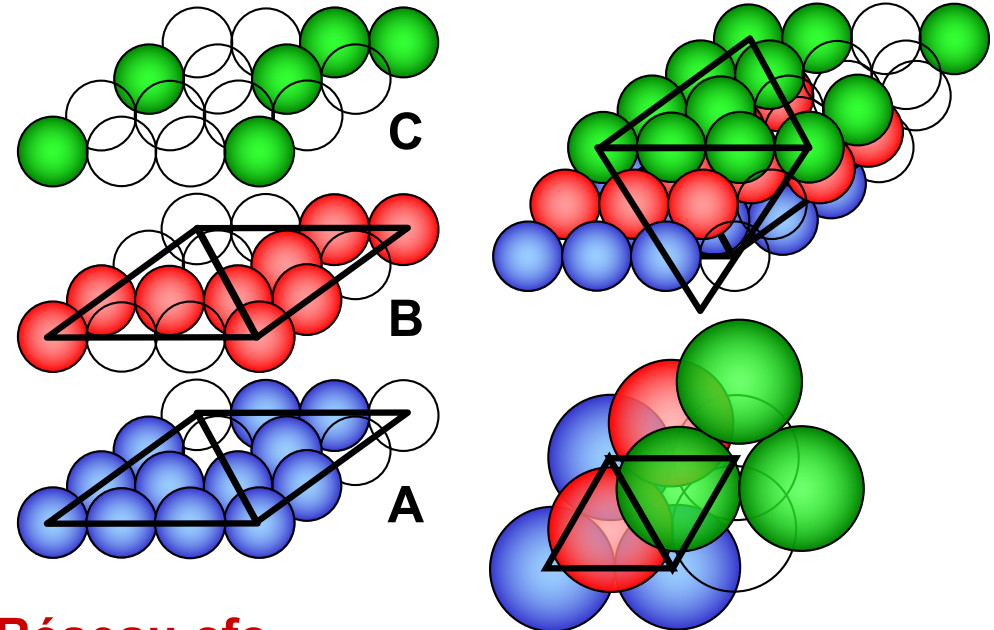


## Réseau hc

Les atomes dans un plan basal (0001) se retrouvent en position

**A – B – A – B – A – B ...**

**Zn – Mg – Ti – Zr ...**



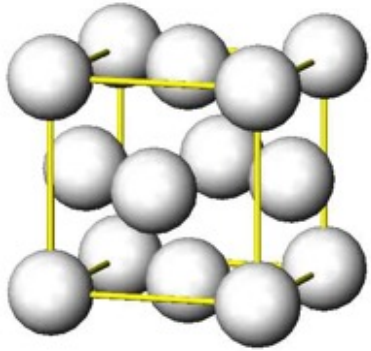
## Réseau cfc

Les atomes dans un plan (111) se retrouvent en position

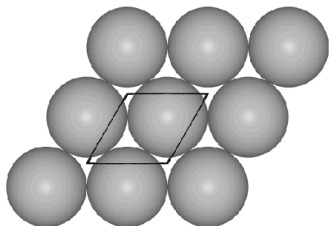
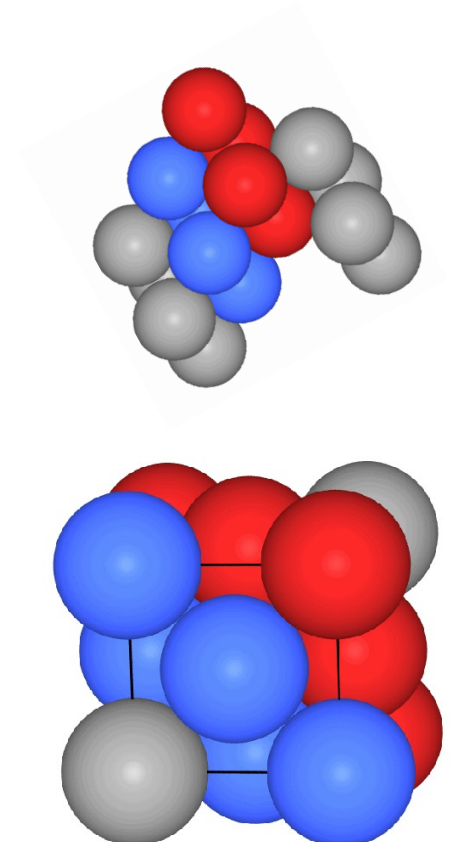
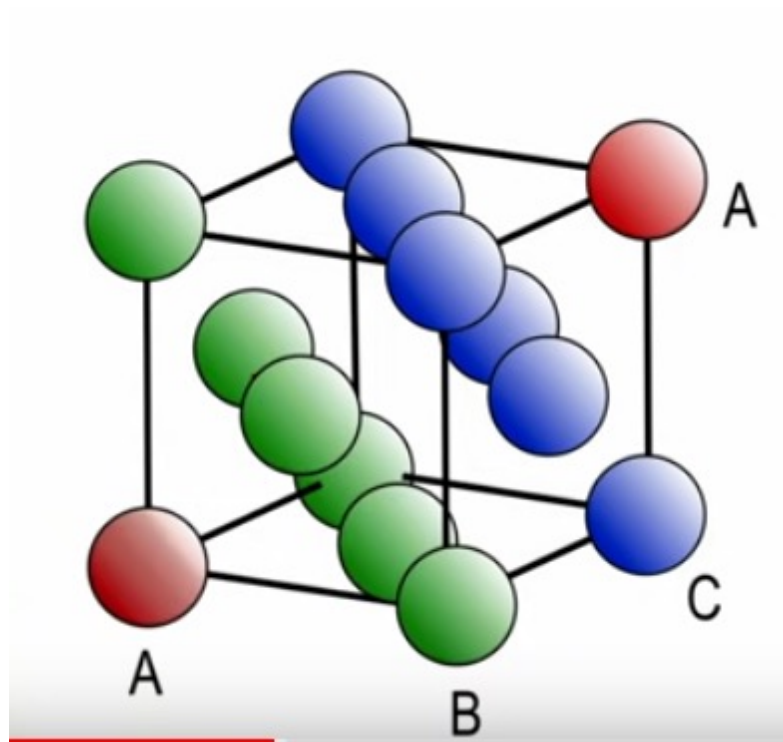
**A – B – C – A – B – C – A ...**

**Al – Cu – Ni – Ag – Au – Fe ...**

# Cubique faces centrées

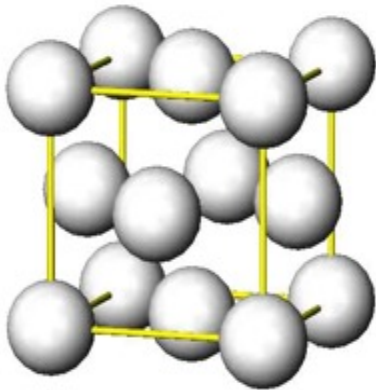


- Coordination: 12
- Empilement de plans denses selon (111)



# Structure des alliages métalliques

## Réseau cubique à faces centrées (cfc)

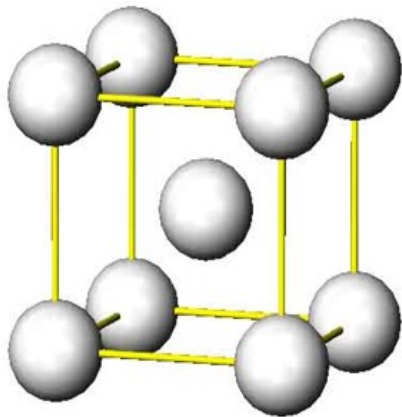


Al – Cu – Ni – Ag – Au – Fe ...

Volume laissé entre atomes : **26%**

Certains métaux comme le fer ont plusieurs phases à différentes températures: **polymorphisme**

## Réseau cubique centré (cc)



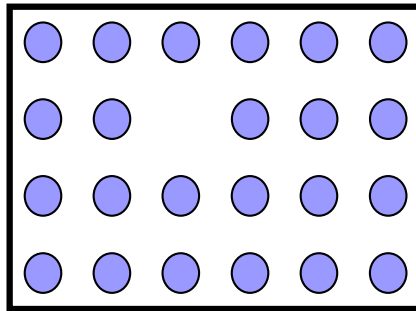
Cr – Fe – Mo – V – W – Ta ...

