

**Cours No 2**  
**Structure des matériaux**

**Francesco Stellacci**

**Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne**

# Premier But

---

Décrire un matériau

- 
1. Pourquoi?
  2. Vrai ou pas?
  3. A quelle échelle?
  4. Quelle expérience peut le montrer?
  5. Quelle expérience je peux designer pour le montrer?

# A quelle échelle?

---





---

---



L'état solide  
L'état liquide  
L'état gazeux

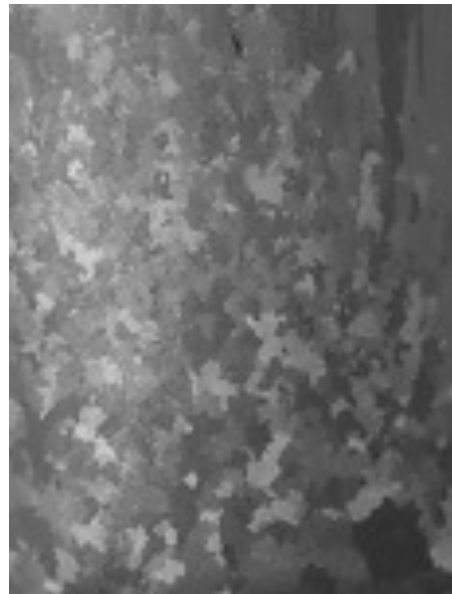
# Niveaux de structuration des solides

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.

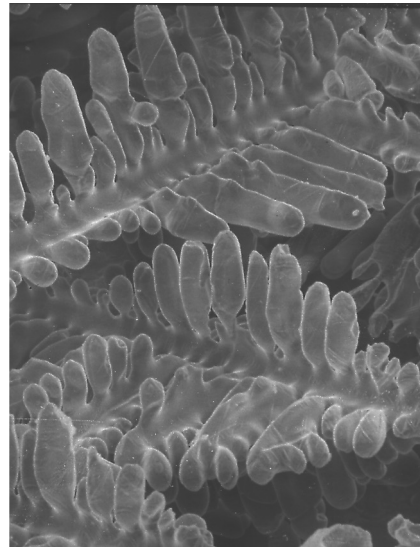
## Pièce métallique



Aube de turbine Ni  
(10 cm)



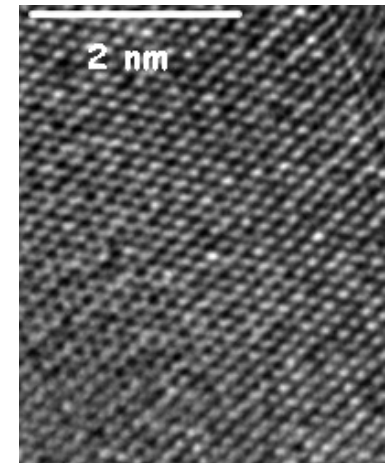
Grains  
(mm)



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



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

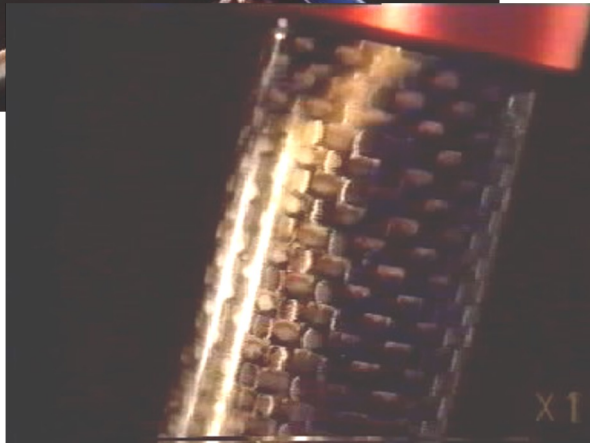


Atomes  
(0.1 nm)



# Niveaux de structuration des solides

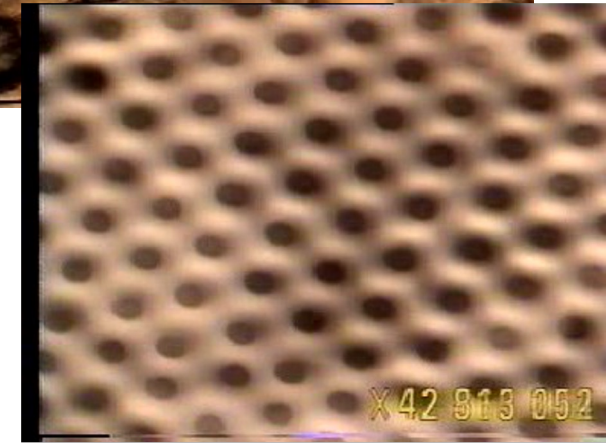
## Pièce composite à matrice polymère



Potence de vélo  
(10-100 cm)



Fibres de carbone enrobées  
dans une matrice époxy  
(1-10  $\mu\text{m}$ )



Arrangement hexagonal  
des atomes de C  
(0.1 nm)

# Étas de la Matière

---



- L'état solide
- L'état liquide
- L'état gazeux

# Étas de la Matière

---

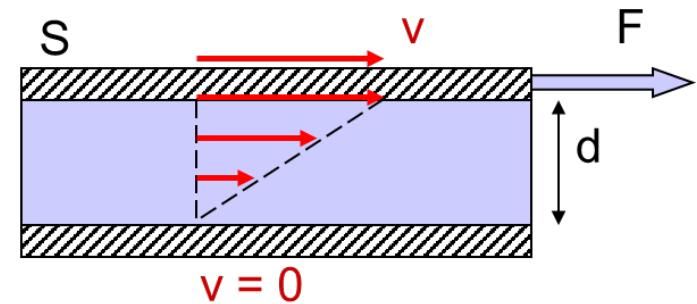


- L'état gazeux se distingue des solide et liquide par sa masse spécifique

# Étas de la Matière



- Solide et liquide se distinguent par leur viscosité





# Au Niveau Atomistique

---



# Etats de la matière

Les états de la matière sont nombreux et se distinguent d'abord par la **masse volumique**:

▪ **Gaz**

$$\rho_g \cong 1 \text{ kg/m}^3$$

▪ **Liquide**

$$\rho_\ell \cong 10^3 - 20 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$$

▪ **Solide amorphe**

$$\rho_a \cong \rho_\ell$$

▪ **Solide cristallin**

$$\rho_c \cong \rho_\ell + \Delta\rho$$

$\Delta\rho/\rho = 0$  à  $+10\%$  pour la majorité des matériaux

=  $-9\%$  pour la glace à  $0^\circ\text{C}$

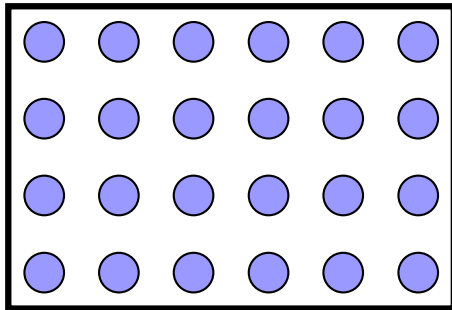
=  $-2.3\%$  pour Si à  $1'414^\circ\text{C}$



Ce qui distinguent les phases condensées liquide et solide entre elles, ce sont ensuite les **propriétés mécaniques** (viscosité).

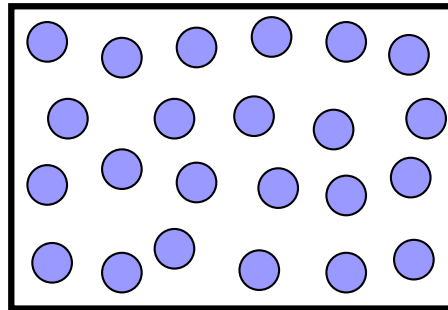
# Etats de la matière

Tout ceci résulte des interactions entre atomes au niveau microscopique et de leur arrangement



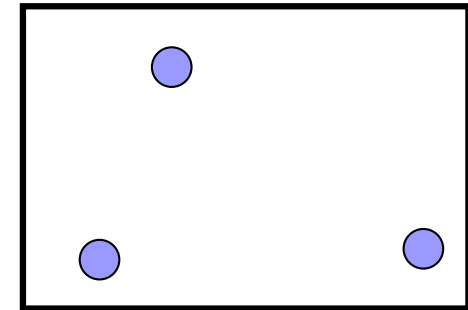
**Cristal parfait**

Arrangement régulier  
d'atomes - Ordre à  
longue distance



**Liquide (ou amorphe)**

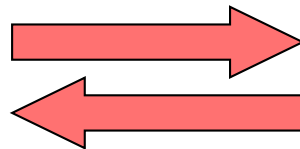
Ordre à courte distance  
avec fluctuations -  
Désordre à longue  
distance



**Gaz**

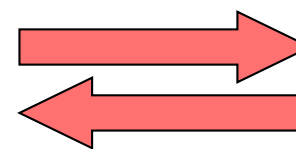
Distance entre  
atomes élevée –  
Désordre total

**Fusion**



**Cristallisation  
Solidification**

**Evaporation**

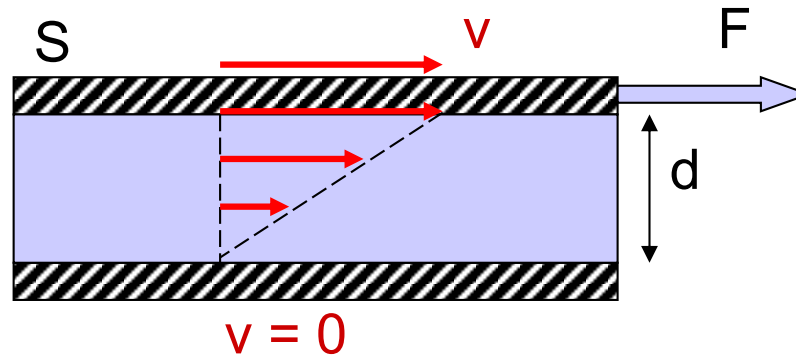


**Condensation**

# Etats de la matière

Fluide:

Viscosité  $\mu$  [Pa s]:



$$\frac{F}{S} = \mu \frac{v}{d}$$

$$v \propto \frac{F}{\mu}$$

$$\mu_g \cong 2 \times 10^{-5} \text{ Pa s}$$



$$\mu_\ell \cong 1 \times 10^{-3} \text{ Pa s}$$



$$\mu_\ell \cong 1 \times 10^{-2} \text{ Pa s}$$



$$\mu_\ell \cong 10 \text{ Pa s}$$



$$\mu_\ell \cong 100 \text{ Pa s}$$

$$\mu_s \cong 1.5 \times 10^{13} \text{ Pa s}$$

- 
1. Pourquoi?
  2. Vrai ou pas?
  3. A quelle échelle?
  4. Quelle expérience peut le montrer?
  5. Quelle expérience je peux designer pour le montrer?

---

---

---



# États Liquide, Solide et Gazeux

---

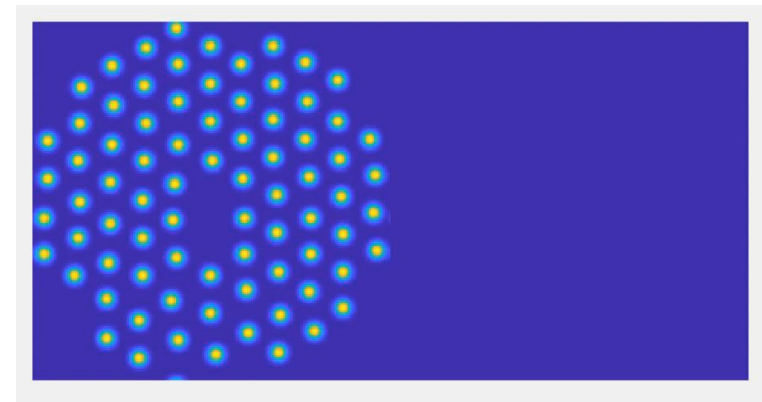
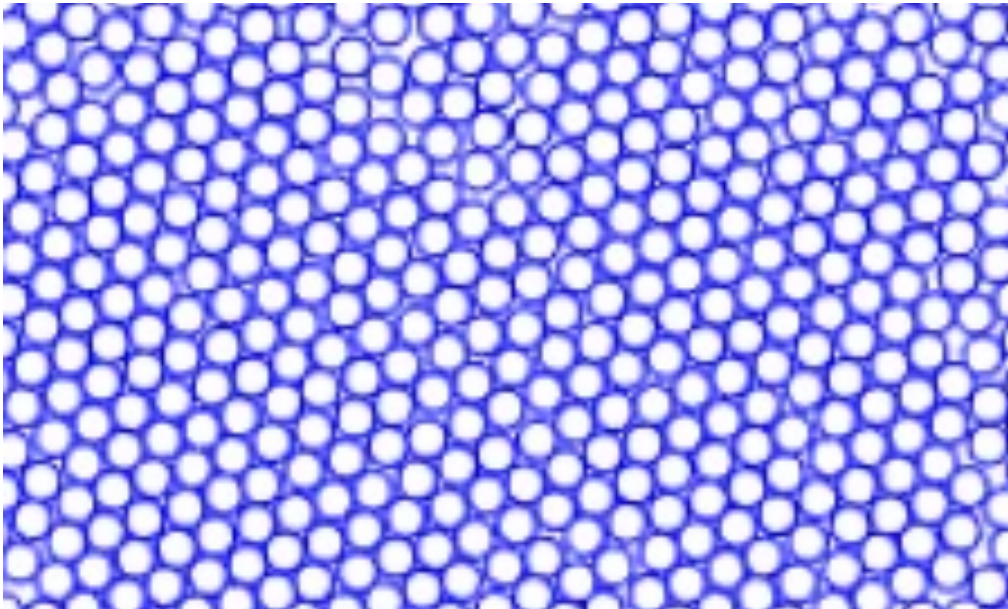
# Premier But

---

Décrire un matériau

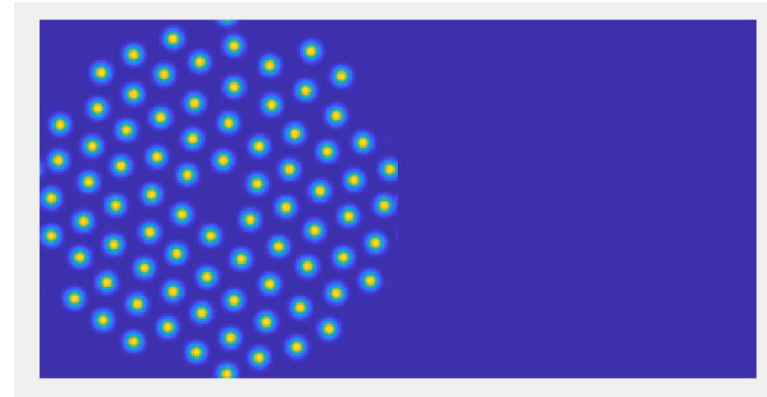
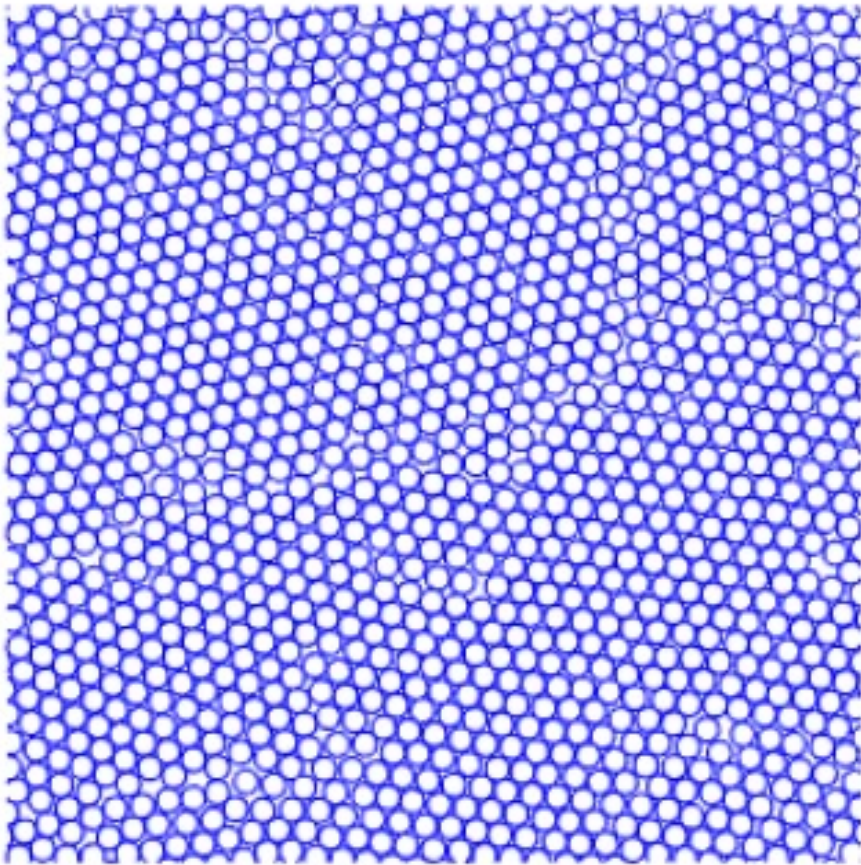
# Fonction de Distribution Radiale

---



# Fonction de Distribution Radiale

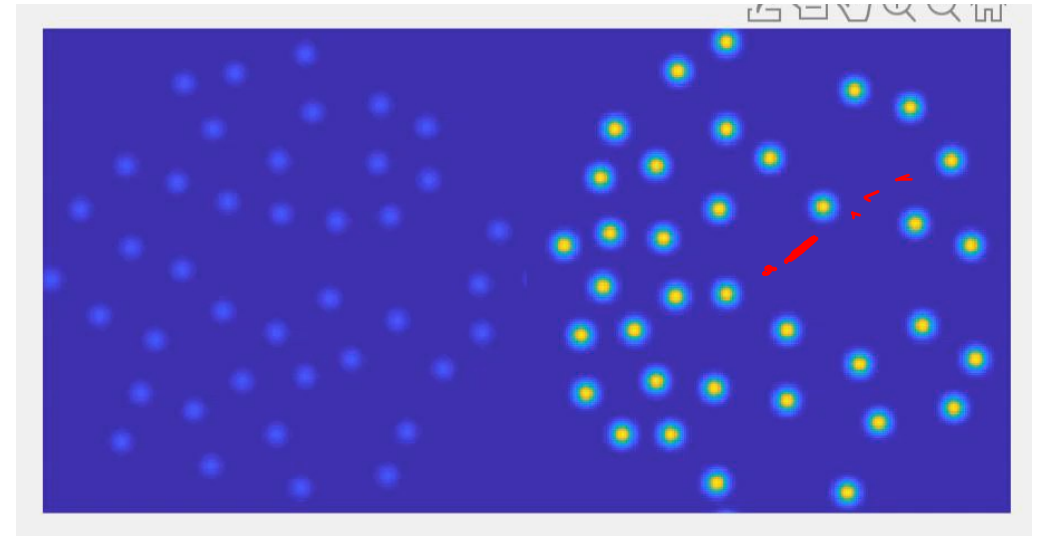
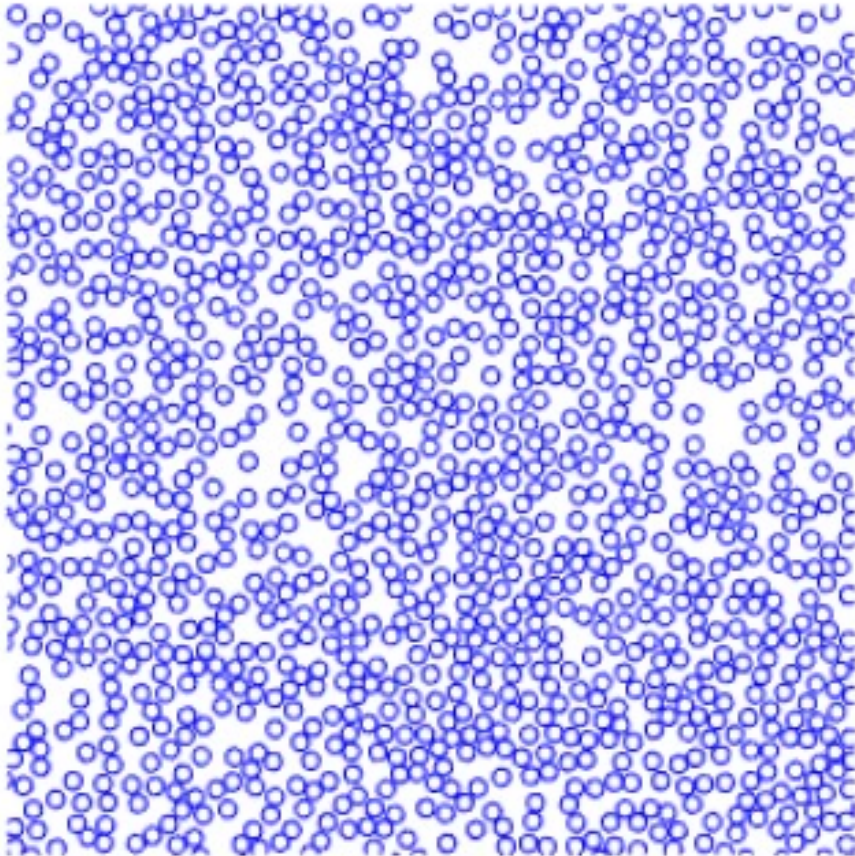
---



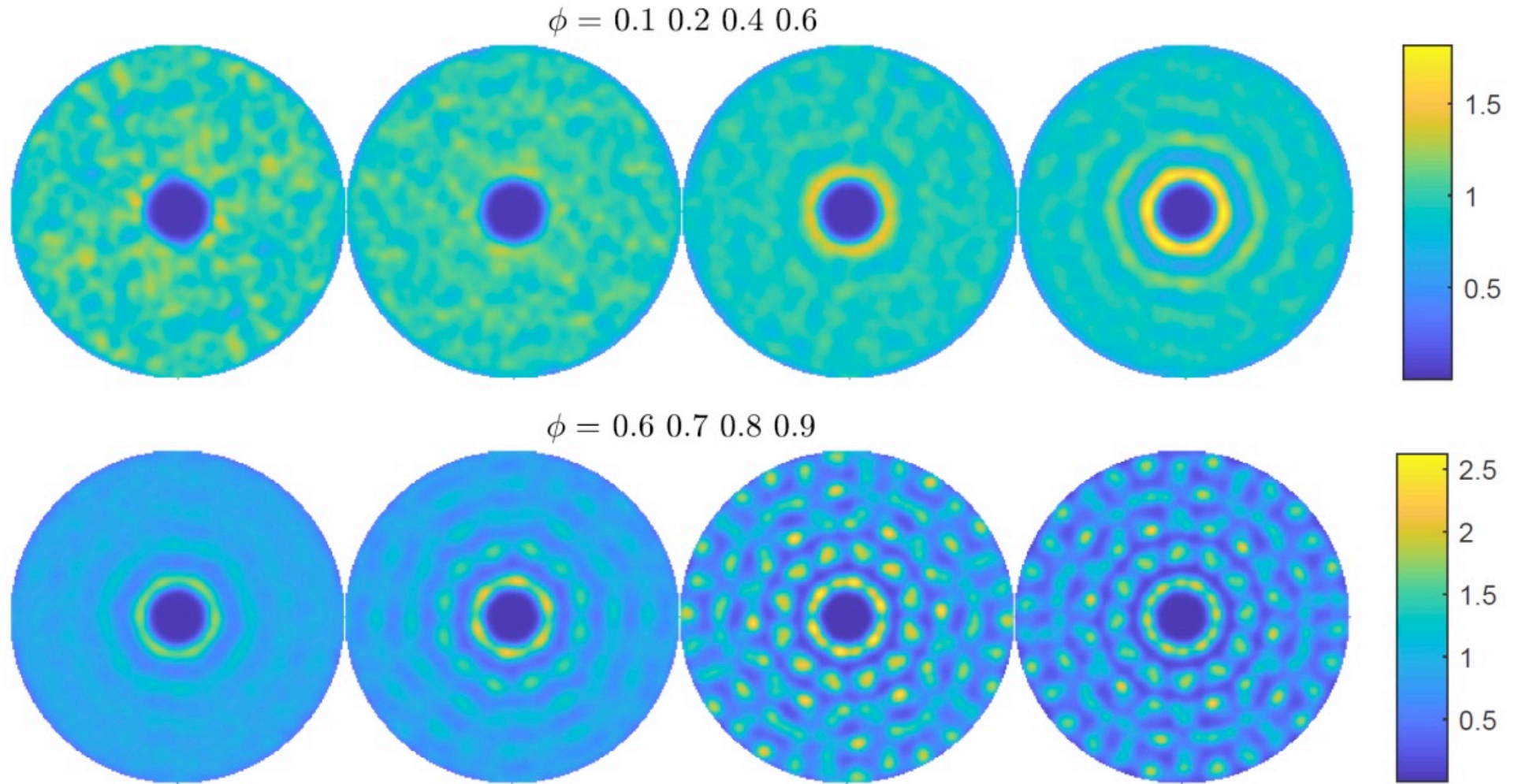


# Fonction de Distribution Radiale

---

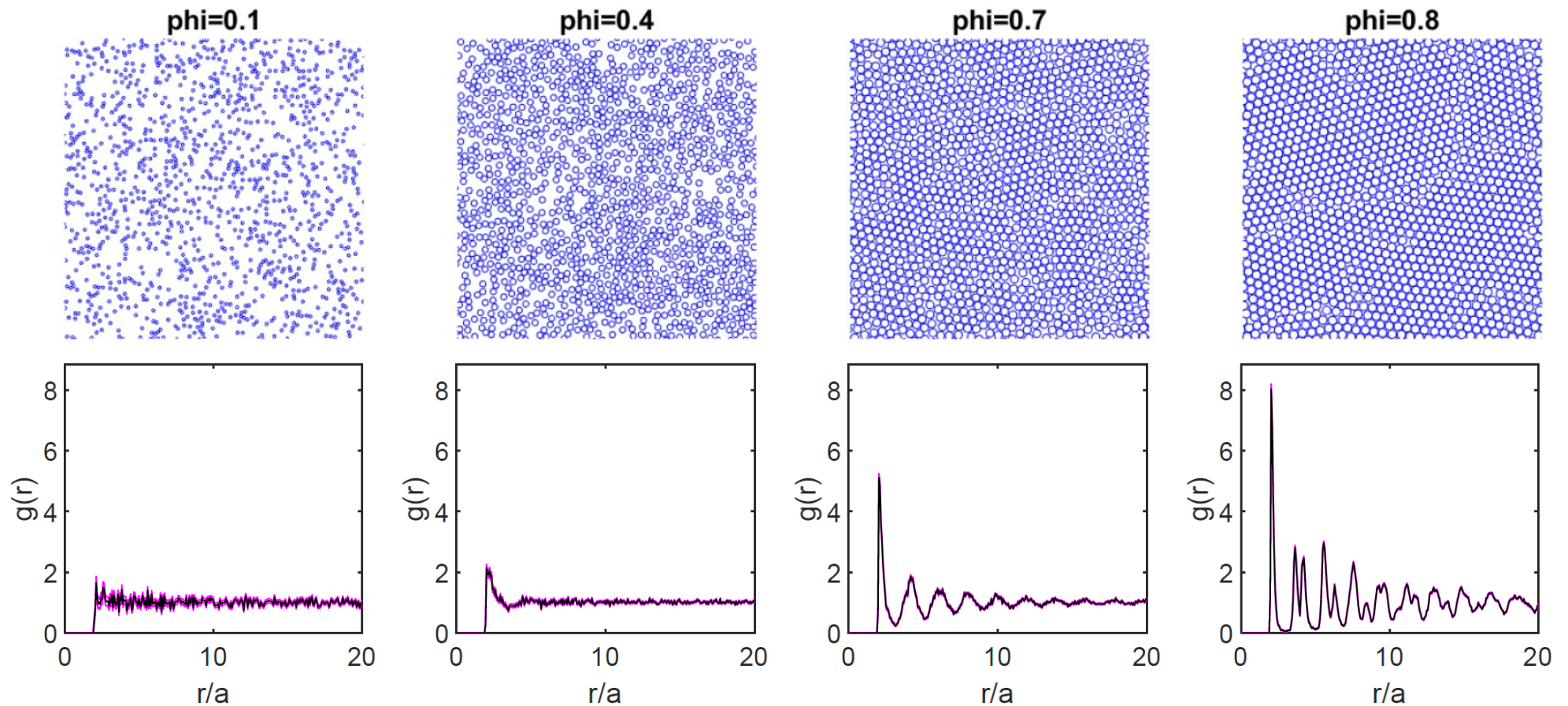


# Fonction de Distribution Radiale





# Fonction de Distribution Radiale



Nous faisons la moyenne de  $g(x^{\rightarrow})$  sur tous les angles pour obtenir  $g(r)$ .

