

Préface

Le présent ouvrage est le support d'un cours de physique, enseigné entre 2002 et 2006, à des étudiants de l'Ecole Polytechnique. Il s'agit d'un cours qui a été suivi, chaque année, par 50 à 100 étudiants inscrits en "majeure de mécanique des structures". Cette voie optionnelle, d'une durée d'un trimestre, est, en général, choisie par des étudiants qui se destinent à une spécialisation ultérieure dans des domaines tels que le génie civil, l'industrie aéronautique, l'industrie automobile, l'industrie nucléaire, ou la recherche en science des matériaux. Elle propose un ensemble de cours relatifs aux propriétés mécaniques des matériaux solides. Y sont enseignées, en particulier, les méthodes utilisées par les mécaniciens pour analyser les propriétés de *déformation plastique* des matériaux solides ou leur *rupture*.

Le cours de physique faisant partie de cette voie, s'attache à présenter le mécanisme physique de la plasticité, qui repose essentiellement sur l'existence et le déplacement des *dislocations*. L'étude de ces défauts linéaires des solides cristallins occupe trois des neuf chapitres de l'ouvrage. Trois autres chapitres introduisent des éléments de cristallographie ou de mécanique nécessaires à la discussion de leurs propriétés ou bien décrivent d'autres types de défauts avec lesquels les dislocations sont susceptibles d'interagir. Un gros chapitre est consacré à la description du mécanisme de la déformation plastique, à partir des éléments précédents. Enfin, les deux chapitres restants sont, d'une part, un chapitre d'introduction visant à justifier l'articulation de l'ouvrage en anticipant sur ses résultats, et, d'autre part un chapitre de compléments relatif à la description, à l'échelle atomique, des propriétés *élastiques*.

La fin de l'ouvrage comprend des exercices, et leurs corrigés, supports de séances de travaux dirigés ou de contrôles écrits.

Il convient de signaler que l'inspiration initiale de cet ouvrage provient d'enseignements antérieurs de la même matière aux étudiants de l'Ecole Polytechnique. Un premier cours avait été élaboré en 1989 par Yves Quéré, s'appuyant sur les derniers chapitres de son ouvrage de "Physique des Matériaux" (Editions Ellipses 1988). Cet enseignement a été poursuivi par Denis Gratias, entre 1994 et 2002, sur la base de son manuel d'enseignement de l'Ecole Polytechnique (non-publié) intitulé "Introduction à la Physique des Matériaux". Ces deux textes couvrent un ensemble de sujets plus large que ceux développés ici. Ils font, en particulier, une place notable aux changements de phases en métallurgie, ainsi qu'au mécanisme de la rupture.

On trouvera, par ailleurs, à la fin du chapitre 1, une liste de livres de référence, écrits en français ou en anglais, et traitant de manière plus approfondie des thèmes développés dans le présent ouvrage. Il s'agit, le plus souvent, de textes publiés au cours des années 1960-1970 (et éventuellement réédités par la suite), c'est à dire à la fin de la période de clarification et de décantation des idées centrales relatives aux dislocations et à leur rôle dans le mécanisme de la plasticité. Contrairement aux deux ouvrages de mes collègues Yves Quéré et Denis Gratias, ce sont, pour la plupart, des ouvrages destinés à des chercheurs plutôt qu'à des étudiants.

Il convenait ici d'extraire d'une matière très abondante, et d'une très grande diversité de comportements des matériaux réels, un ouvrage adapté à un enseignement de courte durée : 8 cours magistraux et autant de séances d'exercices. Il fallait donc se limiter aux idées principales du sujet, et montrer leur pertinence pour interpréter des phénomènes bien connus de tous (plus ou moins grande dureté des métaux, plus grande facilité de déformation "à chaud", etc...). Il fallait également décrire le principe des méthodes de calcul utilisées, et faire acquérir aux étudiants une certaine aptitude "opératoire" à leur mise en oeuvre pratique.

Il s'est avéré qu'une bonne assimilation générale de cet enseignement a pu, chaque année, être obtenue à partir de l'organisation suivante des cours : Chapitres 1 et 2 (1 séance), chapitres 3 et 4 (1 séance), chapitre 5 (2 séances), chapitre 6 (1 séance), chapitre 7 (1 séance), chapitre 8 (2 séances).

La configuration géométrique des dislocations, et leur déplacement, étant parfois compliqués à représenter, il a été d'une certaine utilité pédagogique d'avoir accès sur le WEB à des sites, signalés à la fin du chapitre 1, sur lesquels des simulations numériques, des illustrations et des photographies sont disponibles et permettent une illustration vivante des propriétés discutées.

La collaboration directe avec Denis Gratias lors de son enseignement, entre 2000 et 2002, m' a été précieuse pour imaginer la composition de cet ouvrage. De nombreuses remarques utiles sont dues aux collègues avec qui j'ai partagé la mise en oeuvre de l'enseignement : Alain Barbu, François Beuneu, Yann Le Bouar, et Jean-Eric Wegrowe. Je les en remercie. J'ai été très sensible à l'encouragement amical de mes collègues mécaniciens, Dominique Barthes-Biesel, Pierre Suquet, et André Zaoui, responsables de la "majeure" dans laquelle mon enseignement était intégré. Enfin, je suis reconnaissant à Jean-Paul Coard, responsable des Editions de l'Ecole Polytechnique, à Véronique Pellouin et Frédéric Zantonio du Centre Polymédia, pour l'aide qu'il m'ont apportée dans la réalisation de ce livre.

Jean-Claude Tolédano
Paris, décembre 2006

Chapitre 1

Introduction

1.1 Buts de l'ouvrage

Depuis l'âge du bronze l'humanité pratique le travail des métaux en les déformant par l'action de forces, cette action étant facilitée par le chauffage du métal. Une telle mise en forme n'est possible que parce que les métaux, ainsi que, dans une moindre mesure, la plupart des corps solides, sont susceptibles de subir une déformation permanente quand on les soumet temporairement à des forces extérieures d'intensité suffisante. Cette propriété mécanique des solides est leur *plasticité*. Cet ouvrage a pour objectif de présenter les idées qui sous-tendent l'explication physique *microscopique* du comportement plastique des solides.

Notre attention se portera presque exclusivement sur le cas des solides cristallins, c'est à dire des solides constitués par un assemblage spatialement périodique d'atomes. Deux raisons justifient cette limitation du champ de l'ouvrage.

La raison principale est que la périodicité microscopique des cristaux est un élément essentiel de la démarche théorique explicative de la plasticité qui a été développée au cours des quatre-vingt dernières années. En effet, cette démarche implique un rôle central des *dislocations*, qui sont des défauts de régularité spécifiques de la configuration atomique périodique du solide. Les interactions de ces défauts avec d'autres dislocations, avec des impuretés, ou avec le potentiel périodique associé à la configuration des atomes sont les clés de la compréhension de leur création, de leur multiplication, de leur mobilité, c'est à dire des ingrédients indispensables à la clarification des différents aspects des propriétés plastiques d'un solide.

Une deuxième raison est que les *métaux et alliages*, qui sont les matériaux de référence des études de la plasticité, sont des cristaux. Plus précisément ce sont généralement des assemblages de *grains* accolés les uns aux autres, chaque grain étant un *crystal*, de dimension micronique, dont les propriétés régissent en grande partie les propriétés du métal.

Dans le but de préciser l'objet de l'ouvrage ainsi que son articulation, rappelons, de façon schématique, les lois de comportement mécanique dont nous

allons analyser l'origine microscopique.

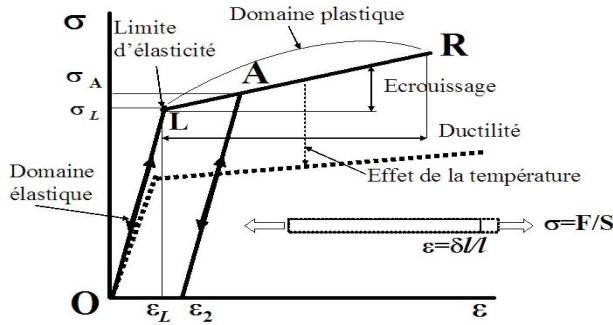


FIG. 1.1 – Relation schématique entre contrainte et déformation dans un matériau solide. OL est le domaine élastique. LR est le domaine plastique.

La figure 1.1 rappelle le comportement mécanique idéalisé d'un matériau solide. On y a représenté la relation entre la contrainte σ imposée au solide et la déformation ϵ qui en résulte. De façon simplifiée, on peut, dans un premier temps, considérer que cette relation est celle que l'on déduit de la mesure de l'allongement relatif $\epsilon = \delta l/l$ d'un barreau de section S soumis à une force de traction $F = \sigma.S$. Quatre aspects de cette relation peuvent être soulignés.

i) Pour une contrainte inférieure à σ_L , appelée *la limite élastique*, la déformation est *réversible* : la courbe $\sigma(\epsilon)$ est la même pour des contraintes croissantes ou décroissantes. La région **OL** ($0 < \sigma < \sigma_L$) est le domaine de comportement *élastique*. On peut considérer, et c'est une bonne approximation, que la déformation y est proportionnelle à la contrainte : $\sigma \simeq C\epsilon$. Dans les métaux, l'ordre de grandeur du coefficient C qui caractérise la *rigidité* du matériau est 1-10 tonnes par millimètre carré (10^{10} - 10^{11} Pascals). La valeur de la contrainte limite σ_L , qui caractérise la *dureté* du matériau, dépend, non-seulement de la nature du matériau, mais également des traitements mécaniques qu'il a subis et d'autres paramètres tels que sa température. Dans un matériau "mou" σ_L peut être inférieur à 100 g/mm^2 (10^6 Pascals) alors que dans un matériau "dur" σ_L peut être supérieur à 100 kg/mm^2 (10^9 Pascals). Une valeur moyenne de la déformation ϵ_L correspondant à la limite d'élasticité est $\sim 1\%$.

ii) Pour $\sigma > \sigma_L$, on se trouve dans le domaine **LR** de comportement *plastique* dans lequel l'allongement devient non-réversible. L'annulation de la contrainte à partir, par exemple, du point **A** détermine une réduction de l'allongement le long de la droite **A** ϵ_2 et laisse subsister une déformation permanente ϵ_2 .

iii) L'application d'une contrainte modérée, à partir de l'état de déforma-

tion ϵ_2 , détermine, à nouveau, un comportement réversible de type élastique¹ : $\sigma \simeq C'(\epsilon - \epsilon_2)$. Par accroissement de la contrainte, on atteint une nouvelle limite élastique σ_A . Au delà du point **A**, la courbe $\sigma(\epsilon)$ reprend le trajet **AR**. La situation schématique représentée sur la figure 1, dans laquelle **LA** a une pente positive, caractérise un matériau *écrouissable*. La limite d'élasticité σ_A après déformation plastique est supérieure à σ_L . (le matériau "durcit" en se déformant). Le point d'arrêt **R** de la courbe correspond à la rupture du solide qui est atteinte après un allongement relatif dont la valeur caractérise la *ductilité* matériau. Comme sa dureté, la ductilité d'un matériau dépend fortement de sa nature, de son "histoire mécanique", et de la température. Elle peut être quasiment nulle pour les matériaux qualifiés de *fragiles* (**R** coïncide alors avec **L**). Dans des matériaux très ductiles, l'allongement relatif avant rupture peut atteindre un facteur de plusieurs dizaines.

iv) La température modifie très notablement les propriétés précédentes : l'accroissement de la température facilite généralement la déformation plastique par diminution de σ_L , par un moindre durcissement, par une augmentation de la ductilité,....