**Fe:**      cc      pour  $T > 1403^{\circ}\text{C}$   
                 et     $T < 910^{\circ}\text{C}$   
                 cfc     pour  $910^{\circ}\text{C} < T < 1403^{\circ}\text{C}$

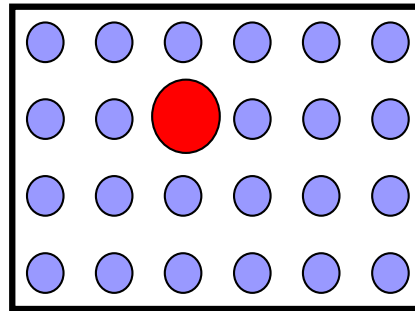
Volume laissé entre atomes : **32%**

# Défauts trouvés dans les cristaux

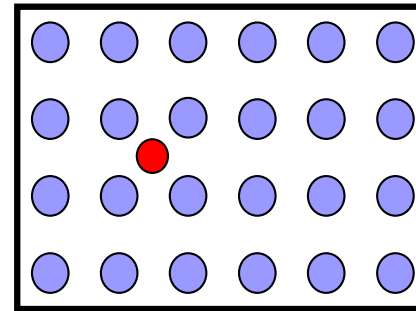
Le cristal parfait n'existe pas! Types de **défauts**:



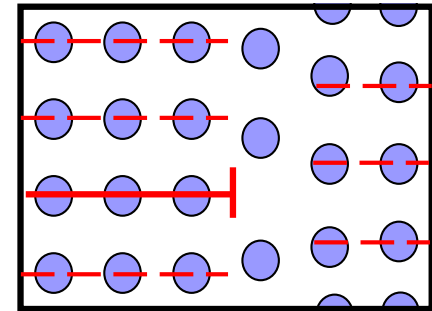
Lacune



Défaut ponctuel  
(substitutionnel)



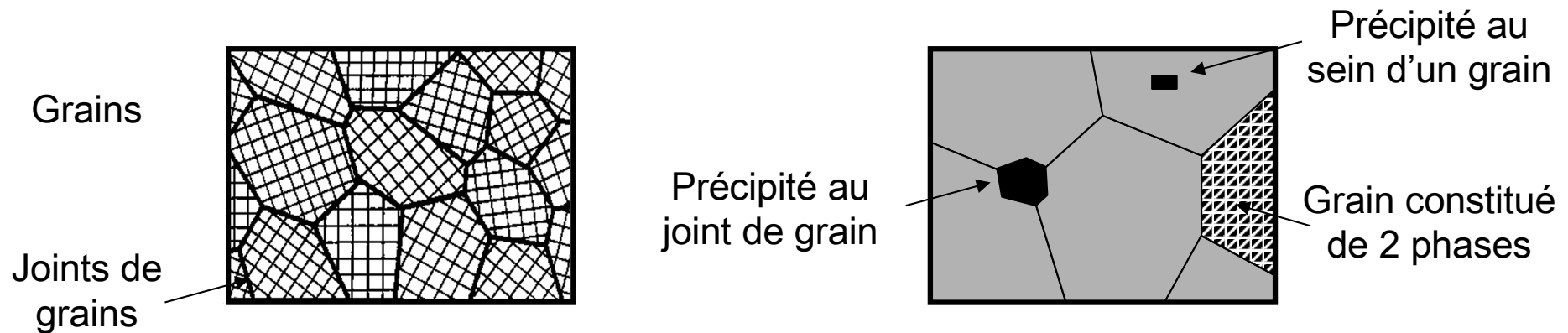
Défaut ponctuel  
(interstitiel)



Dislocation

# Défauts trouvés dans les cristaux

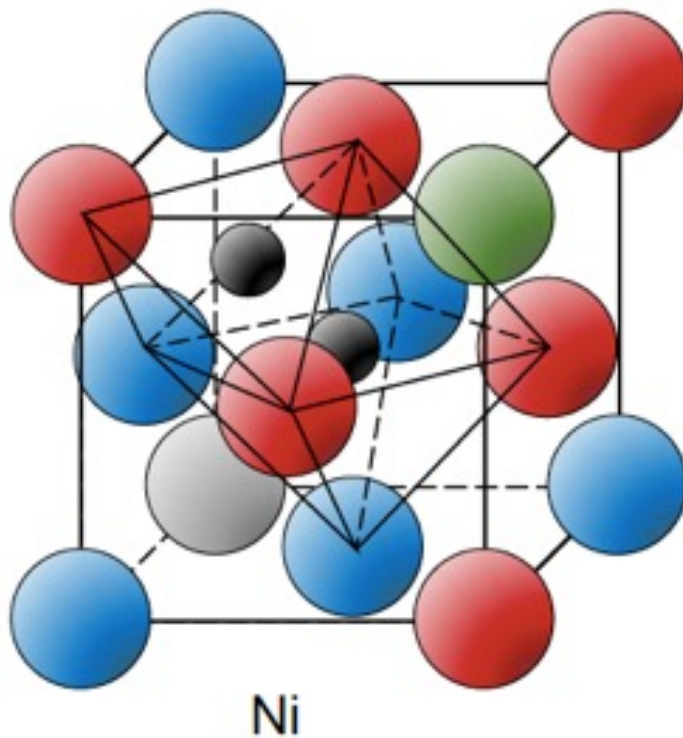
Mais surtout, la plupart des matériaux sont **polycristallins** et composés de plusieurs phases (**multiphasés**)



# Sites intersticiels du CFC

Les alliages métalliques sont constitués d'un **solvant** (Fe, Al, Cu, Mg, ...) et d'éléments additionnels de **soluté**

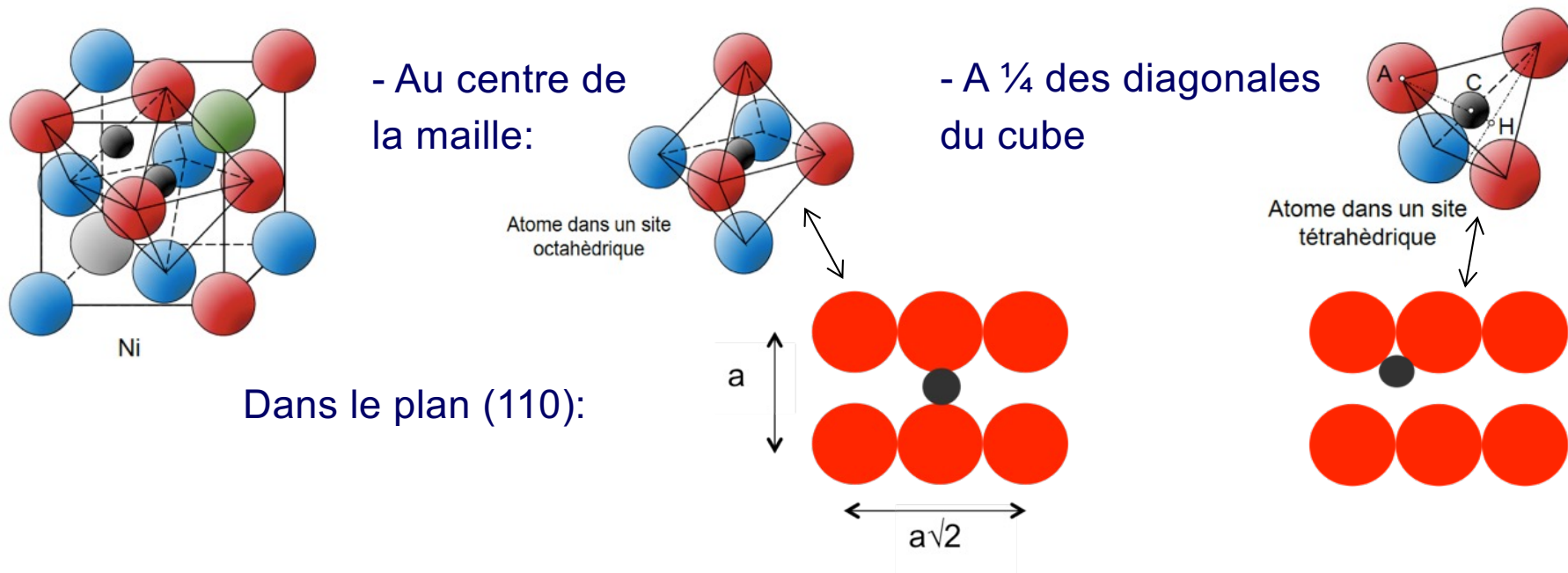
Les atomes de soluté peuvent se mettre dans des sites intersticiels: pour le CFC, deux sites existent



# Sites interstitiels du CFC

Les alliages métalliques sont constitués d'un **solvant** (Fe, Al, Cu, Mg, ...) et d'éléments additionnels de **soluté**

Les atomes de soluté peuvent se mettre dans des sites interstitiels: pour le CFC, deux sites existent



Exemple: Le fer dans sa forme CFC (austenite, entre 900 et 1400° C) et les atomes de carbone -> acier

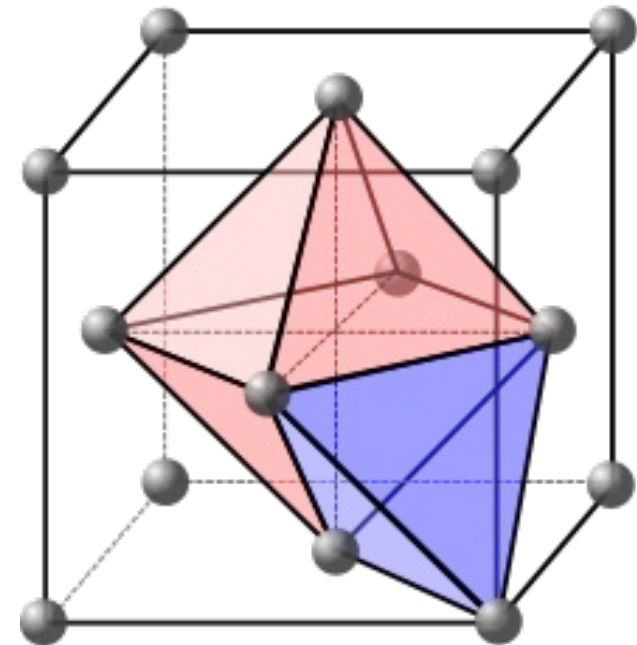
# Sites interstitiels du CFC

- Sites octaédriques dans un CFC:  
Centre de la maille.