# Fonction de Distribution Radiale

---

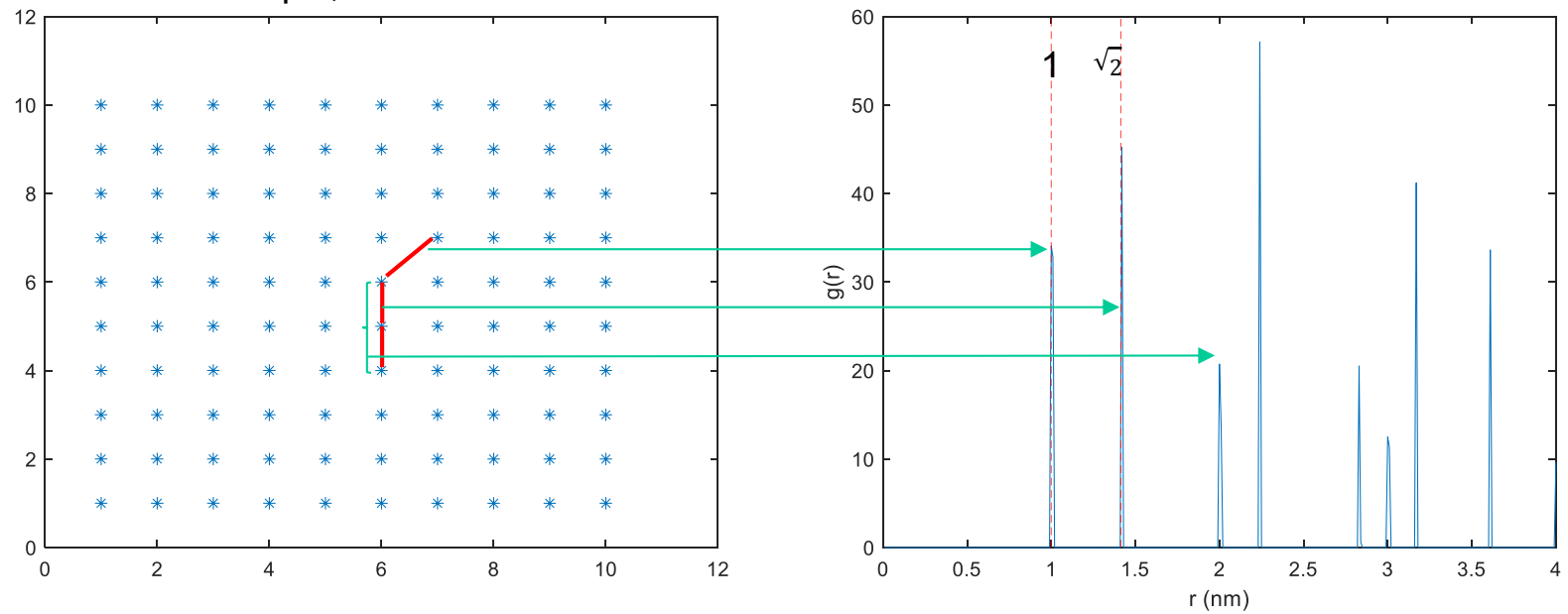
$$g(r) = \frac{1}{\langle \rho \rangle} \frac{dn(r, r + dr)}{dv(r, r + dr)}$$

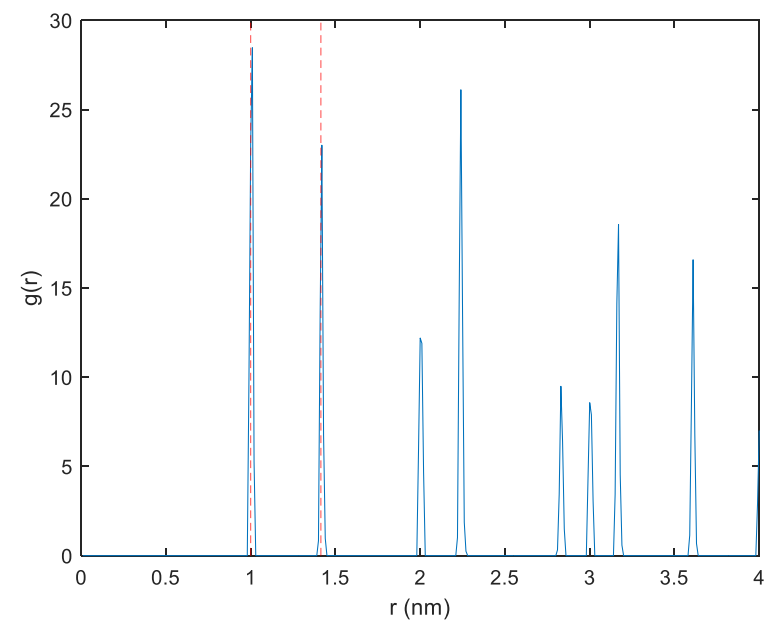
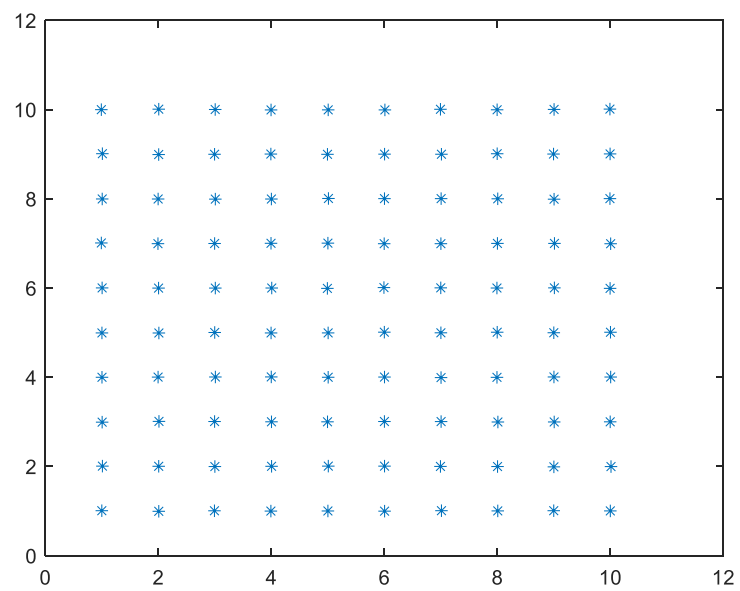
Fonction de distribution de paires

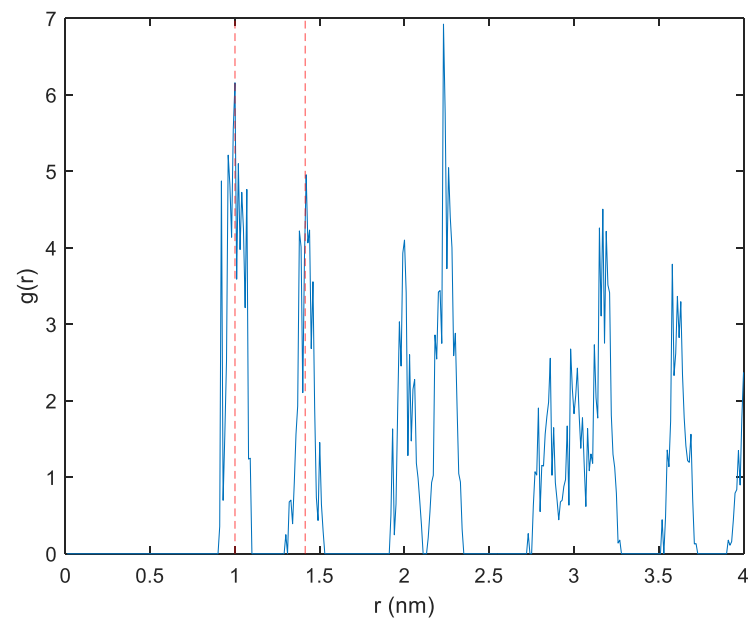
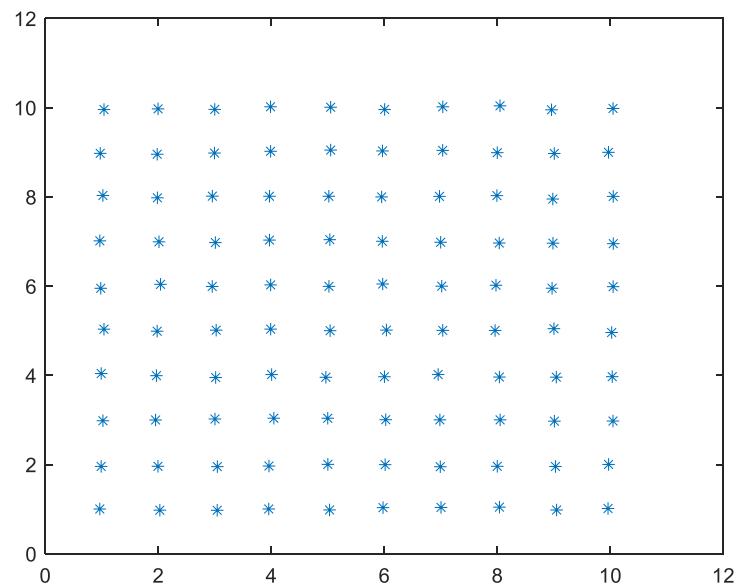
Fonction de distribution radiale

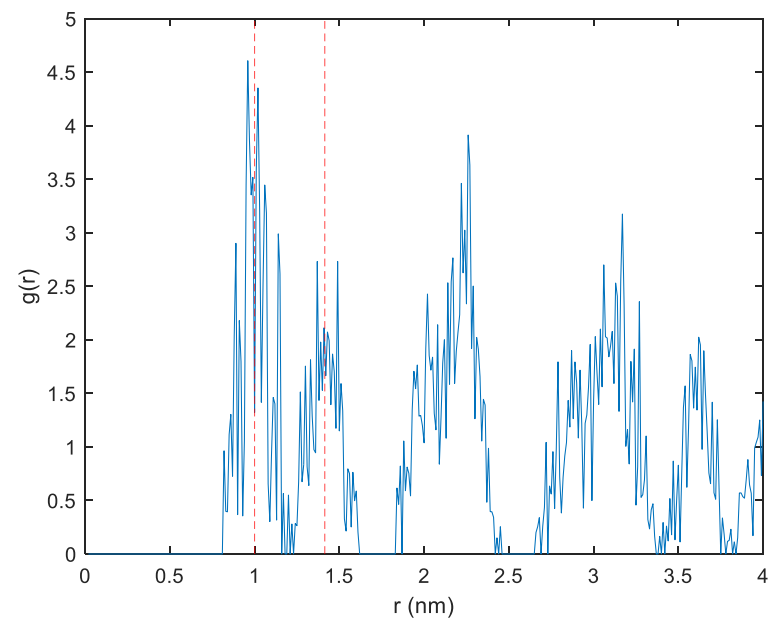
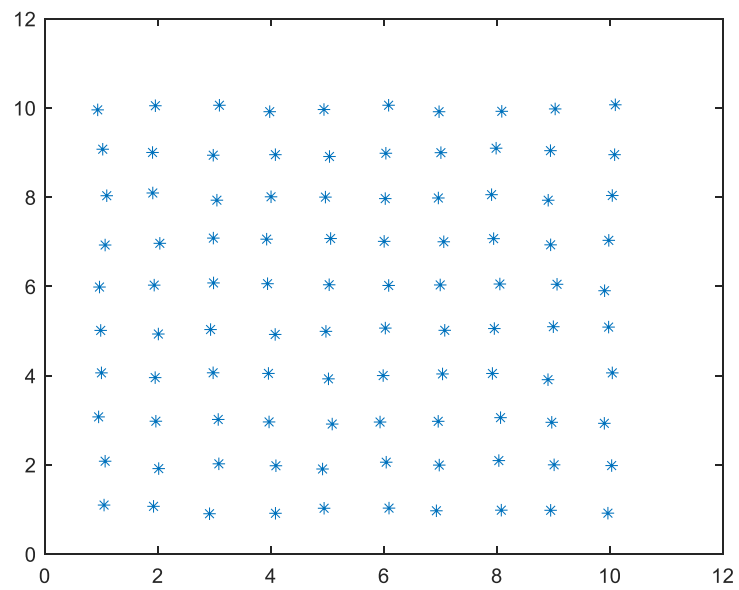


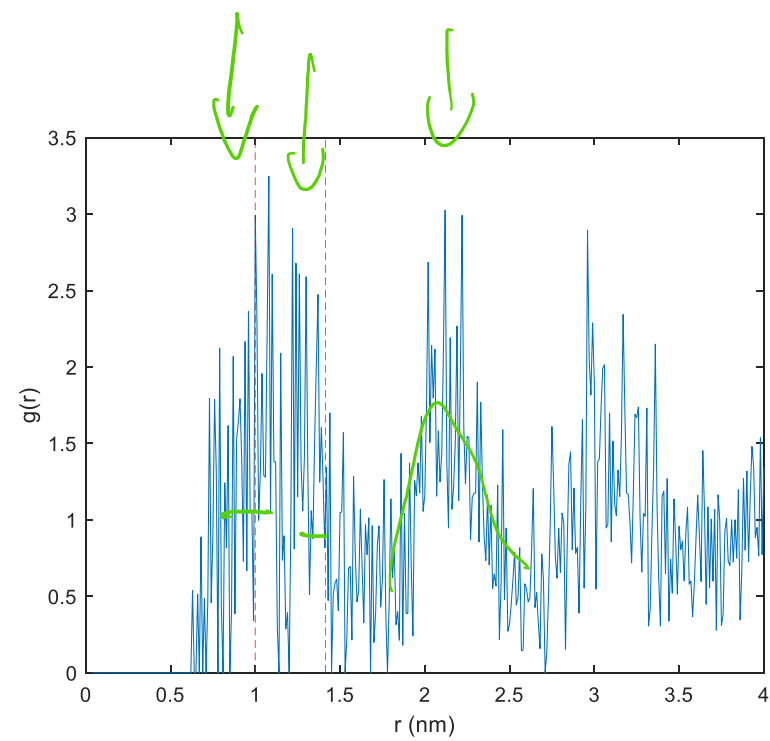
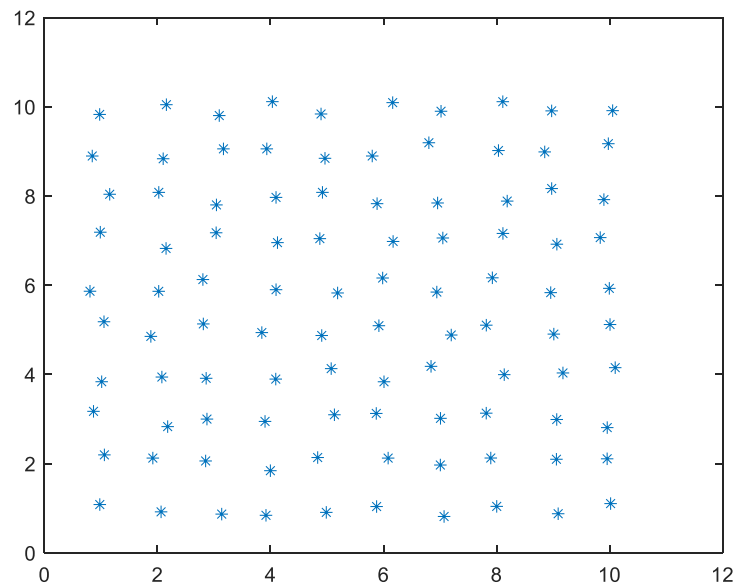
Reseau Cubique,  $a = 1 \text{ nm}$

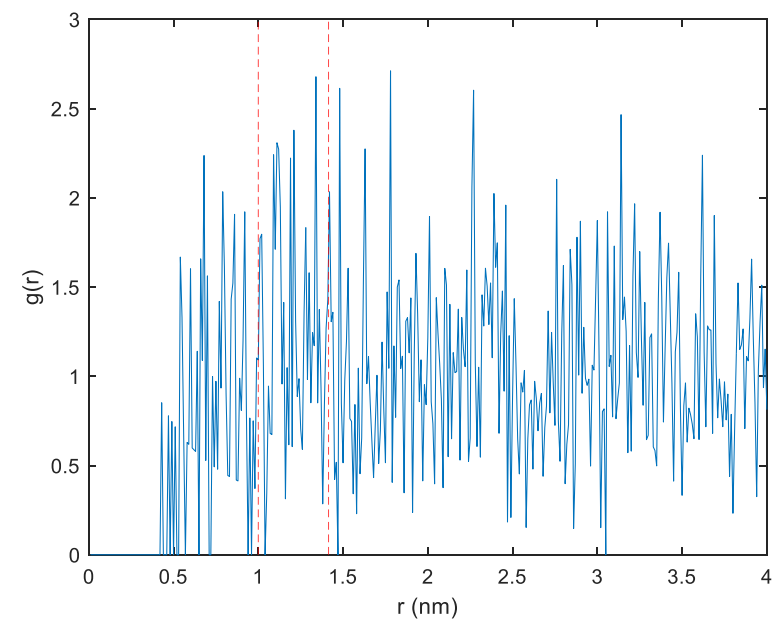
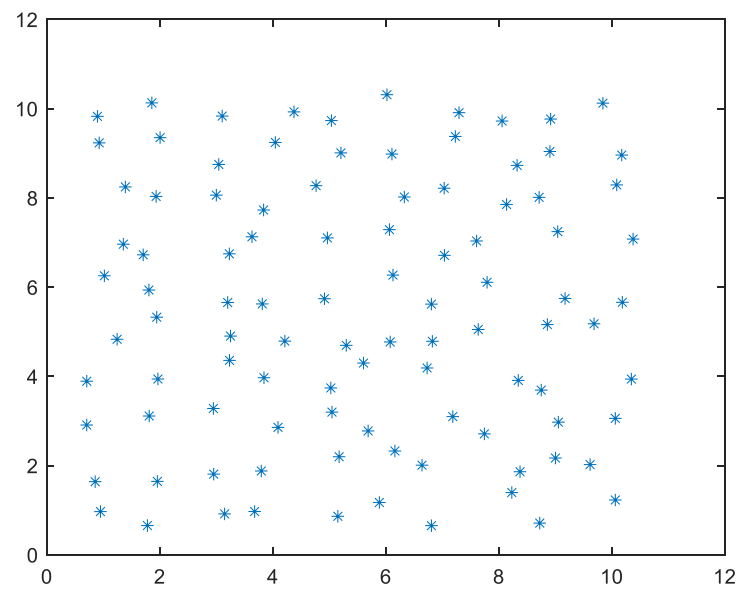






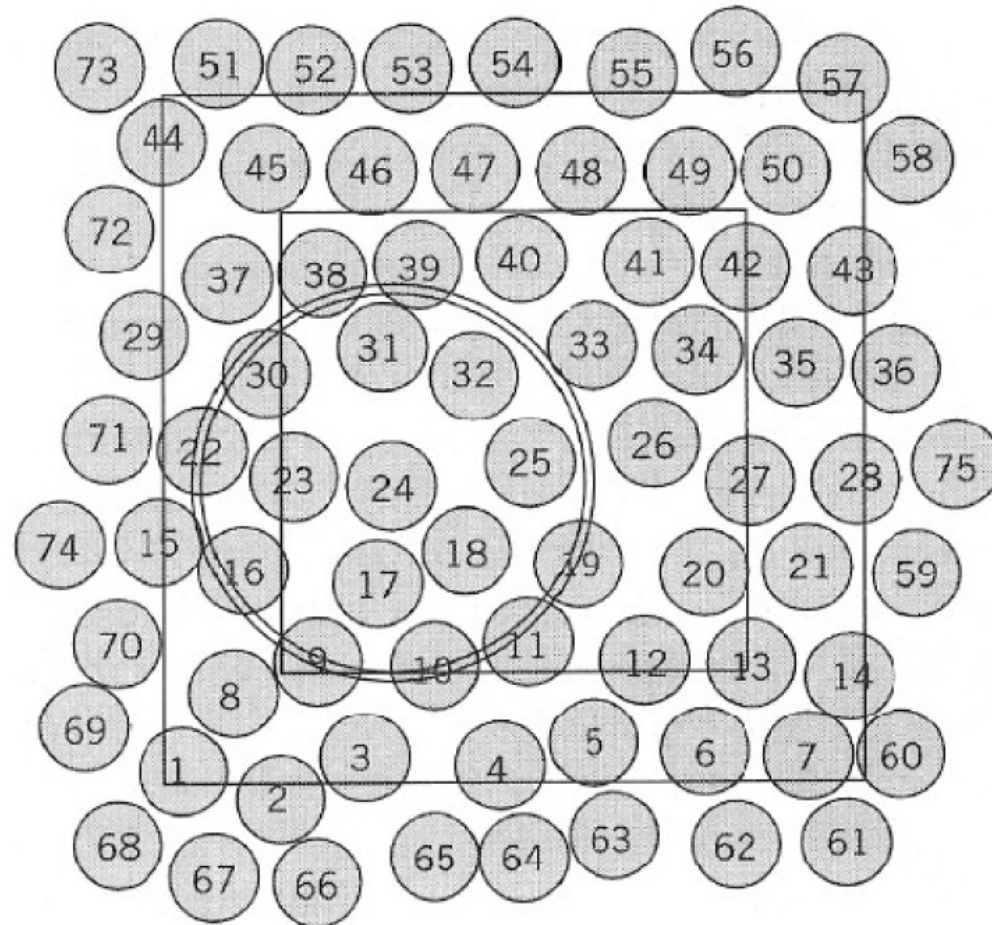






$$g(r) = \frac{1}{\langle \rho \rangle} \frac{dn(r, r+dr)}{dv(r, r+dr)}$$

Fonction de distribution de paires



# États Liquide, Solide et Gazeux

---



# États Liquide, Solide et Gazeux

---

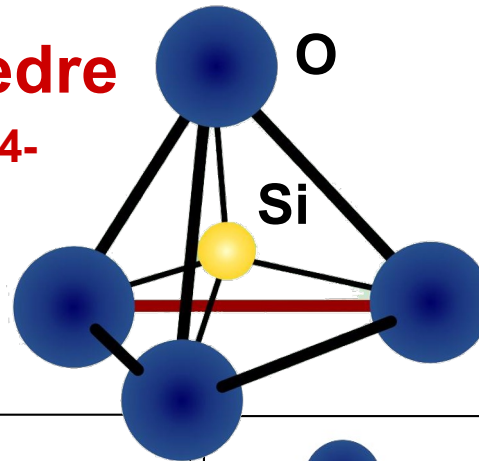
# Matériaux amorphes

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.



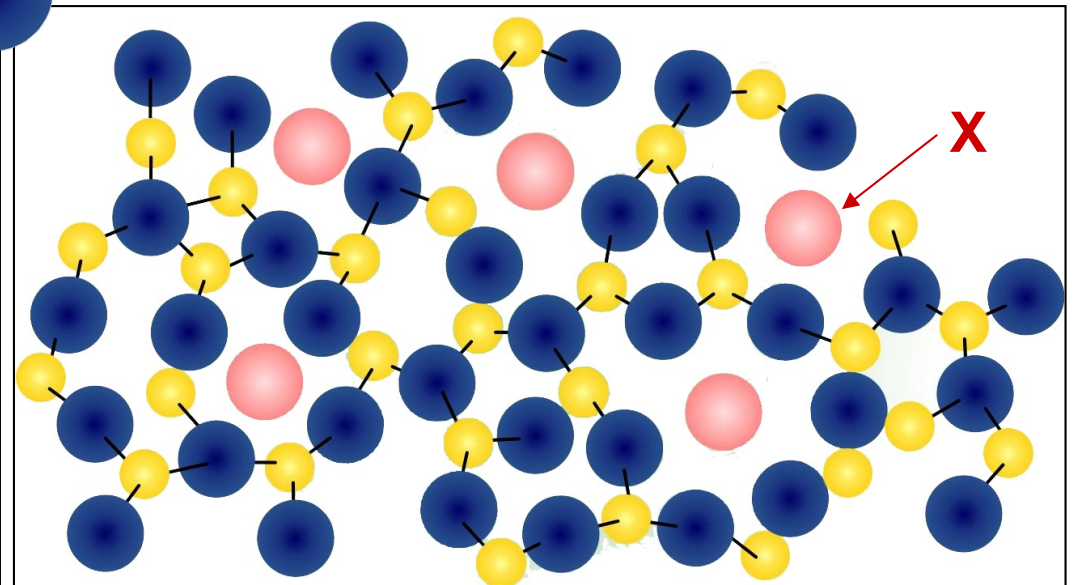
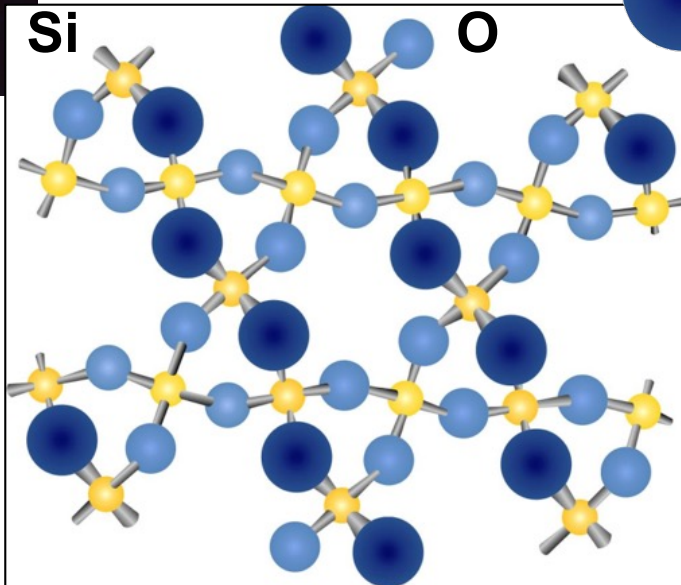
**Quartz**

**Tétraèdre**  
**( $\text{SiO}_4$ )<sup>4-</sup>**



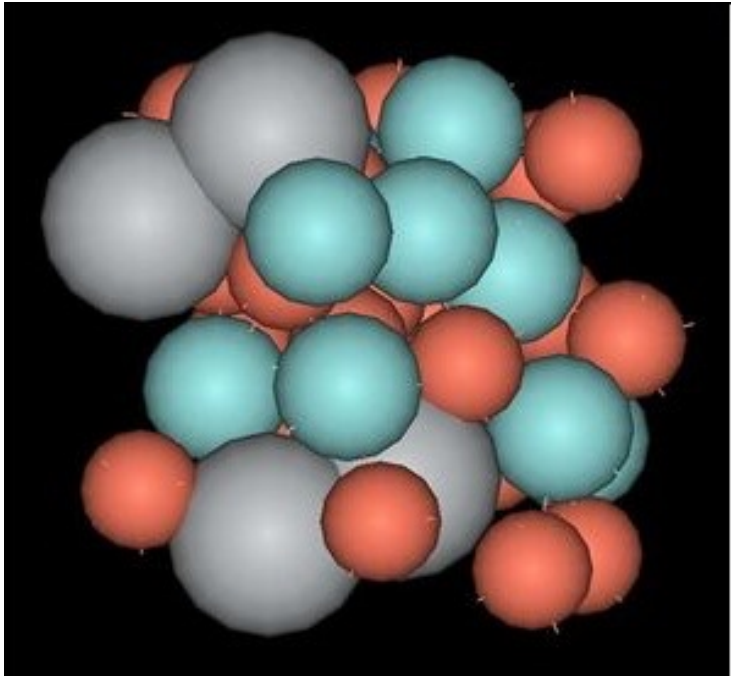
**Verre**

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



# Matériaux amorphes

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).



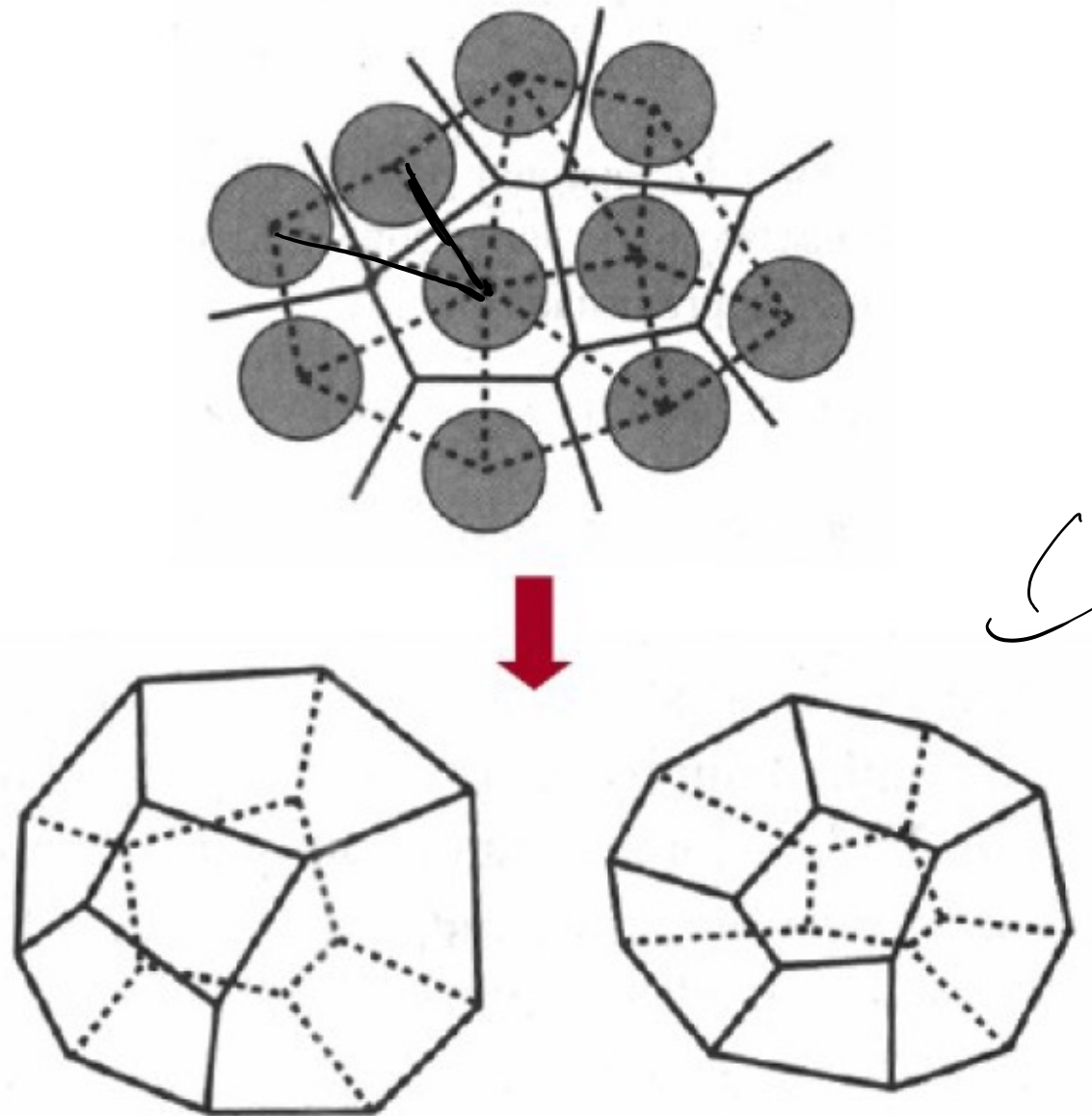
Structure simulée d'un verre métallique à 3 composants