L'objet de cet ouvrage est, principalement, de rendre compte, à partir d'une analyse des phénomènes à différentes échelles microscopiques (l'échelle de l'atome, mais également une échelle moins fine qui est celle des dislocations) des comportements *généraux* précédents : mécanismes qui sous-tendent la plus ou moins grande dureté, origines du phénomène d'*écrouissage*, et de l'ampleur de la ductilité, effets de la température sur les caractéristiques précédentes.

De manière plus qualitative, on analysera également quelques uns des éléments qui permettent de comprendre la diversité des comportements mécaniques de solides spécifiques, par exemple la dureté très différente de différents métaux, ou leur moindre dureté que celle de solide non-métalliques comme le diamant, ou encore l'effet plus prononcé de la température sur certaines classes de matériaux.

Le tableau ci-dessous montre quelques exemples de valeurs mesurées dans des matériaux usuels à la température ordinaire.

Matériau	Rigidité à l'allongement (10^{10} Pa)	Dureté (10^7 Pa)	
Plomb	5	$\sim 0,01$	
Aluminium	11	$\sim 0,1$	
Cuivre	17	$\sim 0,1$	(1.1)
Or	19	$\sim 0,1$	
Fer	24	1-10	
Silicium	17	10-100	
Diamant	100	> 100	

¹Dans le cas le plus simple, qui est celui représenté, la constante de proportionnalité est approximativement la même dans les différents régimes réversibles ($C' \simeq C$). Ceci sera justifié aux chapitres 8 et 9 par la préservation de la perfection de l'ordre cristallin, dans le volume du solide.

1.2 Origine du comportement plastique

Dans ce paragraphe nous esquissons quelques unes des idées explicatives essentielles du comportement plastique. Ceci aura pour avantage d'éclairer la place des notions introduites dans chacun des chapitres de l'ouvrage. Les idées ainsi présentées par anticipation ne prendront cependant tout leur sens qu'au chapitre 8, après que les éléments qu'elles mettent en jeu aient été précisés.

1.2.1 Mécanisme général du comportement plastique

Comme on l'a vu au paragraphe précédent, à l'échelle macroscopique, les comportements élastique et plastique apparaissent en continuité l'un de l'autre. Ce n'est pas le cas de leurs mécanismes microscopiques sous-jacents qui sont très différents. Pour saisir cette différence, il est utile de donner, préalablement à la description de la déformation plastique, quelques indications sur l'origine microscopique du comportement élastique.

Comportement élastique

L'interprétation microscopique du comportement élastique est a-priori très simple. Dans un solide, les atomes possèdent une *configuration spatiale d'équilibre*,² avec des distances interatomiques bien déterminées. En l'absence de force extérieure, toute modification de cette configuration accroît l'énergie du solide et a donc tendance à disparaître. C'est précisément ce que détermine une déformation macroscopique du matériau, induite par des forces extérieures, et qui se traduit par de petits écarts aux distances nominales entre atomes. Si l'on supprime les forces extérieures, il y a donc retour des atomes à leur configuration initiale, ce qui explique la réversibilité du comportement. La petitesse des écarts de distances interatomiques, par rapport à l'équilibre, (inférieurs au pourcent) fait que les forces effectives "de rappel" vers les positions d'équilibre sont proportionnelles aux écarts, d'où la linéarité du comportement élastique.

Bien que son principe soit élémentaire, l'application quantitative du schéma précédent au calcul des rigidités élastiques d'un matériau particulier n'est actuellement réalisée que pour des matériaux dont la configuration atomique est simple. En effet, les déformations mécaniques sont associées à des déplacements collectifs d'un grand nombre d'atomes en interaction mutuelle. Le calcul, qui doit être fait sur la base de la mécanique quantique, doit alors prendre en compte ce grand nombre d'interactions. Ce n'est que récemment que la grande puissance des ordinateurs a permis d'aborder ce calcul pour des matériaux réels.

A titre indicatif, on analysera brièvement, au chapitre 9, la nature des déplacements collectifs d'atomes correspondant à des déformations macroscopiques, et on esquissera la méthode de principe d'un tel calcul.

²A très basse température, cette configuration d'équilibre correspond à l'énergie minimale de l'ensemble des particules en interaction qui constituent le solide.

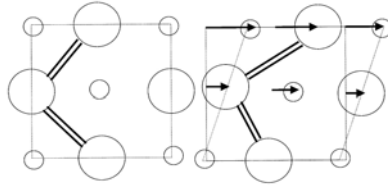


FIG. 1.2 – Représentation schématique des déplacements atomiques induits par un cisaillement. Il y a modification des distances interatomiques et des angles des liaisons chimiques, ce qui engendre des forces qui tendent à ramener distances et angles à leurs valeurs d'équilibre.

Comportement plastique

L'interprétation microscopique des comportements observés au delà de la limite élastique met en jeu plusieurs idées, toutes importantes, issues de l'observation ou confirmées par elle.

Il y a tout d'abord la remarque, faite au début des années 1920 (**Polanyi et Schmid**) que l'allongement permanent induit dans une éprouvette par une traction longitudinale est le résultat cumulé de *glissements* inclinés par rapport à la direction de traction (fig 1.3). Ces glissements se produisent dans des *directions de plans* caractéristiques de la configuration atomique du solide cristallin considéré. Par ailleurs, les *amplitudes* de ces glissements, inférieures au micron, sont des multiples des périodes élémentaires attachées à la périodicité spatiale du solide cristallin. A l'échelle microscopique, la déformation plastique apparaît donc comme *un phénomène discontinu*, dont les caractéristiques sont étroitement liées à la configuration spatiale spécifique des atomes dans le matériau considéré.

Il y a ensuite l'observation que les valeurs mesurées des limites d'élasticité σ_l (de l'ordre de $10^6 - 10^8$ Pascals) sont très inférieures à celles qui résulteraient des forces de cohésion d'un solide cristallin dont la configuration des atomes serait parfaitement régulière. Cette observation a conduit, à partir des années 1930, à l'hypothèse que les faibles limites d'élasticité proviennent, précisément, de la présence, dans le solide, de *défauts linéaires*³ de la configuration des atomes. Ces défauts *facilitent* les glissements parallèles aux plans atomiques. L'étape élémentaire de la déformation plastique, qui consiste en un glissement d'amplitude égale à une seule période du réseau cristallin (quelques angströms), correspond à la traversée de tout l'échantillon par un tel défaut linéaire *mobile*. L'existence de ces défauts et leur rôle dans le comportement plastique ont été théorisés dès 1934 (**Orowan, Polanyi et Taylor**) et démontrés expérimentalement (fig. 1.4) à partir de 1956 (**Bollmann et Hirsch**). En particulier, il a été vérifié expérimentalement que dans de petits cristaux exempts de tels défauts, la limite

³ C'est à dire quasi-infinis dans une dimension et confinés à des dimensions atomiques dans les deux autres.

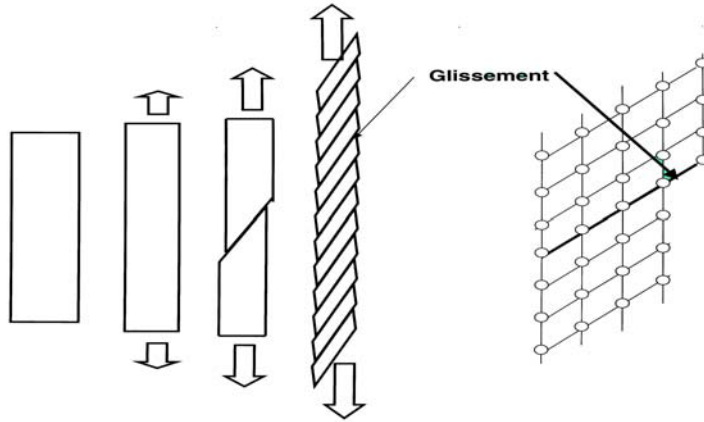


FIG. 1.3 – Etapes successives de l’allongement plastique vertical d’un barreau soumis à une traction. De gauche à droite : 1) Barreau non-déformé, 2) allongement élastique, 3) début de la déformation plastique par glissement relatif de la partie supérieure du barreau le long d’un plan incliné, 4) multiplication des glissements sur des plans parallèles. Le cumul des projections des glissements sur la verticale détermine l’allongement global observé. A droite on a représenté le glissement élémentaire à l’échelle atomique. Son amplitude est égale à une distance interatomique et sa direction est parallèle à un plan d’atomes.

d’élasticité était cent à mille fois supérieure aux valeurs courantes observées. Par ailleurs, il a été reconnu très tôt que ces défauts devaient être identifiés à des *lignes singulières* des milieux continus que les mathématiciens avaient étudiées dès le début du vingtième siècle (**Weingarten 1901, Volterra 1907**) et que les mécaniciens avaient appelées *dislocations* (**Love 1920**).

Il y a enfin la mise en relation, d’une part, des différentes caractéristiques du comportement plastique (valeur de la limite élastique, amplitude de la déformation plastique, vitesse de déformation plastique, écrouissage) avec, d’autre part, les interactions entre les dislocations et différentes sortes d’objets. Ainsi, dans le cadre de l’approximation simple où les dislocations sont considérées comme des lignes singulières d’un milieu continu élastique (**Burgers 1939, Peach et Koehler 1950**) ont pu être étudiées les interactions, de portée macroscopique, entre une dislocation et un champ de contrainte, entre deux ou plusieurs dislocations, entre dislocations et défauts ponctuels (lacunes, impuretés, agrégats de tels défauts) ou planaires (frontières entre grains cristallins). Ces interactions sous-tendent, en particulier les mécanismes de génération des dislocations (**Frank et Read 1950**). Par ailleurs, une modélisation de la configuration microscopique de la dislocation et de son interaction avec la structure cristalline (**Peierls, Nabarro 1940**) a permis une estimation de la contrainte nécessaire pour déplacer une dislocation dans un solide.

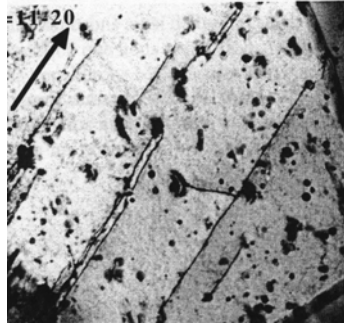


FIG. 1.4 – Observation en microscopie électronique de lignes quasi-rectilignes de dislocations de quelques microns de longueur dans le zirconium (photographie obtenue par Franck Ferrer ; Thèse 2000).

1.2.2 Diversité des matériaux et structure cristalline

La figure 1.5, anticipe sur les prochains chapitres, en indiquant quelques uns des éléments qui influent sur les propriétés mécaniques spécifiques des matériaux. On peut y relever que la configuration spatiale des atomes constitutifs (la "structure" du matériau) a une place déterminante parmi ces éléments. Ceci justifie que le cours comporte une introduction à la géométrie des cristaux à l'échelle microscopique, préalablement aux considérations physiques spécifiques des propriétés mécaniques.