Milieu de chaque arête, partagé par 4 mailles, soit  $12 \times 1/4 = 3$  sites en propre.

La maille élémentaire cubique faces centrées comporte donc au total 4 sites octaédriques par maille.

- Sites tétraédriques dans un CFC :  
Dans le tétraèdre formé par un atome de coin et les 3 atomes centraux des faces se coupant à ce même coin. Chaque coin est lié à un site tétraédrique, qui sont tous internes à la maille, ce qui fait 8 sites tétraédriques.



# Sites interstitiels du CC

Les atomes de soluté peuvent se mettre dans des sites interstitiels: pour le CC, deux sites existent:

- Sites octaédriques dans un empilement Cubique Centré

Centre des faces : 6 faces conjointes à 2 mailles :  $6/2 = 3$  sites par maille.

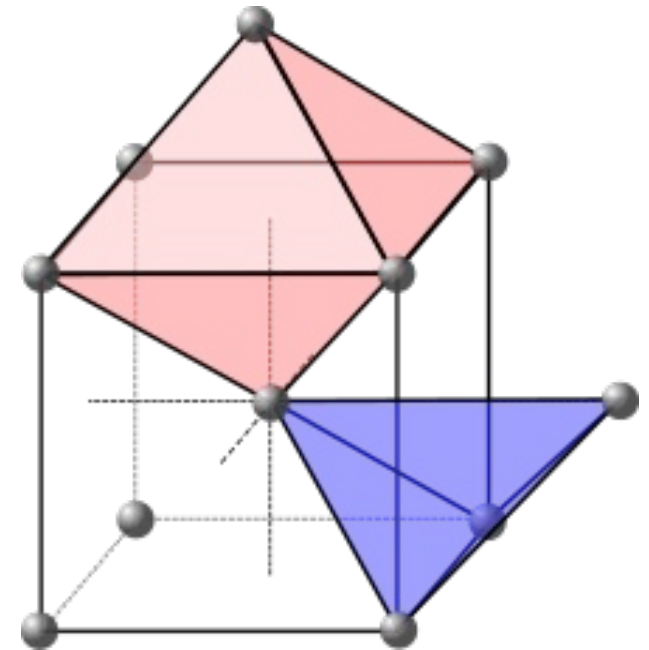
Milieu des arêtes : 12 arêtes conjointes à 4 mailles :  $12/4 = 3$  sites par maille.

Soit au total 6 sites octaédriques par maille.

- Sites tétraédriques dans un empilement Cubique Centré

Situés aux  $1/4$  et  $3/4$  des médiatrices des arêtes : 4 sites par face conjointe à 2 mailles :  $6 \times 4/2 = 12$  sites par maille.

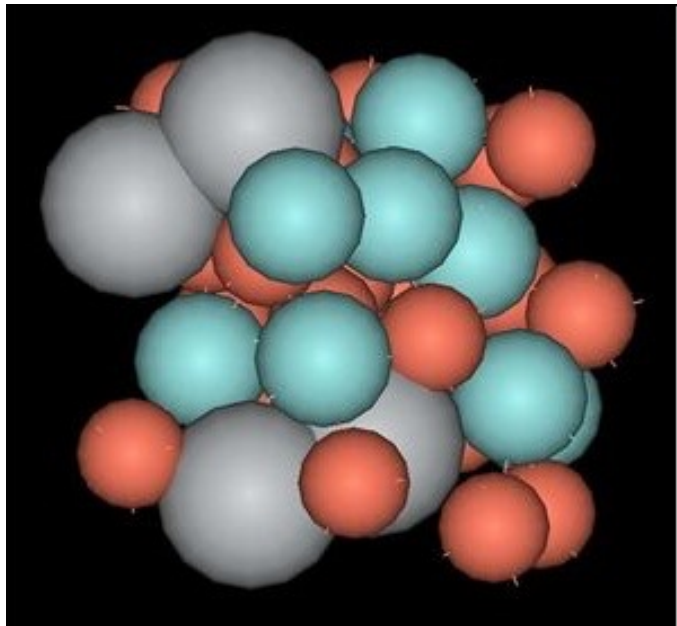
Soit au total 12 sites tétraédriques par maille.



# Structure des alliages métalliques

---

Lorsqu'un alliage métallique est refroidi "suffisamment rapidement" à partir de l'état liquide, il peut garder la structure désordonnée de ce dernier (i.e., pas assez de temps pour que les atomes puissent "s'organiser" en un ensemble de cristaux).



Structure simulée d'un verre métallique à 3 composants

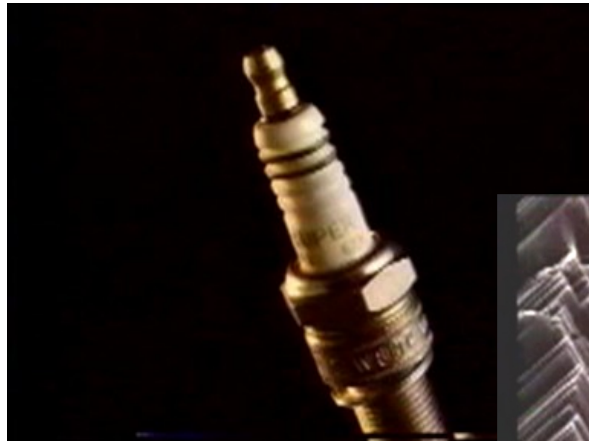
[www.matsceng.ohio-state.edu/faculty/flores/](http://www.matsceng.ohio-state.edu/faculty/flores/)

## Verre métallique

- Haute résistance mécanique
- Grande limite élastique
- Stockage d'énergie élastique élevée
- Haute ténacité

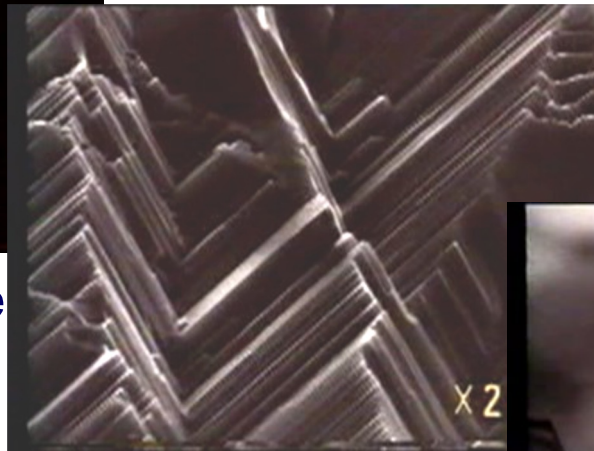
# Structure des céramiques

## Pièce céramique (alumine)



Isolation d'une bougie de voiture (10 cm)

Surface de rupture facettée dans une microfissure (1  $\mu\text{m}$ )



Grains très fins de  $\text{Al}_2\text{O}_3$  (0.1  $\mu\text{m}$ )



Structure atomique  $\text{Al}_2\text{O}_3$  (0.1 nm)



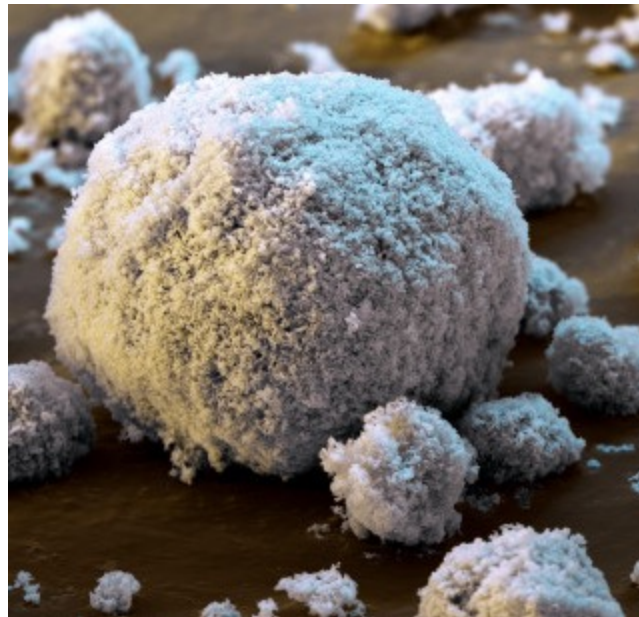
# Structure des céramiques

Avec la liaison ionique entre ions + et -, les céramiques adoptent une structure **compacte**, comme les métaux, mais plus **complexe**.

