

Génie électrique et électronique
Microtechnique

Cours MSE-101(b)

Structure des matériaux I

Roland Logé (MX)

Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne



Table des matières

- Rappels sur les liaisons chimiques
- Les états de la matière (solide-liquide-gaz)
- Les niveaux de structuration des solides
- L'état cristallin (un peu de cristallographie)

Rappels sur les liaisons chimiques

- **Le tableau périodique des éléments peut s'expliquer via les niveaux d'énergie des orbitales atomiques**, et notamment du *remplissage des couches s avant les couches d et f de nombre quantique principal plus faible*.
- **La capacité des atomes à former des liaisons de différents types dépend de sa configuration électronique**: les atomes avec des *couches s, d ou f non remplies* ont tendance à former des *liaisons métalliques*, alors que les atomes des *couches p non remplies* respectent plutôt la règle de l'octet et ont tendance à former des *liaisons ioniques ou covalentes*.
- **Liaison ionique: des e⁻ sont transférés d'un atome à l'autre:** caractère non directionnel, très fortes.
- **Liaison covalente: des e⁻ sont "partagés" entre atomes:** elles sont directionnelles, atomes d'électronégativité proche.
- **Liaison métallique: un bain d'e⁻ baigne des ions +:** non directionnelle, n'a de sens qu'au niveau du solide. La majorité des matériaux à l'état natif forment des liaisons métalliques.
- **L'hybridation des orbitales du Carbone permet d'expliquer les liaisons trivalentes et tétravalentes observées dans le graphite, le diamant, ou les polymères.**
- **Des liaisons faibles (< 40 kJ/mol, pont hydrogène, van der Waals) lient des molécules entre elles.** De nature électrostatique, elles sont très influentes dans les polymères.

Tableau périodique des éléments

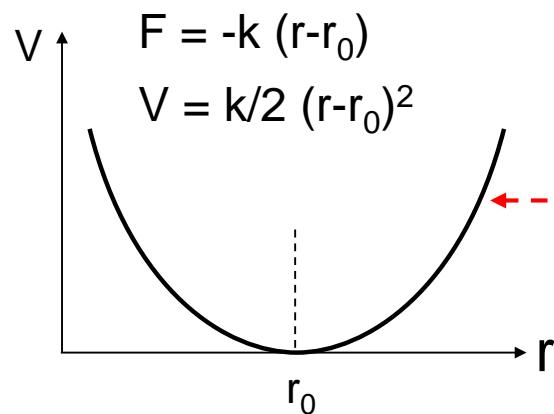
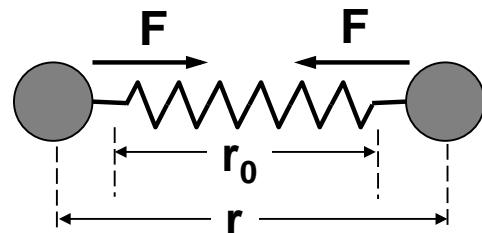
Periodic table of the elements

group	1*																	18
period	1*	Ia**																0
	1	2																2
	H	He																He
1			alkali metals	halogens														
2	Li	Be	alkaline earth metals	noble gases														
3	Na	Mg	transition metals	rare earth elements (21, 39, 57–71)														
4	K	Ca	other metals	lanthanide elements (57–71 only)														
5	Rb	Sr	other nonmetals	actinide elements														
6	Cs	Ba	3 IIIb	4 IVb	5 Vb	6 VIb	7 VIIb	8 VIIIb	9	10	11 Ib	12 IIb						
7	Fr	Ra	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
			Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
			La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
			Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cp	(Uut)	(Uuq)	(Uup)	(Uuh)		(Uuo)
lanthanide series		58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71			
		Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
actinide series		90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103			
		Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr			

Liaisons chimiques

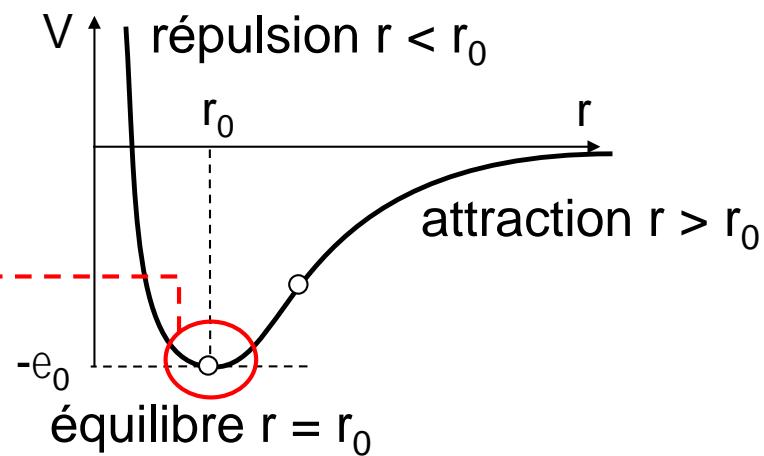
- Un modèle simple d'interaction entre atomes consiste à considérer un **potentiel d'interaction V** , qui représente l'énergie de deux atomes à **distance r** l'un de l'autre.
- On déduit la force F entre atomes à partir de $F = -dV/dr$ (**analogie : ressort**)
- La position d'équilibre r_0 dépend du type d'atome et de la liaison. Elle dépend aussi du niveau d'énergie interne (vibration) de l'atome, donc de la température

$$dV = -F dr$$



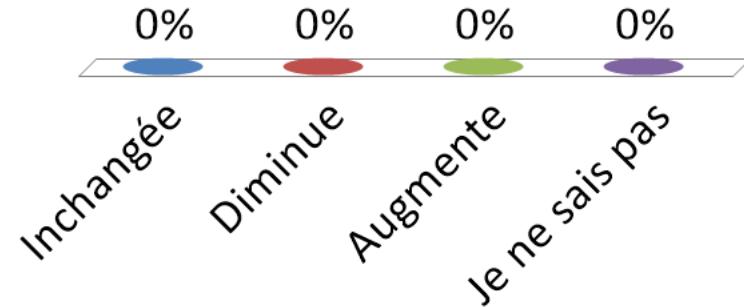
Potentiel de Lennard-Jones:

$$V = \epsilon_0 \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right]$$



Evolution de la position d'équilibre r_0 avec une augmentation de température ?