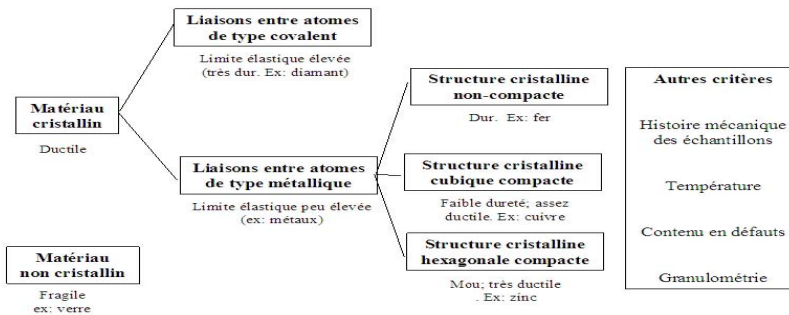


FIG. 1.5 – Principaux éléments qui déterminent la diversité des comportements plastiques des solides. Parmi ces éléments, la structure microscopique (la configuration spatiale des atomes) est un élément central.

1.3 Articulation des chapitres

Le deuxième chapitre de l'ouvrage vise à présenter le petit nombre d'éléments de géométrie cristalline qui sont indispensables à la description microscopique des dislocations, et des autres défauts qui interagissent avec les dislocations : *réseau de translations, plans réticulaires, motif, mailles, symétries*. Par ailleurs, les matériaux de référence de la mécanique étant les métaux et alliages, certaines configurations atomiques simples de ces systèmes sont décrites. Enfin, quelques indications sont données sur la configuration microscopique des solides non-cristallins qui permettront ultérieurement de comprendre la différence qualitative que ces systèmes présentent du point de vue de leur propriétés mécaniques relativement aux métaux .

Le chapitre 3 est une brève introduction aux notions de mécanique des milieux macroscopiques continus qui seront nécessaires à l'étude de la plasticité.

Le chapitre 4 revient sur la description de la configuration atomique d'un cristal pour considérer les défauts de cette configuration. On y passe d'abord en revue les différents types de défauts. Une étude plus détaillée d'un défaut simple, la *lacune*, absence d'un atome constitutif du solide, est ensuite entreprise, ce type de défaut ayant un rôle important dans le comportement plastique des solides à haute température.

Le chapitre 5 concerne l'introduction de l'objet principal du cours : la *dislocation*. Deux descriptions en sont données. L'une découle de sa nature de défaut linéaire de la configuration cristalline du solide. L'autre considère la dislocation en tant que singularité mécanique d'un milieu continu élastique. Dans les deux cas, on verra qu'on peut caractériser les propriétés géométriques et physiques d'une dislocation par un *vecteur de Burgers* de direction et de module déterminés. L'angle que font les directions locales de la ligne et de ce vecteur permettent de distinguer plusieurs types de dislocations dont on analysera les géométries macroscopique et microscopique. On considèrera, en particulier, les cas limites de la dislocation *coin* et de la dislocation *vis* ainsi que le cas d'une *boucle de dislocation*. La fin du chapitre porte sur la principale méthode expérimentale d'observation des dislocations à l'aide d'un microscope électronique.

Le chapitre 6 traite, dans le cadre de la description du solide comme milieu élastique continu, des champs de déplacement, de déformation et de contrainte, ainsi que de l'énergie mécanique associés aux dislocations. Dans le même cadre continu, on y étudie les forces induites par un champ de contraintes sur une dislocation. Ceci permet d'aborder les questions de l'interaction entre deux dislocations ou entre une dislocation et un défaut ponctuel.

Le chapitre 7 approfondit la description microscopique (schématique) d'une dislocation pour étudier la possibilité de la déplacer dans le solide.

Le chapitre 8 complète les différents éléments mis en place dans les chapitres précédents, en abordant les mécanismes de génération et de mobilité des dislocations. On est alors à même d'analyser les principes généraux du comportement plastique des solides ainsi que les variations de ce comportement selon la nature du matériau solide considéré et la température.

La figure 1.6 résume schématiquement l'articulation des différents chapitres

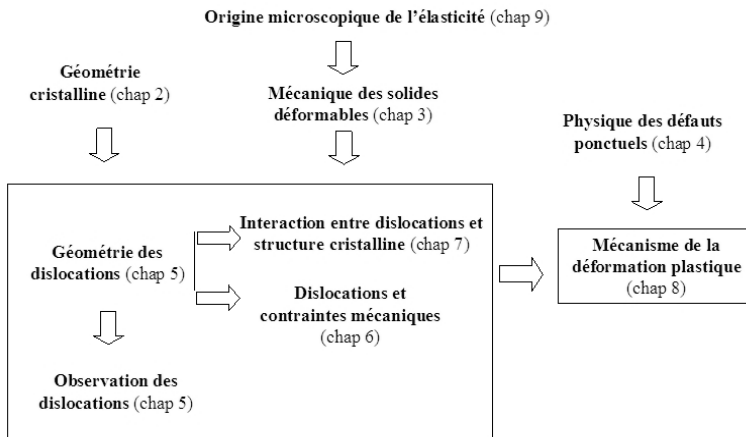


FIG. 1.6 – Articulation des chapitres relatifs aux bases microscopiques de la plasticité. Le grand cadre rectangulaire contient les chapitres introductifs aux différentes propriétés des dislocations.

où les éléments explicatifs du comportement plastique sont introduits.

Enfin, le dernier chapitre porte sur l'origine microscopique du comportement *élastique* des solides. Il ne recourt qu'à la notion de cristal parfait. Il vise à dégager le sens, à l'échelle microscopique, de la loi d'élasticité linéaire $\sigma = C\epsilon$, et à relier les coefficients d'élasticité aux forces d'interaction entre atomes. Cette loi est discutée dans le cas d'un modèle simplifié de solide unidimensionnel. La relation véritable prenant en compte une configuration atomique tridimensionnelle est seulement examinée qualitativement. Par ailleurs, on considère, sur la base de la mécanique quantique, *la relation de principe* qui existe entre les valeurs numériques des coefficients d'élasticité (donc la plus ou moins grande *rigidité* d'un solide) et la nature des constituants d'un cristal, leurs liaisons chimiques, et leur configuration spatiale. La compressibilité volumique d'un métal est étudiée de manière plus quantitative.

1.4 Bibliographie

Ouvrages de référence :

Y. Adda, J.M. Dupouy, J. Philibert, Y. Quéré *Éléments de métallurgie physique T 3 et T5* (Edit. INSTN-CEA, 2000).

J-L. Martin, J. Wagner, *Dislocations et plasticité des cristaux* (Presses Polytechniques et Universitaires Romandes 2000).

Y. Quéré, *Physique des Matériaux* (Editions Ellipses 1988)

D. Gratias *Introduction à la physique des matériaux* (Cours de l'Ecole Polytechnique, Palaiseau 2001).

A.H. Cottrell, *The Mechanical Properties of Matter* (John Wiley, New-York 1964).

J. Friedel, *Dislocations*. (Pergamon Press Oxford 1964).

F.R.N Nabarro, Z.S. Basinski, D.B. Holt *The plasticity of pure single crystals* (Advances in Physics vol. 13 N°50, Londres 1964).

J.P. Hirth, et J. Lothe, *Theory of Dislocations*. Second Edition (Krieger Publishing, Malabar Florida 1982)

F.R.N. Nabarro, *Theory of Crystal Dislocations* (Dover, New-York 1987).

Y. Quéré *Défauts ponctuels dans les métaux*. (Editions Masson. Paris 1967).

W.T. Read, *Les dislocations dans les cristaux*. (Dunod, Paris 1957)

E. Braun, *Mechanical Properties of Solids* (article sur la formation des idées de ce domaine de la physique, dans *Out of the Crystal Maze* Editeurs L. Hoddeson et al, Oxford University Press 1992).

Sites internet recommandés :

<http://Zig.onera.fr/DisGallery>

<http://www.tf.uni-kiel.de/matwis/>

Chapitre 2

Structure des solides cristallins

Notions principales : Cristal=réseau+motif (§ 2.2.2). Conséquences géométriques de la périodicité spatiale : discrétisation des angles de rotation, limitation du nombre des réseaux de Bravais (§2.2.2). Plans réticulaires (§2.2.2). Différents types de mailles (§2.2.3). Empilements atomiques simples (§2.3.1).

Formules essentielles (2.1), (2.3),(2.7),(2.8), (2.9).

2.1 Introduction

Considérés à l'échelle microscopique, les solides sont des systèmes dans lesquels les atomes sont "au contact" les uns des autres. Cette caractéristique est également celle des liquides ou d'autres systèmes comme les cristaux liquides. La spécificité des solides, *leur forme bien définie* au repos, dans des conditions données de température et de contraintes extérieures, est attachée au fait que les positions moyennes¹ d'équilibre de *tous les atomes* sont fixées.

Il existe une certaine diversité "d'états solides", qui diffèrent qualitativement du point de vue de la configuration spatiale des atomes. Il convient, par exemple, de distinguer l'état *cristallin*, l'état *quasicristallin* et l'état *amorphe*. Comme nous l'avons indiqué dans le chapitre d'introduction, ce sont les *solides cristallins* que nous allons principalement considérer dans ce cours. Ce sont eux qui, par la simplicité de leur configuration atomique d'équilibre, constituent les systèmes de référence.

L'observation de ces solides au moyen d'instruments donnant accès à l'échelle atomique (figure 2.2) révèle l'existence de *régularités géométriques* spécifiques de la configuration des atomes. L'analyse de ces régularités, dont le principe a

¹Ce qualificatif est nécessaire car, comme nous le verrons au chapitre 9, les atomes ne sont pas immobiles mais ils oscillent autour de leur position moyenne avec des amplitudes, qui, à la température ambiante, sont de l'ordre de 5.10^{-2}Å .

été entièrement décrit dès le dix neuvième siècle², est une étape nécessaire de la compréhension des propriétés mécaniques des solides.

2.2 Géométrie cristalline

2.2.1 Définition du cristal parfait

La *structure* d'un corps solide est la configuration spatiale de ses constituants microscopiques (les atomes). Elle est déterminée par la donnée des coordonnées du noyau de chaque atome.

Il est utile, dans une première étape de l'analyse de la structure des solides réels, de définir la notion de "cristal parfait", milieu *infiniment étendu*, dont la structure possède une *triple périodicité spatiale*. On entend par là que cette structure peut être engendrée par réplication d'un groupement d'atomes, au moyen de déplacements de translations \vec{T}_{n_1, n_2, n_3} de la forme (fig. 2.1) :

$$\vec{T}_{n_1, n_2, n_3} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad (2.1)$$

où (n_1, n_2, n_3) sont des coefficients entiers (positifs, négatifs, ou nuls, finis ou infinis) et où $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)$ sont trois vecteurs non-coplanaires, qui sont les périodes élémentaires ou *translations primitives* du cristal.