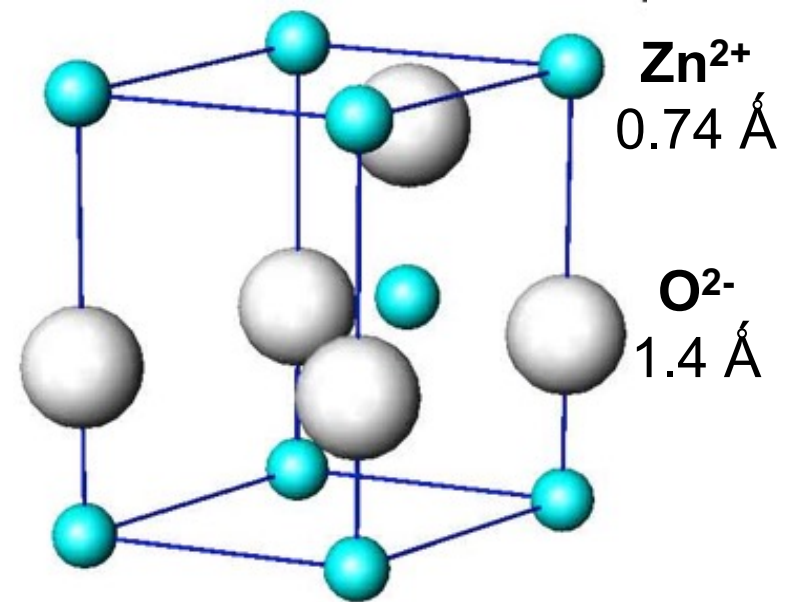
- Prise en compte de la **valence** des ions
- Prise en compte de leur **rayon ionique**
- Conséquence: plus grande tendance à former des **amorphes**



Crème solaire



ZnO nanocristal  
(Z-COTE®)



Type wurtzite hexagonal

# Structure des céramiques

Dans des cas simples, la coordination des atomes et la structure peuvent être déduites du rapport des rayons ioniques.



**NaCl**

$$R_{\text{Na}^+} = 1.02 \text{ \AA}$$

$$R_{\text{Cl}^-} = 1.81 \text{ \AA}$$

Sel de cuisine

**6**

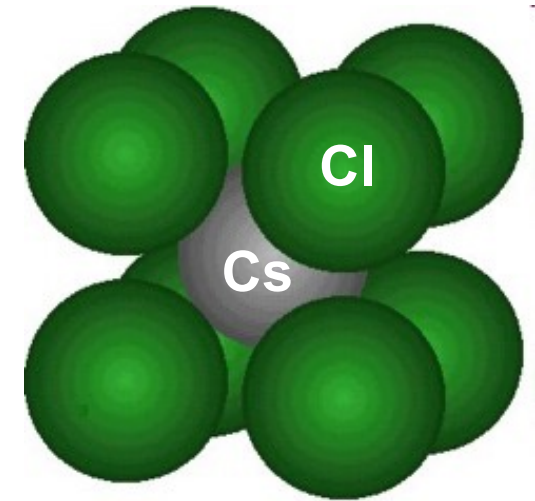
**Coordination**

**0.56**

**Rapport  $R_c/R_a$**

**8**

**0.92**



**CsCl**

$$R_{\text{Cs}^+} = 1.67 \text{ \AA}$$

$$R_{\text{Cl}^-} = 1.81 \text{ \AA}$$

Source de césium

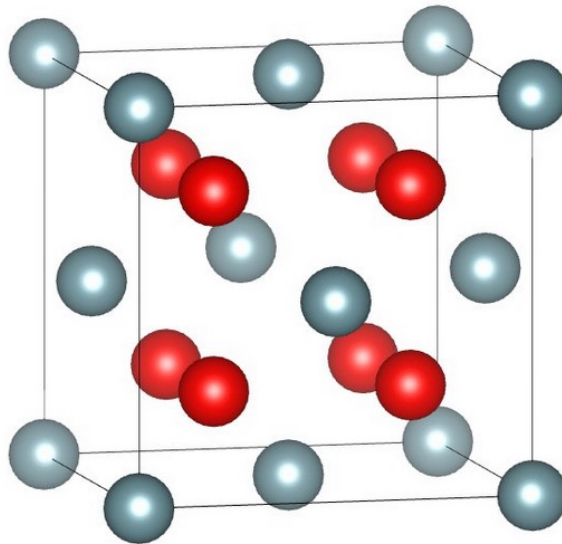
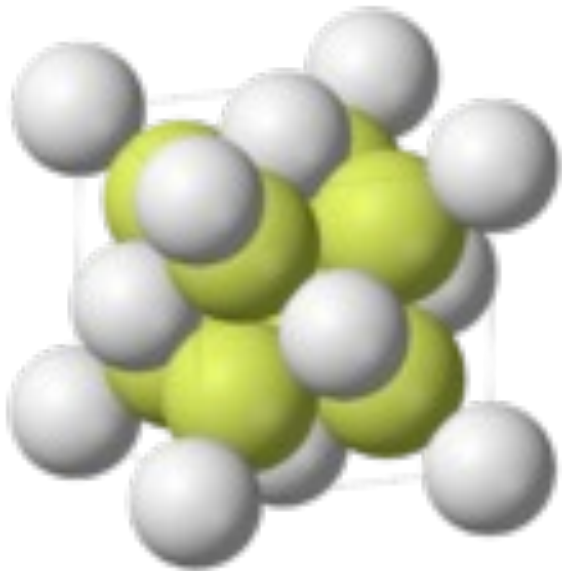
Centrifugation/séparation DNA

Thérapie alternative du cancer

# Structure des céramiques

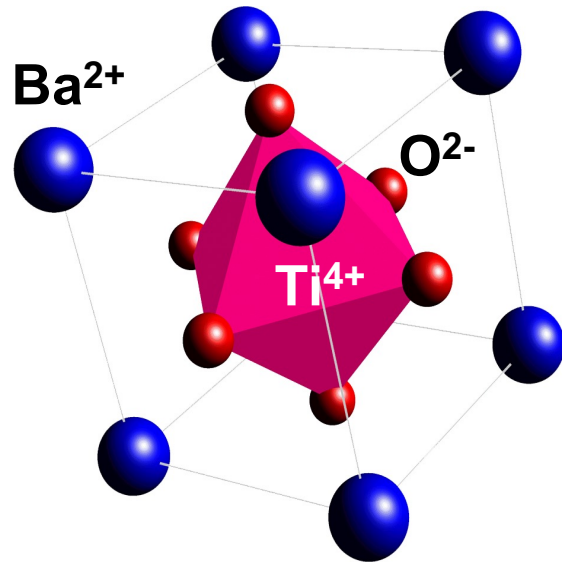
---

Attention, pour  $\text{CaF}_2$  par exemple, le nombre de coordination dépend de l'atome.



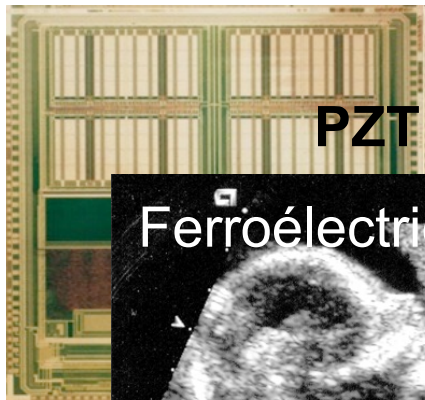
# Structure des céramiques

Quelques céramiques "high tech":