## Verre métallique

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

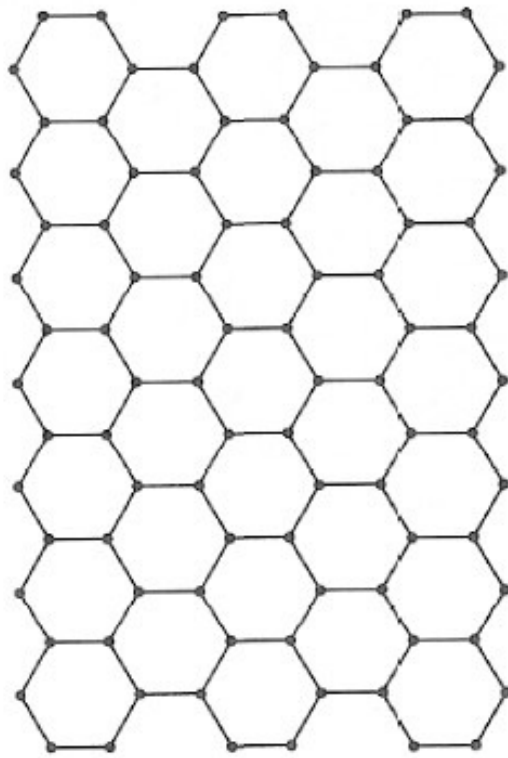
# Matériaux amorphes

---

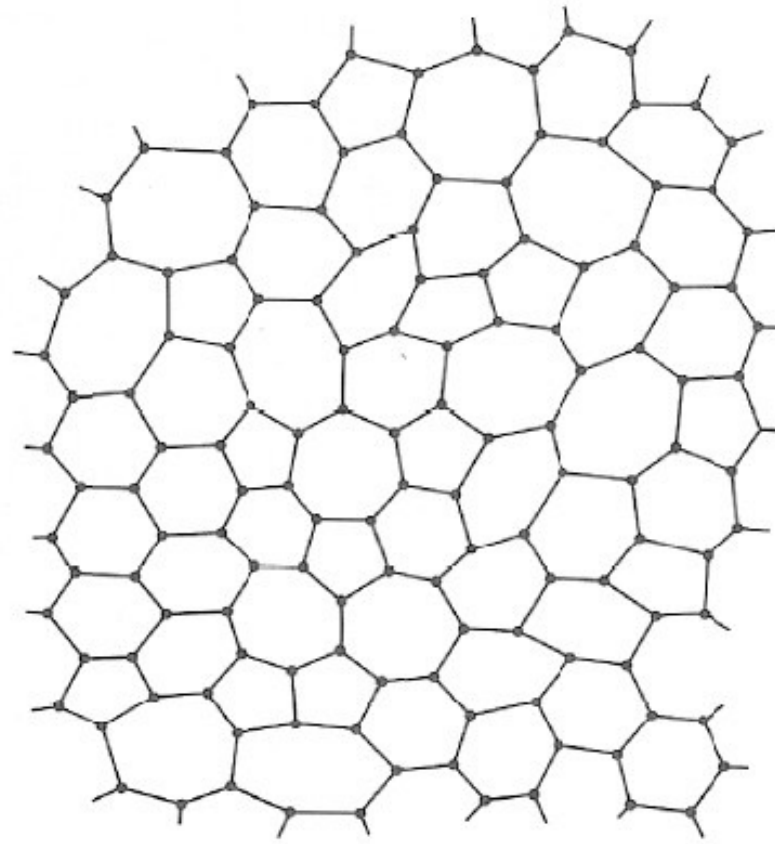


---

## Continuous Random Networks

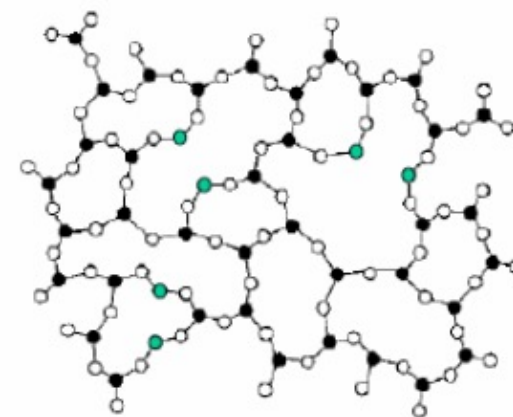
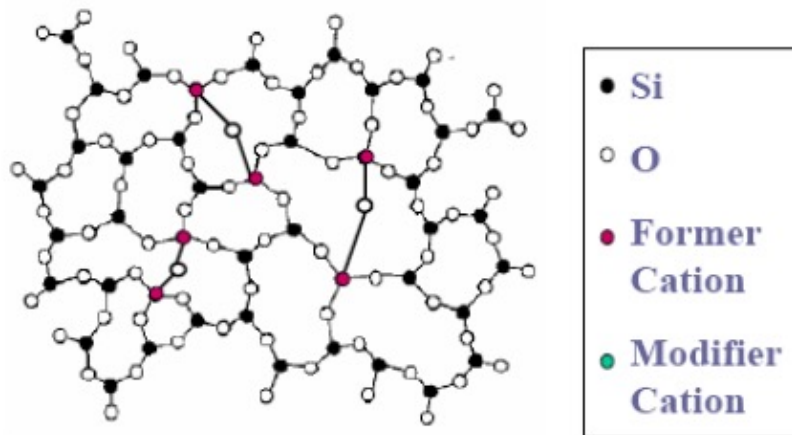
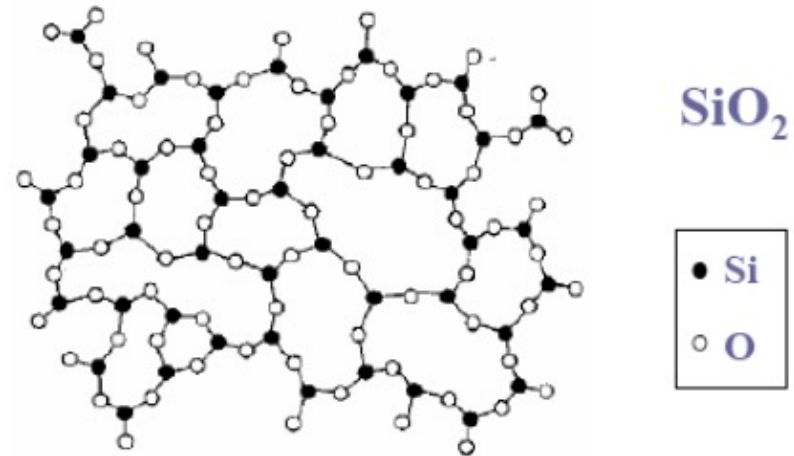


(a)



(b)







# Etats des corps solides

Les matériaux peuvent se présenter sous:

- Une **forme vitreuse**



Vitrail et verre  
(mélange de silice + autres oxydes)



- Une **forme cristalline**



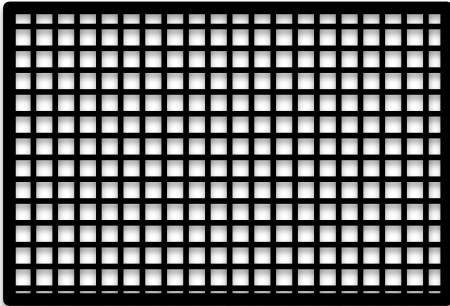
Résonateur en quartz (silice),  
quartz et cuillère en inox



# L'état cristallin

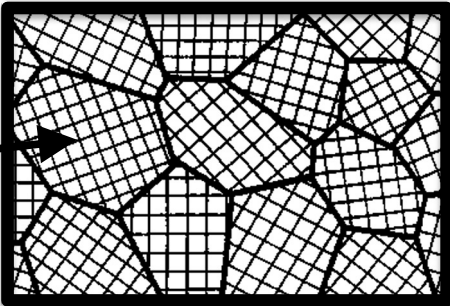
---

Monocristal



Polycristal

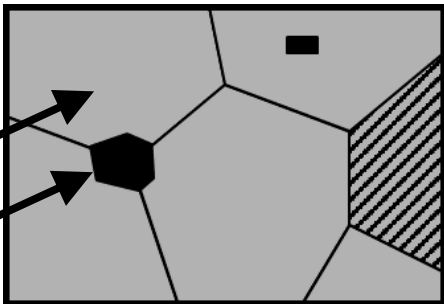
grains



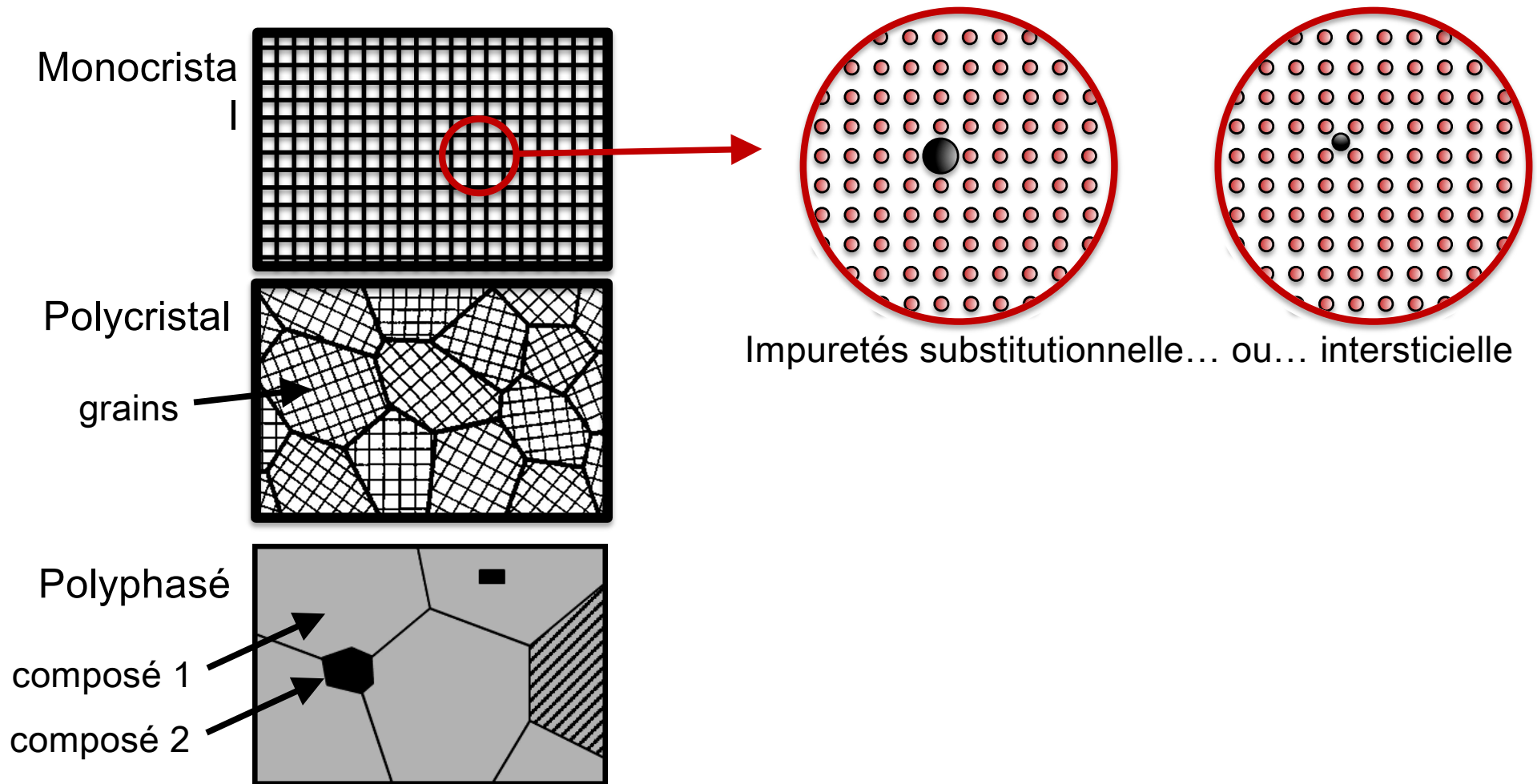
Polyphasé

composé 1

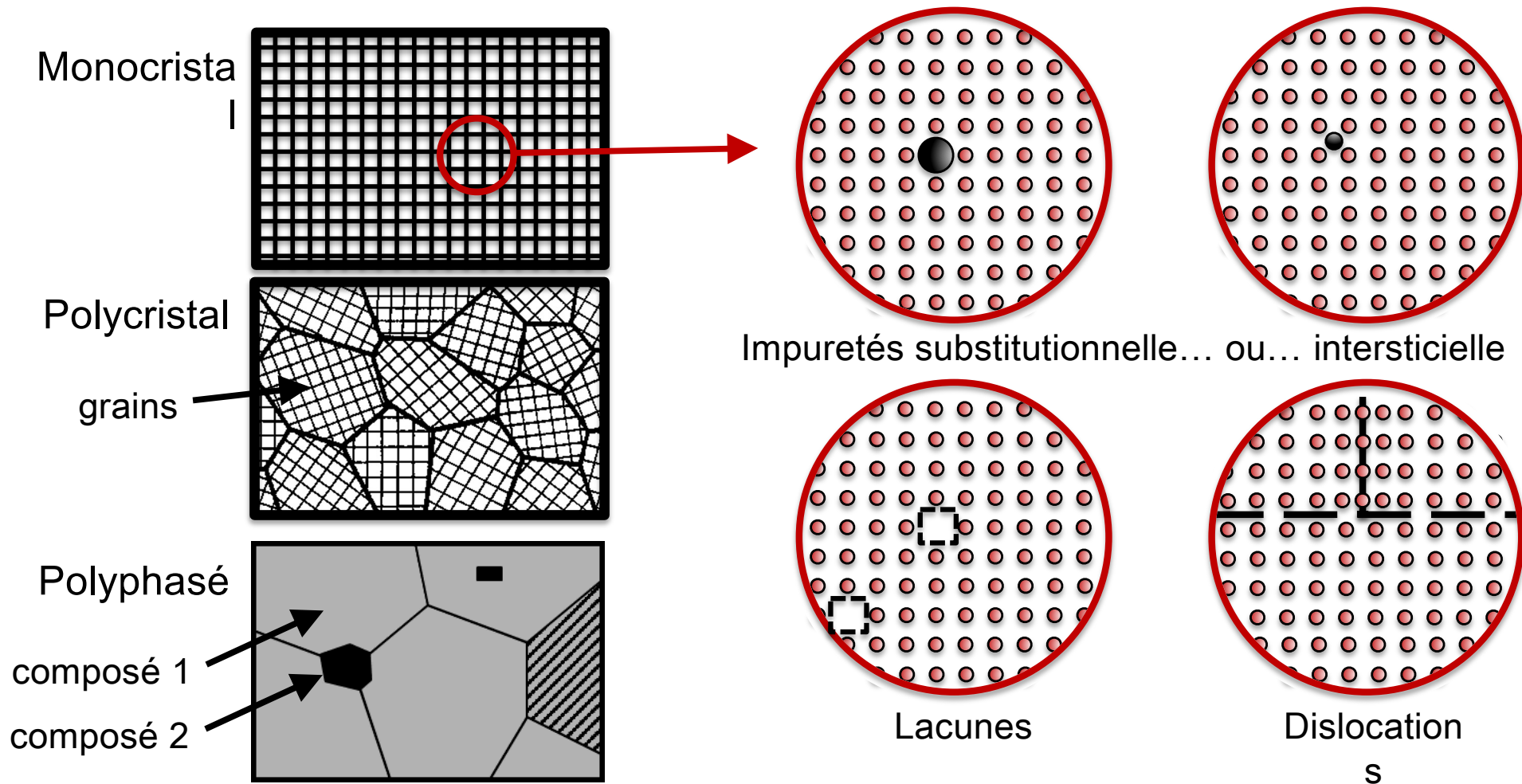
composé 2



# L'état cristallin

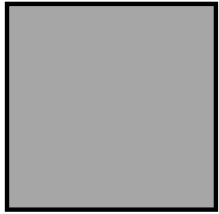


# L'état cristallin

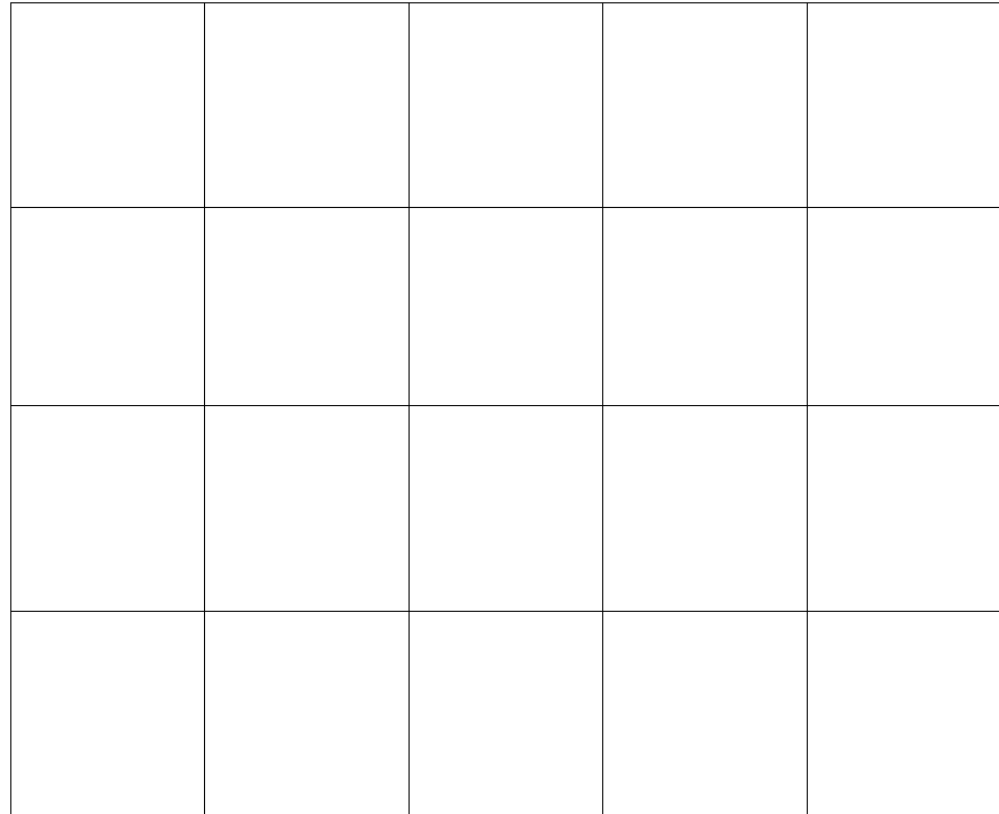


# Réseau cristallin et motif

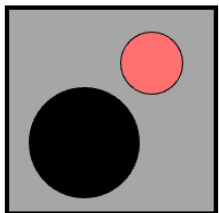
---



Marquage du mur  
compatible avec la  
forme de la catelle

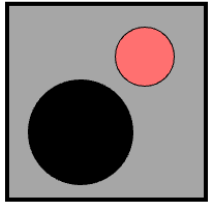


Réseau cristallin

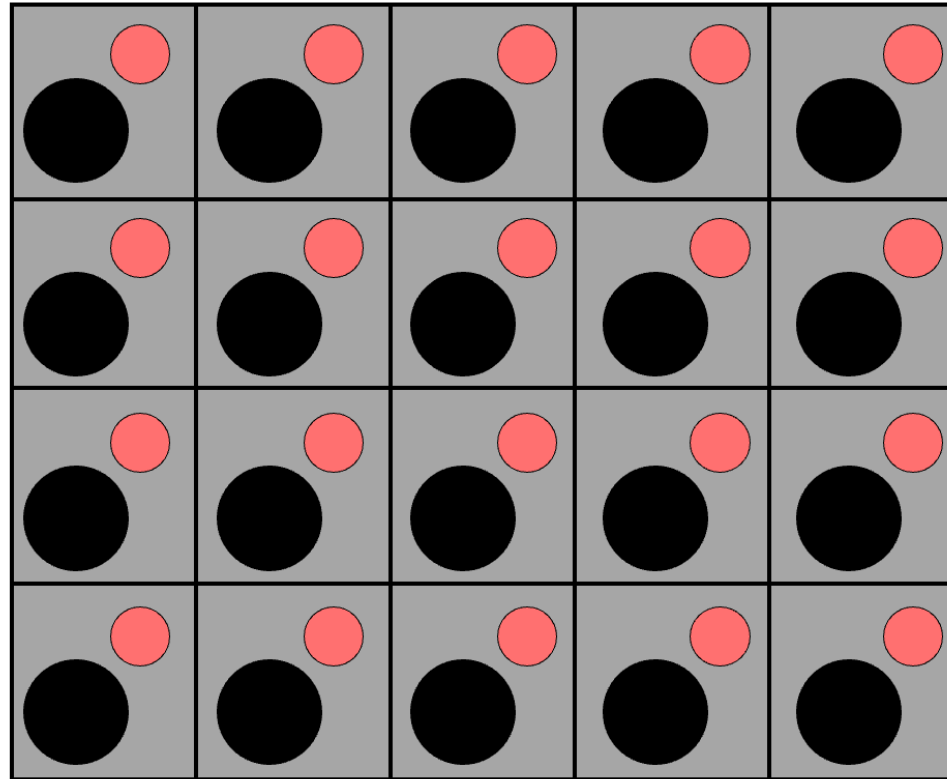


Choix du motif de  
la catelle

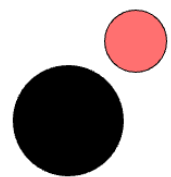

Motif



Pose des catelles



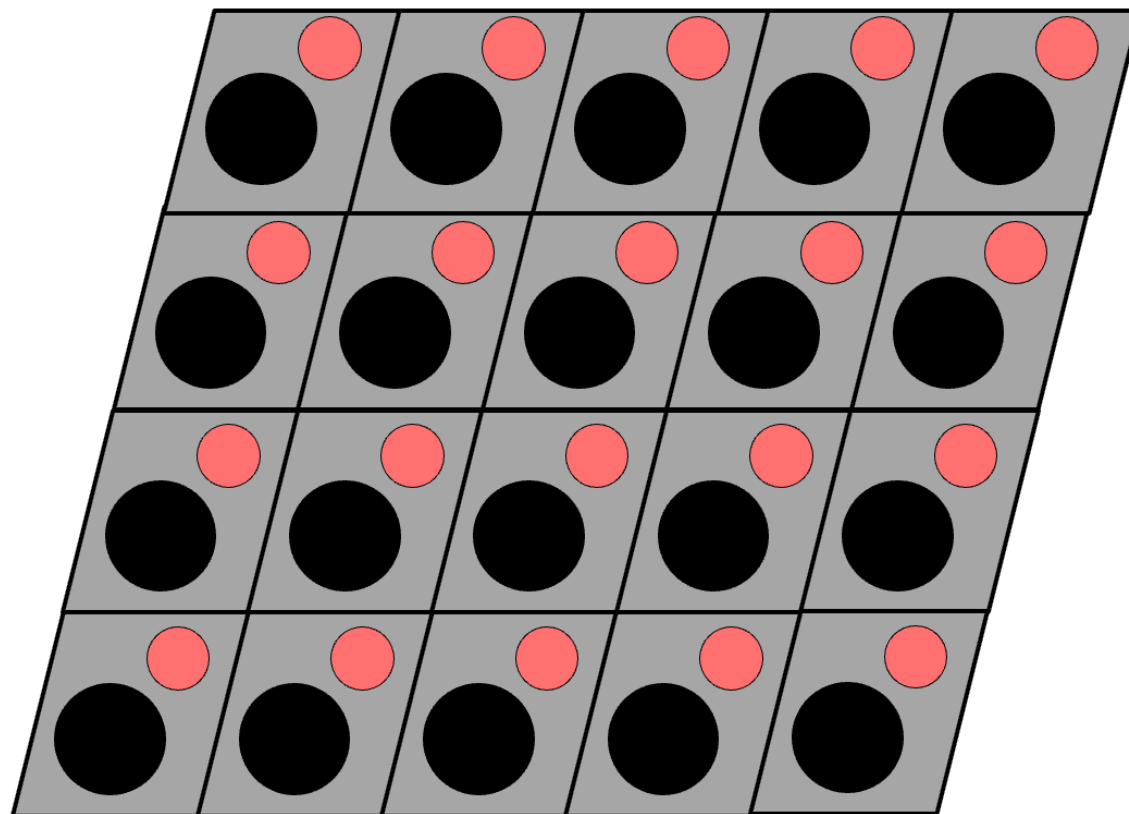
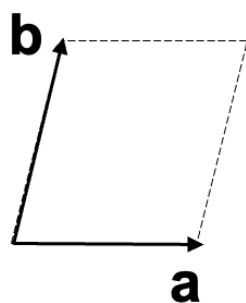
Cristal  
=  
Réseau  
cristallin  
+  
Motif



Même motif

+

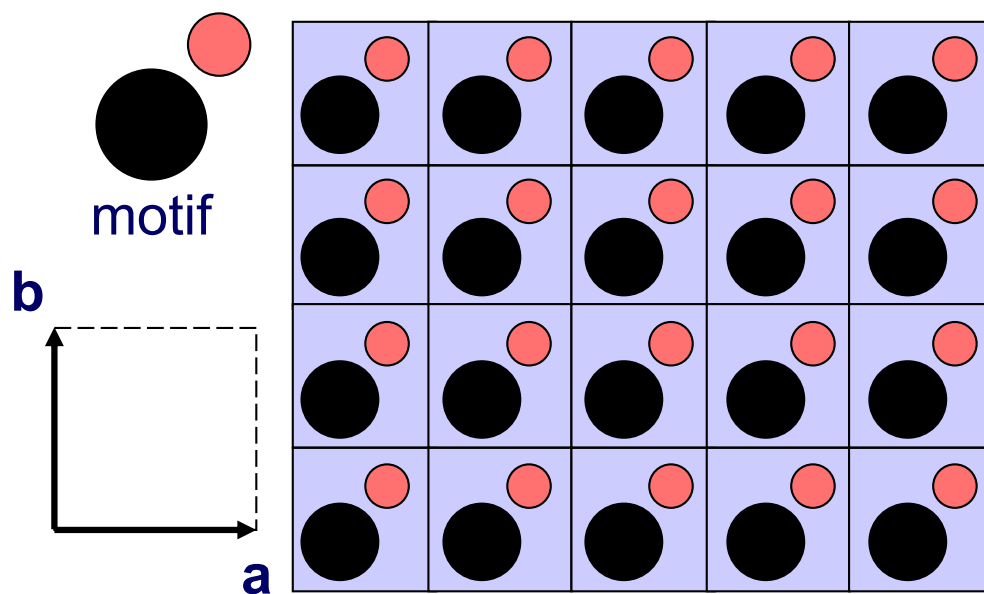
Réseau losange



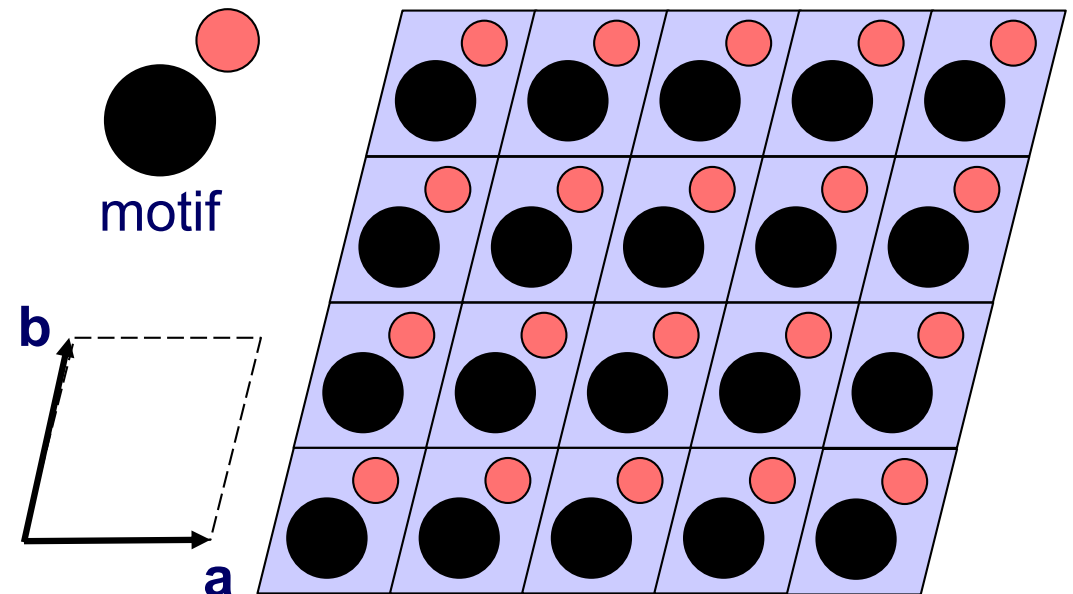


# Etat cristallin

Contrairement à la phase amorphe où les atomes sont désordonnés (à longue distance), le cristal est **ordonné**. Il est décrit par un **motif**, constitué d'atomes, que l'on répète à chaque nœud d'un **réseau cristallin**.



réseau carré de carrelage

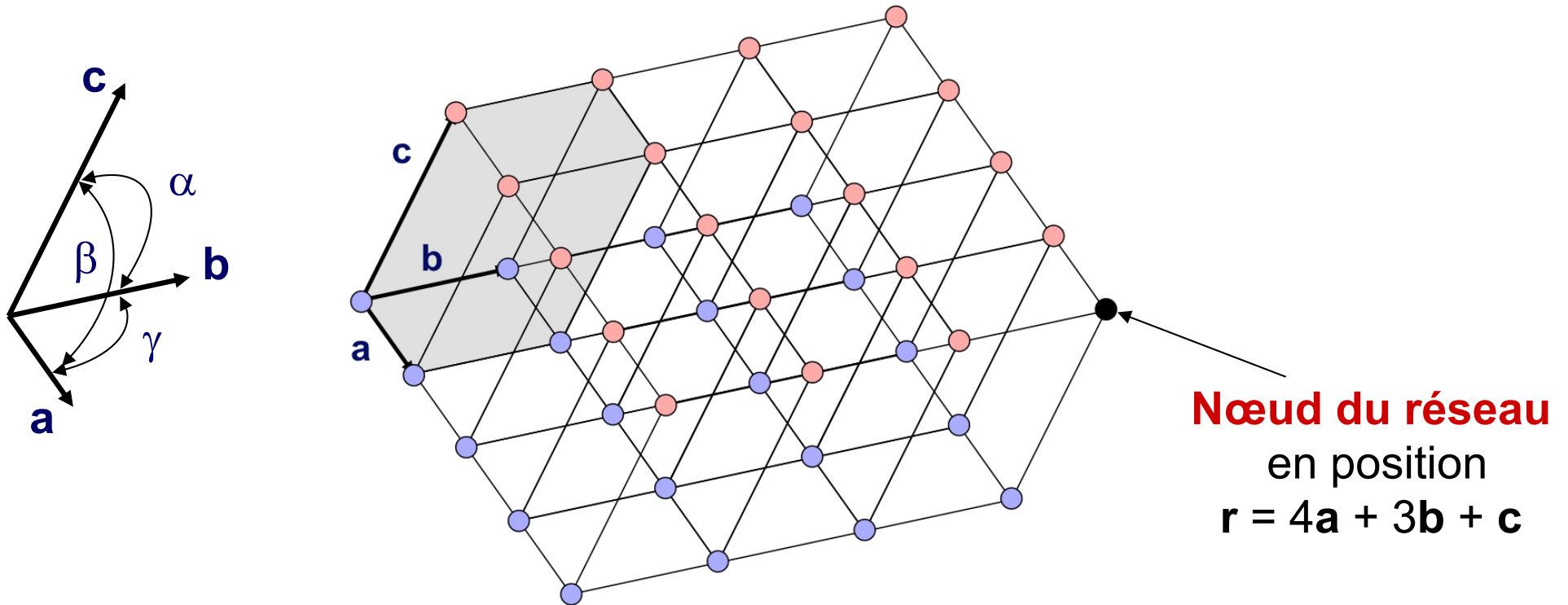


réseau losange de carrelage

Ainsi, un carrelage à 2 dimensions peut être un "réseau" carré ou en losange. Chaque carreau porte un motif, ici 2 cercles ("atomes") rose et noir.