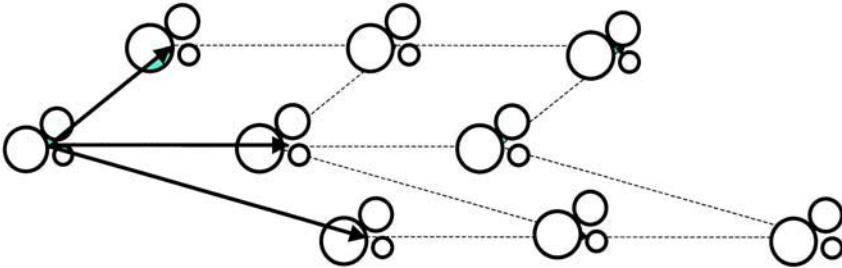


FIG. 2.1 – A partir d'un groupement d'atomes (ici 3 atomes) placé à l'origine des coordonnées, on "fabrique" un cristal en plaçant un groupement identique à l'extrémité de chaque vecteur du type $(n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3)$. Seuls quelques groupements proches de l'origine sont représentés ici.

Le groupement d'atomes dont la répétition engendre le cristal, est appelé le *motif*. Dans le cas de nombreux cristaux d'usage courant (métaux, semi-conducteurs, minéraux simples, etc ..) le motif comprend un seul atome ou un petit

²Les noms des principaux scientifiques à l'origine de cette description sont ceux des français Haüy et Bravais, des allemands Hermann et Schoenflies et du russe Fedorov.

nombre d'atomes. Le fait que les atomes d'un solide soient au contact les uns des autres implique que les modules des translations primitives aient des valeurs voisines des dimensions linéaires du motif. Ainsi, dans les métaux $|\vec{a}_i| \sim 2,5\text{-}3\text{\AA}$, diamètre d'un atome.

La spécification d'un motif et d'un système de translations permettant de construire une structure cristalline particulière n'est pas unique. Ainsi, peut-on répliquer un motif donné, ou bien répliquer un ensemble d'atomes constitué par plusieurs de ces motifs. Dans ce dernier cas, le système de translations permettant la construction de la structure sera différent, et composé de multiples des translations initialement considérées. L'ambiguïté de la définition peut être levée si l'on précise que le motif est *le plus petit groupement d'atomes* permettant une construction de la structure par réplication.

Les translations \vec{T}_{n_1, n_2, n_3} qui apparaissent dans l'équation (2.1) ne sont pas seulement un outil de construction de la structure. Nous pouvons également les considérer comme des éléments de *symétrie* de cette structure. En effet, un cristal parfait étant infiniment étendu, son *déplacement d'ensemble* par l'action de \vec{T}_{n_1, n_2, n_3} va échanger des motifs identiques et transformer la structure en une structure indistinguable de la structure initiale. Chaque translation \vec{T}_{n_1, n_2, n_3} , considérée comme une transformation géométrique, laisse la structure invariante.

Ce point de vue peut être généralisé à d'autres transformations que les translations. Par exemple, l'examen de la structure plane représentée sur la figure 2.2 montre qu'une rotation de 120° autour d'un axe perpendiculaire à la surface et passant par le centre d'un motif échange des groupes d'atomes identiques et laisse également la structure inchangée.

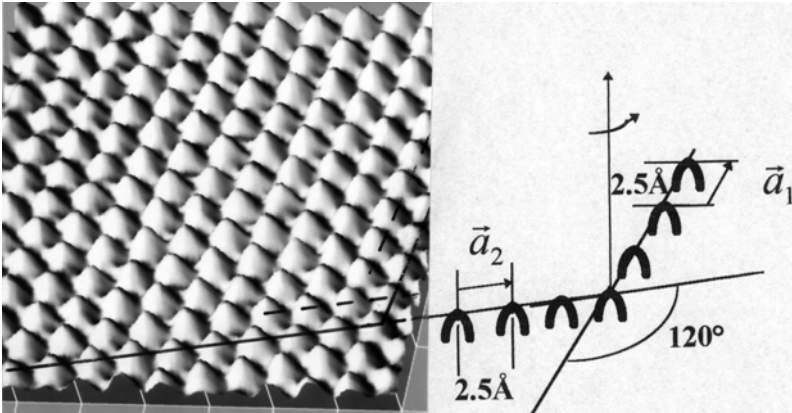


FIG. 2.2 – Image à l'échelle atomique obtenue à l'aide d'un microscope "à force atomique" de la surface d'un cristal de graphite (J.M. Moison 1990). Chaque "monticule" est un groupe de deux atomes de carbone. Le dessin schématique à droite fait ressortir la symétrie de la structure par rotations de 120° .

Ainsi, toute structure cristalline sera généralement invariante par d'autres

transformations (rotations, symétries par rapport à un point ou un plan,..) que les translations \vec{T}_{n_1, n_2, n_3} . L'ensemble de toutes les transformations de symétrie (y compris les translations \vec{T}_{n_1, n_2, n_3}) définit la *symétrie spatiale du cristal*. C'est cette notion qui donne un contenu mathématique plus précis à l'idée de régularité de la configuration atomique.

2.2.2 Réseau de Bravais

Le réseau de Bravais (fig 2.3) d'un cristal est le réseau tridimensionnel infini de points $M(n_1, n_2, n_3)$ qui est obtenu quand, à partir d'une origine O , on construit les extrémités de tous les vecteurs

$$\overrightarrow{OM}(n_1, n_2, n_3) = \vec{T}_{n_1, n_2, n_3} \quad (2.2)$$

Chaque point de ce réseau est appelé un *noeud*.

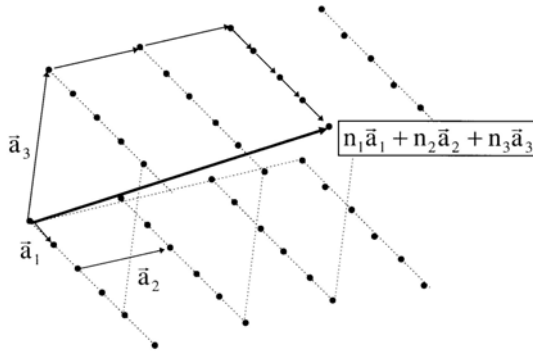


FIG. 2.3 – Translations primitives du cristal et réseau de Bravais, ensemble de noeuds constituant l'image géométrique des translations primitives.

Plans réticulaires, rangées.

Si l'on considère le plan formé par trois noeuds quelconques on définit un *plan réticulaire*. On peut montrer qu'un tel plan contient une infinité de noeuds formant un réseau périodique bidimensionnel. En outre, l'ensemble des noeuds du réseau de Bravais peut être placé sur des plans réticulaires équidistants, en nombre infini, parallèles à la direction de plan définis par les trois noeuds sélectionnés. Cette sélection étant quelconque, il s'en suit que la décomposition du réseau de Bravais en un ensemble de plans réticulaires équidistants de direction donnée peut être effectuée d'une infinité discrète de manières. De façon analogue on peut placer l'ensemble des noeuds d'un réseau de Bravais sur un ensemble de droites équidistantes parallèles, les *rangées*.

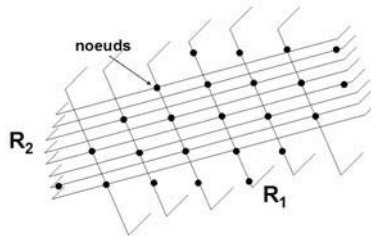


FIG. 2.4 – Décomposition du réseau de Bravais en empilement de réseaux bidimensionnels de points sur des plans équidistants. R_1 et R_2 en sont deux exemples. Un troisième exemple correspond à la famille de plans parallèles au plan de la figure. Il y a une infinité discrète de telles familles de plans réticulaires.

Utilisation du réseau de Bravais

Si l'on choisit l'origine O sur le noyau d'un atome particulier ou au centre d'un groupement d'atomes, le réseau de Bravais constitue le squelette sous-jacent à la structure. L'habillage de ce squelette, en vue de construire la structure, est réalisé par le placement d'un motif en chaque noeud du réseau (fig.2.5). Dans le cas le plus simple de cristaux formés à partir d'un seul élément chimique, la structure est construite en plaçant un seul atome de cet élément en chaque noeud du réseau de Bravais. La structure peut alors être considérée, d'une infinité de manières, comme formée d'un empilement de plans atomiques parallèles à l'une des directions de plans réticulaires.

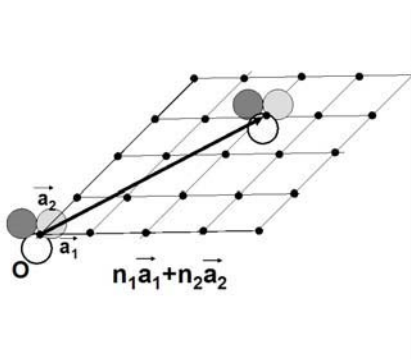


FIG. 2.5 – Noeuds du réseau de Bravais et Motif

On peut également considérer le réseau de Bravais indépendamment de la structure. Avec une origine O arbitraire, il est alors l'image géométrique de l'en-

semble des translations \vec{T}_{n_1, n_2, n_3} qui laissent la structure invariante. Comme nous allons maintenant le voir, on dispose, avec cette image, d'un support commode pour effectuer des raisonnements sur les régularités géométriques du cristal.

Répertoire des symétries cristallines

Les différentes transformations géométriques qui, appliquées à la configuration des atomes d'un cristal, laissent cette configuration inchangée, sont des translations, des rotations R , des symétries m par rapport à des plans (également appelées *réflexions*) ou la symétrie P par rapport à un point, ainsi que *des combinaisons des transformations précédentes*. La signification de ces différentes transformations élémentaires est rappelée sur la figure 2.6.

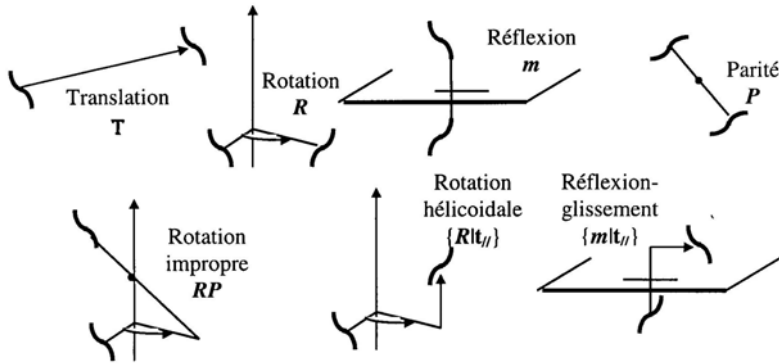


FIG. 2.6 – Répertoire des éléments de symétrie d'un cristal.

Les transformations élémentaires (R, m, P) ont en commun de posséder au moins un *point fixe* (un seul dans le cas de P , une droite ou un plan dans les cas de R et de m). Elles sont collectivement qualifiées de transformations *ponctuelles*. Nous les notons \mathcal{S} . On peut alors montrer que toutes les transformations de symétrie spatiale d'un cristal sont de la forme :

$$\{\mathcal{S}_O | \vec{t}\} \quad (2.3)$$

où les \mathcal{S}_O sont des transformations ponctuelles qui ont un point fixe commun O pris pour origine. \vec{t} est une translation³ appliquée à la suite de \mathcal{S}_O .