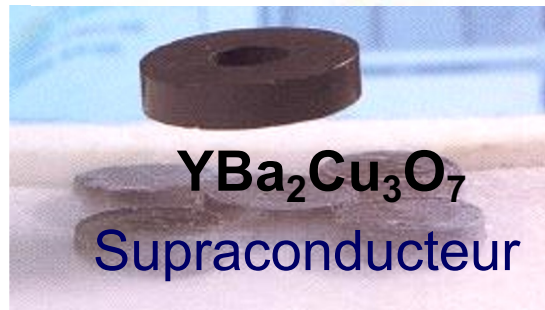
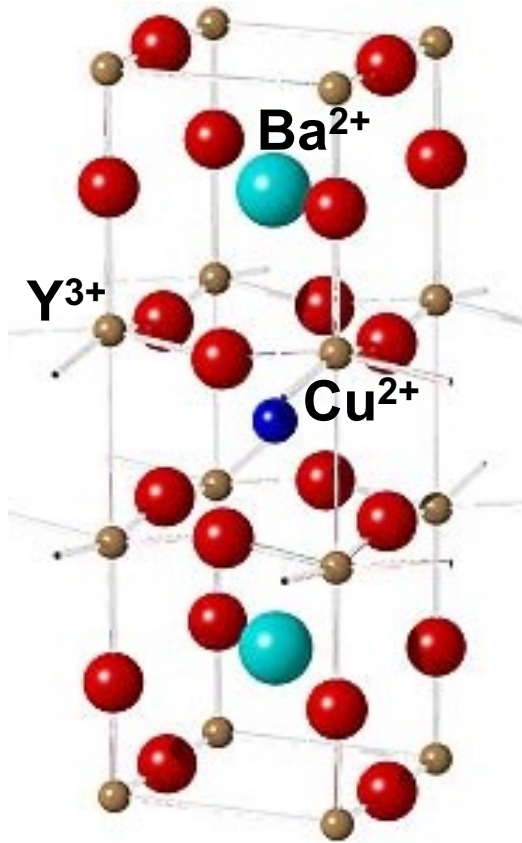


BaTiO<sub>3</sub>

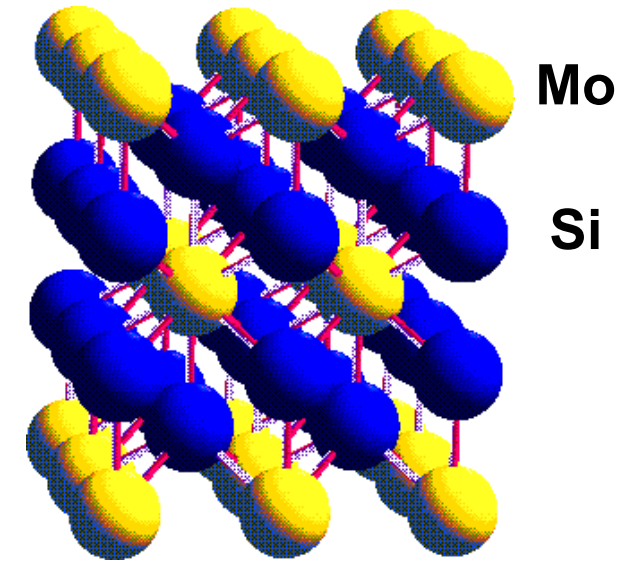
PZT (Pb(Zr,Ti)O<sub>3</sub>)



Ferroélectrique

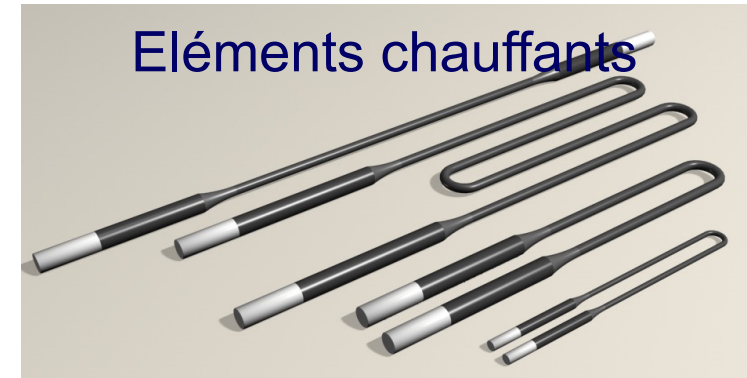


YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub>  
Supraconducteur



MoSi<sub>2</sub>

Eléments chauffants



Cours No 4.2

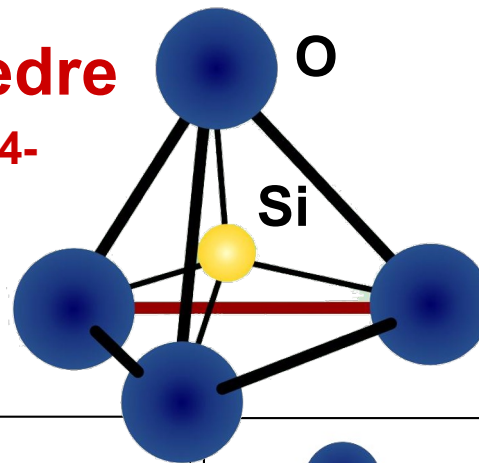
# Silice cristalline ou amorphe

La **silice** ( $\text{SiO}_2$ ) et les **silicates** ( $\text{X}_y\text{SiO}_4$ ) jouent un rôle important pour les céramiques, les verres et les ciments.



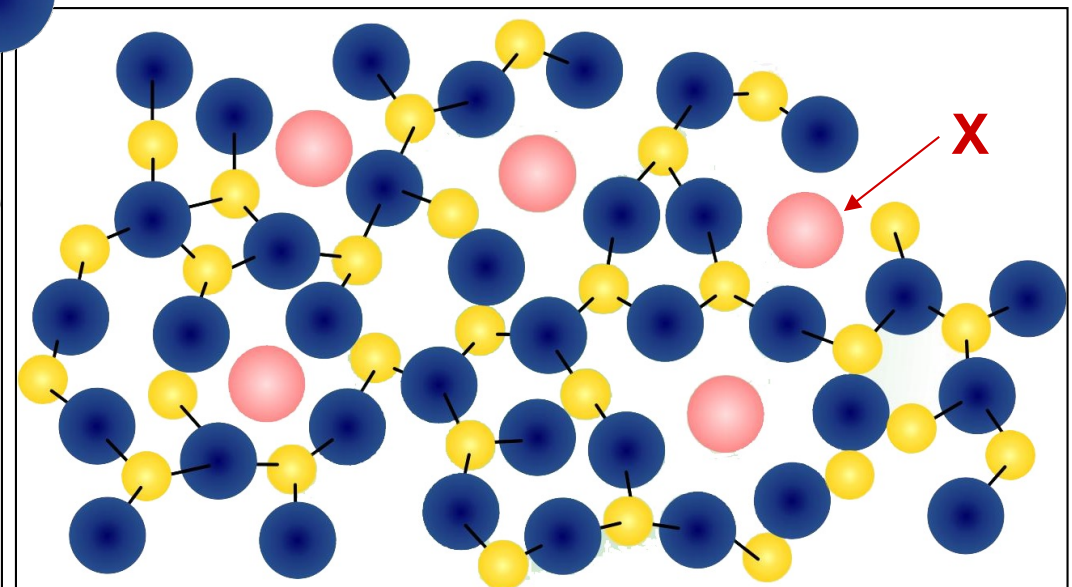
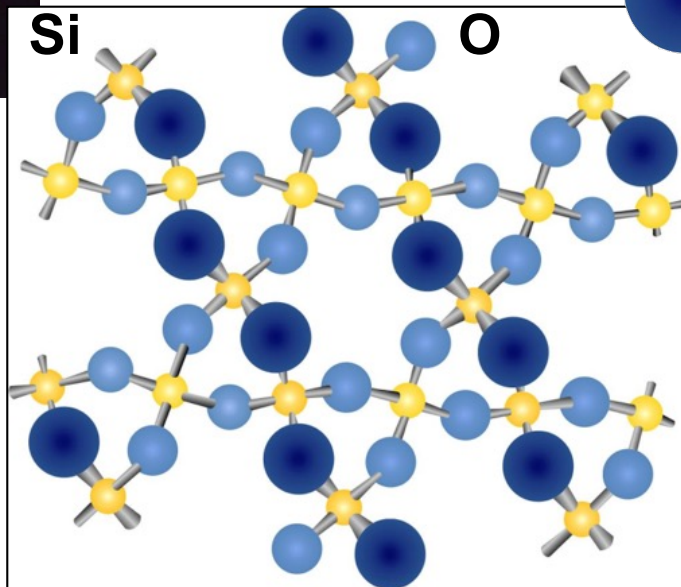
**Quartz**

**Tétraèdre**  
 $(\text{SiO}_4)^{4-}$



**Verre**

Additions de:  
 $\text{Na}_2\text{O}$ ,  $\text{K}_2\text{O}$   
 $\text{CaO}$ ,  $\text{MgO}$   
 $\text{B}_2\text{O}_3$  (pyrex)



# Structure des céramiques

## Argile (kaolin)



## Béton

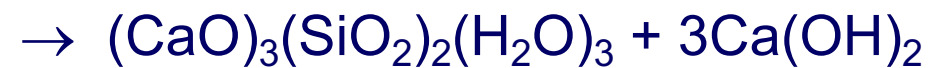
gravier + quartz + ciment



Le ciment est un mélange de:



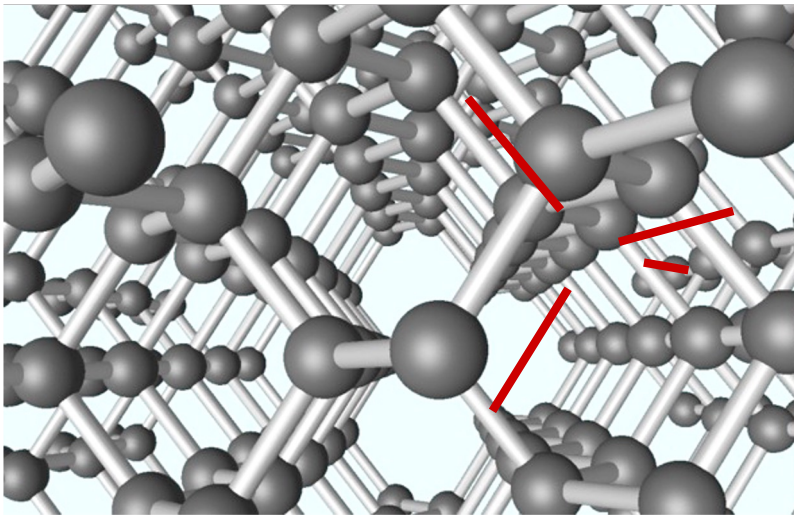
Hydratation du ciment:



# Structure des céramiques

Le **diamant** et le **graphite** pourraient être considérés comme des matériaux organiques, puisque faits de C, mais un composé chimique est dit organique lorsqu'il renferme au moins un atome C lié à au moins un atome H.