- A. Inchangée
- B. Diminue
- C. Augmente
- D. Je ne sais pas



Etats de la matière

L'état de la matière dépend de la **température** et de la **pression ambiante**.
Les différents états se distinguent d'abord par la **masse volumique**:

- **Gaz**
- **Liquide**
- **Solide amorphe**
- **Solide cristallin**

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

$$\rho_l \approx 10^3 - 20 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$$

$$\rho_a \approx \rho_l$$

$$\rho_c \approx \rho_l + \Delta\rho$$

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

= -9% pour la glace à 0°C

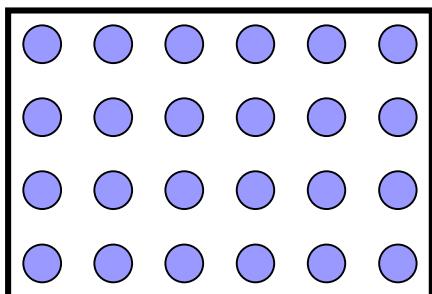
= -2.3% pour Si à 1'414°C

- En général, le solide cristallin est le plus dense, car il est ordonné. Il a donc la masse volumique la plus élevée.
- Les phases condensées liquide et solide se distinguent ensuite par leurs **propriétés mécaniques**.



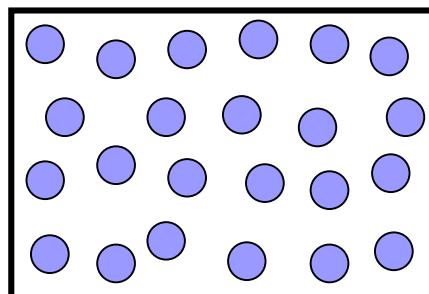
Etats de la matière

La densité résulte des interactions entre atomes au niveau microscopique et de leur arrangement



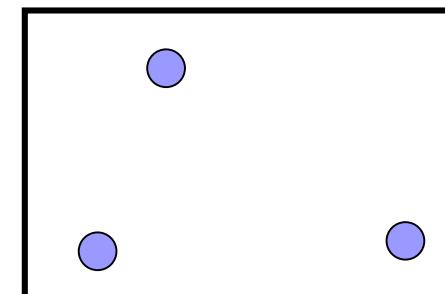
Cristal parfait

Arrangement régulier d'atomes - Ordre à longue distance



Liquide (ou amorphe)

Ordre à courte distance avec fluctuations - Désordre à longue distance



Gaz

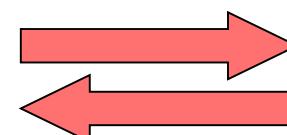
Distance entre atomes élevée – Désordre total

Fusion



Cristallisation
Solidification

Evaporation



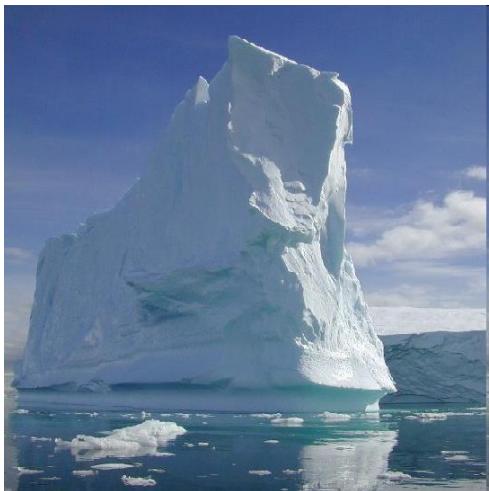
Condensation

Etats de la matière

Fluide:

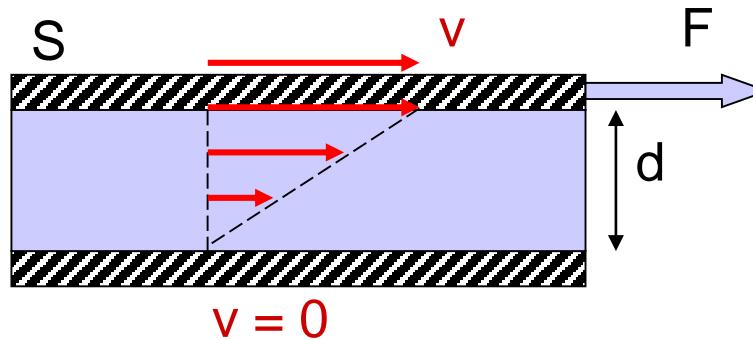
Viscosité μ [Pa s]:

$$\mu_g \approx 2 \times 10^{-5} \text{ Pas}$$



$$\mu_l \approx 1 \times 10^{-3} \text{ Pas}$$

$$\mu_s \approx 1.5 \times 10^{13} \text{ Pas}$$



Essai de cisaillement



$$\mu_l \approx 1 \times 10^{-2} \text{ Pas}$$



$$\mu_l \approx 10 \text{ Pas}$$

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

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



$$\mu_l \approx 100 \text{ Pas}$$

Etats des corps solides

Mis à part les polymères (étudiés plus loin), les matériaux tels que les **métaux et céramiques** peuvent se présenter sous:

- Une **forme vitreuse**



Vitrail et verre
(mélange de silice + autres oxydes)



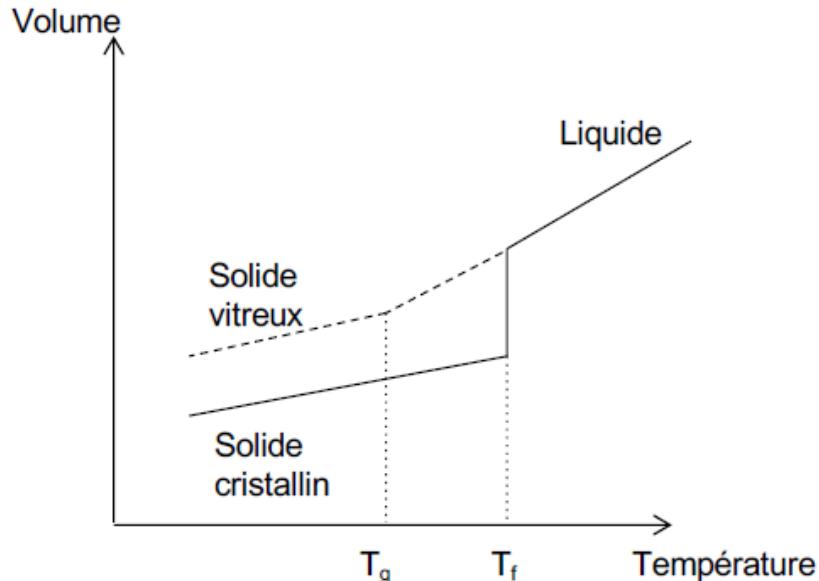
- Une **forme cristalline**



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

Etat vitreux

L'état vitreux correspond à un liquide très **visqueux** qui n'a pas pu s'organiser lors du refroidissement pour réduire son volume, et n'a donc pas pu cristalliser.