# Etat cristallin

Un **réseau cristallin** à 3 dimensions, il faut donc donner 3 vecteurs **a**, **b** et **c** de telle sorte à répéter une **maille** dans l'espace



Sur chaque nœud du réseau, le cristal apparaît exactement identique

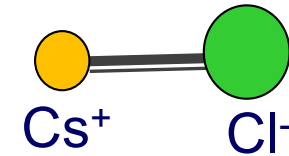
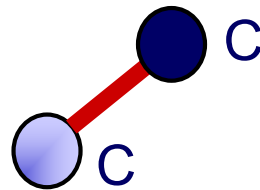
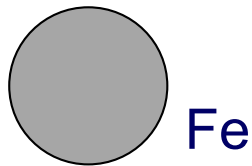
On dit qu'il y a une invariance par translation le long des trois vecteurs **a**, **b** et **c**

# Etat cristallin

On distingue **7 systèmes cristallins**, reflétant la symétrie du cristal, et **14 réseaux de Bravais** (voir diapositive suivante).

**Un cristal = Motif + un réseau de Bravais**

**Motif:** représente la nature du matériau, l'entité chimique à répéter dans l'espace pour former le crystal (atome(s), molécules...)



**Réseau de Bravais:** construction mathématique d'un ensemble infini de points invariant par translation selon trois axes non colinéaires appelés vecteurs de bases.

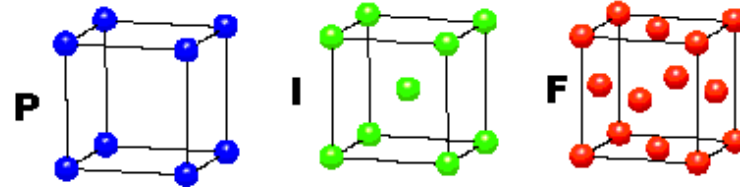
$$B(O, \vec{a}, \vec{b}, \vec{c}) = \{M / \overrightarrow{OM} = l\vec{a} + m\vec{b} + n\vec{c}, (l, m, n) \in \mathbb{Z}^3\}$$

# Etat cristallin

Cubique

$$a = b = c$$

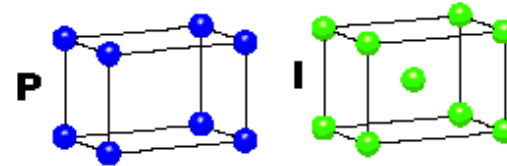
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Tétragonal

$$a = b \neq c$$

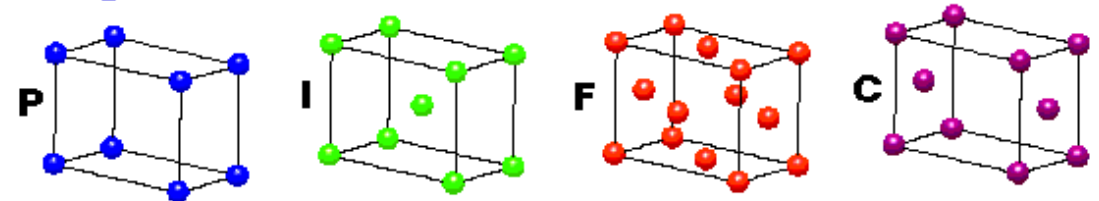
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Orthorhombique

$$a \neq b \neq c$$

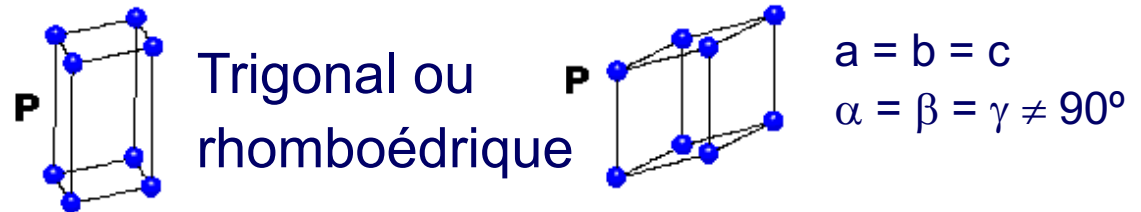
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Hexagonal

$$a = b \neq c$$

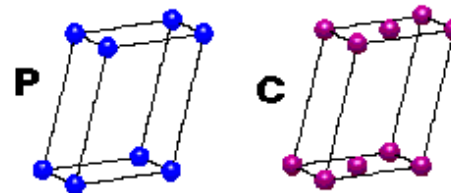
$$\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$$



Monoclinique

$$a \neq b \neq c$$

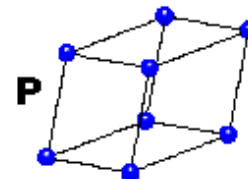
$$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$$



Triclinique

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma$$



7 classes / 14 Bravais

P : primitif

I : centré

F : faces centrées

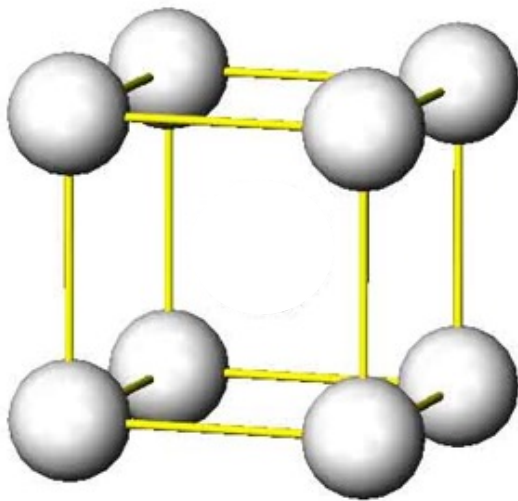
C : bases centrées

# Etat cristallin

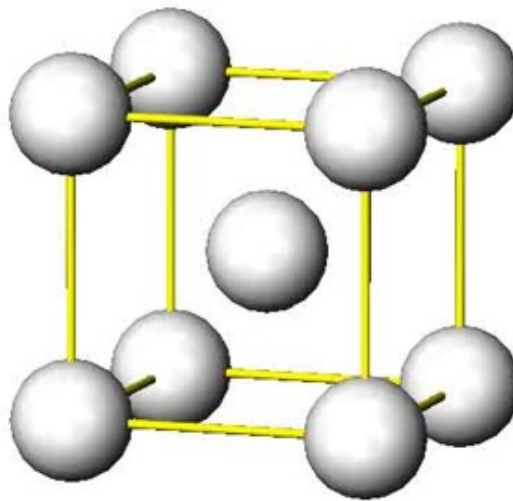
---

On distingue **7 systèmes cristallins**, reflétant la symétrie du cristal, et **14 réseaux de Bravais** (ou réseau cristallin, voir diapositive précédente).

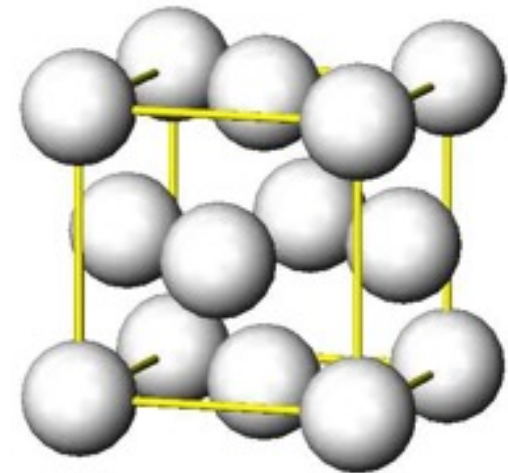
On ne considérera que le système cubique, qui a 3 réseaux de Bravais possibles:



Cubique simple

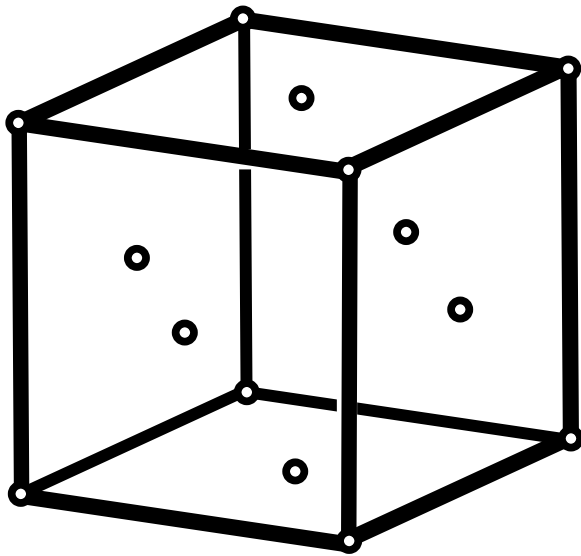


Cubique centré



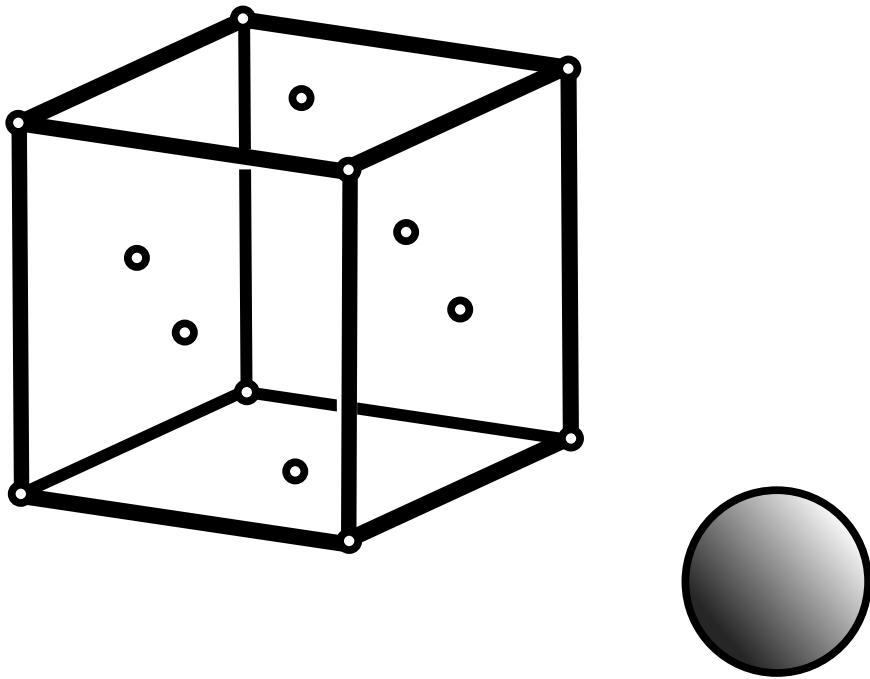
Cubique à faces centrées

# Réseau cristallin et motif



Réseau cfc

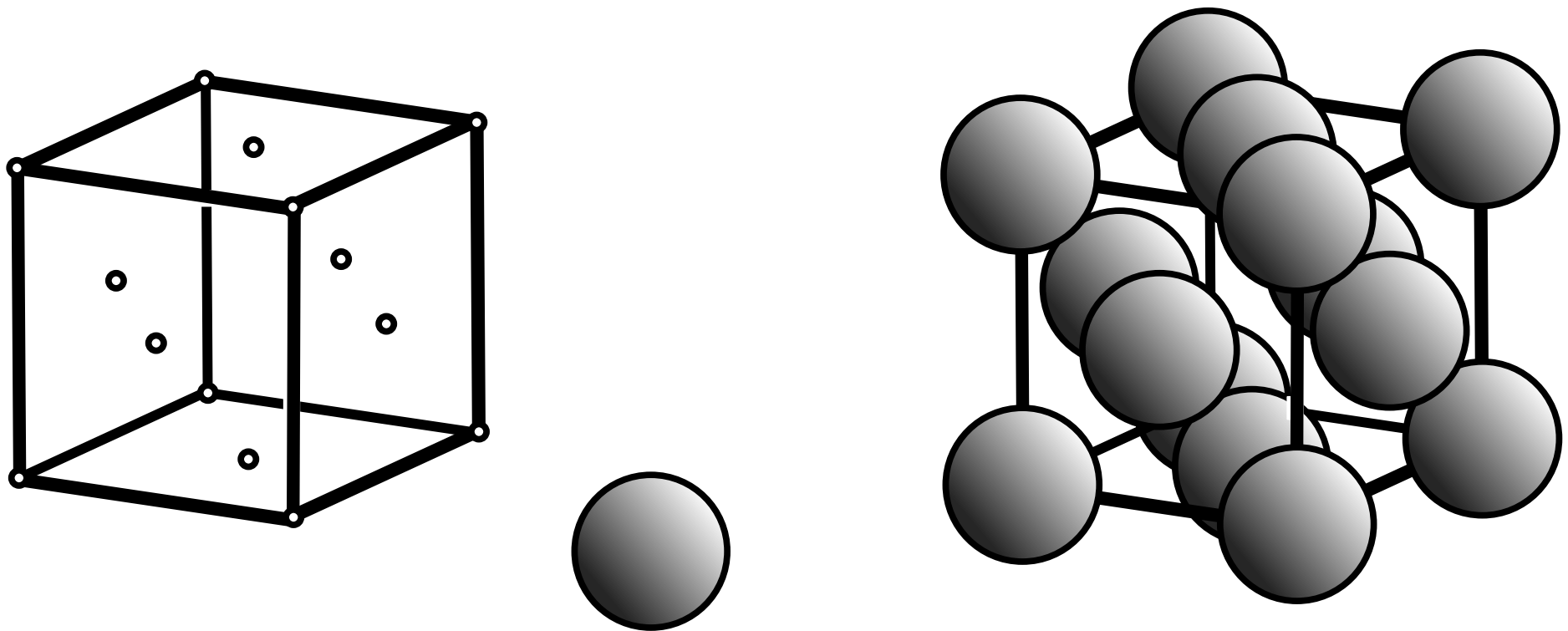
# Réseau cristallin et motif



Réseau cfc + motif simple (1 atome Al)

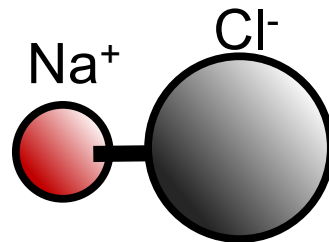
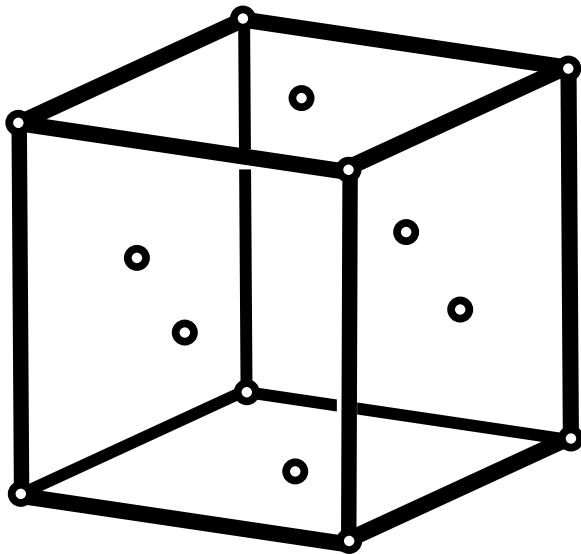


# Réseau cristallin et motif



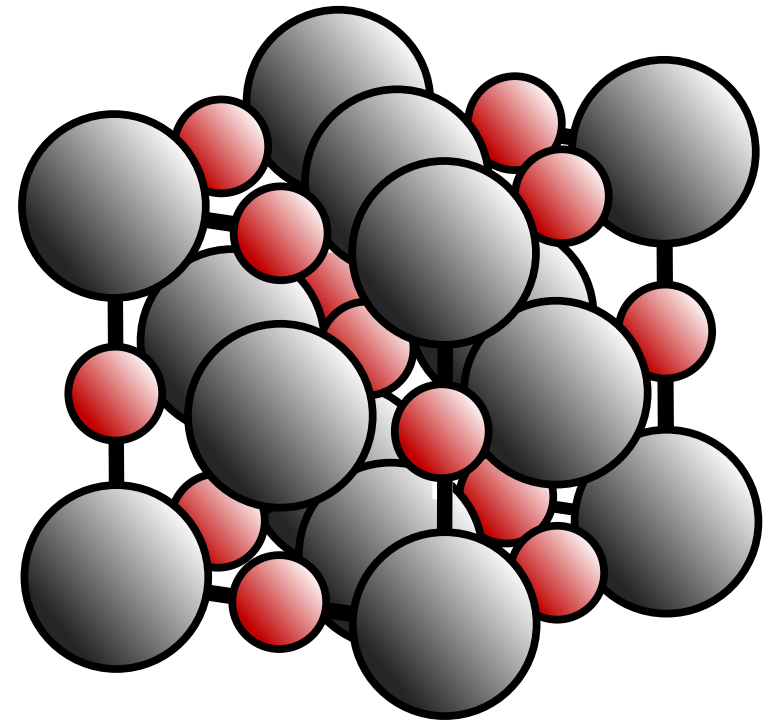
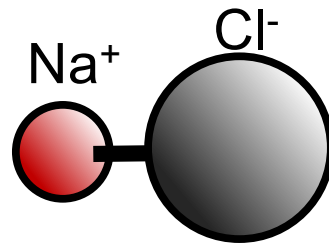
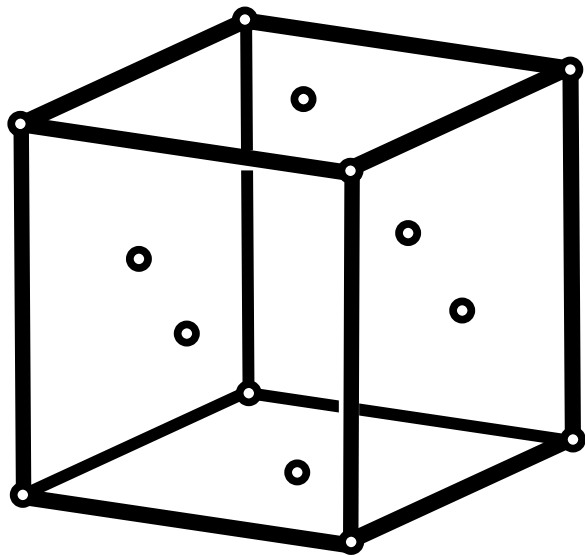
Réseau cfc + motif simple (1 atome Al) = cristal d'aluminium

# Réseau cristallin et motif



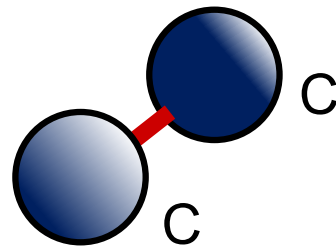
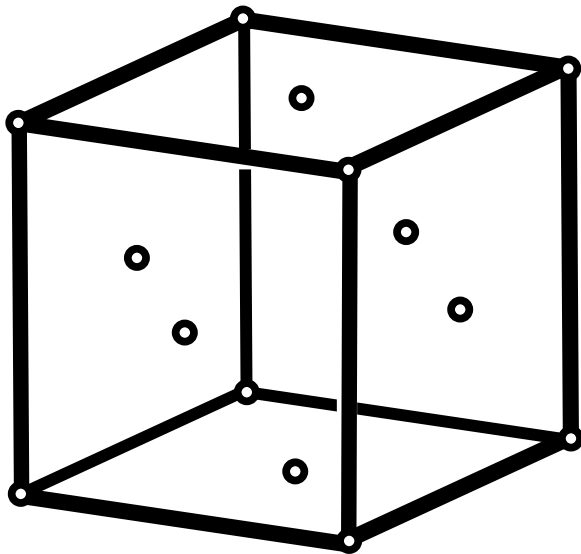
Réseau cfc + motif 1 molécule NaCl

# Réseau cristallin et motif



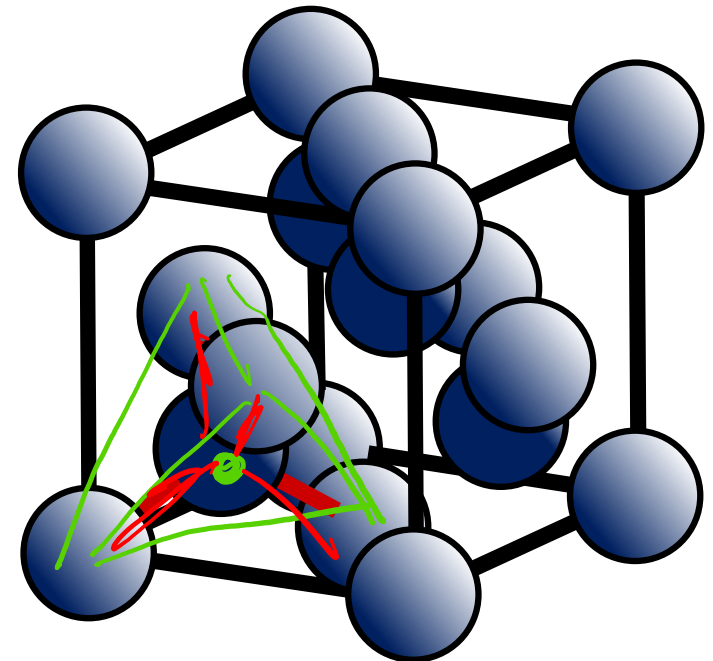
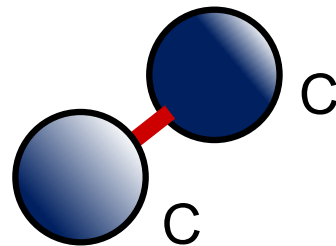
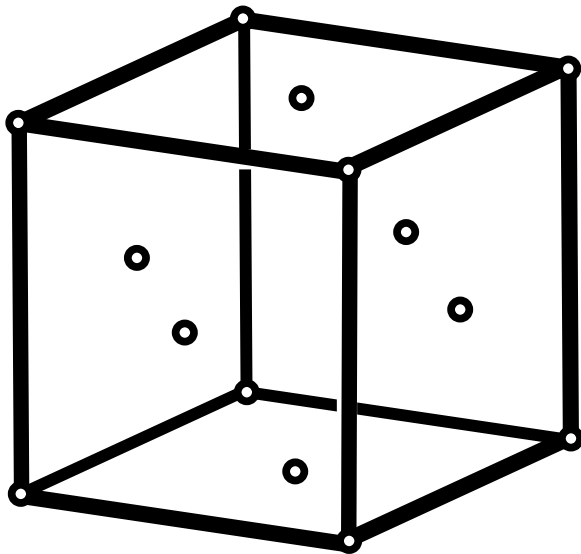
Réseau cfc + motif 1 molécule NaCl = cristal de sel

# Réseau cristallin et motif



Réseau cfc + motif 2 atomes de C

# Réseau cristallin et motif

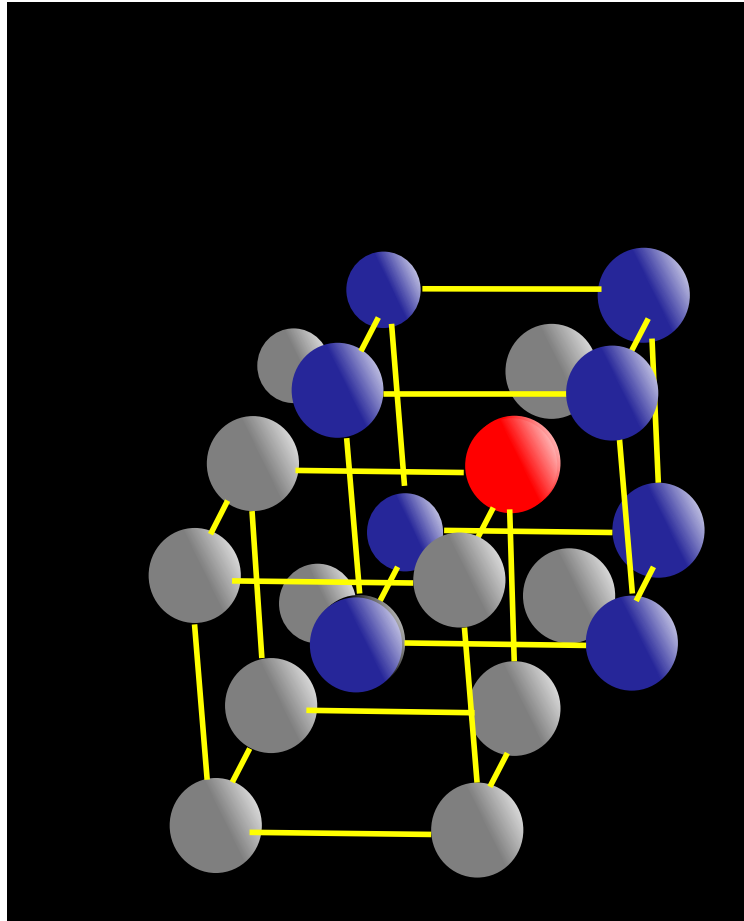


Réseau cfc + motif 2 atomes de C = structure du diamant

# Etat cristallin

---

Chaque point d'un réseau de Bravais a la même configuration autour de lui. Exemple pour la structure cubique centrée:

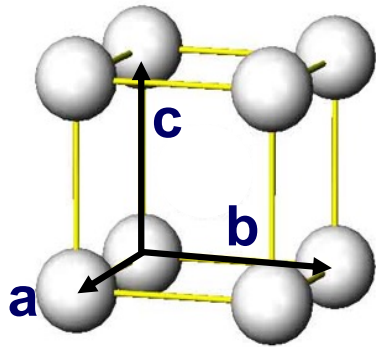


# Etat cristallin

**Un cristal = Motif + un réseau de Bravais (ou cristallin)**

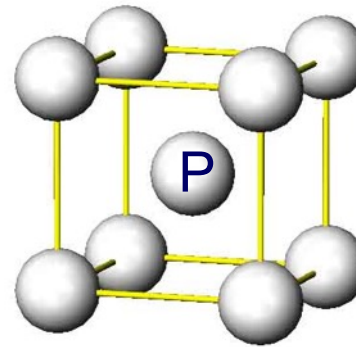
On représente les réseaux cubiques par la maille dite conventionnelle, qui représente la plus grande symétrie du système.

Les structures cubiques (simple, centré, faces centrées) appartiennent au même système cristallin, mais ont des réseaux de Bravais différents !



Cubique simple  
Réseau de Bravais:  
**(a,b,c)**

Dans le réseau (a,b,c), le point P a pour coordonnées  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ....