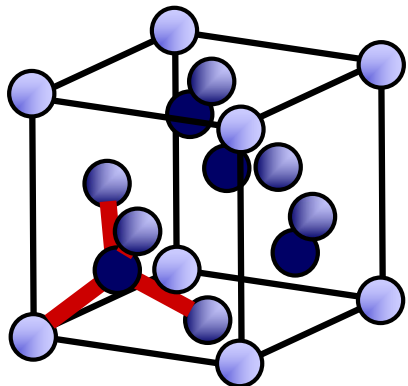
## Diamant



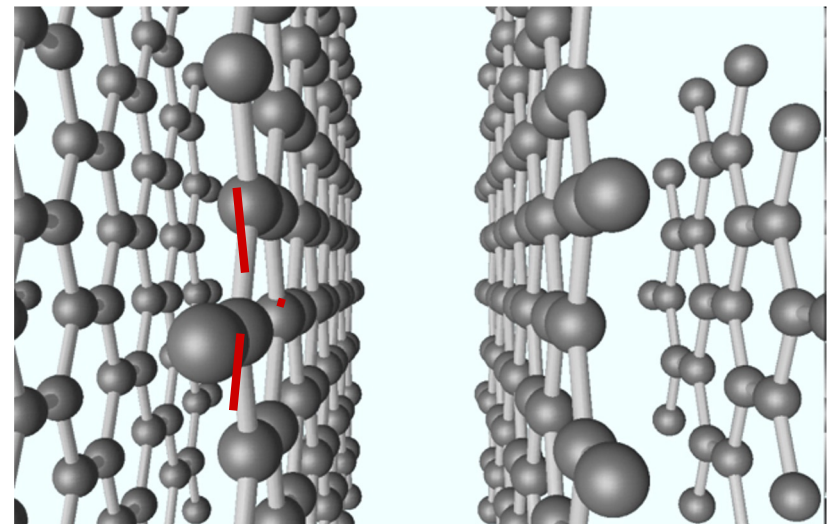
liaison  $sp^3$

structure cfc

motif (0,0,0) et (1/4, 1/4, 1/4)



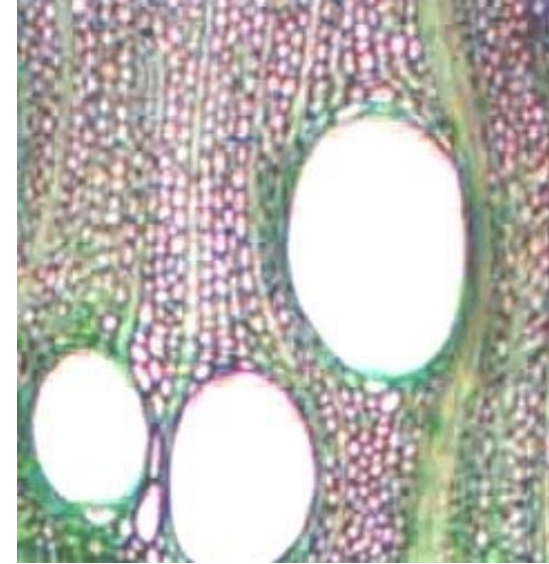
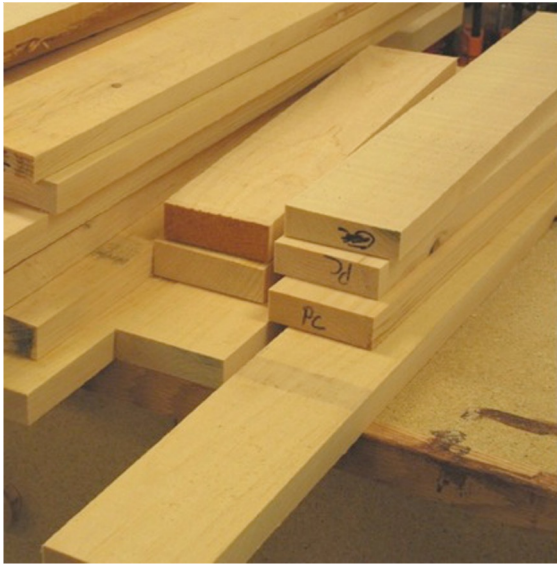
## Graphite



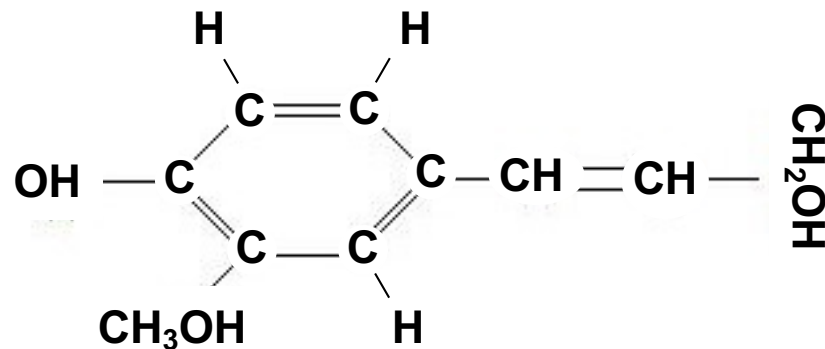
liaison  $sp^2$  - structure hc

# Structure des matériaux organiques

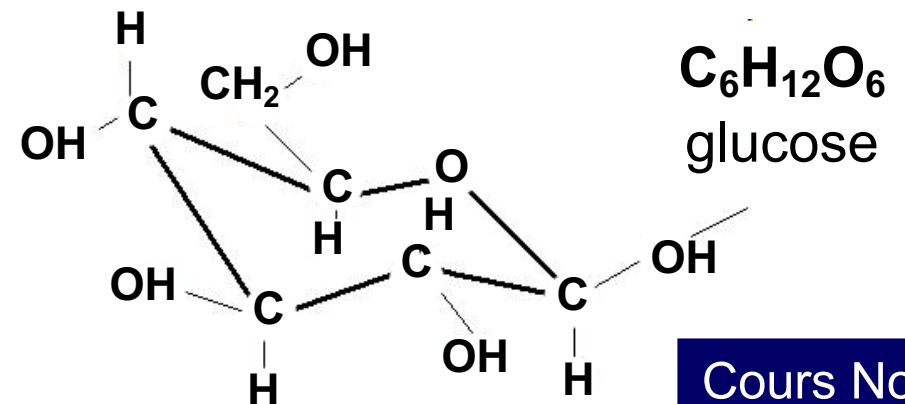
Le **bois** est un matériau organique dont les parois sont composées de **cellulose** et de **lignine**.