Variation de volume au refroidissement
 T_f température de fusion,
 T_g température de transition vitreuse



A 30-g ingot of the BMG Ti40Zr20Cu5Al5Be30 with a measured density of 4.76 g/cm³

Verres classiques, mais aussi verres métalliques (ici à base de Ti, Zr, Cu, Al, Be)

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.

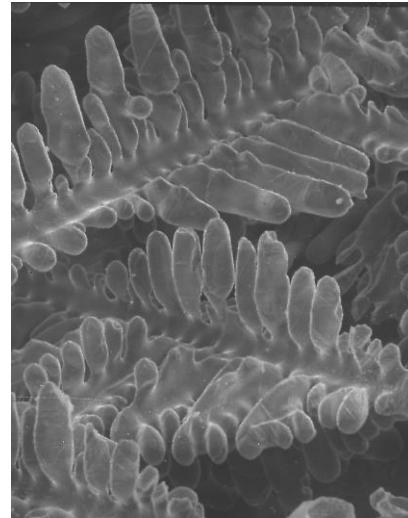
Pièce métallique - hétérogénéité



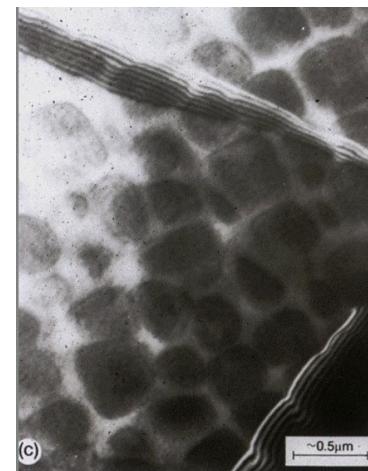
Aube de turbine Ni
(10 cm)



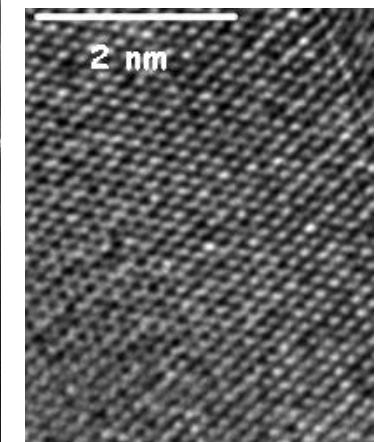
Grains
(mm)



Dendrites
(10-100 μm)



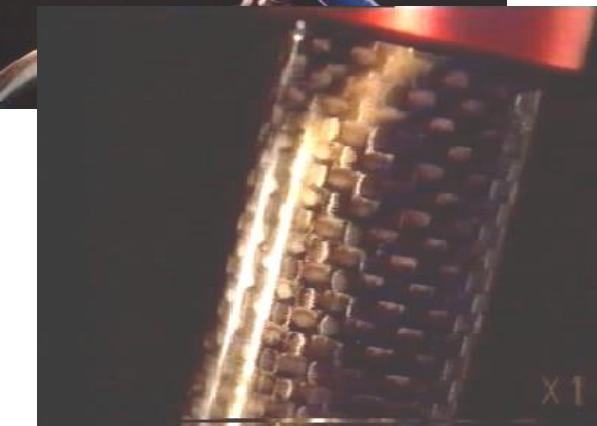
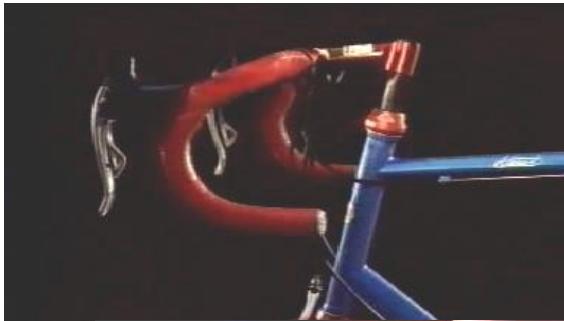
Précipités Ni_3Al
(10-100 nm)



Atomes
(0.1 nm)

Niveaux de structuration des solides

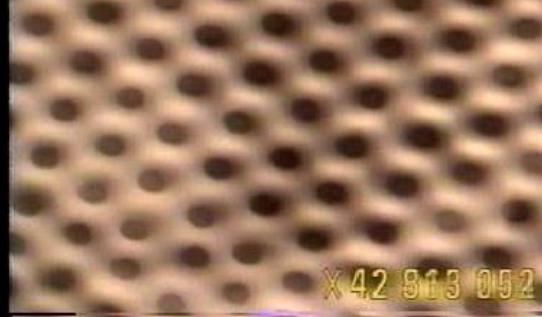
Pièce composite à matrice polymère



Potence de vélo
(10-100 cm)