Cubique centré  
Réseau de Bravais:  
**(a',b',c')**

$$\begin{aligned}a' &= \frac{1}{2}(-a + \vec{b} + c) \\ \vec{b}' &= \frac{1}{2}(a - \vec{b} + c) \\ c' &= \frac{1}{2}(a + \vec{b} - c)\end{aligned}$$



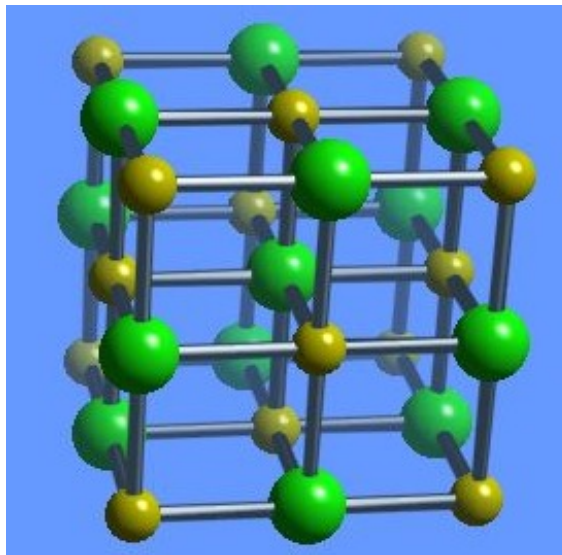
# Etat cristallin

3 exemples de même réseaux cristallins mais de motifs différents

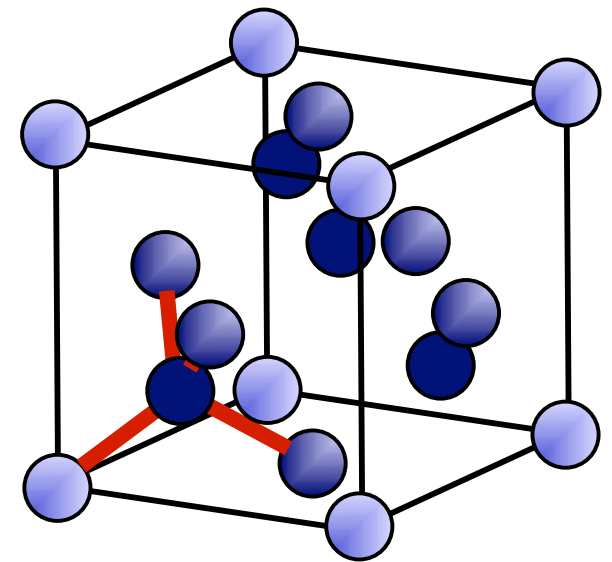
Réseau:



Aluminium



NaCl

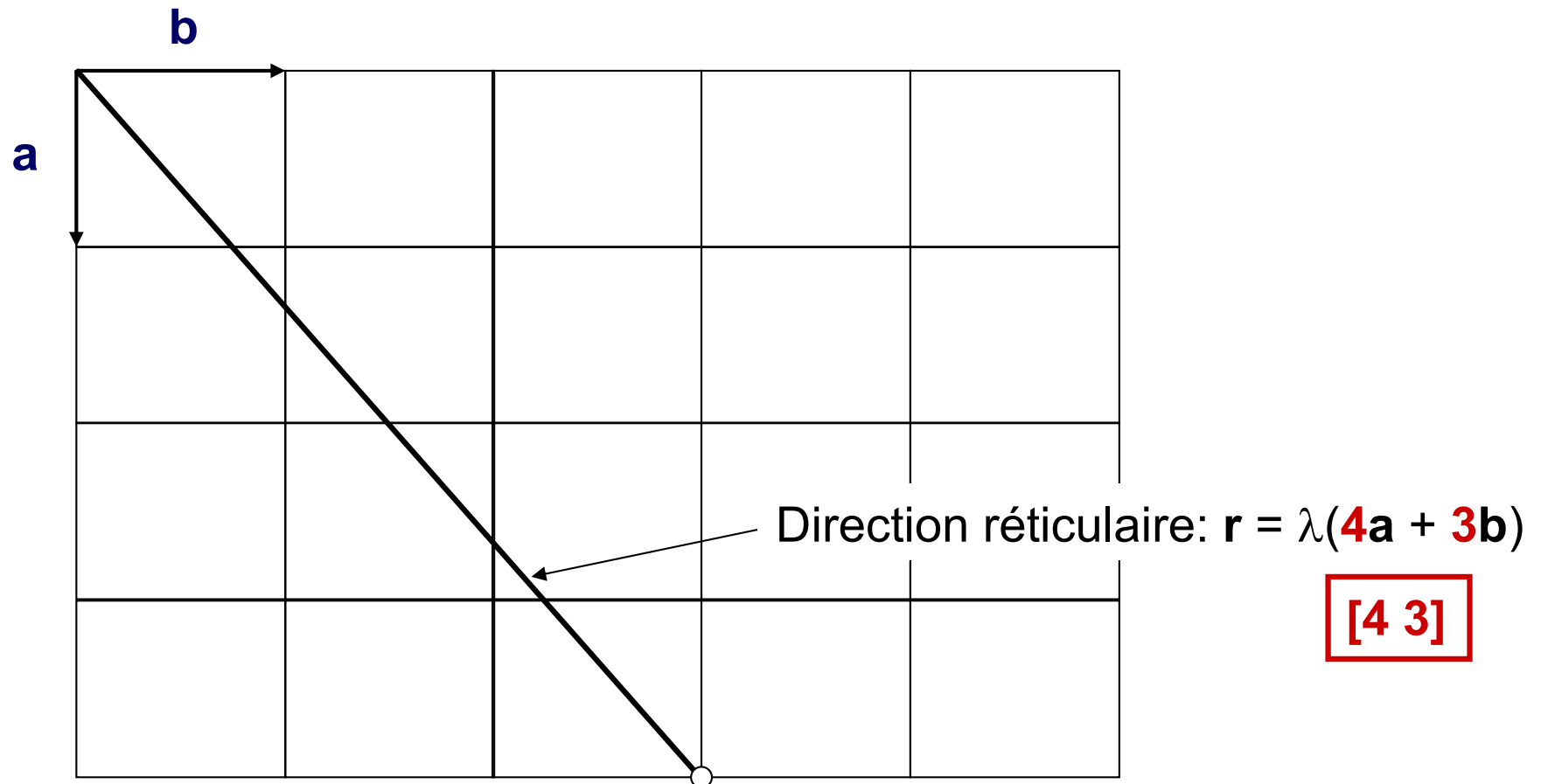


Diamant

Motifs:

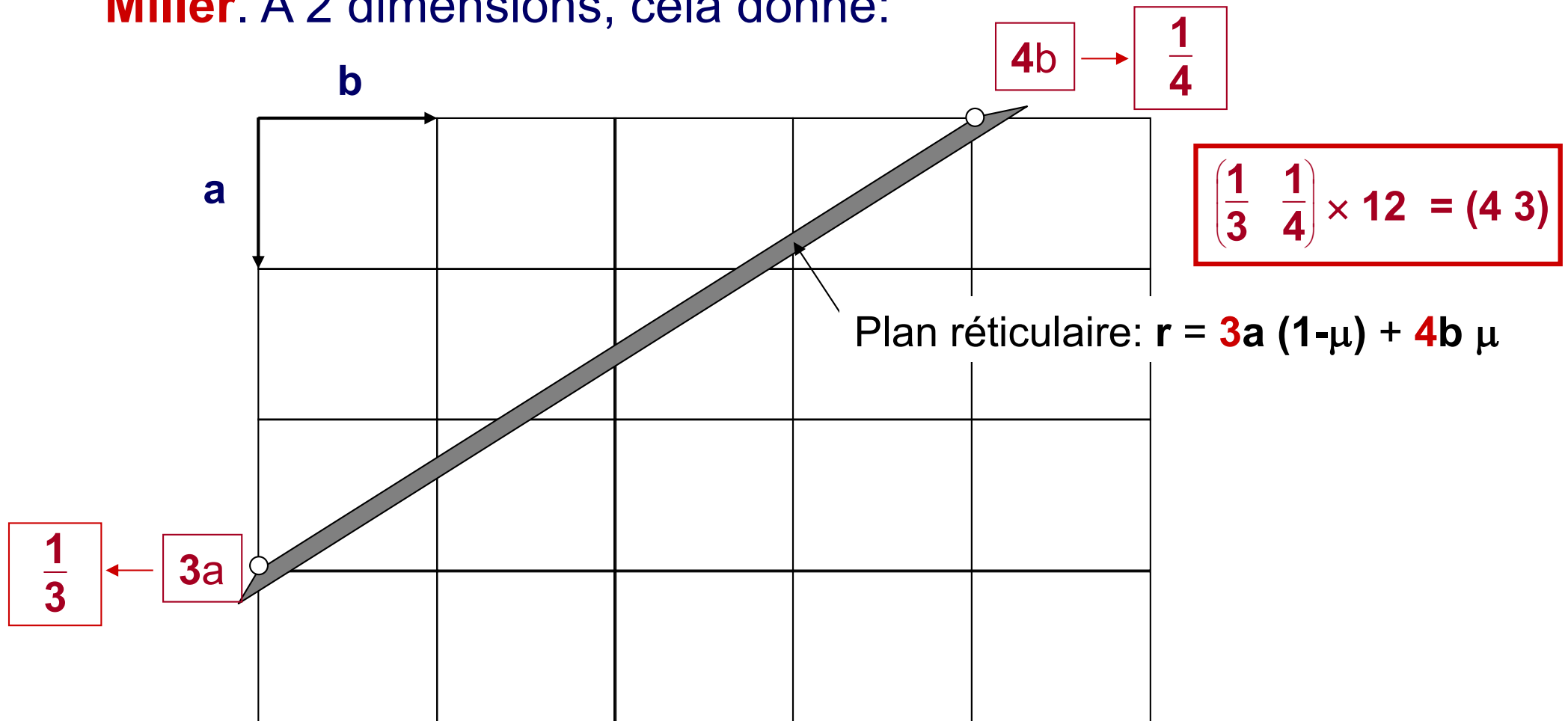
# Etat cristallin

Pour désigner une **direction réticulaire** et un **plan réticulaire** passant par des nœuds du réseau, on utilise les **indices de Miller**. A 2 dimensions, cela donne:



# Etat cristallin

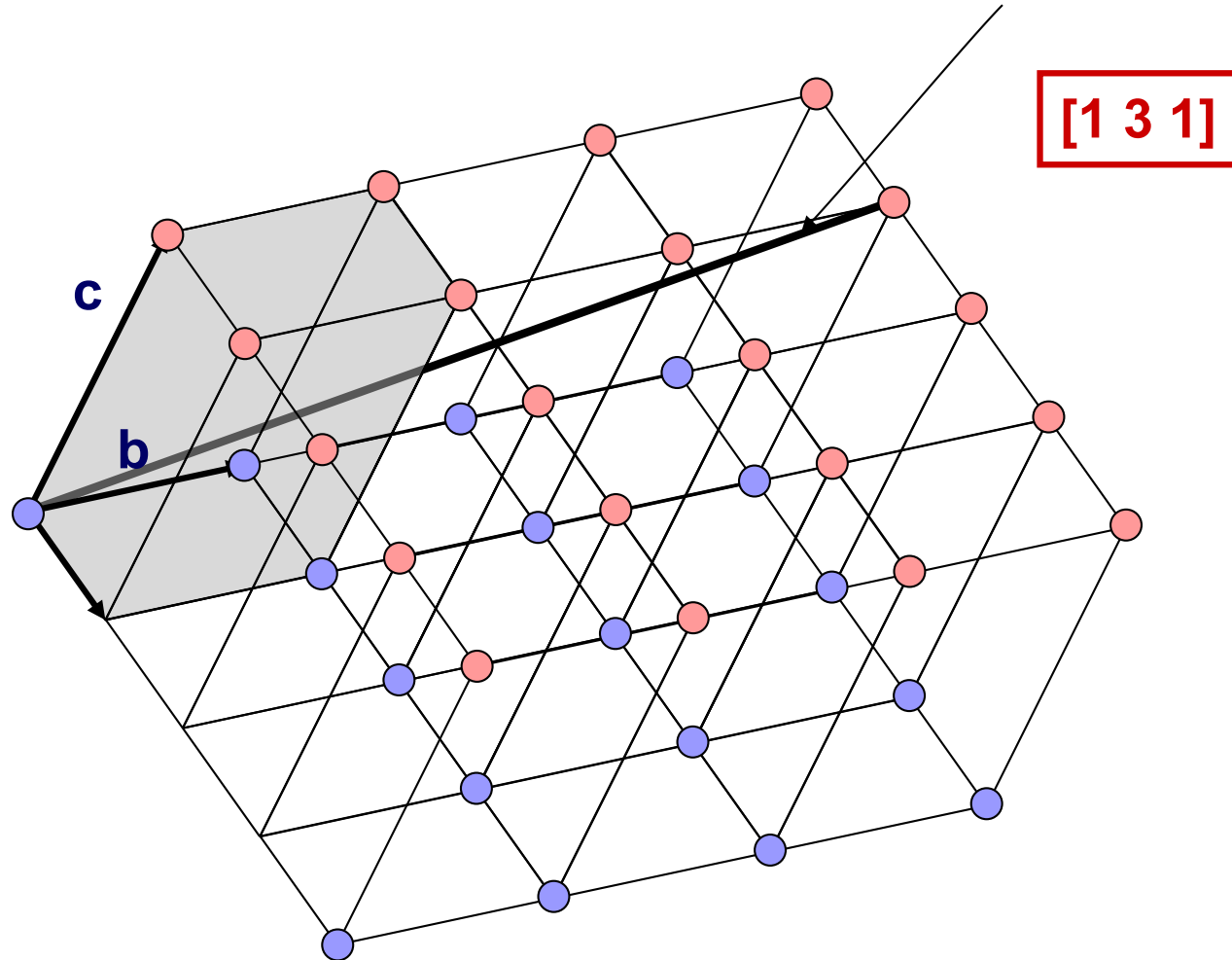
Pour désigner une **direction réticulaire** et un **plan réticulaire** passant par des nœuds du réseau, on utilise les **indices de Miller**. A 2 dimensions, cela donne:



# Etat cristallin

A 3 dimensions, on obtient:

Direction réticulaire:  $\mathbf{r} = \lambda(\mathbf{1a} + \mathbf{3b} + \mathbf{1c})$

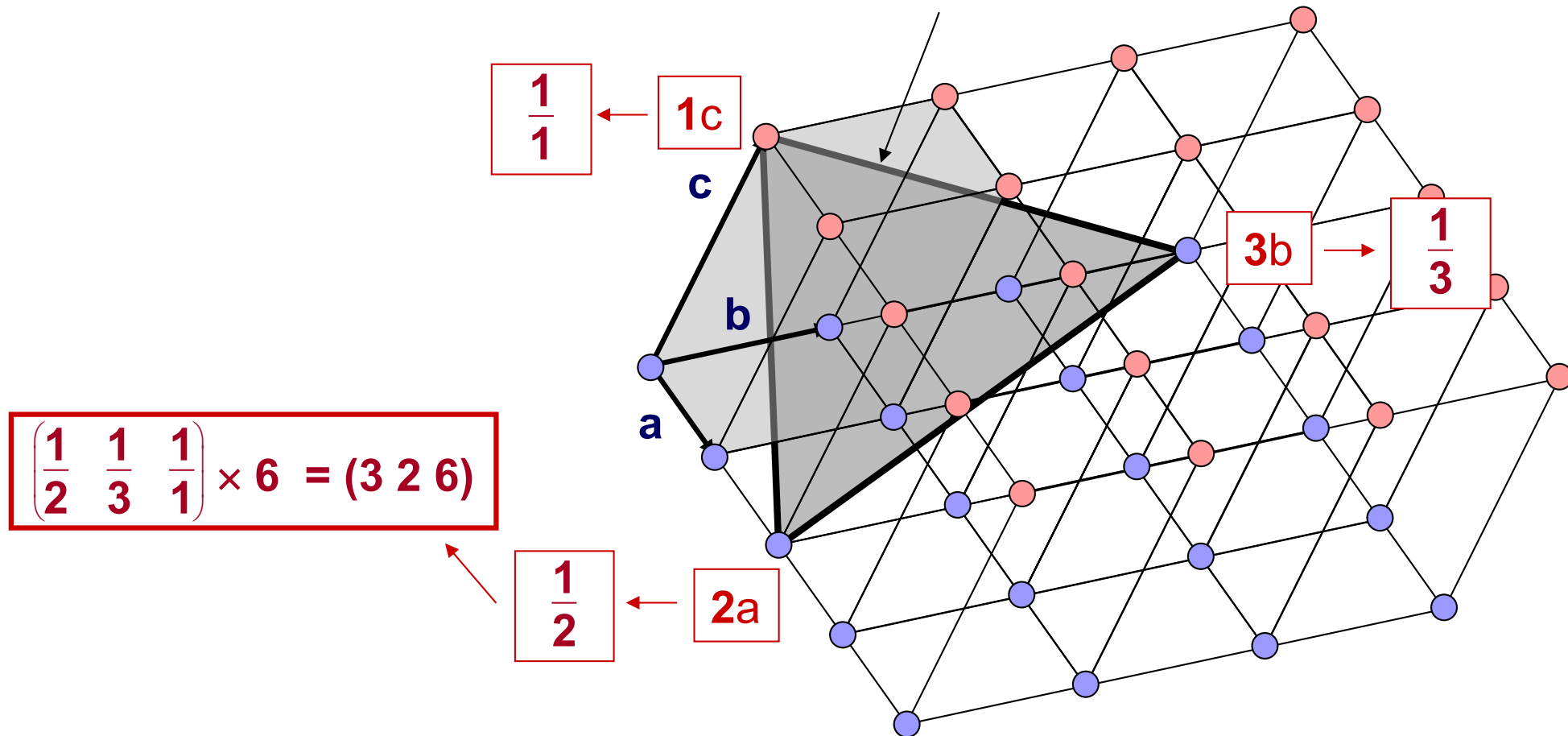


Pour les systèmes cubiques, une droite  $[hkl]$  est perpendiculaire à un plan  $(hkl)$ .  
Attention: ce n'est pas valable pour les autres systèmes.

# Etat cristallin

A 3 dimensions, on obtient: Plan réticulaire:

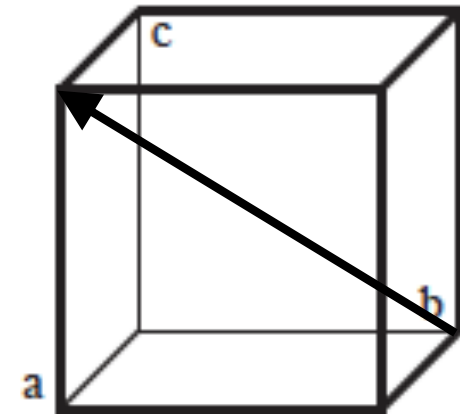
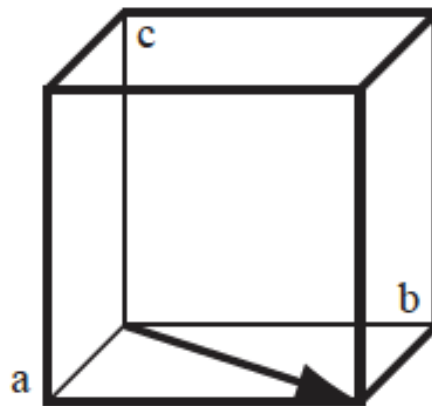
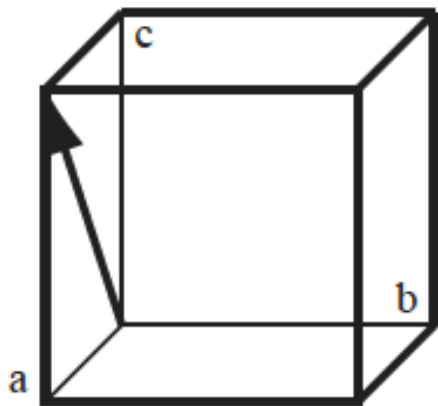
$$\mathbf{r} = 2\mathbf{a} + \lambda(3\mathbf{b} - 2\mathbf{a}) + \mu(\mathbf{c} - 2\mathbf{a})$$



Pour les systèmes cubiques, une droite  $[hkl]$  est perpendiculaire à un plan  $(hkl)$ .  
Attention: ce n'est pas valable pour les autres systèmes.

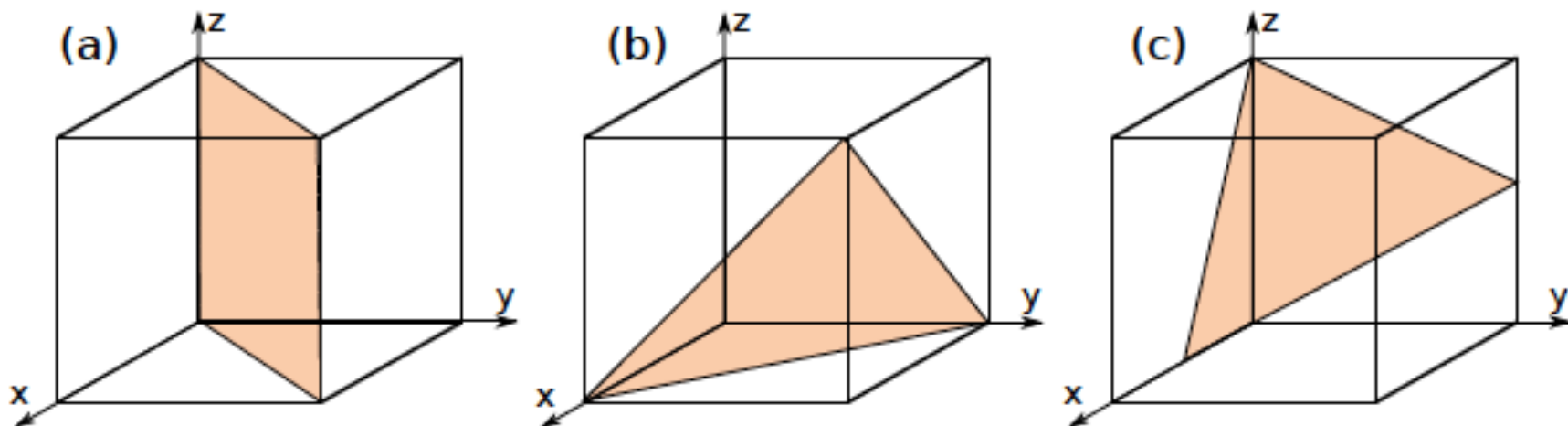
# Indices de Miller: exemples

---



# Indices de Miller: exemples

- Si le plan passe par l'origine, le translater le long d'une direction réticulaire d'une longueur un paramètre de maille (ce qui revient à translater l'origine, sans changer les axes !);
- Trouver les coefficients  $(\alpha, \beta, \gamma)$  tels que le plan intercepte les axes  $(x, y, z)$  en  $(\alpha a, \beta a, \gamma a)$  ( $a$  étant l'arrête du cube);
- Prendre l'inverse de ces coefficients et les multiplier par leur plus petit commun multiple (PPCM)
- Les coefficients  $h = \text{PPCM}(\alpha, \beta, \gamma) / \alpha$ ,  $k = \text{PPCM}(\alpha, \beta, \gamma) / \beta$ ,  $l = \text{PPCM}(\alpha, \beta, \gamma) / \gamma$  sont les indices de Miller du plan. Ce sont des nombres premiers entre eux.



# Rappels de géométrie tridimensionnelle

---

- Une droite est définie par deux points, ou un point et une direction;
- Un Plan est défini par trois points, ou un point et deux directions, non colinéaires;

Il se définit aussi par un point et une direction perpendiculaire.

- Angle  $\theta$  entre deux vecteurs: 
$$\cos(\theta) = \frac{\vec{u} \cdot \vec{v}}{\|\vec{u}\| \cdot \|\vec{v}\|}$$
- L'angle entre un plan et une droite se définit comme le complémentaire de l'angle entre la droite et la normale au plan
- L'angle entre deux plans est l'angle entre leur normale.
- **Dans le système cubique, (hkl) est perpendiculaire à [hkl]**

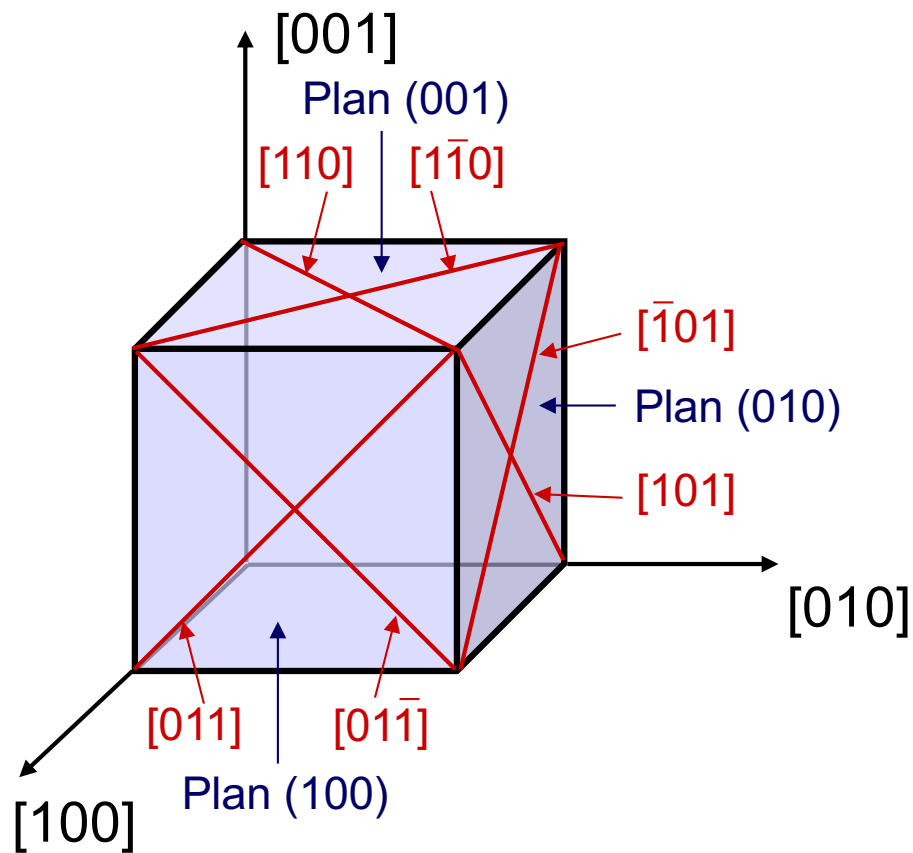


# Etat cristallin

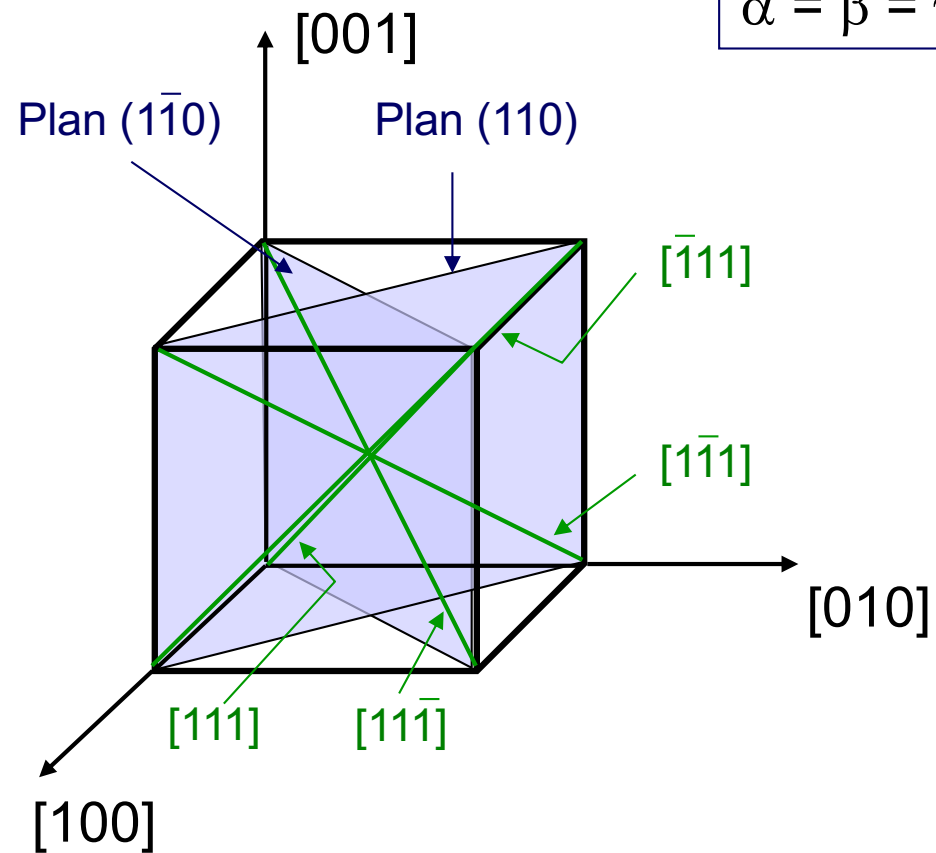
Une structure cristalline très usuelle : **cubique**

$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



3 directions  $\langle 100 \rangle$ , symétrie 4  
6 directions  $\langle 110 \rangle$ , symétrie 2  
3 plans  $\{100\}$  de symétrie



4 directions  $\langle 111 \rangle$ , symétrie 3  
6 plans  $\{110\}$  de symétrie

Dans ce cas,  $[h \ k \ \ell]$  perpendiculaire à  $(h \ k \ \ell)$

# Etat cristallin

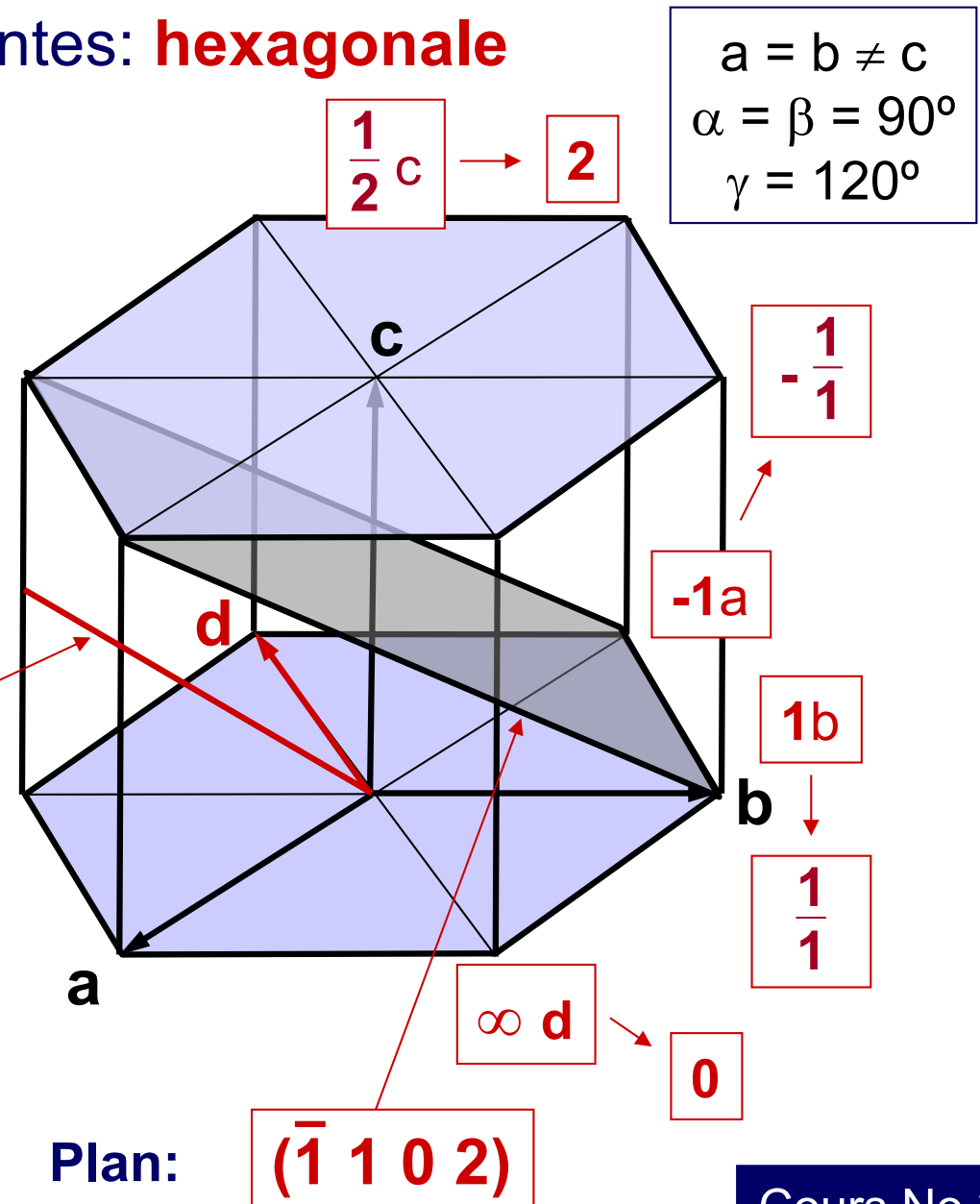
2 structures cristallines très fréquentes: **hexagonale**

On introduit un 4<sup>ème</sup> vecteur de base (dépendant), **d**, de telle sorte que:  
 $a + b + d = 0$

**Indice de Miller-Bravais** pour une direction  $[u \ v \ j \ w]$  ou un plan  $(h \ k \ i \ \ell)$  de telle sorte que:  
 $u + v + j = 0$  et  $h + k + i = 0$

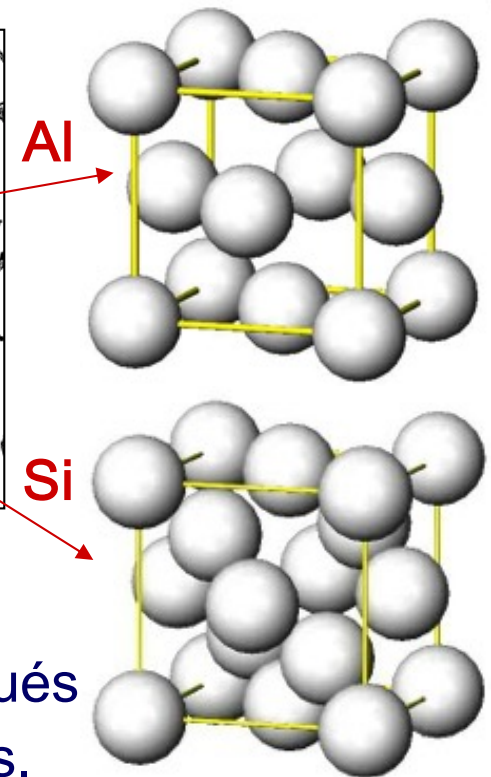
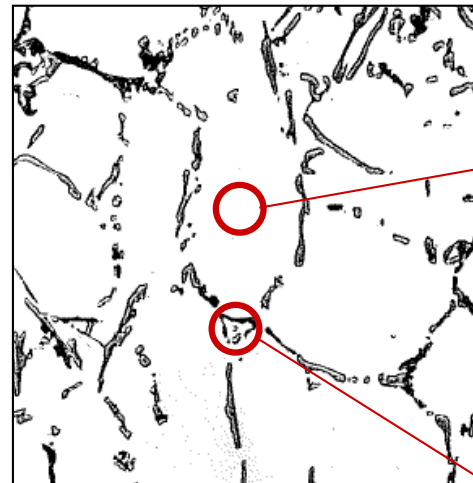
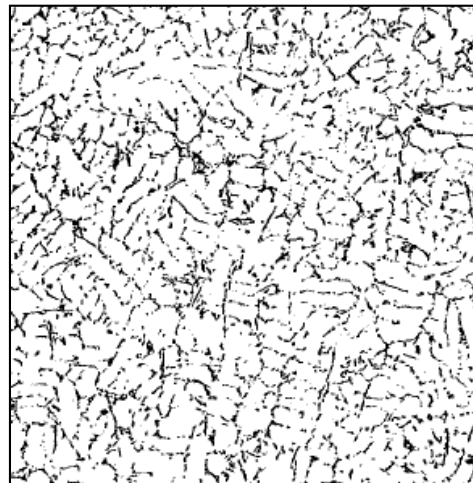
**Direction:**  $0a -1b + 1/2c = 0$

$$\begin{array}{c} [0 \ \bar{2} \ 1] \\ \downarrow \\ [2 \ \bar{4} \ 2 \ 3] \end{array} \quad ?$$



# Structure des alliages métalliques

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



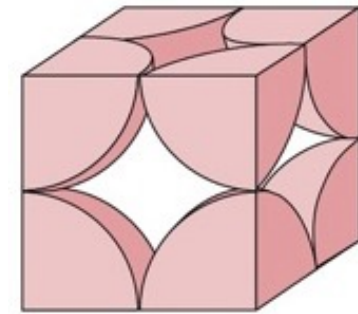
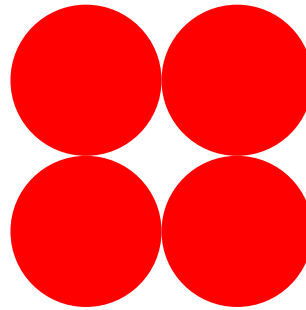
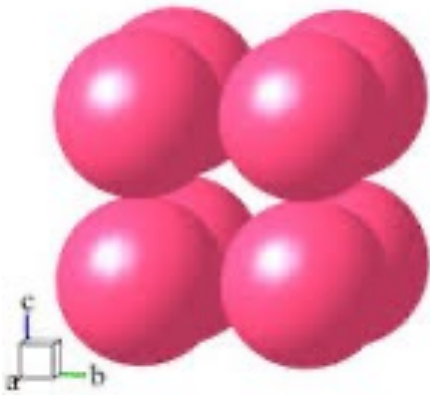
Alliage de type Al – Si utilisé pour l'injection d'une jante de voiture

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**.