Élément de base d'une des **lignines**



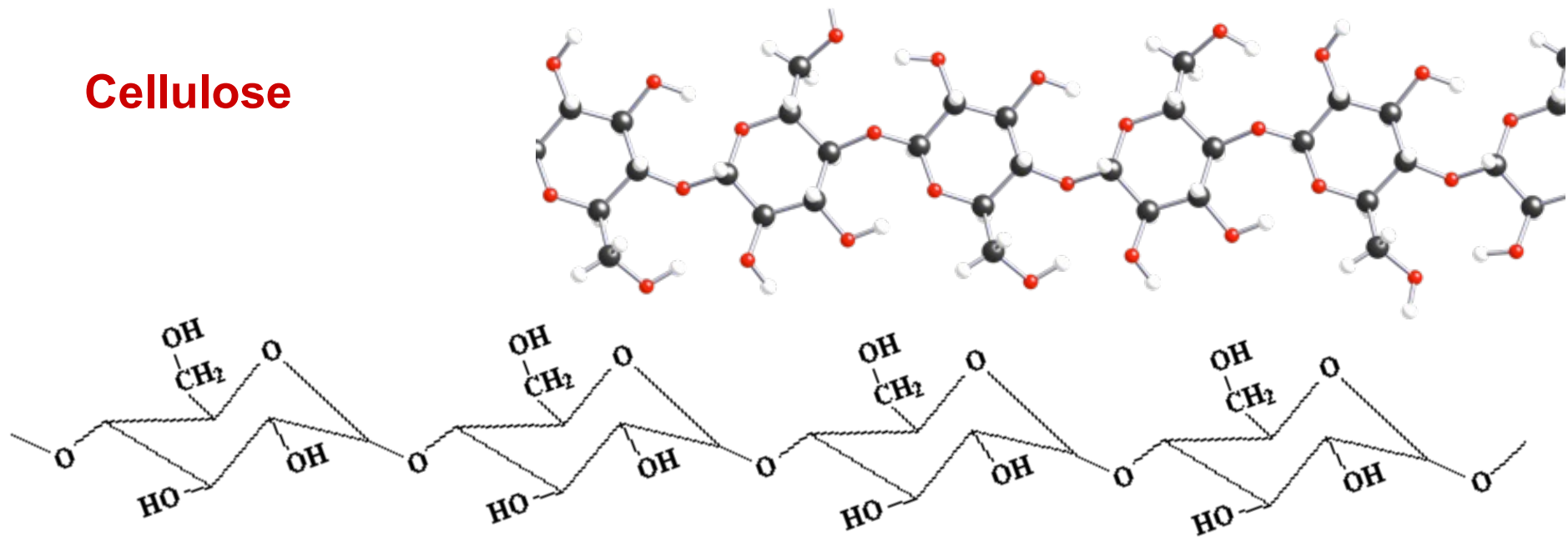
Élément de base de la **cellulose**



# Structure des matériaux organiques

La lignine et la cellulose sont en fait des **polymères** naturels, c'est-à-dire de longues chaînes répétant un **motif de base**.

**Cellulose**

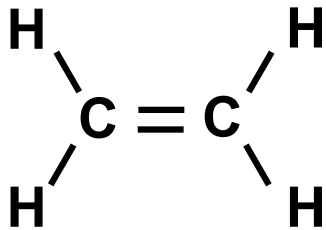


De nombreux matériaux naturels organiques (végétaux, coton,...) ont comme base la cellulose (> 50% biomasse). Nous allons plutôt regarder les **matériaux organiques synthétiques**, le principe de construction restant le même.

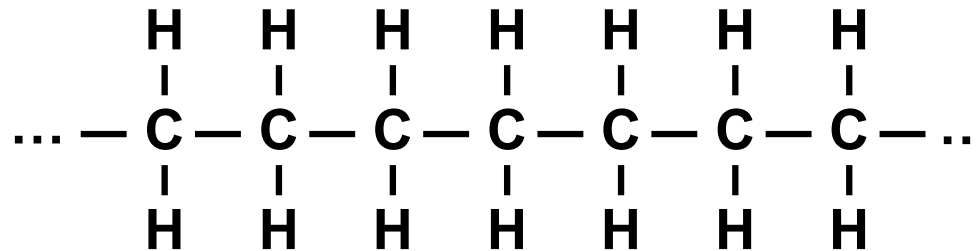
# Structure des matériaux organiques

Un polymère est une **macromolécule** obtenue par la répétition d'un **bloc de base**.

éthylène  $C_2H_4$



**Polyéthylène (PE)**



La **polymérisation** est l'opération permettant de passer dans ce cas d'une molécule avec double liaison C-C à une longue macromolécule avec des liaisons C-C simples.

La **masse molaire** typique de ce polymère est  $10^5 - 10^6$  g/mole (**UHMWPE**)

**Masse molaire :**

$M_i$  = masse molaire d'une chaîne de polymère de degré de polymérisation  $i$ , donc de répétition du monomère de base  $i$  fois =  $i M_{\text{molécule}}$

$M_1$  pour une molécule: la somme des masses molaires des atomes de base de la molécule, ici :  $2 \times 12 + 4 \times 1 = 28$  g/mol

# Structure des matériaux organiques

---

On distingue:

- **Homopolymère:** polymère constitué d'un seul bloc de base A  
... - A - A - A - A - A - ... (où A = C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> pour le polyéthylène)
- **Copolymère:** polymère composé de deux blocs A et B
- **Degré de polymérisation:** nombre moyen de blocs par chaîne

$$n = \frac{M_{polymère}}{M_{monomère}}$$

← Valeur moyenne sur un ensemble de chaînes.

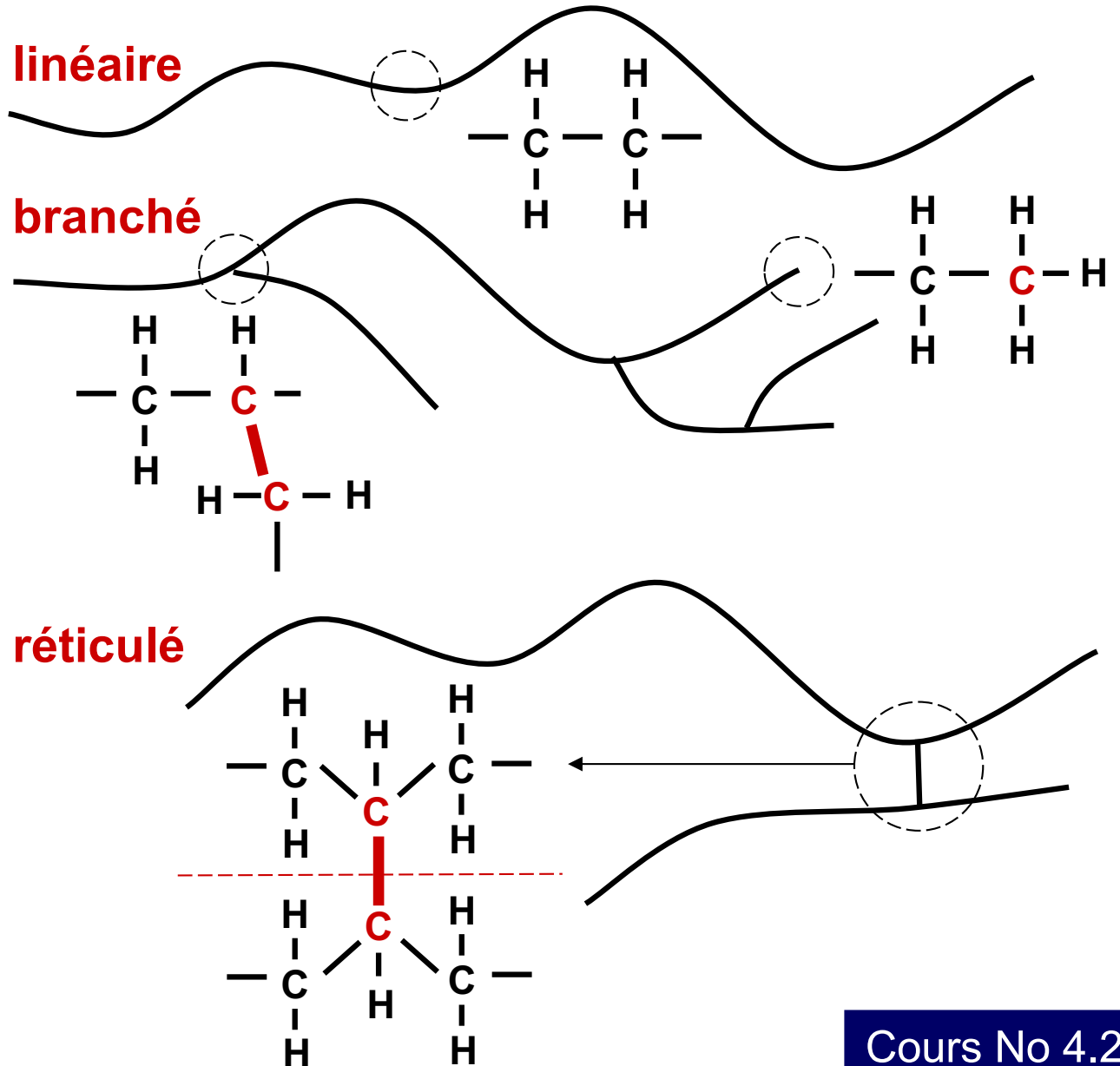
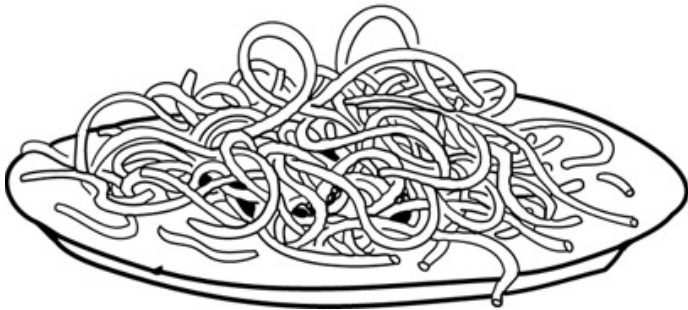
Les liaisons au sein des chaînes sont covalentes ! C-C, C-O, C-H, C-F, C-Cl.....