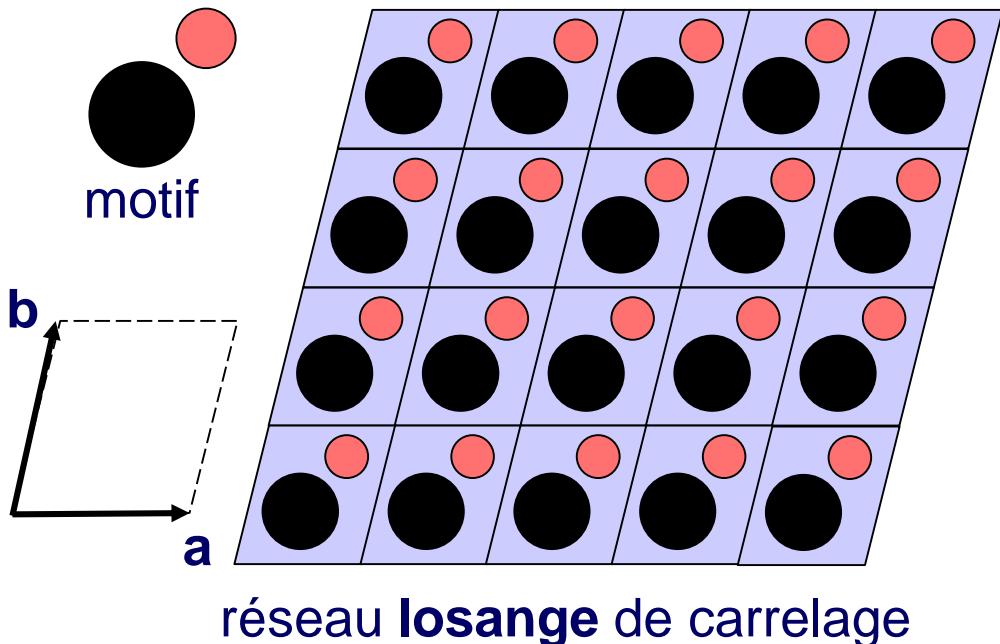
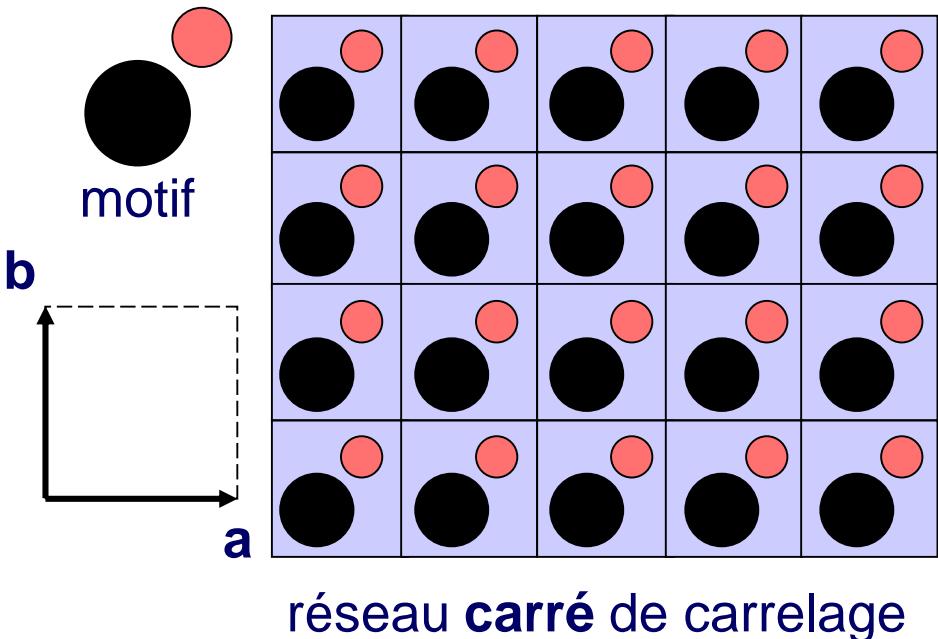
Fibres de carbone enrobées
dans une matrice époxy
(1-10 µm)



Arrangement hexagonal
des atomes de C,
hybridation Sp²
(0.1 nm)

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**.

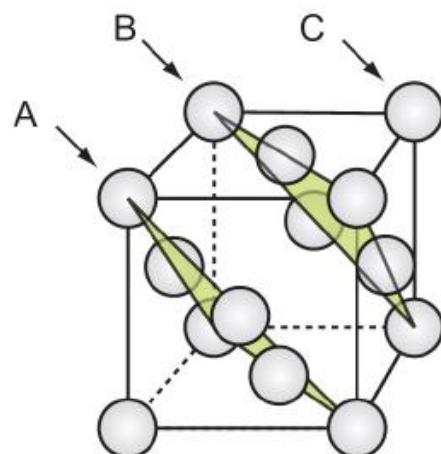


Ainsi, un carrelage à 2 dimensions peut être un "réseau" carré ou en losange. Chaque carreau porte un motif, ici 2 cercles ("atomes") rose et noir.

Etat cristallin

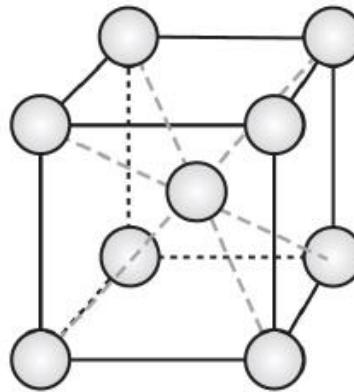
La plupart des **solides** solidifient sous forme cristalline. Il en existe de nombreuses formes (voir plus loin), mais la plupart des métaux adoptent une des **3 structures** ci-dessous.