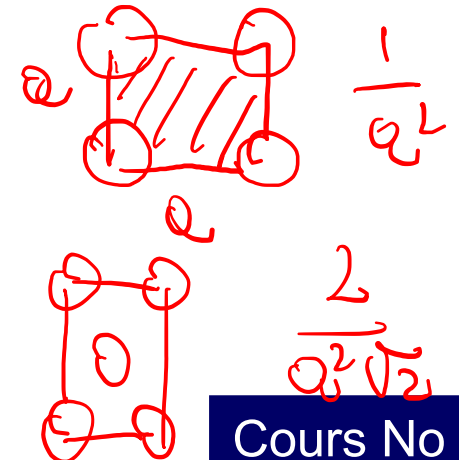
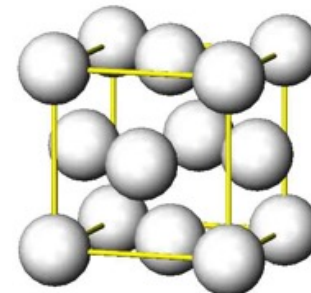
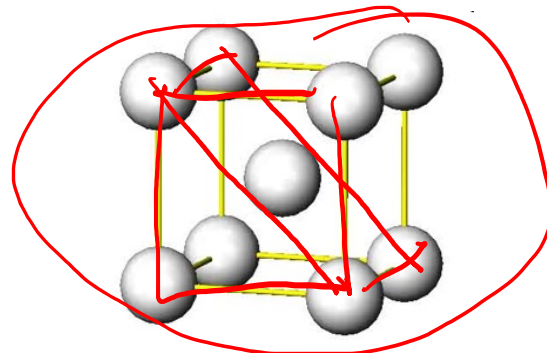
# Structure des alliages métalliques

Comment faire le lien entre une maille élémentaire cubique et de volume de l'ordre de  $10^{-30}$  m et un échantillon macroscopique ?



Pour mieux se représenter les matériaux, on peut considérer les atomes comme des sphères rigides de rayon  $R$  (leur rayon atomique)

Combien y a-t-il d'atomes en propre par maille ?



# Structure des alliages métalliques

On peut déjà déduire quelques notions importantes de ce modèle en ne connaissant que la maille élémentaire:

-La masse volumique du matériau:

$$\rho = \frac{N_{\text{atomes par mailles}} \times m_{\text{atome}}}{V_{\text{maille}}}$$

-La compacité:

$$c = \frac{N_{\text{atomes par mailles}} \times V_{\text{atome}}}{V_{\text{maille}}}$$

(ou le volume vide entre les atomes)

-Directions et plans de compacité ?

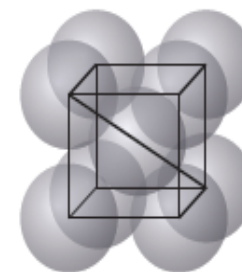
Cubique simple



Cubique faces centrées

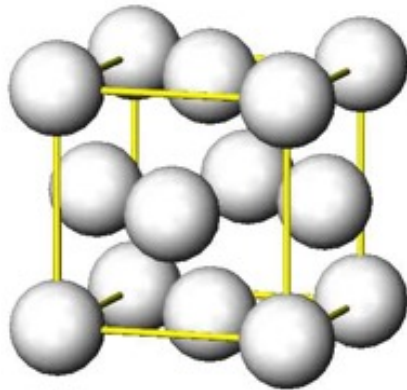


Cubique centré



# Structure des alliages métalliques

## Réseau cubique à faces centrées (cfc)



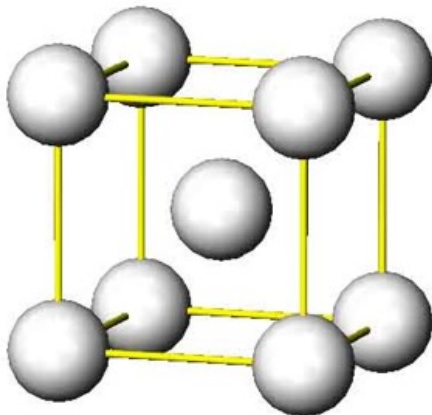
Al – Cu – Ni – Ag – Au – Fe ...

Volume laissé entre atomes : **26%**

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

**polymorphisme**

## Réseau cubique centré (cc)



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%**

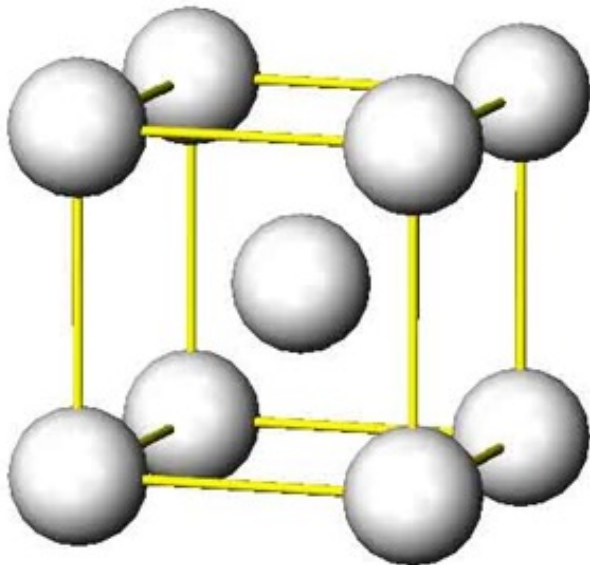
Fe – Mo – V – W – Ta ...

# Structure des alliages métalliques

## Réseau cubique à faces centrées (cfc)

- Nombre de **coordination** d'un atome (nbre de voisins) : **12**
- Volume laissé entre les atomes (sphères denses) : **26%**

## Réseau cubique centré (cc)



**Cr – Fe – Mo – V – W – Ta ...**

Coordination : **8**  
Volume laissé entre atomes : **32%**

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

**polymorphisme**

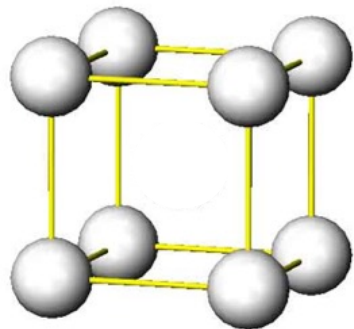
<b>Fe:</b>	cc	pour $T > 1403^{\circ}\text{C}$ et $T < 910^{\circ}\text{C}$
	cfc	pour $910^{\circ}\text{C} < T < 1403^{\circ}\text{C}$



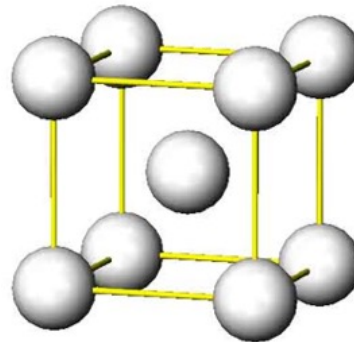
# Structure des alliages métalliques

Deux nouvelles notions importantes:

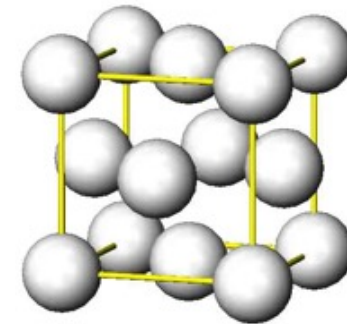
-Le nombre de coordination: le nombre de plus proches voisins



6

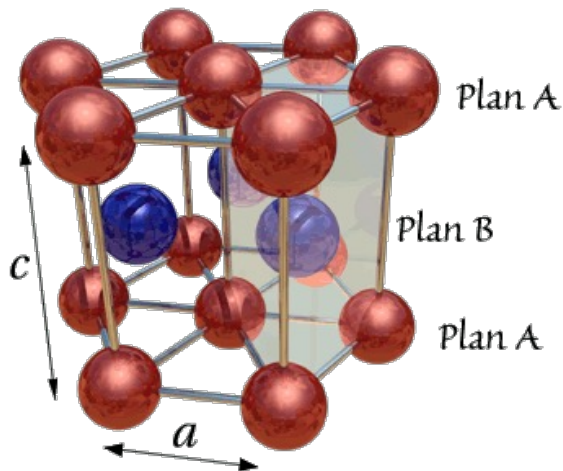


8



12

-Les plans d'empilement compact



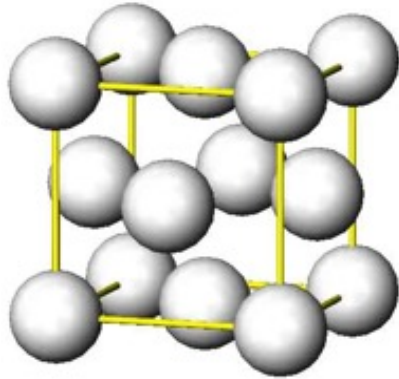
Structure Hexagonale compacte:

-Coordination: 12

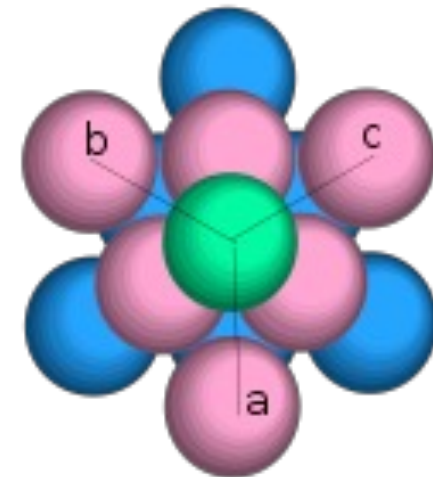
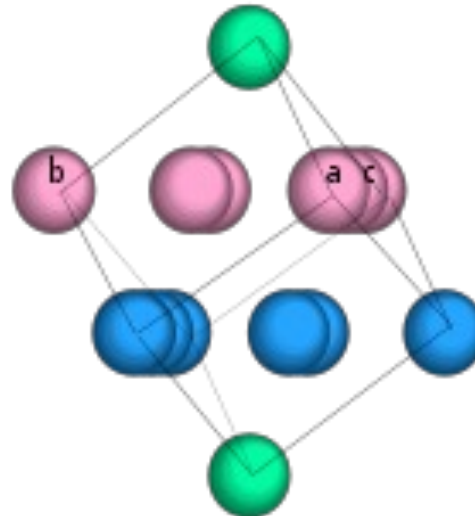
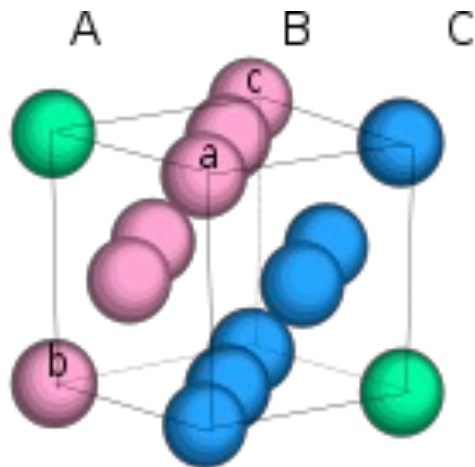
-Empilement de plans d'arrangement hexagonal selon les plans (1000)



# Cubique faces centrées



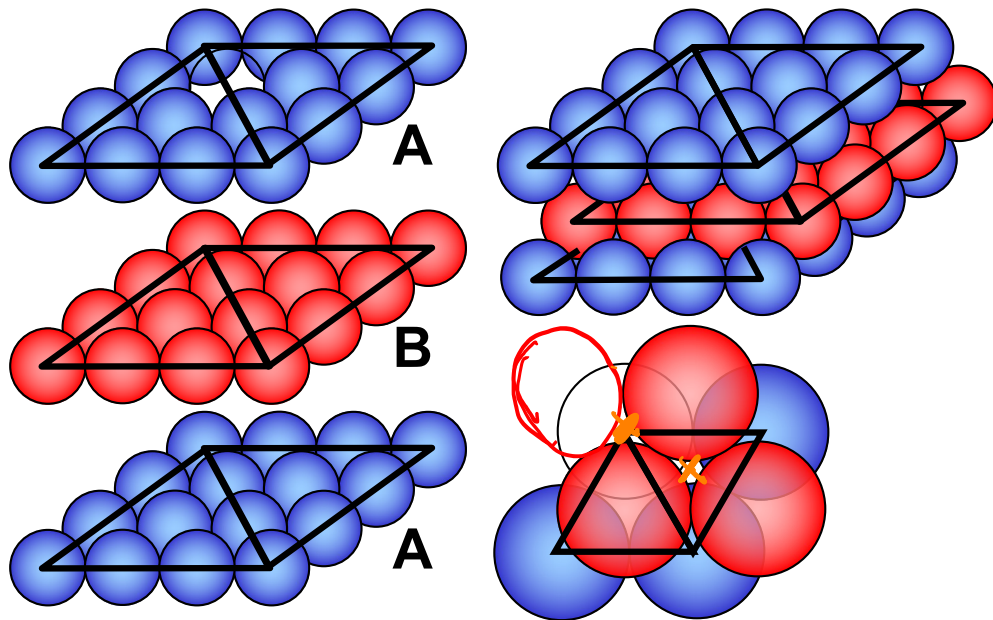
- Coordination: 12
- Empilement de plans d'arrangement hexagonal selon les plans (111)



Empilement compact Cubique Faces Centrées  
( cubic close- pack CCP, ABC )

# Structure des alliages métalliques

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

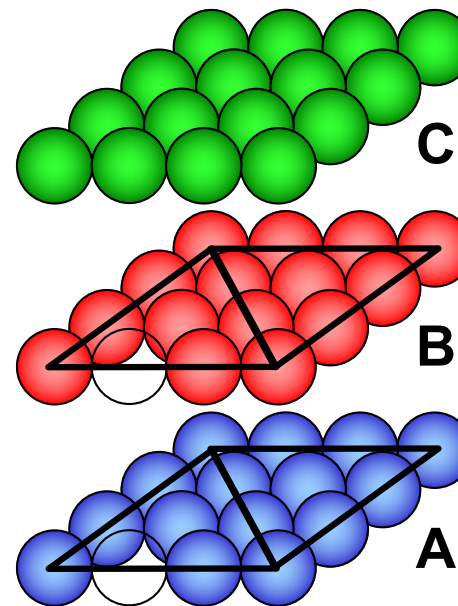


## Réseau hc

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

**A – B – A – B – A – B ...**

**Zn – Mg – Ti – Zr ...**

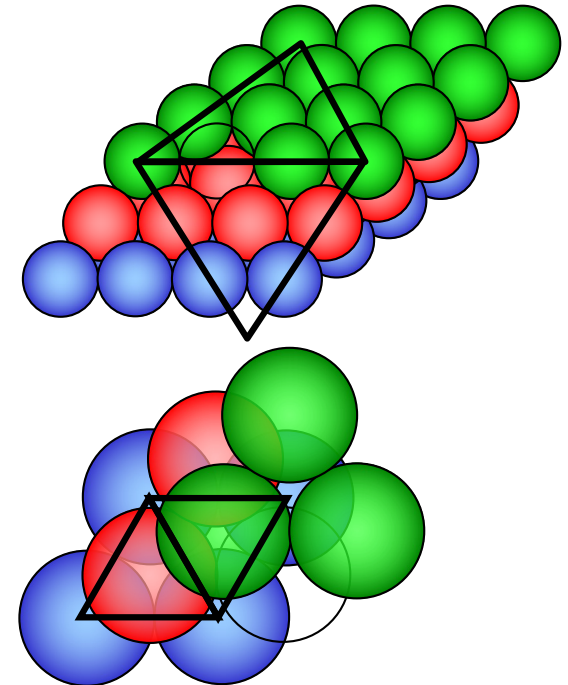


## Réseau cfc

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

**A – B – C – A – B – C – A ...**

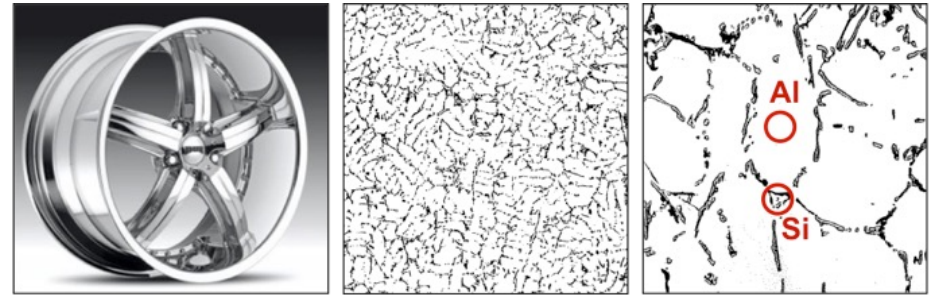
**Al – Cu – Ni – Ag – Au – Fe ...**



# Sites interstitiels du CFC

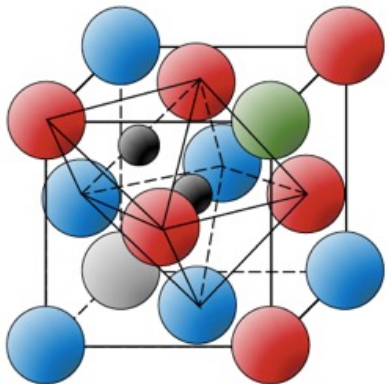
Les alliages métalliques sont constitués d'un **solvant** (Fe, Al, Cu, Mg, ...) et d'éléments additionnels de **soluté**:

- Ils peuvent former des précipités *durs* dans une matrice *ductile*:



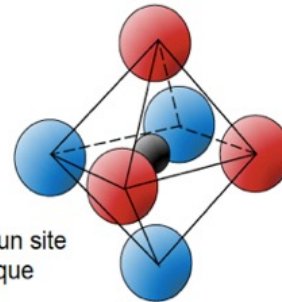
Alliage de type Al – Si utilisé pour l'injection d'une jante de voiture

- Ils peuvent se mettre dans des sites interstitiels: pour le CFC, deux sites existent:



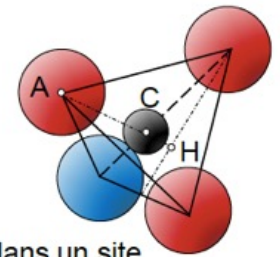
Ni

- Au centre de la maille:



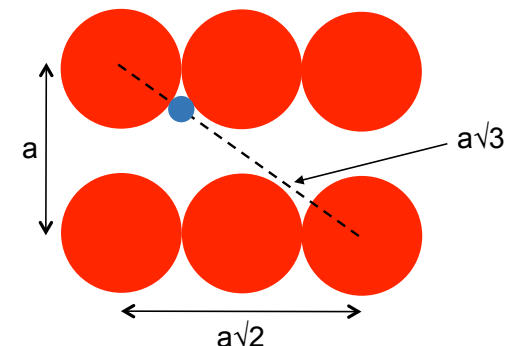
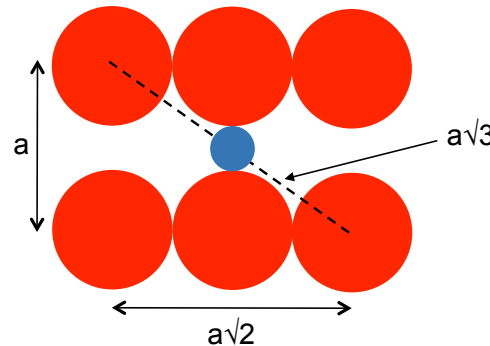
Atome dans un site octaédrique

- A  $\frac{1}{4}$  des diagonales du cube



Atome dans un site tétraédrique

Dans les plans  $\{110\}$  :





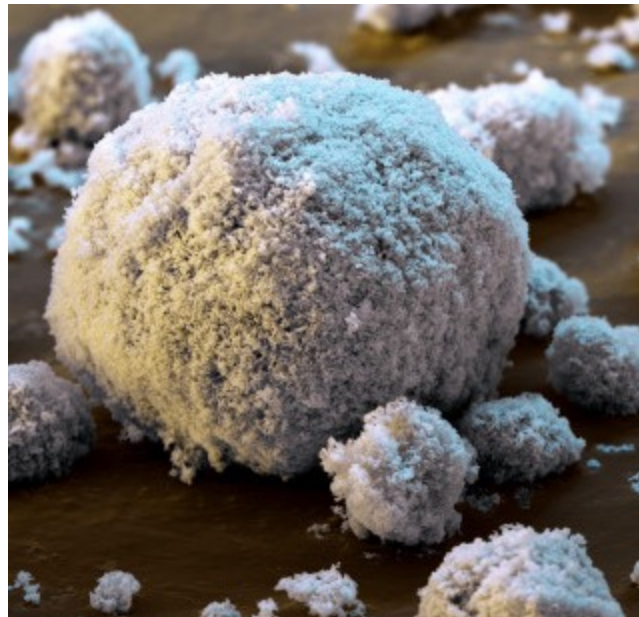
# Structure des céramiques

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

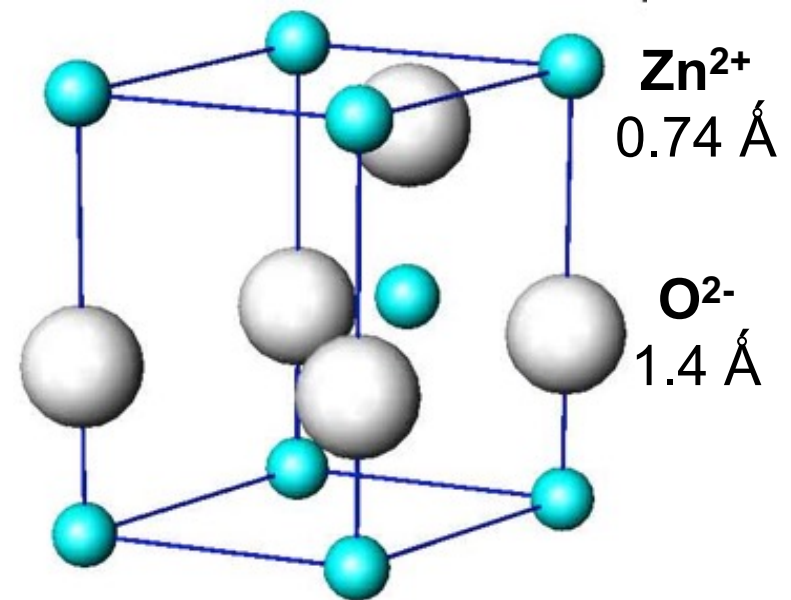
- Prise en compte de la **valence** des ions
- Prise en compte de leur **rayon ionique**
- Conséquence: plus grande tendance à former des **amorphes**



Crème solaire



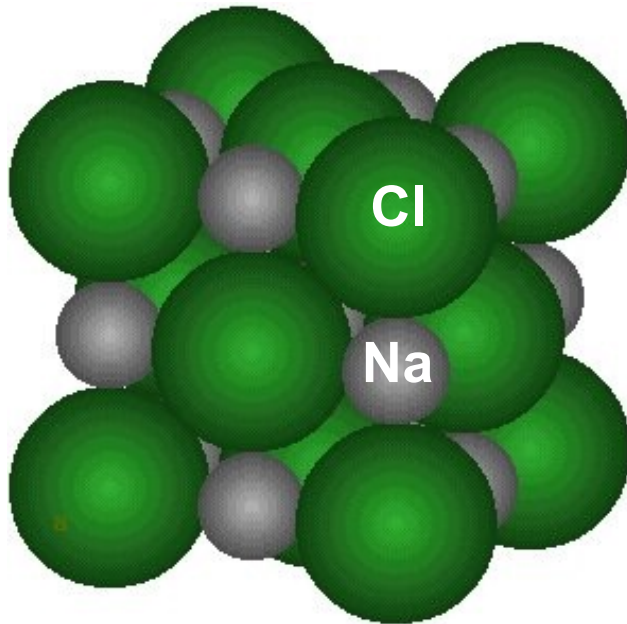
ZnO nanocristal  
(Z-COTE®)



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**

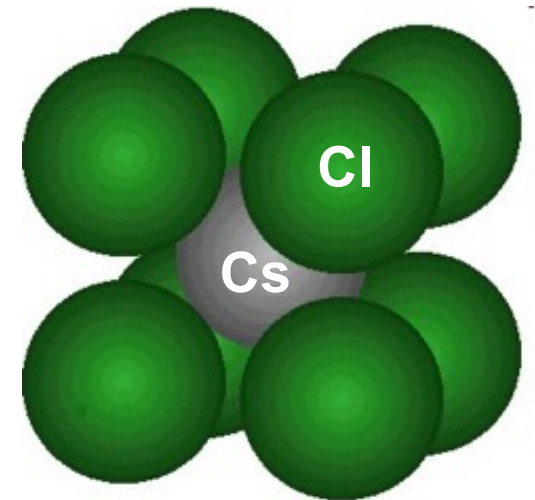
**0.56**

**Coordination**

**Rapport  $R_c/R_a$**

**8**

**0.92**



**CsCl**

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

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

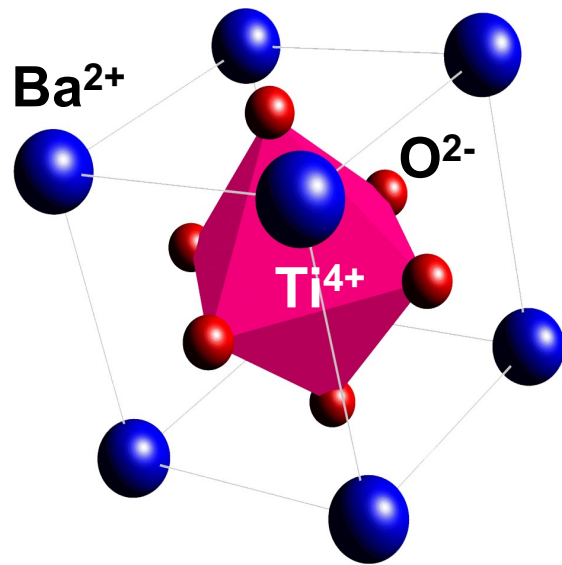
Source de césium

Centrifugation/séparation DNA

Thérapie alternative du cancer

# Structure des céramiques

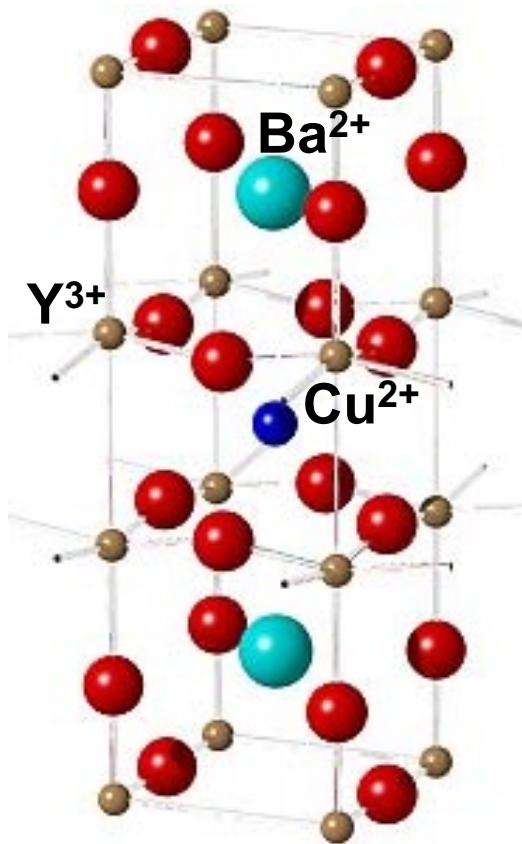
Quelques céramiques "high tech":