Entre les chaînes: Van der Waals ou ponts réticulés

# Structure des matériaux organiques

Le polymère peut être:

Les interactions entre chaînes étant faibles, une masse polymère peut être vue comme:



# Structure des matériaux organiques

## ■ Thermoplastiques

- polymère moulé à chaud et ensuite utilisé à froid. Donc en principe, recyclable.
- Pas de ponts réticulants: forces de Van der Waals entre les chaînes
- Amorphes ou semi-cristallins

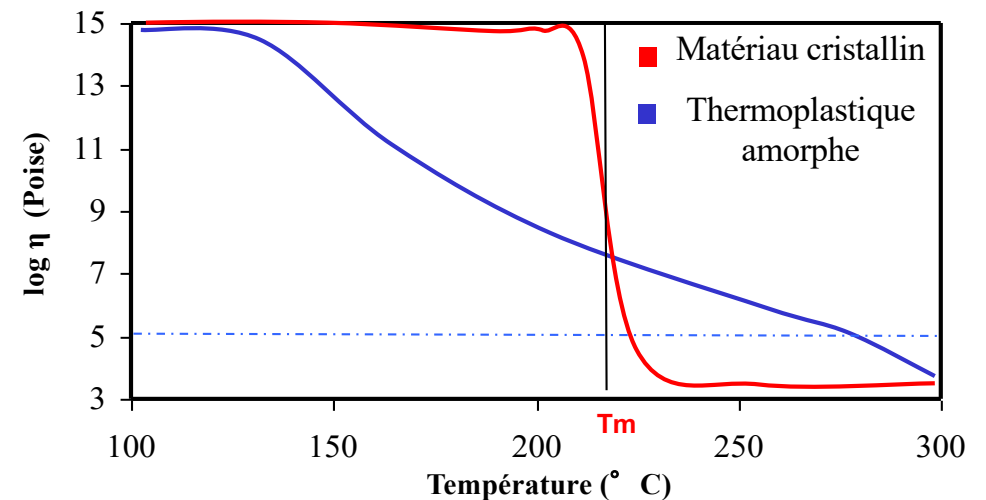
Amorphe



Semi-cristallin



Viscosité vs. température

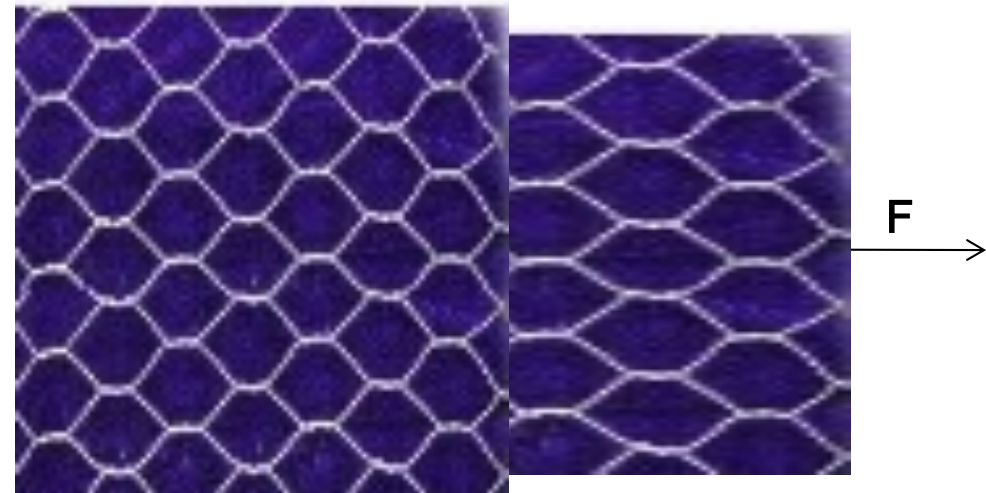
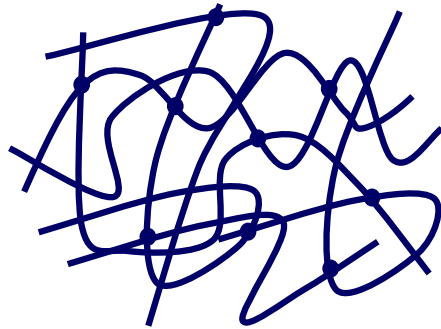


Exemples: Polyéthylène Téréphtalate (PET), Polyméthylmétacrylate (PMMA), Polycarbonate (PC)...(voir slides supplémentaires à la fin du cours)

# Structure des matériaux organiques

## ■ Elastomères:

- polymère réticulé à chaud par vulcanisation pour le rendre très élastique
- Polymère amorphes, non recyclables
- Exemple: caoutchouc, néoprène, silicone, ...

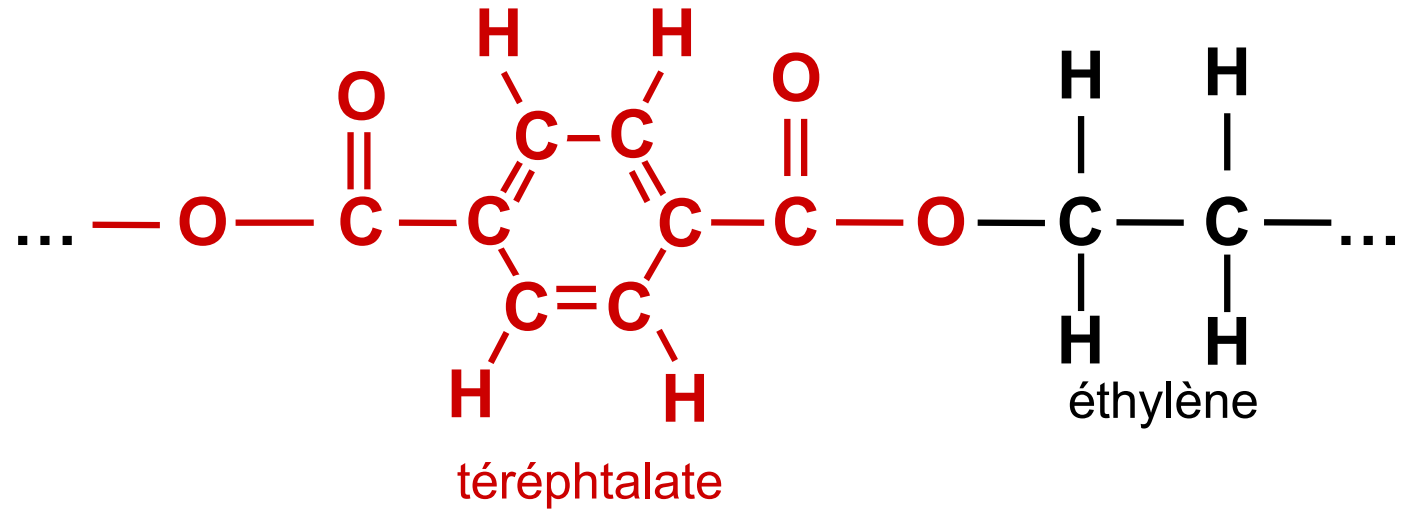


## ■ Thermodurcissables

- polymère **très** réticulé (10-100 x élastomères) à chaud. Devient donc résistant à la température. Ne peuvent pas être recyclés.
- Polymère amorphes, non recyclables
- Exemple: colles époxy, résines polyesters, bakélite, ...

# Structure des matériaux organiques

Quelques polymères : **polyéthylène téréphtalate (PET)**



**Bouteilles ... recyclées en vestes polaires**

# Résumé

---

- *A moins d'être solidifiés rapidement (en formant alors des verres), les métaux ont une structure cristalline simple compacte, cfc, hc, ou encore cc.*
- *Les structures hc et cfc se différencient par l'empilement des plans denses.*
- *Les céramiques se présentent généralement sous forme cristalline, mais aussi vitreuse. Leur structure, compacte, dépend des degrés de valence et des rayons ioniques*
- *Les polymères sont des chaînes très longues, répétant un motif. Ils sont amorphes ou semi-cristallins.*
- *On distingue les thermoplastiques, les élastomères et les thermodurcissables, suivant leurs types de liaisons entre molécules*

# A retenir du cours d'aujourd'hui

---

- *Savoir ce qu'est la coordination, un espace interstitiel*
- *Connaître quelques exemples de la structure possible des métaux, céramiques et des polymères.*
- *Savoir calculer une masse molaire et un degré de polymérisation.*

# Pour la semaine prochaine

---

- *Lire le chapitre 4 du livre  
p 51-64 l'élasticité (leçon No 5)  
p 64-80 récapitulation de la structure des  
matériaux en relation avec l'élasticité  
(leçon No 4)*