**Cubique Faces
Centrées**



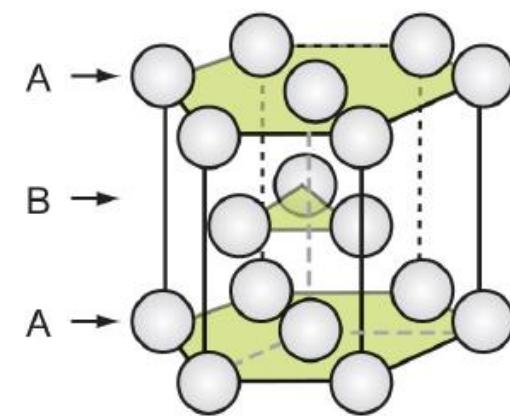
CFC

Cubique Centré



CC

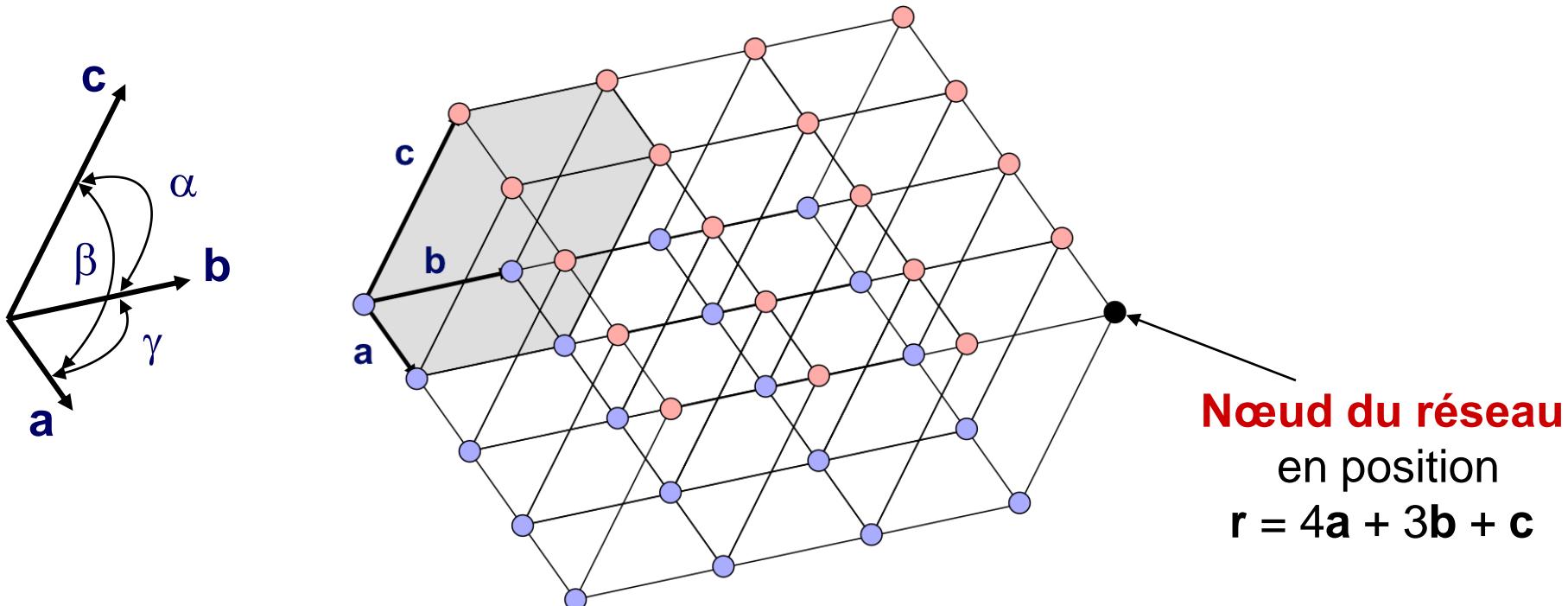
Hexagonal Compact



HC

Etat cristallin

Un **r  seau cristallin** en 3 dimensions requiert 3 vecteurs **a**, **b** et **c** qui permettent de r  p  ter une **maille** dans l'espace



Sur chaque n  ud du r  seau, le cristal appara  t exactement identique

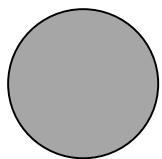
On dit qu'il y a une invariance par translation le long des trois vecteurs **a**, **b** et **c**

Etat cristallin

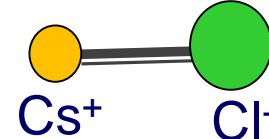
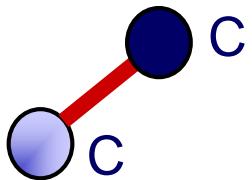
On distingue **7 systèmes cristallins**, reflétant la **symétrie** du cristal, et **14 réseaux de Bravais** (= **arrangements atomiques**, voir diapositive suivante).

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...)



Fe



Cs⁺

Cl⁻

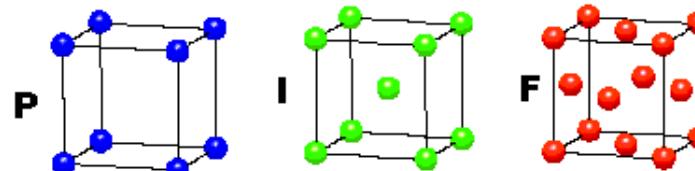
Réseau de Bravais: construction mathématique d'un ensemble infini de points invariant par translation selon trois axes non colinéaires appelés vecteurs de bases.

$$B(0, \vec{a}, \vec{b}, \vec{c}) = \left\{ M / \overrightarrow{OM} = l\vec{a} + m\vec{b} + n\vec{c}, (l, m, n) \in \mathbb{Z}^3 \right\}$$

Les 14 réseaux de Bravais (pour information)

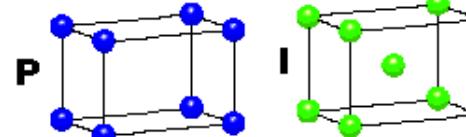
Cubique

$$a = b = c \\ \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



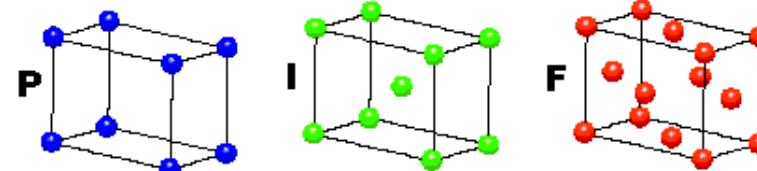
Tétragonal

$$a = b \neq c \\ \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Orthorhombique