$\text{BaTiO}_3$

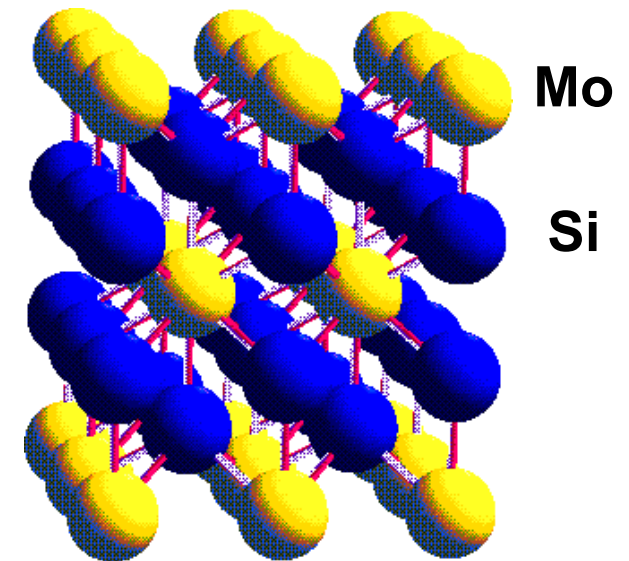
PZT ( $\text{Pb}(\text{Zr},\text{Ti})\text{O}_3$ )

Ferroélectrique



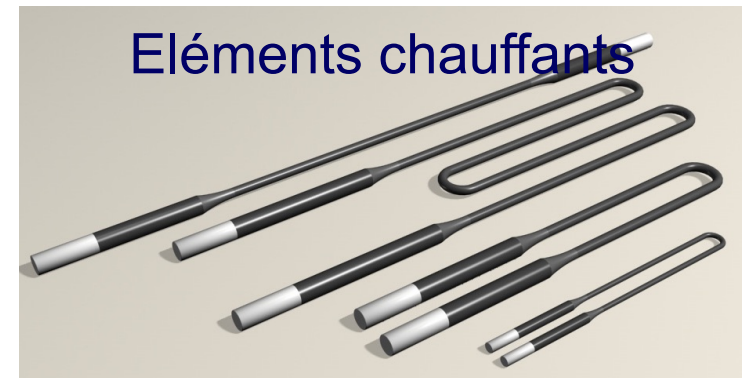
$\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$

Supraconducteur



$\text{MoSi}_2$

Eléments chauffants





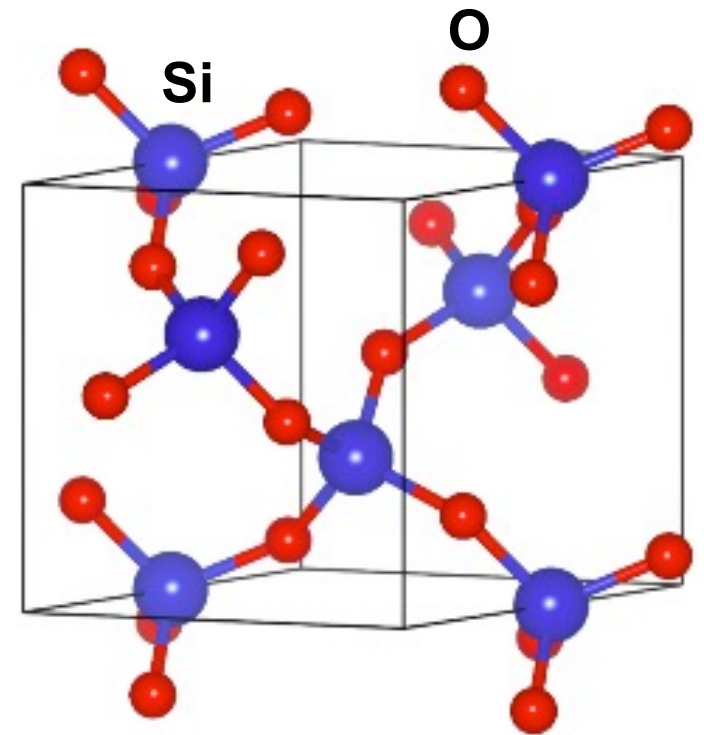
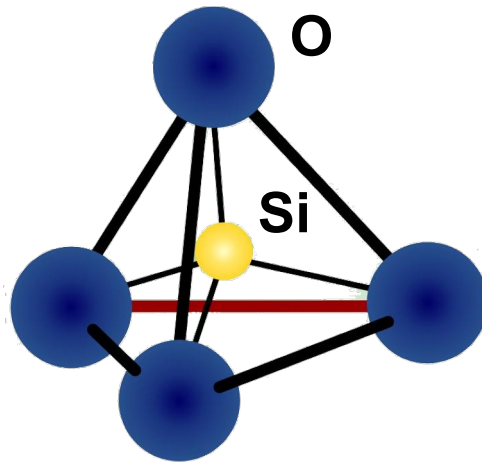
# Structure des céramiques

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 ( $\text{SiO}_4$ )<sup>4-</sup>**



<https://sciencetonnante.wordpress.com/2011/05/09/le-verre-cet-inconnu/>  
[http://www.espaceterreetmateriaux.be/verre\\_et\\_cristal.htm](http://www.espaceterreetmateriaux.be/verre_et_cristal.htm)

# Structure des céramiques

## Argile (kaolin)

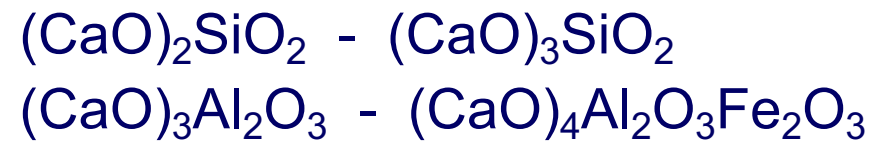


## Béton

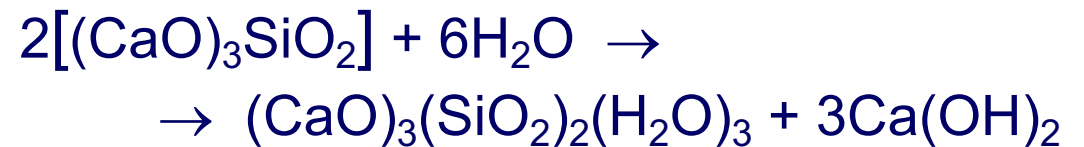
gravier + quartz + ciment



Le ciment est un mélange de:



Hydratation du ciment:

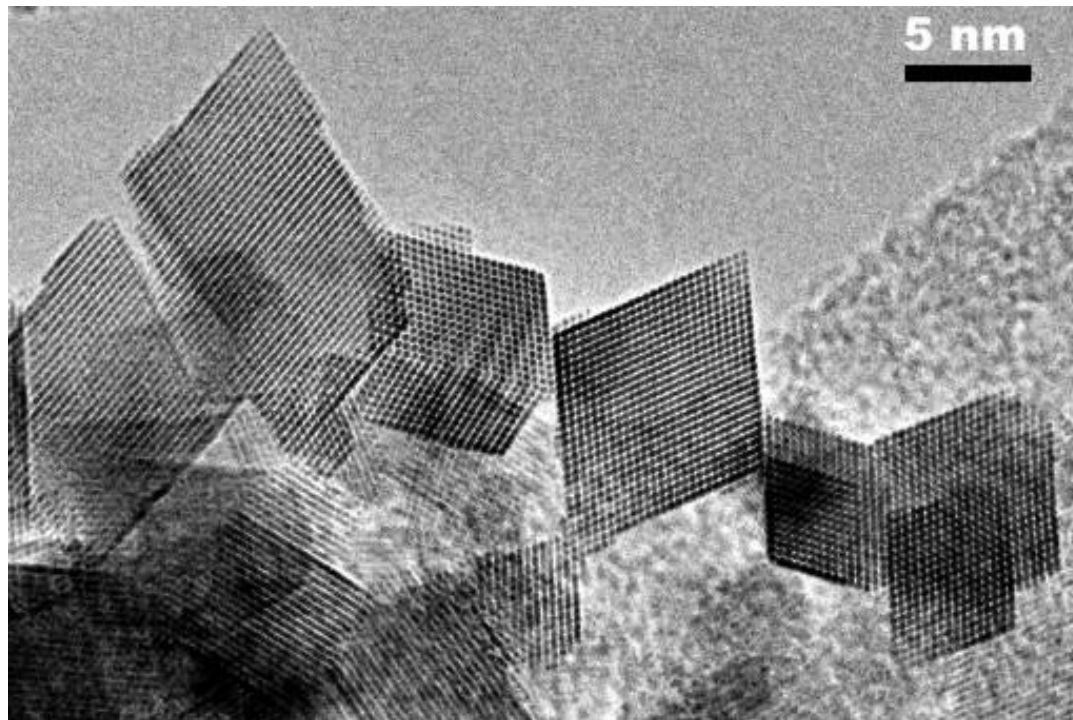




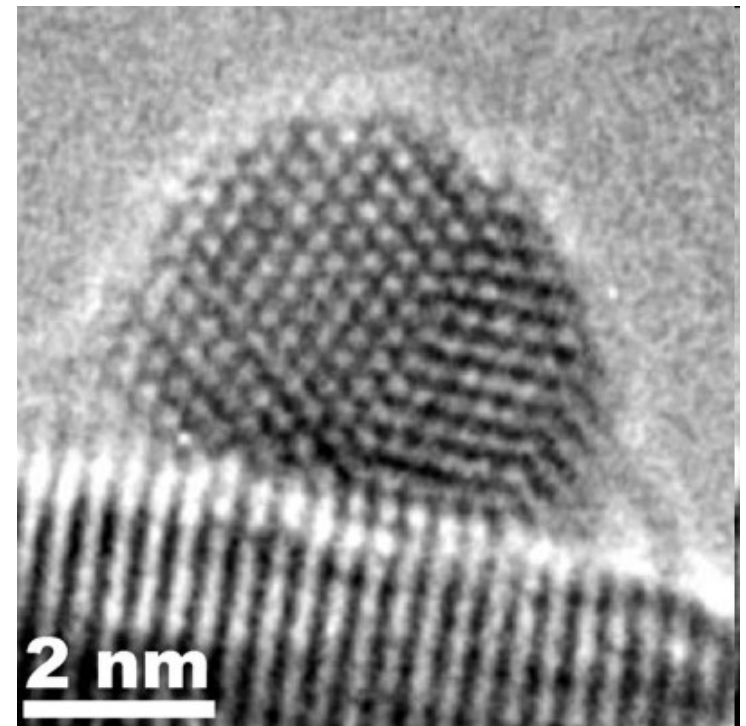
# Observation de l'arrangement des atomes

On peut actuellement observer directement l'arrangement des atomes par **microscopie électronique en transmission** à HR

Nanocristaux de  $\text{Ce}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$



Nanocristal d'Ag  
déposé sur du ZnO



# Observation de l'arrangement des atomes

Initialement, l'arrangement régulier des atomes dans un cristal a été mis en évidence par **diffraction des rayons X**

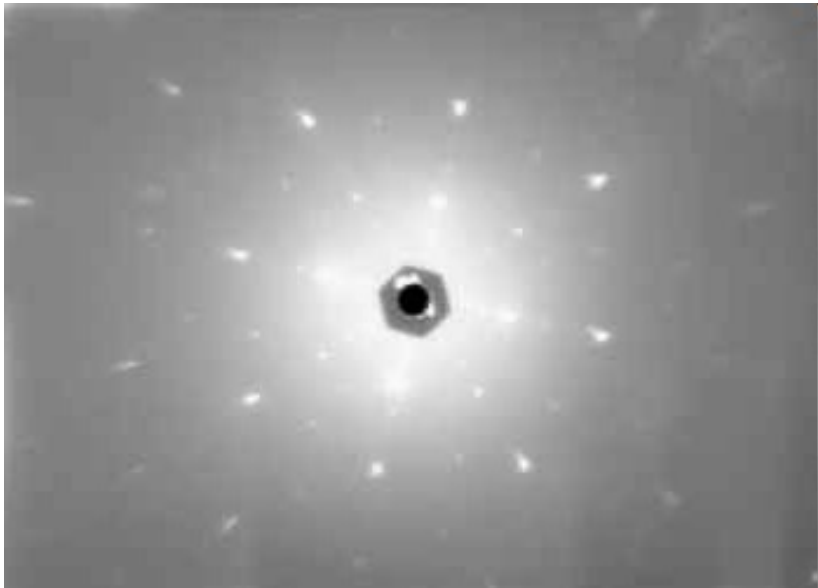
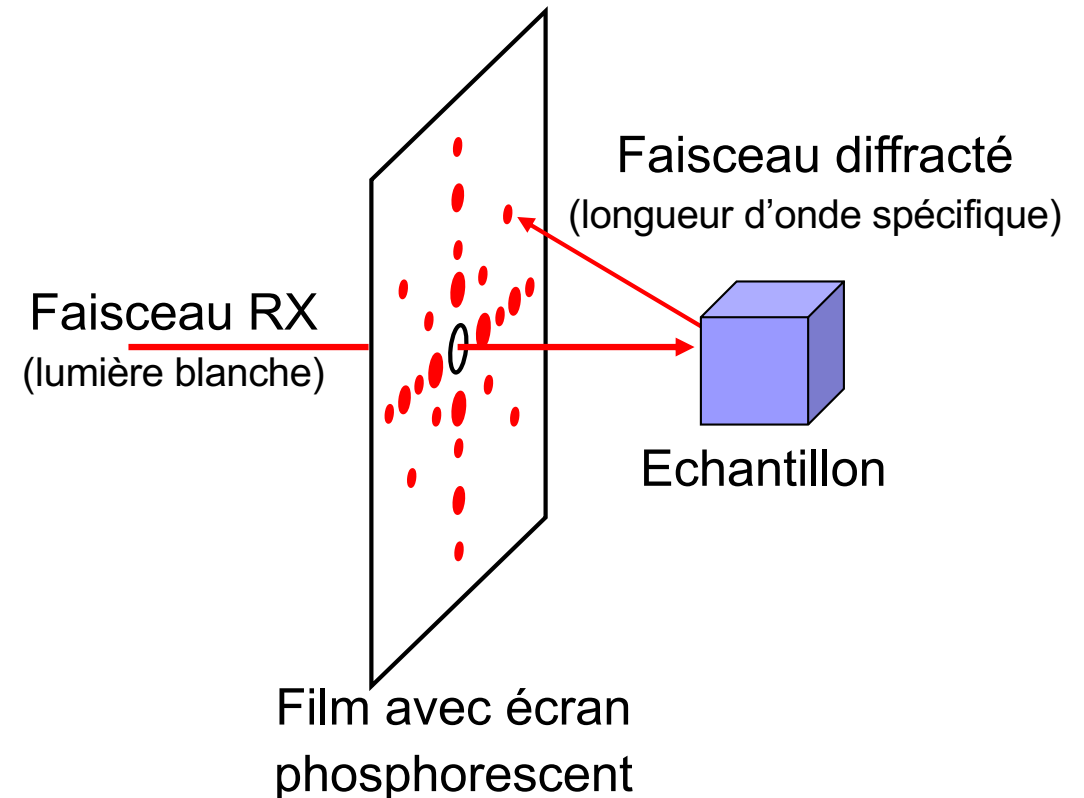


Figure de diffraction de  
Laue pour un cristal de fer

[pwatlas.mt.umist.ac.uk/.../diffraction/laue.html](http://pwatlas.mt.umist.ac.uk/.../diffraction/laue.html)



Principe de la diffraction de Laue

# Observation de l'arrangement des atomes

Les électrons, comme les photons, peuvent se comporter comme des ondes (dualité onde-corpuscule).

A l'énergie ( $E$ ) d'un photon est associée une longueur d'onde ( $\lambda$ ):

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

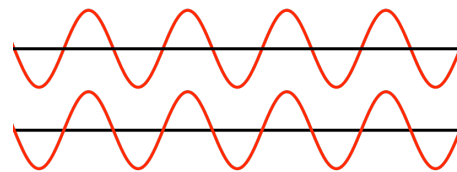
$$\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi c}{\lambda}$$

$$E(eV) \approx \frac{1240}{\lambda(nm)}$$

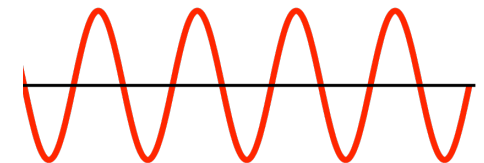
$h$ : constante de Planck

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

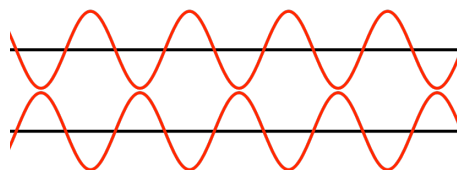
Comme les ondes sonores, ou les ondes mécaniques à la surfaces de l'eau, ces ondes peuvent s'additionner (en phase) ou s'annihiler (opposition de phase).



Interférence  
→  
*Constructive*



Décalage des ondes de  $n\lambda$



Interférence  
→  
*Destructive*



Décalage des ondes de  $(n+1/2)\lambda$

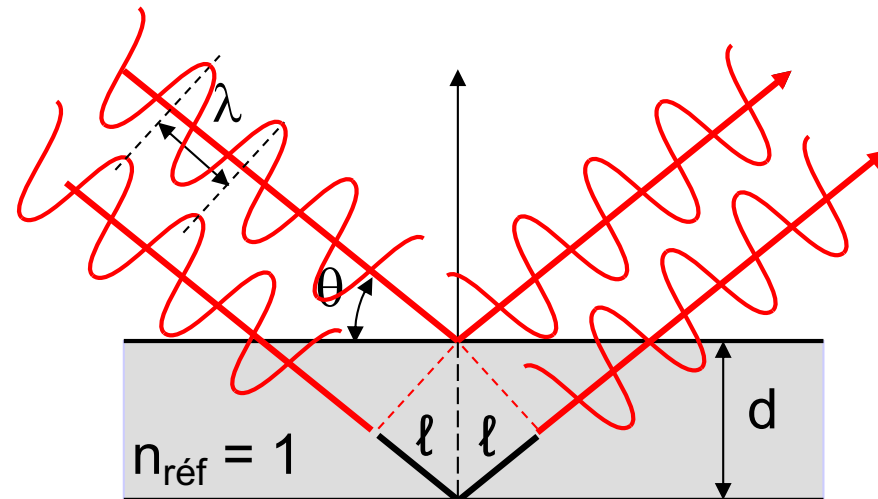
# Observation de l'arrangement des atomes

Le phénomène est analogue à la décomposition de la lumière blanche par un film liquide



Interférences de la lumière  
sur un film d'huile

[www.answers.com/topic/optics](http://www.answers.com/topic/optics)



Les ondes lumineuses réfléchies par les deux surfaces seront **constructives** (en phase) si la différence de chemin optique est un multiple ( $n$ ) de la longueur d'onde:

$$2\ell = 2d \sin \theta = n\lambda$$

# Observation de l'arrangement des atomes

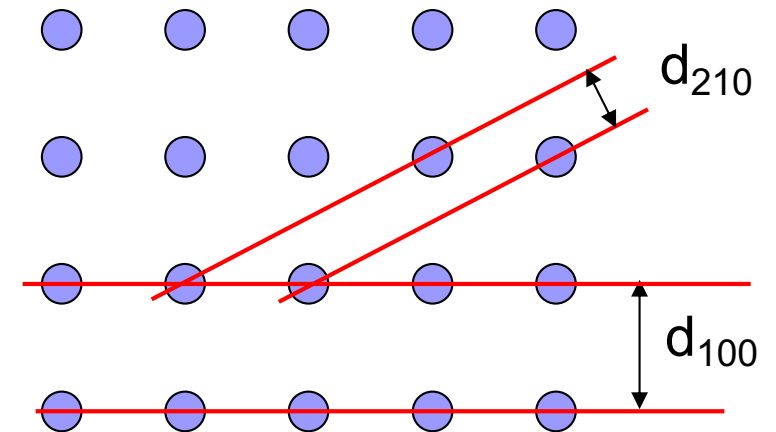
La différence est que pour un cristal, on peut distinguer de nombreux plans atomiques diffractant

Les divers plans cristallographiques (hkl) considérés, séparés d'une distance  $d_{hkl}$ , vont donc donner des spots de diffraction en sélectionnant la "bonne" couleur et l'ordre de diffraction  $n$ .

La **loi de Bragg** est toujours la même:

$$2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda$$

**La figure de diffraction reflète directement la symétrie du cristal.**



En reprenant les indices de Miller (hkl) des plans, on montre facilement pour un réseau cubique que:

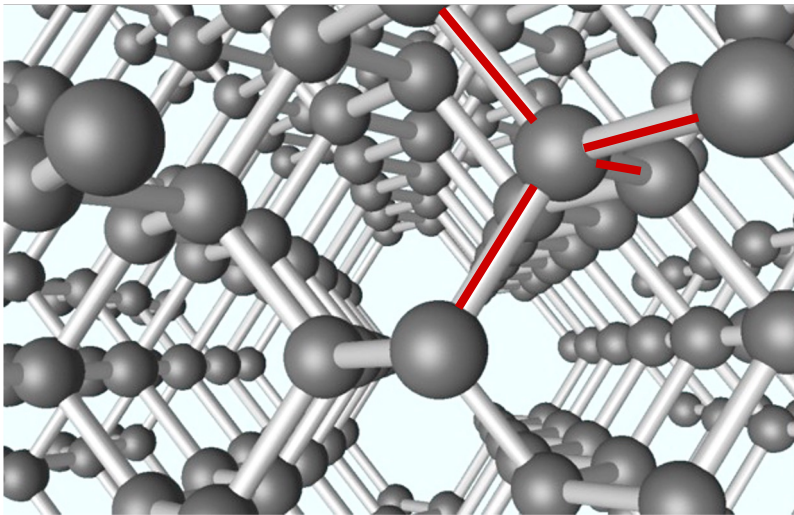
$$d_{hkl} = \frac{a}{(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}}$$



# Des céramiques aux matériaux organiques

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 autre élément comme H.

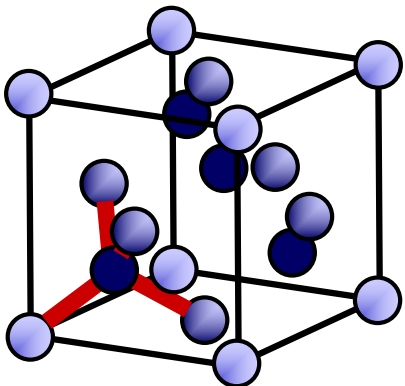
## Diamant



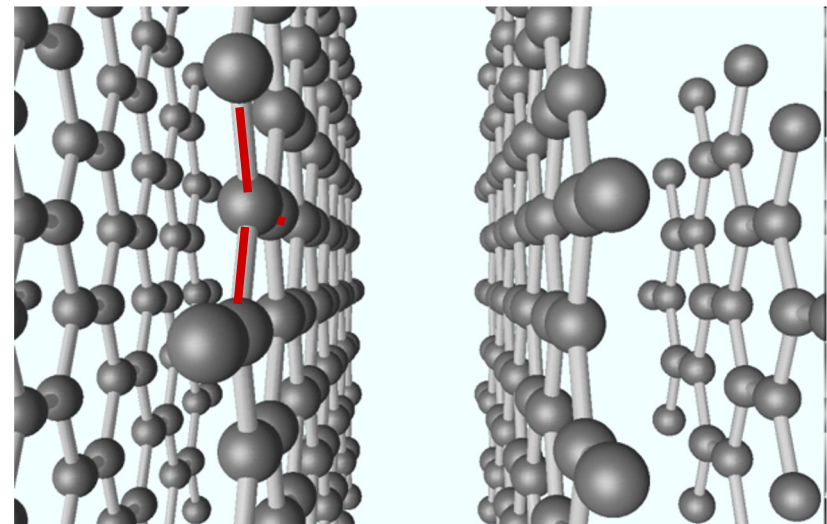
liaison  $sp^3$

structure cfc

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



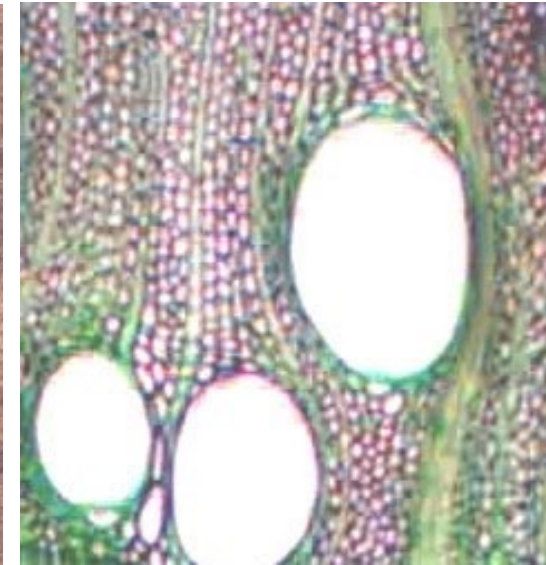
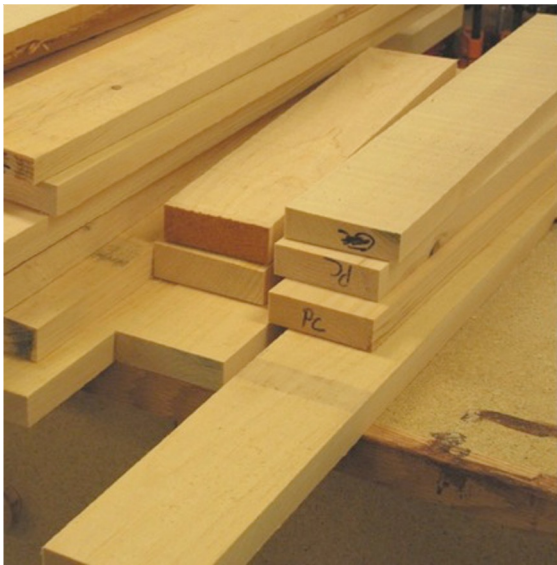
## Graphite



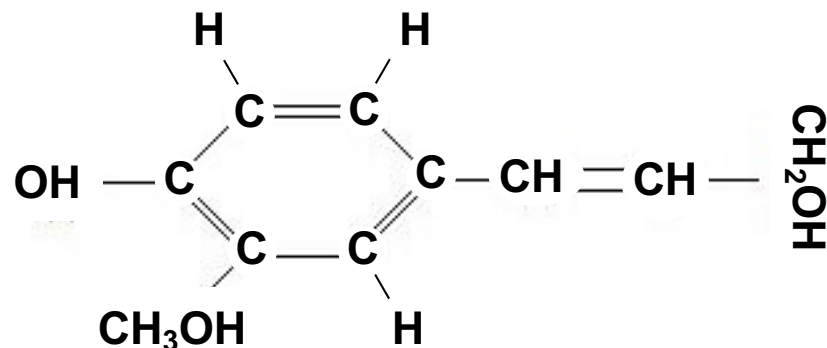
liaison  $sp^2$  - structure hc

# Structure des matériaux organiques

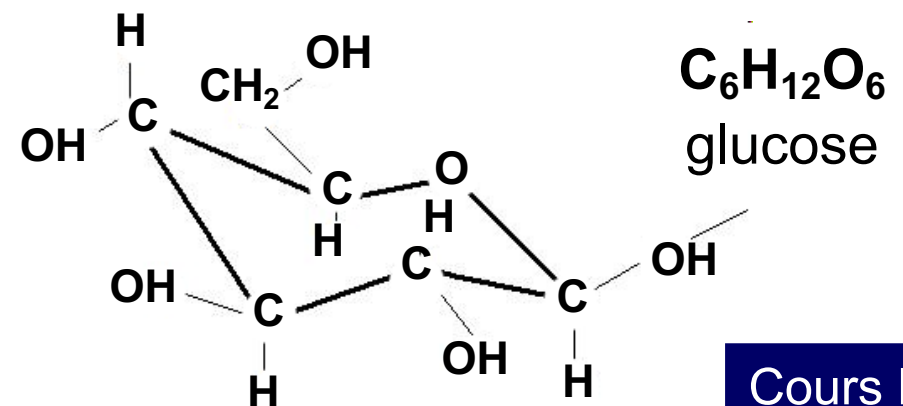
Le **bois** est un matériau organique dont les parois sont composées de **cellulose** et de **lignine**.