Le répertoire des symétries spatiales d'un cristal, du type (2.3) comprend six sortes de transformations géométriques de nature distincte : translation \vec{T} du réseau de Bravais, que l'on peut noter $\{0 | \vec{T}\}$, rotations pures $\{R | 0\}$, symétrie par rapport à un plan ou un point $\{m | 0\}$ ou $\{P | 0\}$, produit d'une rotation par

³On peut montrer que \vec{t} est nécessairement une fraction simple d'une translation primitive \vec{T} .

une symétrie par rapport à un point situé sur l'axe de la rotation $\{RP|0\}$, ainsi que deux transformations moins banales, la *rotation hélicoïdale* qui consiste en une rotation suivie d'une translation parallèle à l'axe de la rotation, et la *réflexion-glissement* qui est une symétrie par rapport à un plan suivie d'une translation parallèle au plan.

Invariance du réseau de Bravais.

Supposons que la structure d'un solide soit inchangée par la transformation $\{\mathcal{S}_O|\vec{t}\}$. Son réseau de Bravais, rapporté à une même origine O , doit également être inchangé. Or $\{\mathcal{S}_O|\vec{t}\}$ consiste d'abord à appliquer la transformation ponctuelle \mathcal{S}_O qui agit sur les orientations des vecteurs du réseau de Bravais, puis à faire agir \vec{t} qui pour seul effet de décaler l'origine O du réseau. Si on annule ce décalage en ramenant en O l'origine du réseau, il résulte de la préservation de la structure par $\{\mathcal{S}_O|\vec{t}\}$ que l'action de \mathcal{S}_O sur le réseau de Bravais d'origine O le laisse *invariant*.

*La transformation ponctuelle \mathcal{S}_O est une symétrie du réseau de Bravais.*⁴

Valeurs possibles des angles de rotation

Parmi les transformations ponctuelles \mathcal{S}_O , considérons les seules rotations R , et montrons que l'invariance d'un réseau de Bravais par R conduit à des restrictions sur les valeurs possibles de l'angle de la rotation R .

Faisons d'abord le choix d'une base de l'espace à trois dimensions adaptée au réseau de Bravais, et formée par le système de translations primitives $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)$ qui définissent ce réseau (fig 2.7). Il résulte de l'invariance du réseau de Bravais par $\mathcal{S}_O = R(\vec{u}, \theta)$ que les extrémités des \vec{a}_i , qui sont des noeuds du réseau, sont transformées en des noeuds du réseau.

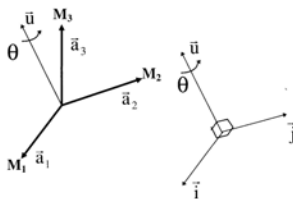


FIG. 2.7 – Repères respectivement adaptés aux translations primitives (repère oblique) et à l'axe d'une rotation (repère orthogonal).

De façon équivalente, on peut donc dire que les \vec{a}_i se transforment en des combinaisons linéaires à *coefficients entiers* des \vec{a}_i . Dans cette base, la matrice

⁴Notons que \mathcal{S}_O n'est pas une symétrie de la structure cristalline (alors que $\{\mathcal{S}_O|\vec{t}\}$ l'est), et que, inversement, $\{\mathcal{S}_O|\vec{t}\}$ modifie l'origine du réseau de Bravais et ne constitue pas l'une de ses symétries.

$M(R)$ qui représente la rotation R possède donc tous ses coefficients entiers. En particulier, sa trace est un nombre entier n .

La même rotation R peut maintenant être représentée dans une base orthogonale adaptée à la rotation, et formée par le vecteur unitaire \vec{u} parallèle à l'axe de la rotation, et par deux vecteurs (\vec{i}, \vec{j}) situés dans le plan perpendiculaire à \vec{u} . On sait que dans cette base, la trace de la matrice $M'(R)$ qui représente la rotation est $(1 + 2 \cos \theta)$. La trace d'une matrice étant invariante par changement de base, la comparaison des deux résultats montre que l'on a :

$$(1 + 2 \cos \theta) = n \quad (2.4)$$

ce qui détermine les valeurs possibles de $\cos \theta$: $(0, \pm \frac{1}{2}, \pm 1)$ et, en conséquence, la limitation à quelques valeurs discrètes des valeurs de θ :

$$\theta = 0, \pm \frac{\pi}{3}, \pm \frac{\pi}{2}, \pm \frac{2\pi}{3}, \pm \pi \quad (2.5)$$

Ainsi, une structure cristalline quelconque ne pourra-t-elle présenter d'invariance que par rapport aux rotations précédentes. Des valeurs d'angles telles que $2\pi/5$ ou $\pi/4$ par exemple (caractéristiques des symétries du pentagone ou de l'octogone) sont exclues.

2.2.3 Mailles élémentaires

Le parallélépipède défini par les trois translations primitives $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ constitue une *maille élémentaire* (ou *primitive*) du cristal. Un déplacement de cette maille par toutes les translations \vec{T} de la forme (2.1), engendre un ensemble de mailles adjacentes identiques qui *pave* l'espace, (fig.2.8) c'est à dire qui le remplit entièrement, sans recouvrement entre les mailles, les sommets des différentes mailles étant les noeuds du réseau de Bravais. Si l'on décale l'origine de ce pavage du vecteur $(\vec{a}_1/2, \vec{a}_2/2, \vec{a}_3/2)$, on obtient un noeud du réseau au centre de chaque maille. On voit ainsi que la densité volumique des noeuds du réseau de Bravais est d'un seul noeud par maille élémentaire.

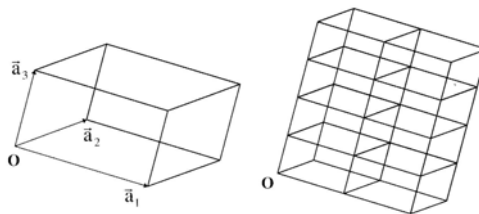


FIG. 2.8 – Maille élémentaire (primitive) d'un cristal, et pavage de l'espace par un ensemble de mailles adjacentes.

Nous avons vu au §2.2.1 que le système de translations primitives d'un cristal n'est pas unique. De même, la maille élémentaire d'un cristal n'est pas définie de

façon unique. Toutefois, les différentes mailles élémentaires ont nécessairement le même volume puisque chacune d'elles est en correspondance avec un seul noeud du réseau de Bravais.

2.2.4 Maille conventionnelle

On peut définir un autre type de maille cristalline, la *maille conventionnelle*, si l'on abandonne l'exigence d'associer chaque maille à un seul noeud du réseau de Bravais, mais que l'on conserve les deux autres propriétés de la maille élémentaire : a) Parallépipède construit à partir de 3 translations du réseau de Bravais. b) Possibilité de paver l'espace par juxtaposition d'un ensemble de mailles identiques. Pour comprendre l'avantage d'une telle définition considérons l'exemple de la figure 2.9, où l'on a représenté un réseau de Bravais bidimensionnel "rectangulaire centré". Ce réseau est invariant par des symétries

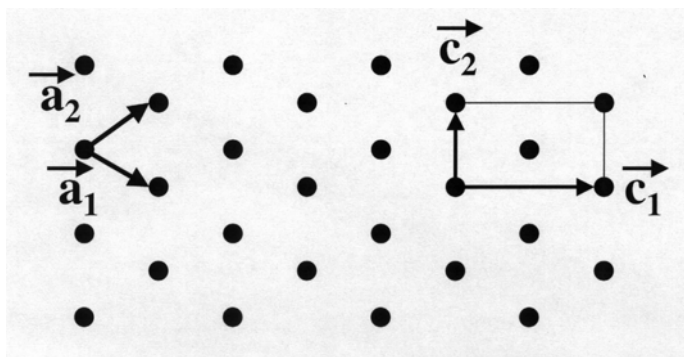


FIG. 2.9 – Mailles primitive et conventionnelle d'un réseau de Bravais rectangulaire centré.

par rapport à des lignes verticales et horizontales passant par un noeud quelconque. La conjonction de ces deux directions de symétrie est caractéristique du *rectangle*. Or, on remarque que la maille élémentaire (\vec{a}_1, \vec{a}_2) n'est pas un rectangle mais un losange dont les côtés sont deux demi-diagonales d'un rectangle. Dans une telle maille, la "forme" rectangulaire du réseau n'est pas manifeste. On peut toutefois construire (figure 2.9) une maille rectangulaire, reflétant la symétrie du réseau, à partir des deux translations :

$$\vec{c}_1 = (\vec{a}_1 + \vec{a}_2) \quad \vec{c}_2 = (\vec{a}_2 - \vec{a}_1) \quad (2.6)$$

Il est clair que si l'on translate cette maille par les translations (non-primitives) de réseau, combinaisons linéaires à coefficients entiers de \vec{c}_1 et \vec{c}_2 , on engendre un ensemble de rectangles identiques pavant le plan. La maille rectangulaire n'est pas une maille élémentaire, car les noeuds engendrés par les translations (2.6) ne coïncident qu'avec la moitié des noeuds du réseau de Bravais (On n'obtient pas les noeuds situés au centre des rectangles adjacents). Chaque rectangle possède

une surface double de celle de la maille élémentaire et contient deux noeuds du réseau de Bravais.

On pourrait définir d'autres mailles rectangulaires ayant pour côtés des multiples de \vec{c}_1 et \vec{c}_2 , avec cependant l'inconvénient d'engendrer une fraction plus petite des noeuds du réseau de Bravais. La maille rectangulaire définie par (2.6), qui est la *maille conventionnelle* du réseau considéré est la plus petite des mailles rectangulaires.

De façon générale, la maille conventionnelle d'un cristal est définie comme le plus petit parallélépipède, construit à partir de translations de réseau du type (2.1), dont la forme correspond aux symétries (plans, rotations) du réseau de Bravais. La figure (2.10) en montre des exemples pour des réseaux tridimensionnels possédant la symétrie du cube. Le plus souvent, la maille conventionnelle est une *maille multiple* dont le volume est un multiple de celui de la maille élémentaire. Il y a des cas cependant où la maille conventionnelle est aussi une maille élémentaire.

2.2.5 Classification des réseaux ; réseaux cubiques.

La distinction entre maille conventionnelle et maille élémentaire fournit un moyen de classer les réseaux de Bravais. La classification obtenue comporte deux niveaux.

Le premier niveau consiste à regrouper tous les réseaux de Bravais dont la maille conventionnelle a la *même forme*. Par exemple, un réseau de Bravais sera qualifié de "cubique" si sa maille conventionnelle est un cube. Dans ce cas, les translations \vec{c}_i qui définissent cette maille satisfont aux conditions :

$$|\vec{c}_1| = |\vec{c}_2| = |\vec{c}_3| \quad \vec{c}_i \cdot \vec{c}_j = c^2 \cdot \delta_{ij} \quad (2.7)$$

Il existe 7 formes distinctes de mailles conventionnelles déterminant 7 classes de réseaux (figure 2.11) : parallélépipède de forme arbitraire (*réseau triclinique*), prisme droit à base parallélogramme (*réseaux monocliniques*), rhomboèdre ⁵ (*réseau rhomboédrique*), prisme droit à base rectangulaire (*réseaux orthorhombiques*), prisme droit à base carrée (*réseaux quadratiques*), prisme droit à base losange d'angle 120° (*réseau hexagonal*), cube (*réseaux cubiques*).