$$a \neq b \neq c \\ \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



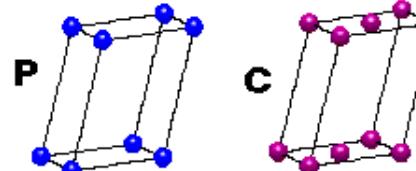
Hexagonal

$$a = b \neq c \\ \alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$$



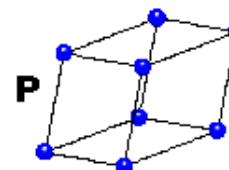
Monoclinique

$$a \neq b \neq c \\ \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$$



Triclinique

$$a \neq b \neq c \\ \alpha \neq \beta \neq \gamma$$



Trigonal ou
rhomboédrique

$$a = b = c \\ \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

7 systèmes cristallins /
14 réseaux de Bravais

P : primitif

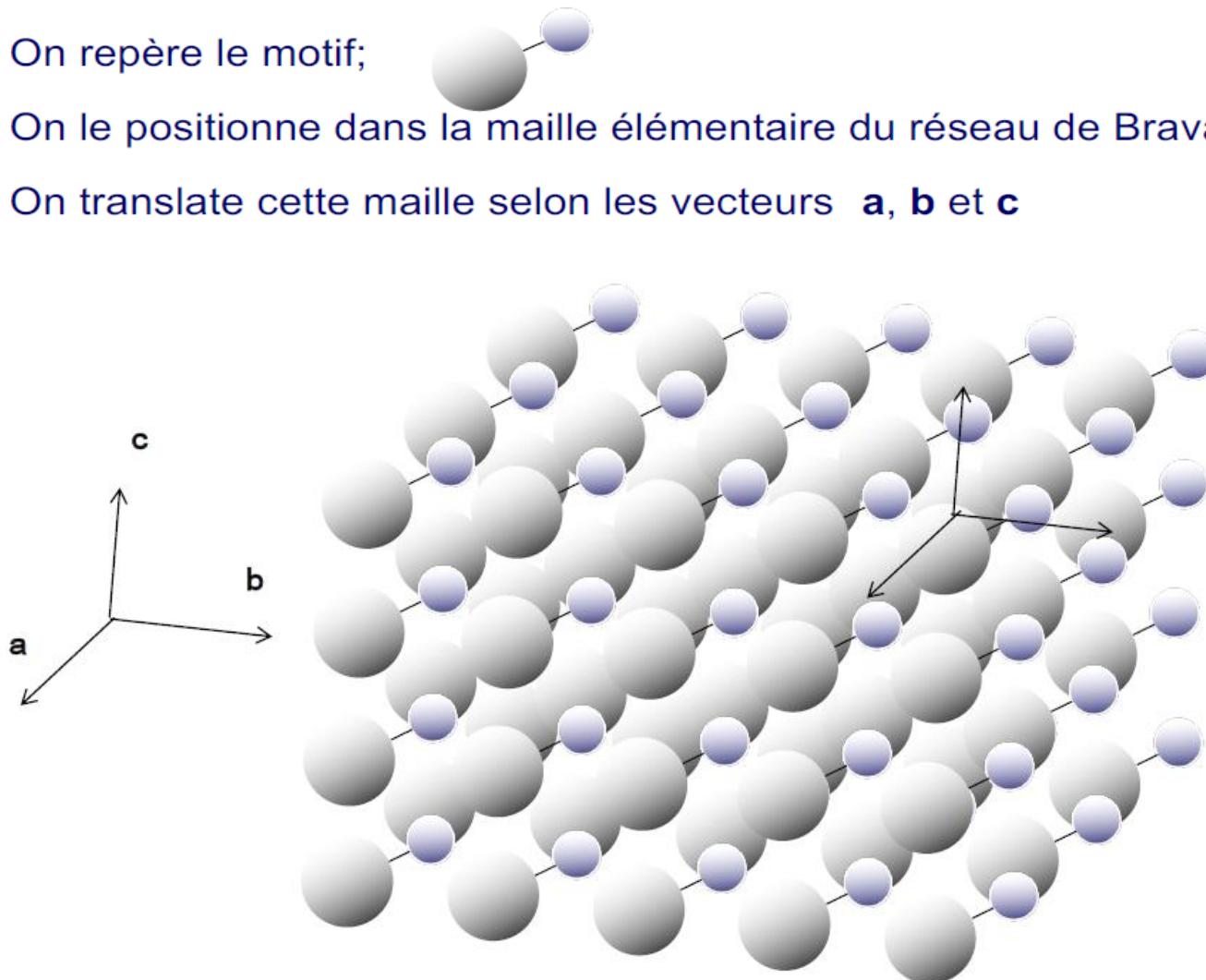
I : centré

F : faces centrées

C : bases centrées

Cristal = répétition du motif suivant a, b, c

- On repère le motif;
- On le positionne dans la maille élémentaire du réseau de Bravais
- On translate cette maille selon les vecteurs **a**, **b** et **c**



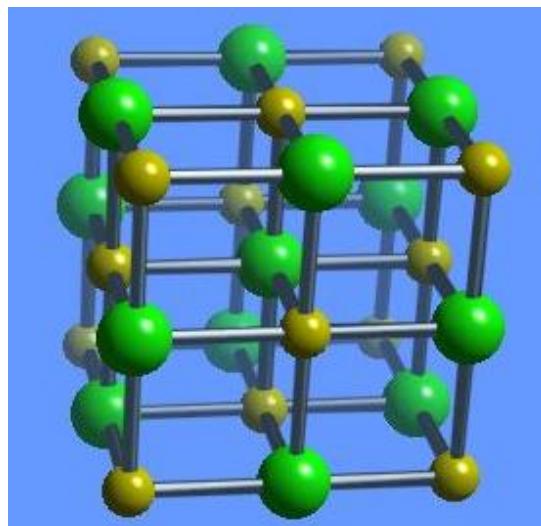
Etat cristallin: Système cubique

3 exemples de même **réseau cristallin** mais de **motifs** différents

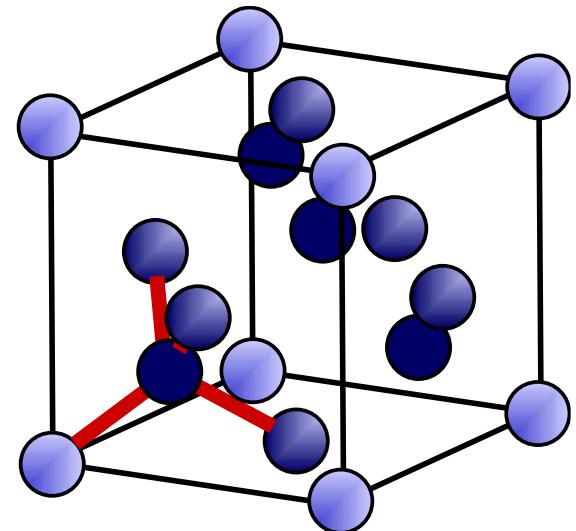
Réseau: **Cubique à Faces Centrées (CFC)** c-a-d Cubique F en slide 18



Aluminium

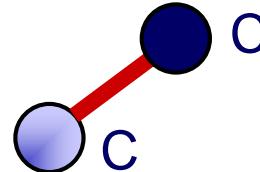
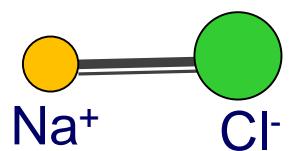
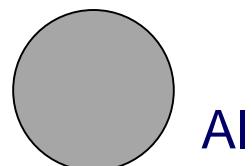