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



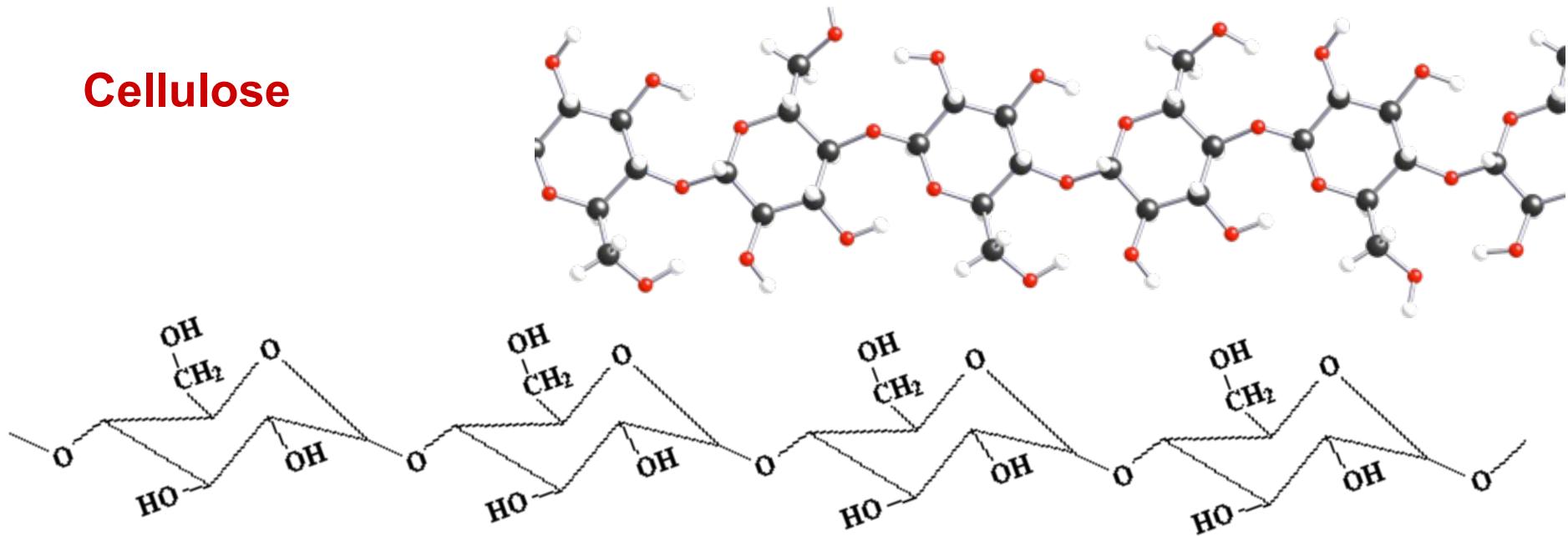
Elément de base de la **cellulose**



# 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**



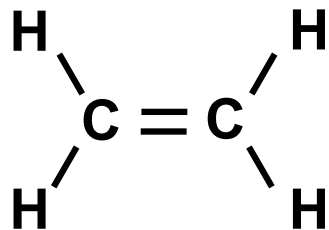
De nombreux matériaux naturels organiques (végétaux, coton,...) ont comme base la cellulose (> 50% biomasse). Nous allons plutôt regarder les **matériaux organiques synthétiques**, le principe de construction restant le même



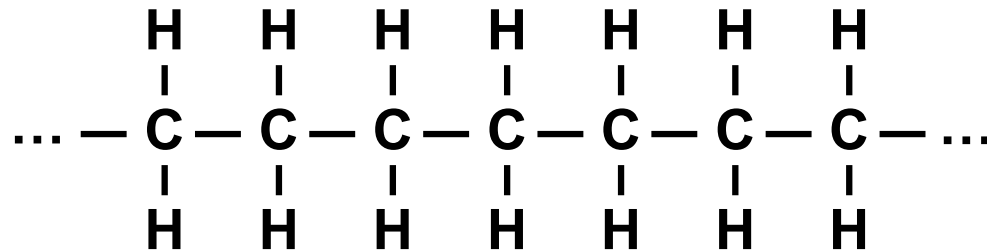
# Structure des matériaux organiques

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

éthylène  $C_2H_4$



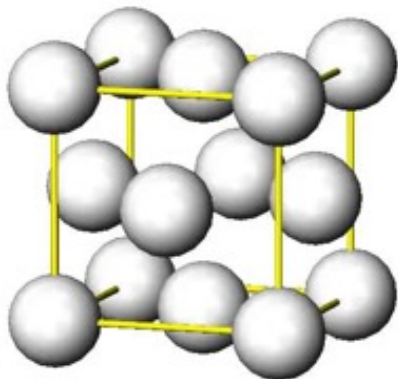
**Polyéthylène (PE)**



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**

*Métaux et céramiques*



Motif: quelques atomes

*Polymères*



Motifs:

-quelques atomes dans le motif de base pour former une chaîne

-Plusieurs milliers d'atomes par chaînes qui s'organisent pour former le matériau !!

# 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

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

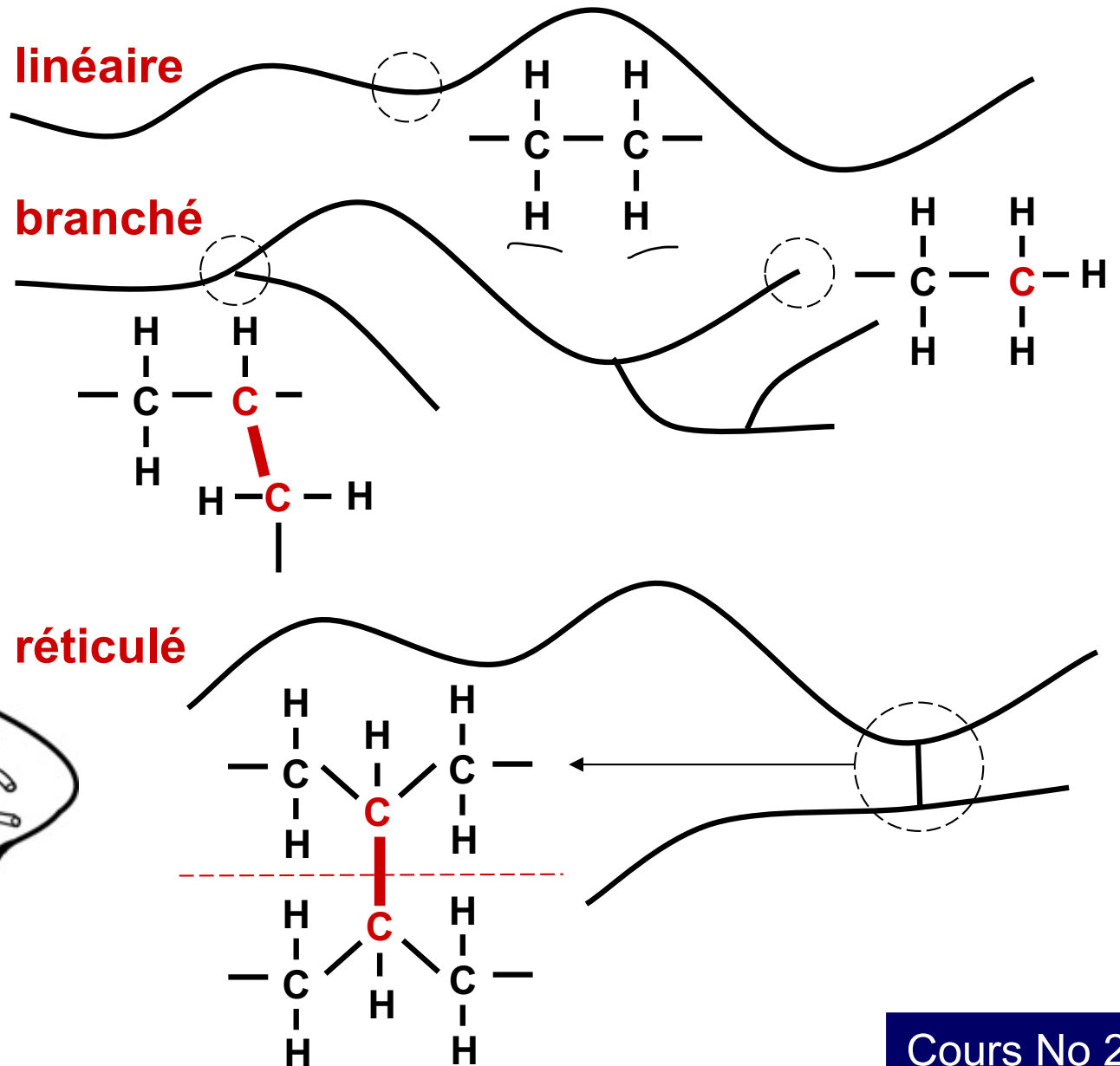
← Valeur moyenne  
sur un ensemble  
de chaînes.

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

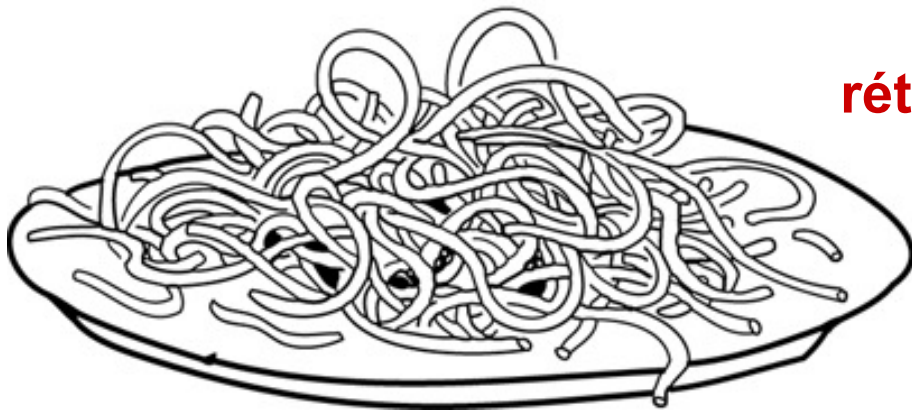
Entre les chaînes: Van der Waals ou ponts covalents

# 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

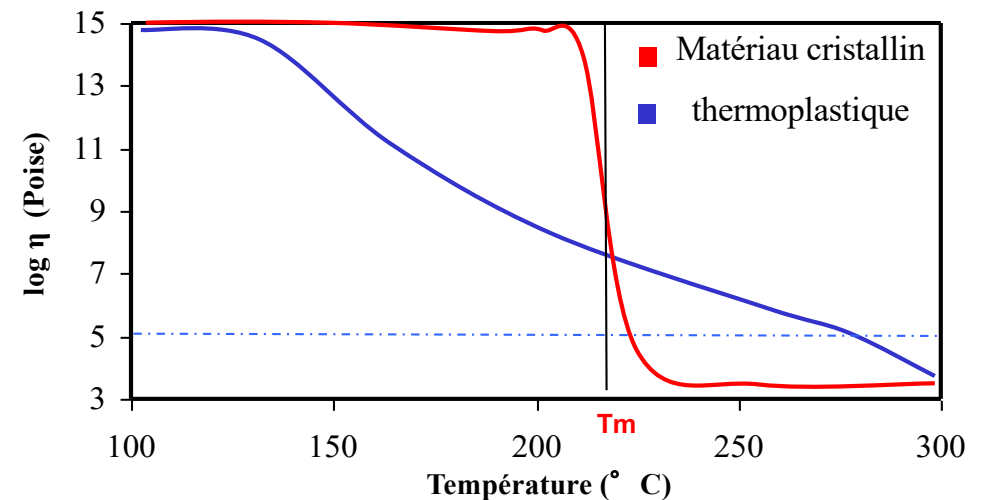
Amorphe



Semi-cristallin



Viscosité vs. température

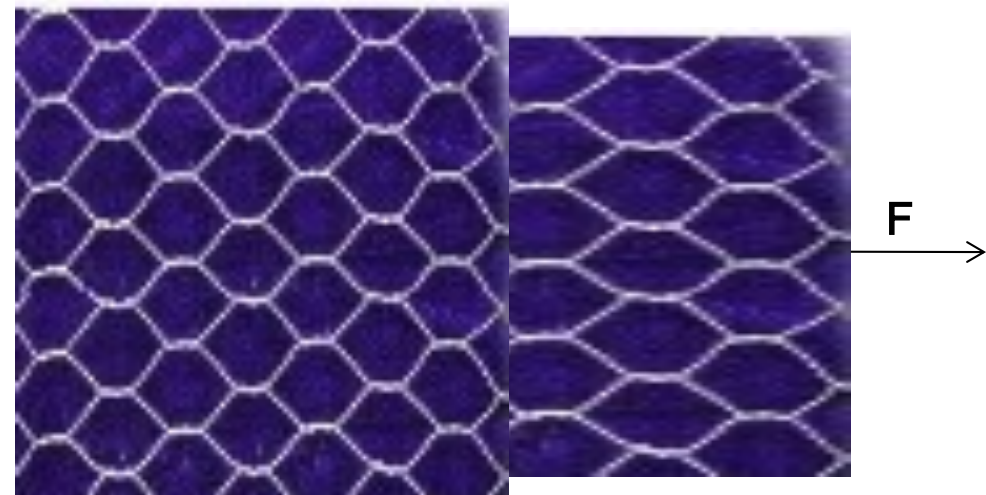
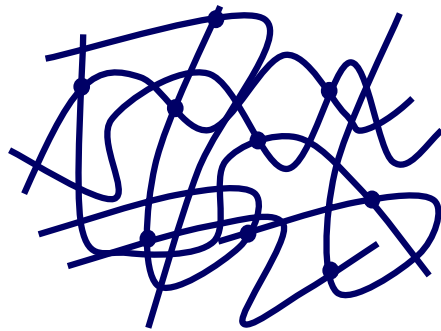


Exemples: Polyéthylène Téréphtalate (PET), Polyméthyl métacrilate (PMMA), Polycarbonate (PC)...(voir slides supplémentaires à la fin du cours)

# 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 fois plus que les élastomères) à chaud. Devient donc résistant à la température. Ne peuvent pas être recyclés.
- Polymère amorphes, non recyclables
- Exemple: colles époxy, résines polyesters, bakélite, ...



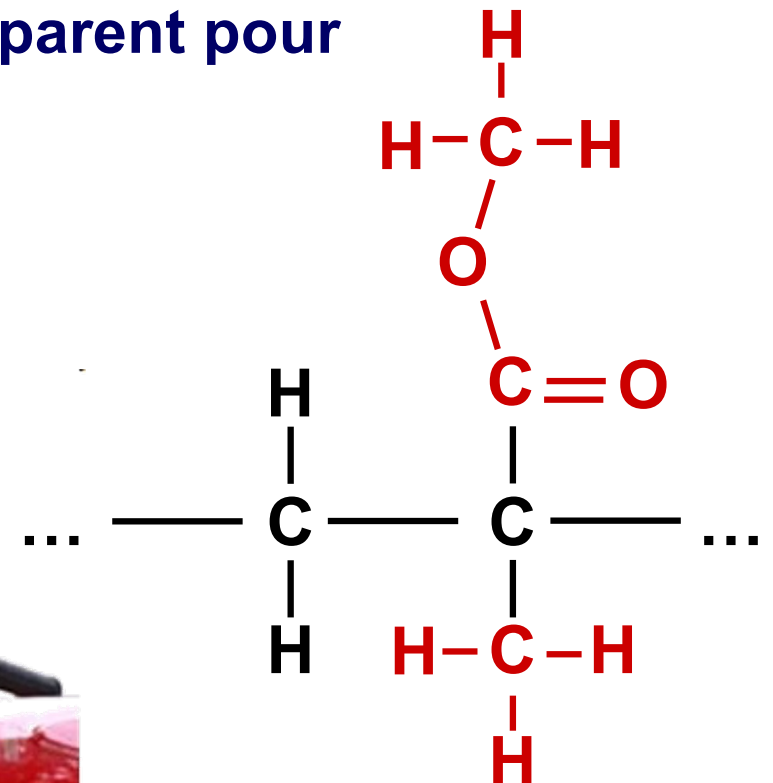
# Structure des matériaux organiques

Quelques polymères : **polyméthacrylate de méthyle (PMMA)**



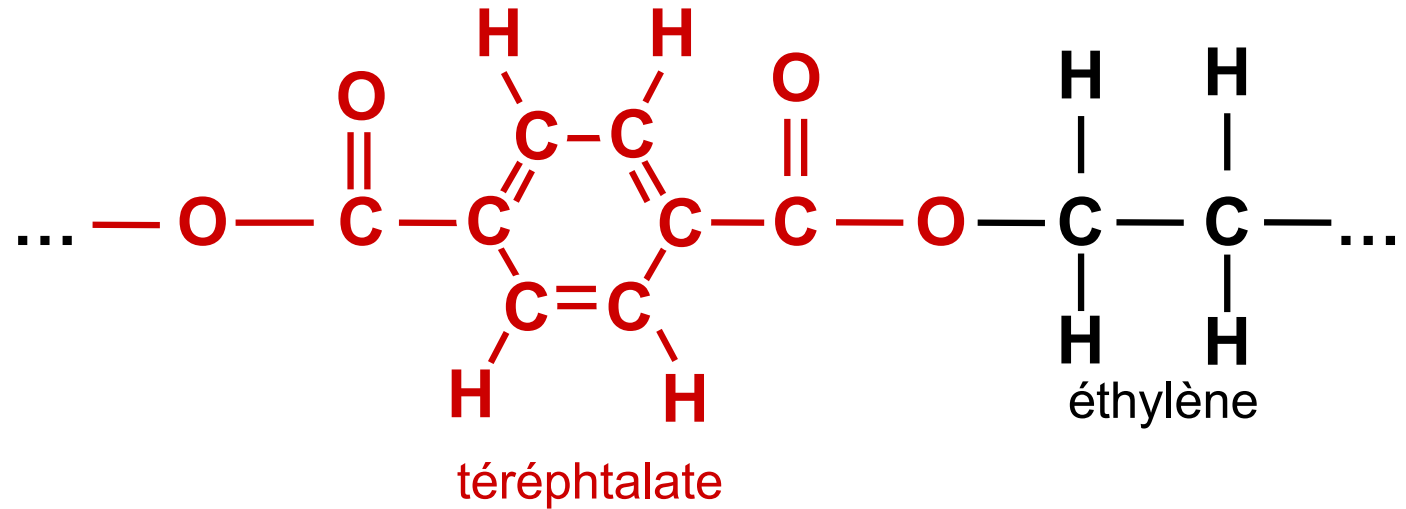
Plus connu sous le nom de **Plexiglas**

Thermoplastique transparent pour  
remplacer le verre



# Structure des matériaux organiques

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

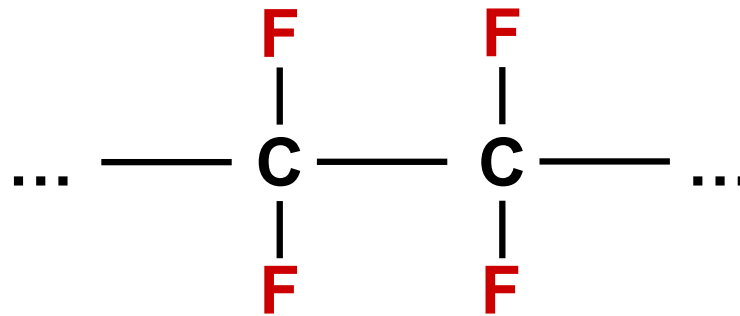


**Bouteilles ... recyclées en vestes polaires**



# Structure des matériaux organiques

Quelques polymères : **polytétrafluoroéthylène (PTFE)**



Plus connus sous le nom de **téflon**

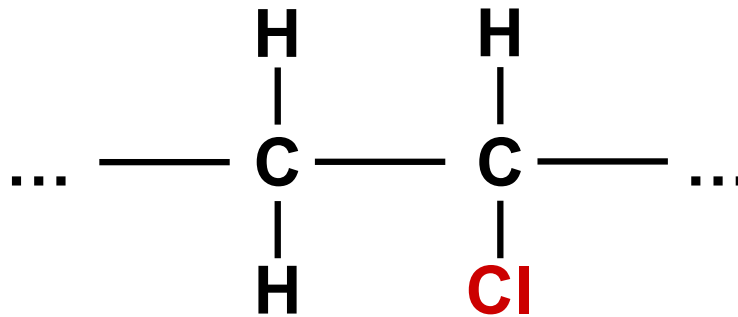
Antiadhésif , revêtements, lubrifiant





# Structure des matériaux organiques

Quelques polymères : **polychlorure de vynile (PVC)**

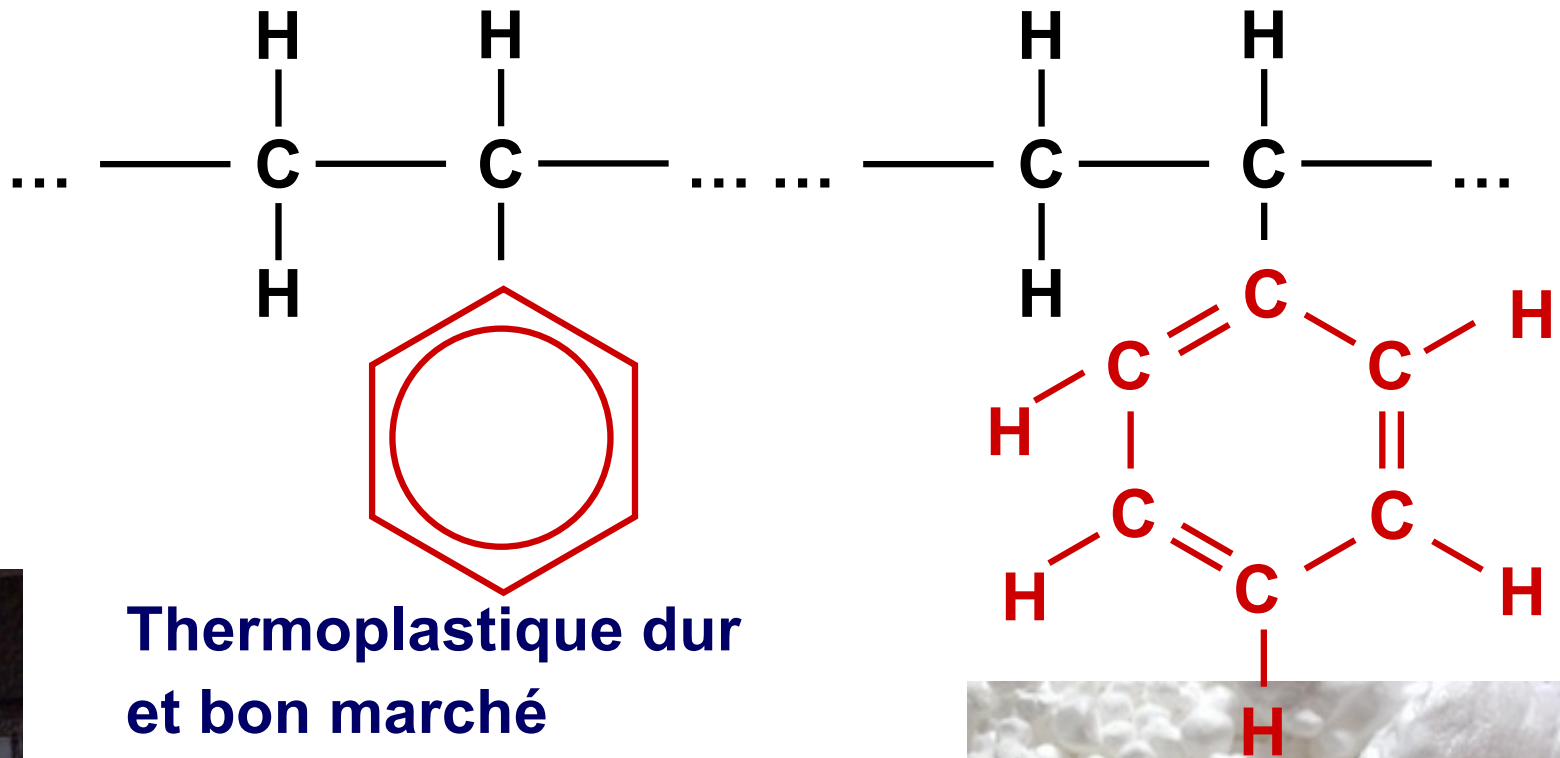


Résistant à l'eau et au feu



# Structure des matériaux organiques

Quelques polymères : **polystyrène (PS)**



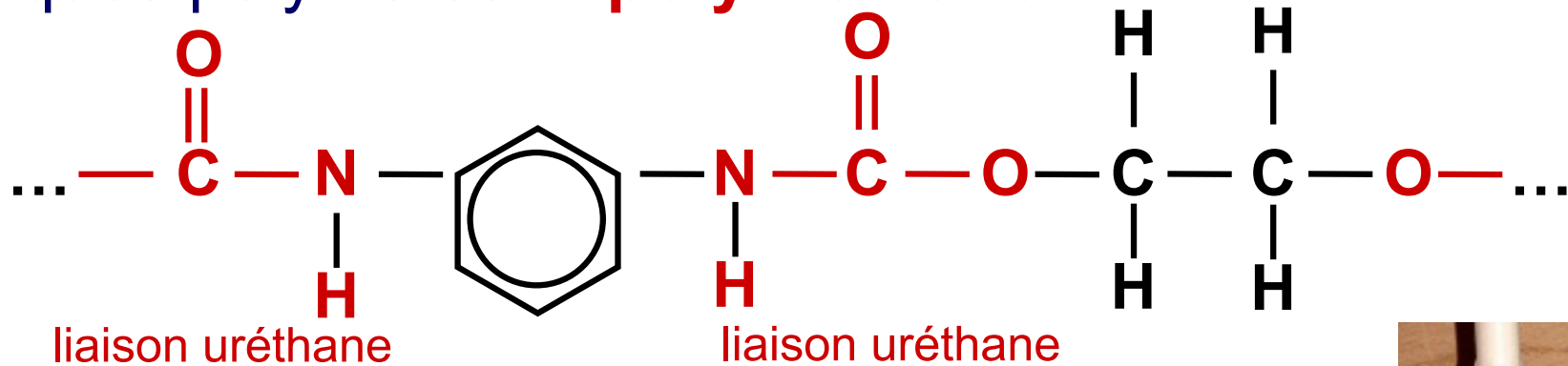
**Thermoplastique dur  
et bon marché**





# Structure des matériaux organiques

Quelques polymères : **polyuréthane**

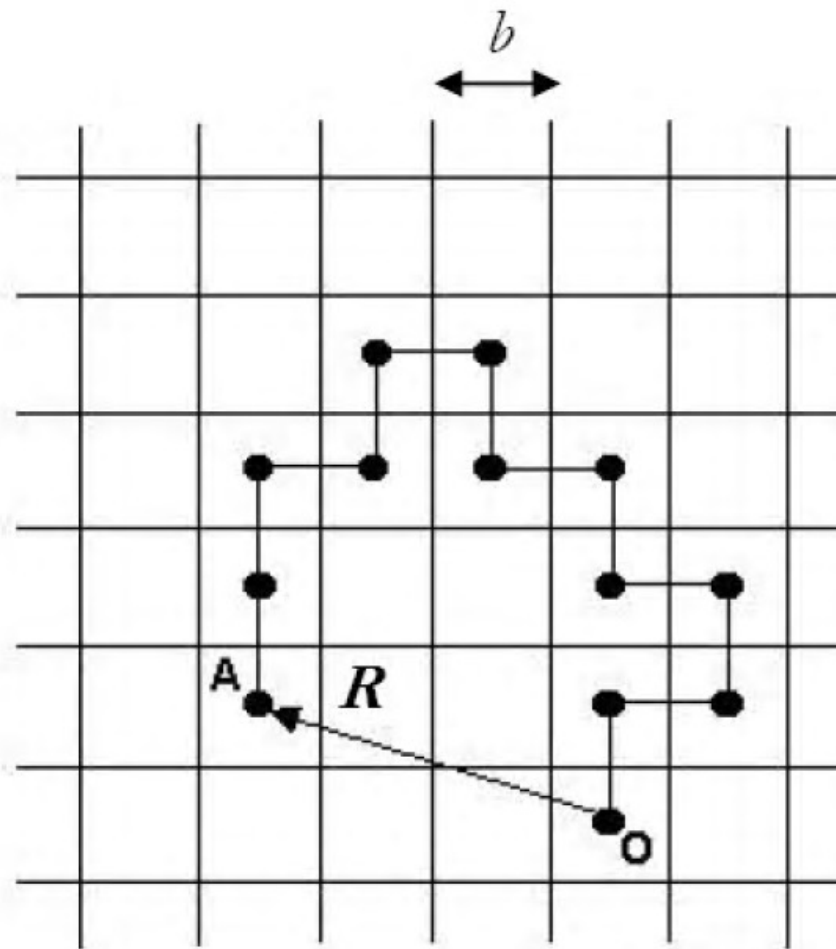


Elastomère, fibres, colles, ...



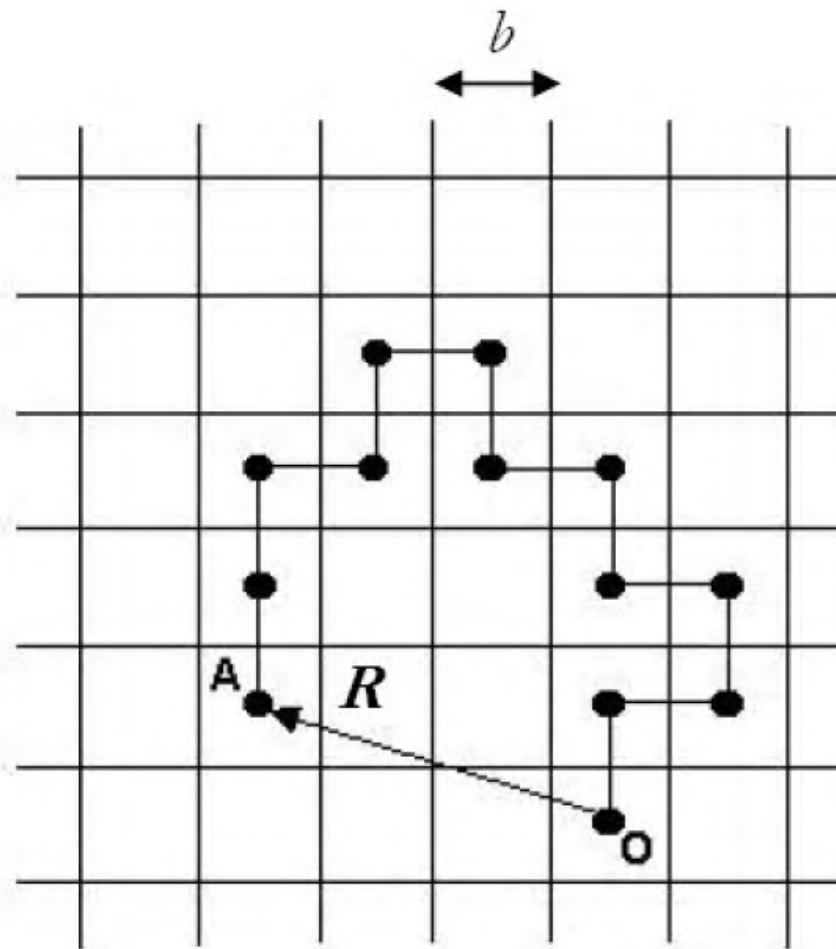
# Modèle de Marche Aléatoire

---



# Modèle de Marche Aléatoire

---



---

---

# 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 et semi-cristallins.
- On distingue les thermoplastiques, les élastomères et les thermodurcissables, suivant leur degré de réticulation