Dans chacune des classes précédentes, un deuxième niveau de classification permet de distinguer différents *types de réseaux de Bravais*, à partir de la relation qui existe entre les vecteurs \vec{c}_i et \vec{a}_i qui définissent respectivement la maille conventionnelle et la maille élémentaire.

Considérons par exemple le cas des réseaux cubiques dont la maille conventionnelle est définie par les égalités (2.7). Trois types de réseaux peuvent être distingués⁶ (figure 2.10).

⁵Un rhomboèdre est un parallélépipède dont les trois côtés ont la même longueur et dont les angles des trois faces adjacentes sont égaux.

⁶L'existence de trois types seulement de réseaux cubiques implique que l'on considère comme équivalents les réseaux qui possèdent la même forme de maille conventionnelle mais dont la dimension c du côté est différente.

a) Réseau cubique simple (en abrégé cs)

Dans ce réseau, la maille élémentaire et la maille conventionnelle coïncident. Le réseau de Bravais est donc engendré par les translations de type (2.7).

b) Réseau cubique corps centré (en abrégé cc)

Les translations primitives sont reliées à celles (2.7) qui définissent la maille conventionnelle par :

$$\vec{a}_1 = \frac{1}{2}(\vec{c}_1 + \vec{c}_2 - \vec{c}_3) \quad \vec{a}_2 = \frac{1}{2}(-\vec{c}_1 + \vec{c}_2 + \vec{c}_3) \quad \vec{a}_3 = \frac{1}{2}(\vec{c}_1 - \vec{c}_2 + \vec{c}_3) \quad (2.8)$$

Il est facile d'établir que le produit mixte $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)$, qui détermine le volume de la maille élémentaire est égal à la moitié du volume $(\vec{c}_1, \vec{c}_2, \vec{c}_3) = \mathbf{c}^3$ de la maille conventionnelle. Ce résultat est cohérent avec le fait que les noeuds du réseau de Bravais engendré par les translations primitives \vec{a}_i occupent les sommets *et* le centre de la maille conventionnelle (justifiant ainsi la terminologie utilisée), ce qui conduit à associer *deux noeuds* à chaque maille conventionnelle. La distance la plus courte entre noeuds, égale au module des translations primitives est $d_{noeud} = |\vec{a}_i| = \frac{1}{2}\mathbf{c}\sqrt{3}$.

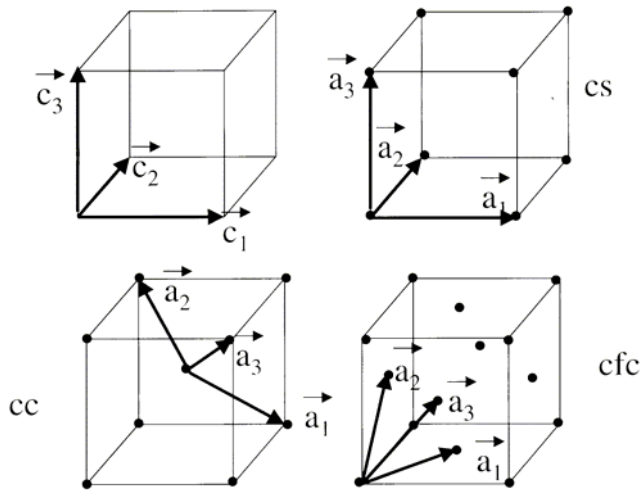


FIG. 2.10 – Réseaux de Bravais cubiques. De haut en bas et de gauche à droite : maille conventionnelle commune aux r éseaux cubiques, cubique simple (cs), cubique corps centré (cc), cubique faces centrées (cfc).

c) Réseau cubique faces centrées (en abrégé cfc)

La relation entre translations est dans ce cas ⁷ :

$$\vec{a}_1 = \frac{1}{2}(\vec{c}_1 + \vec{c}_2) \quad \vec{a}_2 = \frac{1}{2}(\vec{c}_2 + \vec{c}_3) \quad \vec{a}_3 = \frac{1}{2}(\vec{c}_3 + \vec{c}_1) \quad (2.9)$$

Le volume de la maille élémentaire est $\frac{1}{4}\mathbf{c}^3$, c'est à dire le quart de celui de la maille conventionnelle, en accord avec le fait que les noeuds du réseau de Bravais occupent les sommets *et* centres des faces de la maille conventionnelle, ce qui conduit à associer *quatre noeuds* à chaque maille conventionnelle. La plus courte distance entre noeuds est ici $d_{noeud} = |\vec{a}_i| = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathbf{c}$.

Si l'on effectue une énumération analogue pour les sept classes de réseaux, on trouve qu'il existe **14 types** de réseaux de Bravais, inégalement répartis dans les sept classes. Leur nombre est indiqué, pour chaque classe, sur la figure 2-11. Sept des quatorze types de réseaux peuvent être qualifiés de *simples*, car leur maille conventionnelle est aussi une maille élémentaire.

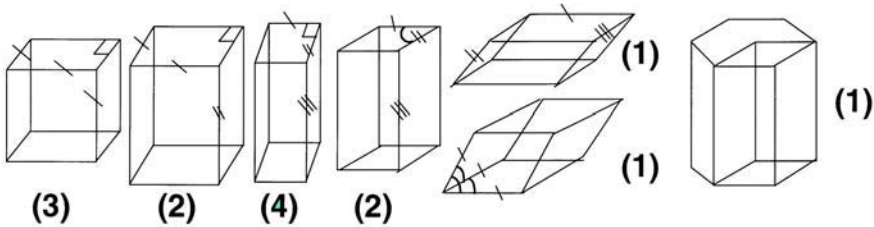


FIG. 2.11 – Les sept formes de mailles associées à 14 types de réseaux de Bravais. Les nombres indiquent le nombre de réseaux inéquivalents pour chaque symétrie de réseau. De gauche à droite on a représenté les réseaux de symétrie cubique, quadratique, orthorhombique, monoclinique, triclinique, rhomboédrique, et hexagonale.

2.3 Exemples de structures simples.

Certaines propriétés physiques des solides cristallins peuvent être expliquées à partir d'une description simplifiée, réduite à la seule donnée du type de leur réseau de Bravais. En général cependant, la compréhension des propriétés spécifiques d'un matériau requiert la connaissance détaillée de sa structure cristalline, c'est à dire de la nature chimique et de la position de tous les atomes de sa maille élémentaire.

Il existe dans la nature une grande variété de structures distinctes. On pourrait penser que dans le cas des métaux purs (fer, cuivre,..), dont les cristaux

⁷On pourrait choisir un autre système de translations primitives parmi les 12 vecteurs $\pm(1/2)(\vec{c}_i \pm \vec{c}_j)$.

”monoatomiques” sont constitués d’un seul élément chimique de la table de Mendeleïev, les structures soient simples. Ceci n’est que partiellement vrai. En effet, on observe très souvent qu’un même élément (par exemple le fer ou le carbone) donne naissance, en fonction de la température ou de la pression à des cristaux de structures différentes dont certaines sont compliquées. Cette situation est encore plus marquée dans le cas des alliages de plusieurs métaux.

Cependant, dans une classe assez large de solides monoatomiques, principalement ceux constitués d’un élément chimique situé dans la partie gauche du tableau de Mendeleïev (fig. 2-17), les structures les plus fréquemment réalisées sont simples et peuvent être approximativement décrites comme des empilements de ”sphères dures”, c’est à dire de billes sphériques indéformables en contact les unes avec les autres et qui ne s’interpénètrent pas.

2.3.1 Empilements d’atomes identiques.

Il y a plusieurs manières d’empiler des sphères dures. Deux des structures cristallines résultantes sont qualifiées d’*empilements compacts*. On entend par là que, pour un rayon donné de la sphère atomique, la compacité est maximale : les volumes vides existant entre les sphères occupent une plus petite fraction du volume total du cristal que dans tout autre empilement.

Empilement cubique compact

Cet empilement est obtenu en plaçant un atome de l’espèce chimique considérée à chaque noeud d’un réseau cfc (Cf. eq.2.9 et fig.2.10) dont la taille de la maille soit telle qu’il y ait contact entre les sphères des atomes voisins. Cette condition implique que si \mathbf{r} est le rayon de l’atome et si $|a_i|$ est le module d’une translation primitive on ait $|a_i| = 2\mathbf{r} = \mathbf{c}/\sqrt{2}$, où \mathbf{c} est le côté de la maille conventionnelle cubique. Dans cette structure, chaque atome possède 12 plus proches voisins situés à la distance $2\mathbf{r} = |a_i|$ dans la direction des diagonales de faces.⁸

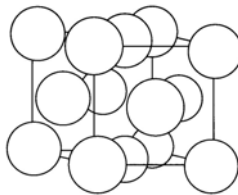


FIG. 2.12 – Position des atomes dans la maille conventionnelle d’une empilement cubique compact.

⁸On dit que la *coordinnence* d’un atome est 12.

La maille conventionnelle, contient 4 atomes et la maille élémentaire en contient donc un seul, conformément au procédé de construction (un atome à chaque noeud du réseau). La *compacité* de la structure peut être caractérisée par le rapport entre le volume d'un atome et celui de la maille élémentaire :

$$\frac{V_{\text{atome}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{4\pi r^3/3}{c^3/4} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0,74 \quad (2.10)$$

Empilement hexagonal compact

La construction de cet empilement est plus complexe. Considérons tout d'abord le réseau de Bravais hexagonal (figure 2.11) engendré par le système de translations primitives $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{c})$ où \vec{a}_1 et \vec{a}_2 sont des vecteurs de même module faisant entre eux un angle de 60 degrés, et où \vec{c} est perpendiculaire au plan (\vec{a}_1, \vec{a}_2) . Dans chaque maille élémentaire (fig. 2.13) plaçons un atome à l'origine O et un atome en O' tel que $\vec{OO}' = \frac{1}{3}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2) + \vec{c}/2$. Imposons également aux atomes de cette structure d'être au contact de leurs voisins, à la fois dans les plans perpendiculaires à \vec{c} , et dans les plans adjacents le long de \vec{c} . Ceci impose les relations suivantes entre $\mathbf{a} = |\vec{a}_i|$, $\mathbf{c} = |\vec{c}|$ et le rayon atomique \mathbf{r} :

$$\frac{\mathbf{c}}{\mathbf{a}} = \frac{\mathbf{c}}{2\mathbf{r}} = 2\sqrt{\frac{2}{3}} \quad (2.11)$$

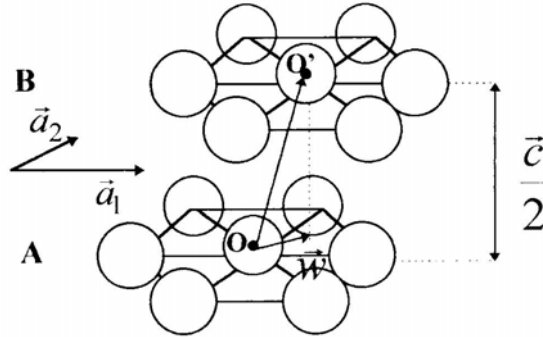


FIG. 2.13 – Position des atomes dans l'empilement hexagonal compact.