NaCl



Diamant

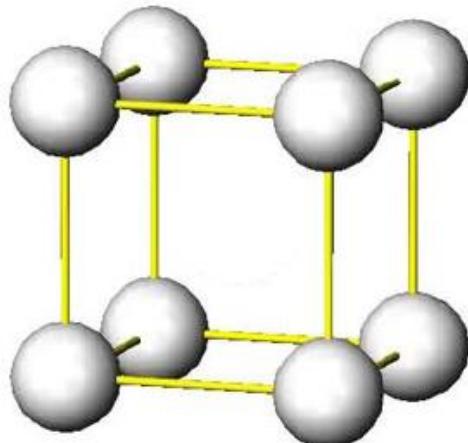
Motifs:



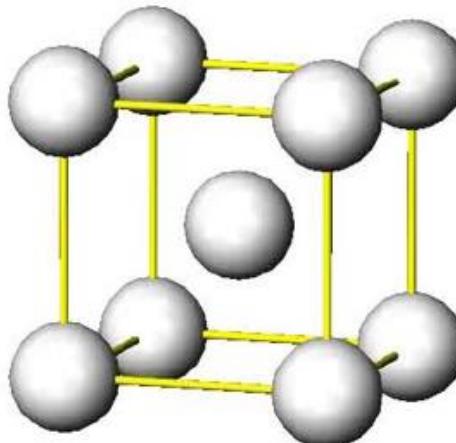
3 réseaux de Bravais du système cubique

On considérera principalement le système cubique dans ce cours, avec ses trois réseaux de Bravais.

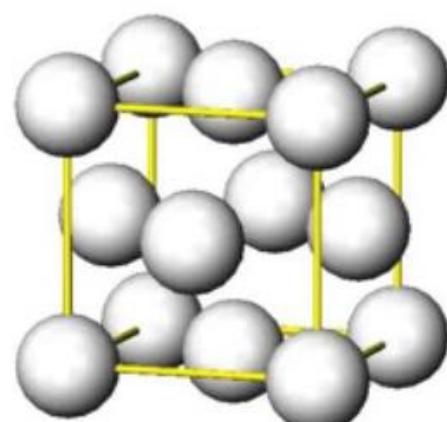
**Cubique Simple
(P)**



**Cubique Centré - CC
(I)**



**Cubique Faces
Centrées - CFC
(F)**



Dans chaque maille cubique:

1 atome en propre
 $(8 \times 1/8)$

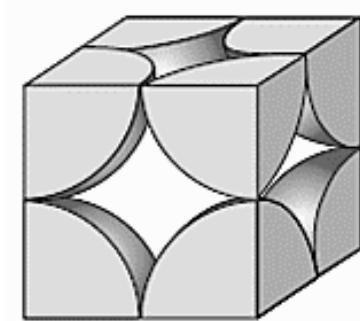
2 atomes en propre
 $(8 \times 1/8) + 1$

4 atomes en propre
 $(8 \times 1/8) + (6 \times 1/2)$

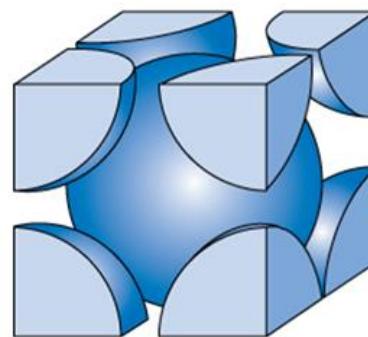
3 réseaux de Bravais du système cubique

Le **taux d'occupation** de la matière est lié à la **compacité** du réseau, c.-à-d. le pourcentage de volume occupé par la matière (atomes \approx sphères dures qui se touchent). Il influe sur la **densité**.

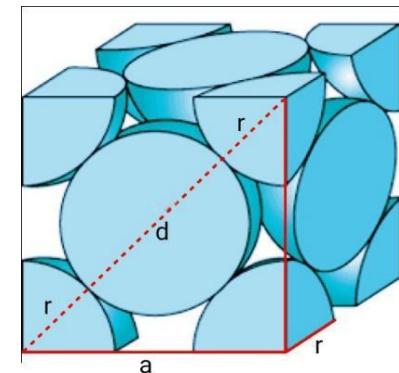
**Cubique Simple
(P)**



**Cubique Centré
(I)**



**Cubique Faces
Centrées
(F)**



Taux d'occupation:

52.4 %

68 %

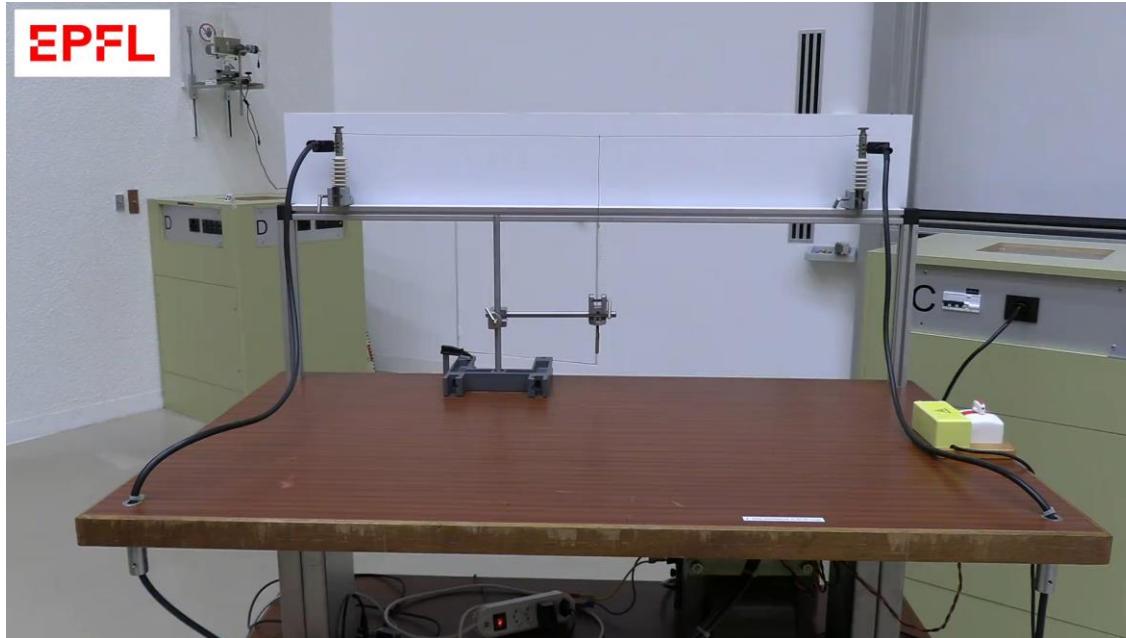
74 %

→ compacité

Expérience de changement de phase

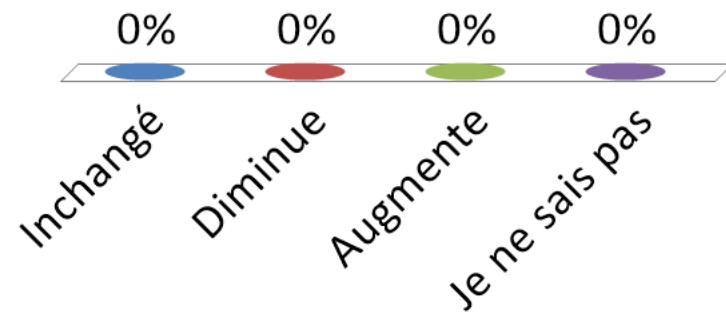
Le fer passe d'une structure cubique centrée (CC) à une structure cubique faces centrées (CFC) autour de **910° C.**

- Lors de ce passage, sa densité et son volume changent.
- Aux autres températures, le matériau subit de la simple dilatation thermique



Si on refroidit le fil de fer depuis 1100°C , comment évolue sa longueur au passage de $T = 910^{\circ}\text{C}$?

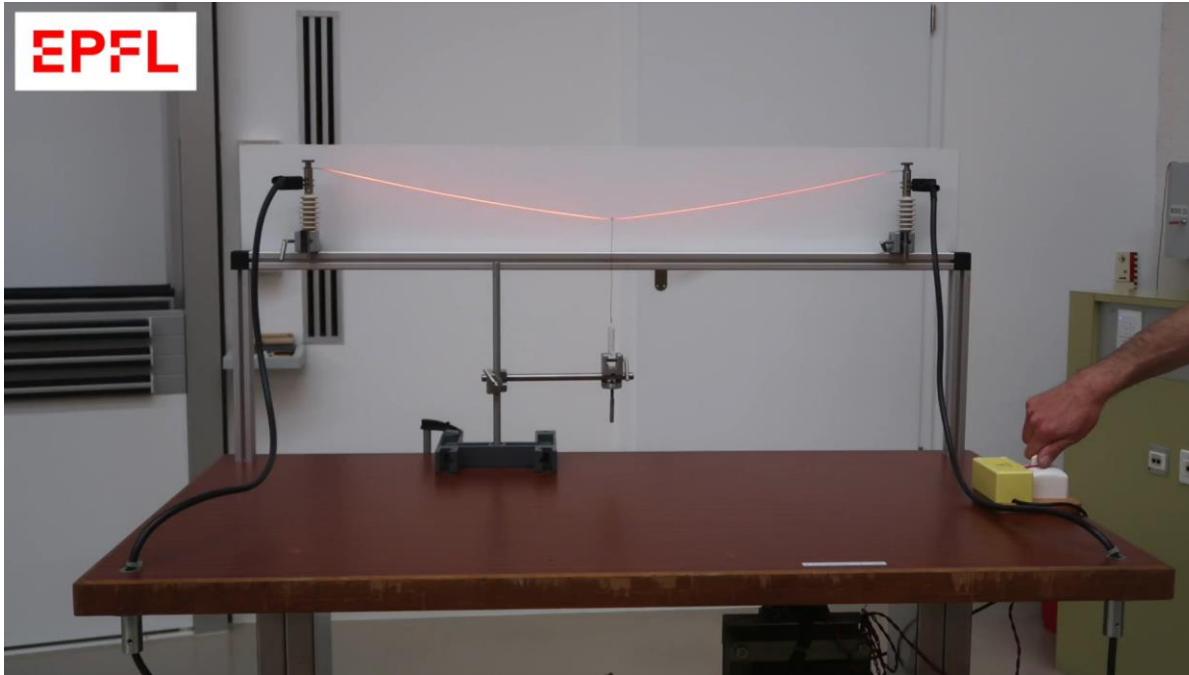
- A. Inchangé
- B. Diminue
- C. Augmente
- D. Je ne sais pas



Expérience de changement de phase

Le fer est cubique centré (CC) à $T < 910^\circ \text{ C}$, et cubique faces centrées (CFC) à $T > 910^\circ \text{ C}$.

- Au **chauffage**, CC → CFC : densité **augmente** et longueur/volume **diminue**.
- Au **refroidissement**, CFC → CC : densité **diminue** et longueur/volume **augmente**.
- Aux autres températures, le matériau subit de la simple dilatation/contraction thermique



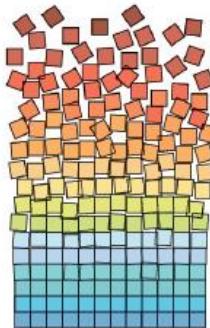
Résumé

- La matière condensée peut se présenter sous forme de liquide, solide cristallin ou solide amorphe (verre)
- Le liquide et l'amorphe n'ont pas d'ordre à longue distance
- Un cristal est un arrangement périodique d'atomes qui se caractérise par un réseau et un motif
- Le réseau est décrit par 3 vecteurs de base (**a**, **b**, **c**), selon 7 systèmes cristallins et 14 réseaux de Bravais
- Une grande partie des métaux, et certaines céramiques simples, cristallisent dans la structure cubique à faces centrées (CFC), cubique centrée (CC) ou hexagonale compacte (HC).

Pour revoir les notions abordées

- *Lire la Leçon Guidée No 1 du livre de Ashby (réseau cristallin)*

**Leçon guidée n° 1:
quelques éléments
de cristallographie**



Contenu du chapitre	
Introduction et présentation du chapitre	GL1-2
PARTIE 1: Structures cristallines	GL1-2
PARTIE 2: Espaces intersticiels	GL1-6
PARTIE 3: Description d'un plan du réseau	GL1-8
PARTIE 4: Description d'une direction du réseau	GL1-10
PARTIE 5: Structures des céramiques	GL1-12
PARTIE 6: Cristaux polymères	GL1-16