Le motif de cette structure est formé de deux atomes identiques (situés en O et en O'). Sa compacité est déterminée par :

$$\frac{2V_{\text{atome}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{8\pi r^3/3}{\mathbf{a}^2 \mathbf{c} \sqrt{\frac{3}{2}}} = 0,74 \quad (2.12)$$

Elle a la même valeur que celle de l'empilement cubique compact.

Remarquons que si l'on applique à l'atome situé en O les translations de réseau engendrées à partir de $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{c})$, on obtient une succession de plans (que nous notons **A**), parallèles à (\vec{a}_1, \vec{a}_2) , espacés de $|\vec{c}|$, et contenant la moitié des atomes de la structure. Dans chacun de ces plans, les atomes forment un réseau régulier de triangles équilatéraux (figure 2.14). De façon évidente, cette configuration est la plus compacte de celles qui peuvent être formées dans un plan avec des disques empilés au contact les uns des autres. Les atomes des différents plans **A** forment des colonnes parallèles à \vec{c} . Si l'on applique maintenant les translations de réseau à l'atome O' , on engendre une seconde famille de plans atomiques (notés **B**), intercalés à mi-distance des plans **A**, le long de \vec{c} . Ils ont une configuration et une distance interplans identiques à celles des plans **A**. Les colonnes atomiques associées aux plans **B** consécutifs sont décalées latéralement par rapport aux colonnes de type **A**, de :

$$\vec{w} = \frac{1}{3}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2) \quad (2.13)$$

Un atome d'un plan **B** se trouve ainsi à la verticale du centre de gravité du triangle équilatéral formé par trois atomes des plans **A** adjacents.

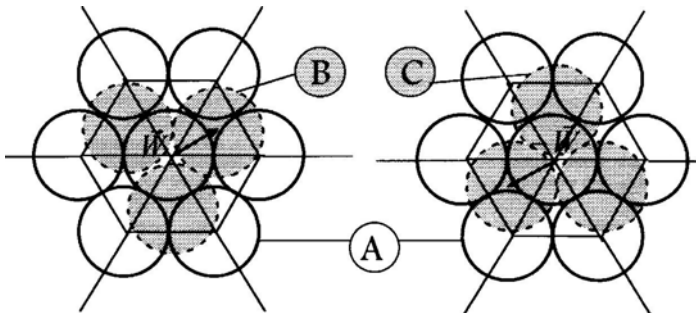


FIG. 2.14 – Structure bidimensionnelle hexagonale compacte des plans atomiques les plus denses. Ces plans sont à la base de la construction des structures tridimensionnelles hexagonale compacte et cubique compacte.

La structure hexagonale compacte peut donc être décrite comme une séquence de plans équidistants **A-B-A-B-...**, espacés de $c/2$, chaque plan ayant une structure bidimensionnelle hexagonale compacte, et les plans consécutifs étant décalés latéralement, alternativement de $+\vec{w}$ et de $-\vec{w}$ les uns par rapport aux autres.

Relation entre les deux empilements compacts

Dans l'empilement cubique compact, les plans atomiques perpendiculaires aux grandes diagonales formés par trois diagonales de faces de la maille conventionnelle sont les plans les plus denses de la structure puisqu'ils correspondent

aux plus courtes distances $|\vec{a}_i| = 2\mathbf{r}$ entre atomes. Il est facile de se rendre compte que ces plans possèdent la même structure que les plans **A** ou **B** de l'empilement hexagonal compact. (fig. 2.14). Tous les atomes étant inclus dans de tels plans, cette structure peut donc être décrite comme une superposition, le long d'une grande diagonale du cube, de plans hexagonaux compacts. Leur séquence est cependant différente de celle de la structure hexagonale compacte.

La figure (2.15) montre, en effet, que l'on a une séquence **A-B-C-A-B-C...** de trois types de plans. Le long de la grande diagonale, on rencontre successivement : a) un plan **A** passant par le coin inférieur de la maille cubique. b) un plan **B** contenant la diagonale de la face horizontale inférieure du cube. Les atomes de ce plan sont décalés perpendiculairement à la grande diagonale, de $\vec{w} = (\frac{1}{6})(\vec{c}_1 - 2\vec{c}_2 + \vec{c}_3)$ par rapport à ceux du plan **A**. c) un plan **C** contenant la diagonale de la face horizontale supérieure du cube, avec un décalage de $2\vec{w}$ par rapport aux atomes du plan **A**. Le plan suivant de la séquence est, à nouveau un plan en position **A**.

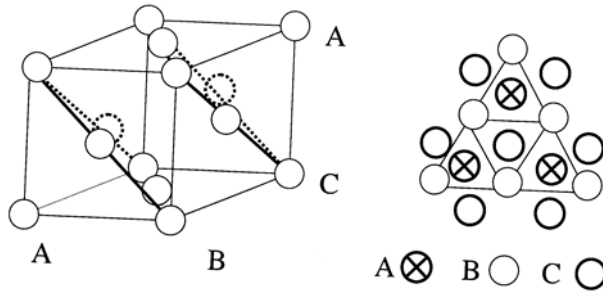


FIG. 2.15 – Superposition de plans hexagonaux compacts dans la structure fcc.

Ainsi c'est le décalage entre le deuxième et le troisième plan de la séquence ($\mp \vec{w}$) qui distingue les empilements cubique et hexagonal compacts. Les plans de l'empilement et leur distance étant les mêmes dans les deux structures, la compacité de ces structures est évidemment la même (fig.2.15).

Empilement cubique centré

Cet empilement est obtenu (figure 2.16) en plaçant un atome à chaque noeud d'un réseau de Bravais de type cc (2.10).

Le contact entre atomes voisins requiert que le diamètre des atomes soit égal au module des translations primitives : $\mathbf{r} = |\vec{a}_i|/2 = \mathbf{c}\frac{\sqrt{3}}{4}$. La compacité de cet empilement est :

$$\frac{V_{\text{atome}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{4\pi r^3/3}{\mathbf{c}^3/2} = 0,68 \quad (2.14)$$

Elle est plus faible que celle des structures compactes précédentes. Les plans les plus denses sont ceux définis par deux grandes diagonales du cube. Ils n'ont pas la structure de plans hexagonaux compacts, chaque atome ayant quatre voisins dans le plan au lieu de six.

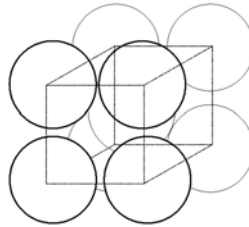


FIG. 2.16 – Empilement cubique centré.

Empilements réalisés dans les métaux purs

Une partie de la table périodique des éléments est reproduite figure 2.17. Tous les éléments indiqués sont, à l'état solide, des métaux. Ils cristallisent dans des structures proches des empilements décrits dans les paragraphes précédents. Ainsi, un modèle simple de sphères dures empilées semble rendre compte de façon satisfaisante de l'existence d'un grand nombre de structures métalliques effectivement observées dans la nature.

Cette situation est également celle des métaux des premières colonnes de la table périodique (non reproduites ici), tels que le sodium. Dans ce cas, la structure en empilement compact résulte du fait que la cohésion de ces métaux "simples" est assurée par le gaz d'électrons libres, quasi-isotrope, formé par les électrons de valence des atomes. Ce gaz induit une attraction mutuelle "effective" entre les constituants qui est approximativement la même dans toutes les directions de l'espace (cf.fig.2.18).

On peut alors construire la structure cristalline en empilant les atomes au contact les uns des autres dans des directions quelconques. La structure la plus stable sera celle qui est la plus compacte. Nous verrons au chapitre 7 que cette isotropie de la liaison "métallique" entre atomes joue également un rôle important dans la facilité de déformation plastique des métaux.

Cette explication ne serait pas pertinente si les atomes étaient liés les uns aux autres par des liaisons "covalentes" car alors les angles entre les différentes liaisons seraient fixés (cf. l'exemple de la configuration tétraédrique des liaisons chimiques dans les composés du carbone). La cohésion chimique des métaux des autres colonnes du tableau périodique (le fer par exemple) présente un certain caractère de covalence. L'étude en mécanique quantique de la stabilité de ces

									Al
Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	
Zr	Nb	Mo		Ru	Rh	Pd	Ag		
Hf	Ta	W		Os	Ir	Pt	Au		

FIG. 2.17 – Portion de la table périodique. Les métaux indiqués sur fond noir cristallisent dans la structure hexagonale compacte. Ceux indiqués sur fond grisé possèdent la structure cubique centrée. Ceux indiqués sur fond clair ont la structure cubique compacte.

métaux montre cependant que chaque atome tend à s'entourer d'un nombre maximum de voisin, justifiant encore ainsi la stabilité des empilements compacts.

2.3.2 Alliages métalliques

Les alliages métalliques, dont l'importance technologique est cruciale, sont des solides formés de plusieurs éléments. Ce sont eux, plutôt que les métaux purs, qui permettent d'obtenir les propriétés mécaniques requises par les applications industrielles. La configuration spatiale des atomes qui constituent un alliage est sujette à plusieurs sortes de complications. Ainsi, une telle configuration peut être *ordonnée* ou *désordonnée*, la triple périodicité spatiale de la structure étant présente *strictement* ou *statistiquement* en raison de l'occupation aléatoire d'une position atomique par l'un des éléments chimiques de l'alliage. Par ailleurs, un alliage peut être *hétérogène* et comporter plusieurs structures juxtaposées, à une échelle micronique ou submicronique, la composition de l'alliage étant alors une moyenne sur celles des différentes structures. Dans l'étude de telles situations, nous nous limiterons ici, à titre d'illustration, à la description de deux exemples simples de structures d'alliages métalliques pour lesquels les empilements décrits plus haut constituent une description de départ commode : l'acier austénitique, alliage de fer et de carbone, et le laiton, alliage de cuivre et de zinc.

En première approximation, la structure de l'acier austénitique peut être décrite comme un empilement cubique compact d'atomes de fer. Comme l'indique la figure 2.17, cette structure n'est pas la structure ordinaire d'équilibre du fer qui est du type cc. Le fer pur cristallise cependant dans cette structure entre 900°C et 1400°C . L'empilement compact possède deux sortes "d'interstices" entre les atomes de fer, les sites "octaédriques" et les sites "tétraédriques".

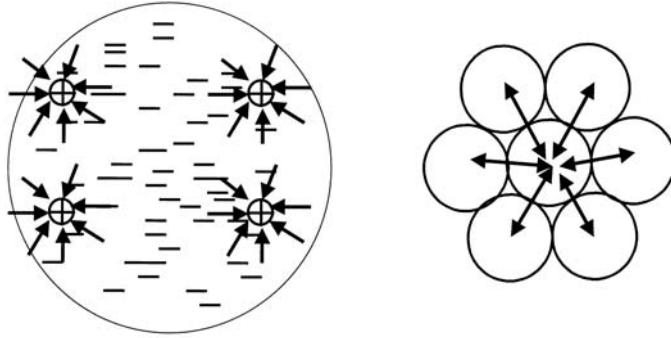


FIG. 2.18 – Dans un métal l’isotropie approximative du gaz d’électrons libres a pour effet qu’il s’exerce entre ions positifs une attraction effective, médiée par le gaz d’électron, qui est-elle même quasi-isotrope. Cette isotropie conduit, à la formation de plan atomiques les plus compacts possibles.

L’un des sites octaédriques est situé au centre de la maille cubique ou, de façon géométriquement équivalente (c’est à dire à une translation primitive près), au milieu des côtés. Chacun de ces sites interstitiels est entouré de six atomes de fer formant un octaèdre régulier, ce qui justifie leur qualificatif de ”site octaédrique”. La maille cubique, qui contient 4 atomes de fer, contient également 4 sites octaédriques. Dans l’acier, ce sont ces sites qui sont partiellement occupés par des atomes de carbone, dans une proportion inférieure à 7%. Ceci signifie que dans certaines mailles il n’y a aucun atome de carbone, alors que d’autres en contiennent un. Les observations indiquent que la distribution des atomes de carbone entre les différentes mailles est aléatoire.

Dans la structure cubique compacte idéale, la taille d’un site octaédrique permet de loger un atome de rayon maximum $\rho = (0,414.\mathbf{r}) = (0,146.\mathbf{c})$, \mathbf{r} étant le rayon de l’atome de fer et \mathbf{c} le côté de la maille cubique. Le fer ayant un rayon $\mathbf{r} \cong 1 \text{ \AA}$, ($\mathbf{c} = 2,85 \text{ \AA}$), on a $\rho \cong 0,42 \text{ \AA}$. Or le rayon d’un atome de carbone est $\rho_c \cong 0,77 \text{ \AA}$. Son introduction dans la structure va déformer notablement le site octaédrique. Ceci explique que la proportion maximum de sites occupés reste faible.

Le laiton, de formule CuZn , possède deux types de structures cristallines notées β et β' la deuxième étant stable au dessous de 350°C et l’autre au dessus de cette température. Elles peuvent toutes deux être décrites à partir d’un réseau de Bravais de type cubique où les sommets et le centre de la maille cubique sont occupés par des atomes. Ces deux structures sont désordonnées, les sites atomiques étant occupés de façon plus ou moins aléatoire par des atomes de zinc et des atomes de cuivre (fig 2.19).

Dans la structure β , le caractère aléatoire est total, chaque site étant occupé au hasard par un atome de cuivre ou de zinc. *Statistiquement*, les sommets et les

centres des mailles cubiques sont alors équivalents. Il est manifeste que ces deux ensembles de points forment les noeuds d'un réseau de Bravais cubique corps centré. Le *motif* de ce cristal aléatoire est formé par un seul "atome moyen" ayant 50% de chance d'être du cuivre et 50% d'être du zinc.

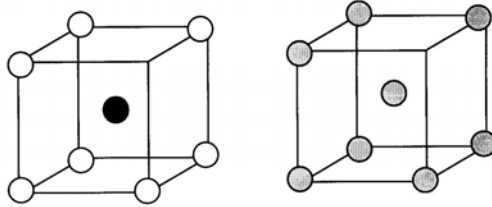


FIG. 2.19 – Structure des phases (β) de haute température (droite) et (β') de basse température (gauche) de l'alliage CuZn. Dans les deux cas les atomes ont un caractère "aléatoire" chacun d'eux ayant une certaine probabilité d'être du cuivre et une probabilité complémentaire d'être du zinc.

Dans la structure β' , également aléatoire, les centres des mailles sont occupés par des atomes moyens A ayant la probabilité p ($p > 50\%$) d'être du cuivre et $(1-p)$ d'être du zinc, alors que les sommets des mailles sont occupés par des atomes moyens B correspondant à des proportions inversées de cuivre et de zinc. Le réseau de Bravais de cette structure statistique est de type cubique simple (les translations primitives étant les côtés de la maille cubique), le motif étant composé des deux atomes moyens A et B. La probabilité p augmente quand la température s'abaisse pour atteindre la valeur 1 à très basse température. C'est seulement dans cette situation que le laiton peut être considéré comme un cristal ordinaire, non aléatoire, le motif étant alors composé d'un atome de cuivre et d'un atome de zinc.

Une complication supplémentaire vient du fait que le réseau des centres des mailles et le réseau de leurs sommets sont équivalents, au décalage près d'une demi-diagonale du cube. En conséquence, un état d'équilibre aussi stable du laiton β' pourrait être réalisé en échangeant les atomes moyens A et B de la structure précédente. En pratique, les deux structures se correspondant par échange des atomes A et B *coexistent* dans un même échantillon de laiton où elles occupent des petites régions juxtaposées, de dimensions $\gg c$, introduisant ainsi un élément de désordre supplémentaire.

2.3.3 Exemples d'autres structures.

Les éléments chimiques situés dans la partie droite du tableau périodique (non représentée sur la figure 2-17) ne cristallisent pas sous la forme d'empilements simples. Ceci est dû au fait, que dans les solides correspondants, la

cohésion des atomes relève de la liaison covalente qui a un caractère directionnel prononcé. Ainsi, un atome de silicium ou de germanium tend à s'entourer de quatre atomes formant un tétraèdre régulier. C'est aussi, dans certaines conditions, le cas du carbone.

L'une des structures dans laquelle le carbone cristallise est celle du diamant (fig.2.20). Le réseau de Bravais de cette structure est du type cfc. Le motif comprend deux atomes identiques. L'un est à l'origine de la maille élémentaire $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)$ définie par l'équation (2.9). L'autre est situé en $\frac{1}{4}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2 + \vec{a}_3) = \frac{1}{4}(\vec{c}_1 + \vec{c}_2 + \vec{c}_3)$. Cette structure optimise la configuration des liaisons chimiques du carbone car chaque atome est bien au centre d'un tétraèdre formé par ses plus proches voisins.⁹

La maille conventionnelle cubique contient 8 atomes. Si nous assimilons ces atomes à des sphères dures au contact les unes des autres, la relation entre le rayon r des atomes et le côté c de la maille cubique est $r = \frac{1}{8}|\vec{c}_1 + \vec{c}_2 + \vec{c}_3| = c\frac{\sqrt{3}}{8}$. On peut alors calculer la compacité de la structure :

$$\frac{8V_{atome}}{V_{maille}} = \frac{32\pi r^3/3}{c^3} = \frac{\pi\sqrt{3}}{16} = 0.34 \quad (2.15)$$

Elle est beaucoup plus faible que celle (0,74) de la structure cubique compacte. La forte cohésion de la structure diamant, sa grande rigidité élastique (cf. tableau 2.3) et sa dureté, ne sont pas reliées à la compacité de sa structure mais à la force et à la directivité de la liaison covalente.

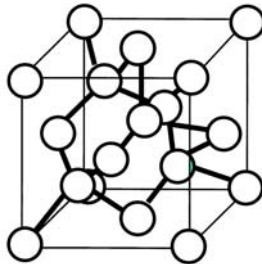


FIG. 2.20 – Structure du diamant. Chaque atome est au centre d'un tétraèdre régulier formé par 4 autres atomes de carbone.

⁹Cette structure n'est la forme stable du carbone qu'à de très hautes pressions alors qu'à pression ordinaire la structure stable du carbone est celle, hexagonale, du graphite (voir exercice 1). Par contre le silicium et le germanium possèdent cette structure à la pression atmosphérique.

2.4 Solides non-cristallins

Nous avons décrit les cristaux à partir de leur caractéristiques géométriques. Un point de vue complémentaire consiste à considérer les cristaux comme l'état le plus *ordonné* qui peut être formé à partir de ses atomes. L'idée d'ordre relève de la description *statistique* d'un système comportant un grand nombre de constituants microscopiques (de l'ordre de grandeur du nombre d'Avogadro). Un tel nombre est une source d'incertitude sur l'état global du système, et le degré de cette incertitude est mesuré par la valeur de son *entropie*. L'incertitude qu'il convient de considérer ici est celle qui concerne la *position* de chacun des atomes du système. De ce point de vue, un cristal parfait est un système complètement ordonné car on peut préciser la position de tous ses atomes en indiquant la position des quelques atomes qui constituent le motif, ainsi que les composantes des trois translations primitives.

Parmi les corps solides, les matériaux *amorphes* (dont les verres ordinaires sont l'exemple le mieux connu) constituent, à l'opposé des cristaux, l'exemple de désordre maximum.

On ne peut y mettre en évidence aucune périodicité microscopique car, bien que les liaisons chimiques aient tendance à imposer *localement* des distances et des angles proches de leur valeurs "optimum", des déviations à cet optimum se produisent (figure 2.21) qui ont pour effet qu'au delà de quelques angströms, il n'y a aucune corrélation des distances entre atomes et des orientations de leurs liaisons. On peut donc considérer que, dans ces systèmes, la position et l'orientation des groupements atomiques sont parfaitement aléatoires. De ce point de vue les substances amorphes peuvent être considérés comme des "liquides figés". De nombreux solides existent à l'état amorphe, dont les verres ordinaires (qui sont souvent des "silicates" dans lesquels le groupement SiO_2 joue un rôle de cohésion important), ainsi qu'un certain nombre d'alliages métalliques.

Un autre exemple de système non-cristallin, plus ordonné qu'une substance amorphe, est fourni par les *quasicristaux*. Pour les définir on peut se référer au fait que la maille d'un cristal parfait permet, par réplication, de *paver* tout l'espace avec des mailles identiques juxtaposées.

Certains alliages métalliques possèdent une propriété analogue. Bien que leur configuration atomique ne soit pas cristalline, elle est associée à un pavage de l'espace au moyen de *deux types de mailles distinctes*. Les formes et les dimensions de ces deux mailles sont telles qu'elle permettent ce pavage par juxtaposition des mailles en suivant des règles d'assemblage déterminées. Une illustration de cette juxtaposition à deux dimensions est reproduite sur la figure 2.21.

Les différences structurelles entre matériaux cristallins et matériaux amorphes ou quasicristallins, sont déterminantes pour expliquer leurs différences de propriétés mécaniques. Nous verrons que la mobilité des dislocations, condition d'une déformabilité plastique, et qui est réalisée dans les *métaux* cristallins (cf. chaps. 7 et 8), ne l'est pas dans ces matériaux non-cristallins : il en résulte qu'ils sont "fragiles".

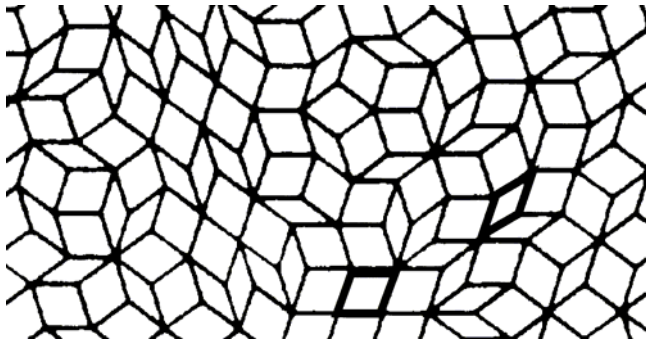


FIG. 2.21 – Pavage quasicristallin à deux dimensions par juxtaposition de deux types de mailles (losange étroit et losange large représentés en traits épais).

