

III.Structures cristallines

III.1.Introduction :

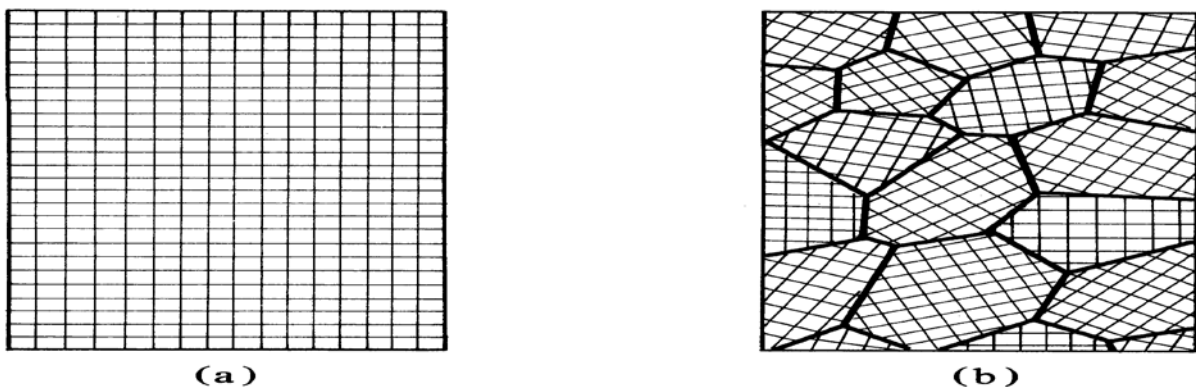
Le cristal représente l'état de la matière le plus fréquemment rencontrée dans les matériaux. Pour cette raison nous allons étudier de façon plus approfondie certains concepts liés à cette structure.

La cristallographie décrit l'architecture des cristaux, c'est-à-dire la répartition des atomes dans l'espace et les lois géométriques qui en fixent la position. Les solides cristallins sont donc caractérisés par un ensemble d'atomes arrangés périodiquement suivant les trois directions de l'espace dans un ordre strict qui définit la structure cristalline.

Deux concepts fondamentaux sont à la base de la description de la structure cristalline: le réseau et le motif.

- un milieu cristallin est constitué d'un ensemble d'atomes. Ces derniers, organisés suivant un ordre défini, engendré par la répétition périodique dans l'espace des atomes constitutifs ou de groupements d'atomes (de même nature ou de natures différentes) suivant les trois directions de l'espace, non coplanaires. Ce groupement d'atomes permettra, par des translations seulement, d'engendrer la structure cristalline complète. Ceci, est appelé le motif du cristal. Quant aux extrémités des vecteurs définissant les translations dans tout l'espace, elles constituent un ensemble de points, appelés les nœuds du réseau cristallin.

La **structure cristalline** est engendrée par translation dans l'espace du motif qui vient occuper les nœuds du réseau spatial. La structure cristalline est donc déterminée à la fois par son motif et par son réseau spatial.



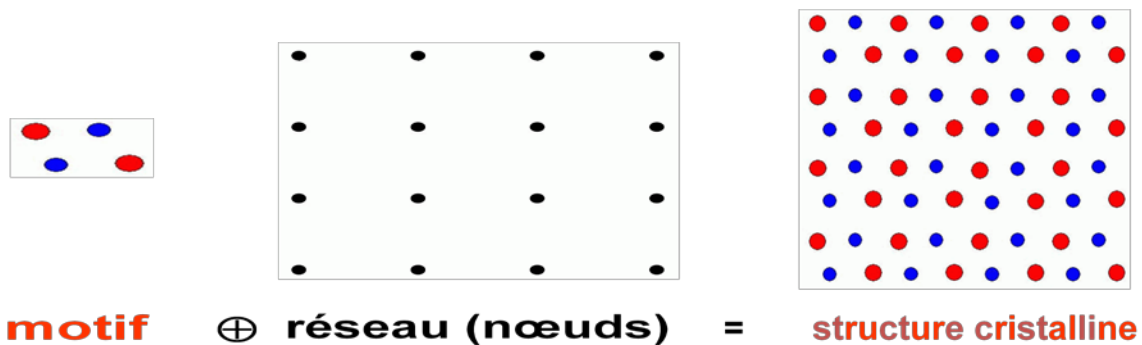
FIGIII-1:La structure cristalline est représentée par un réseau quadrillé: (a) cristal unique (monocristal); (b) structure polycristalline (assemblage de grains cristallins) avec, en traits noirs, les joints de grain.

III.2. Définition :

***Maille élémentaire:** C'est la portion d'espace de volume minimal, tel que par translation de vecteur repéré par ses composants (m, n, p) selon les trois axes entiers. Les abscisses (m, n, p) sont trois (03) entiers et (**a, b, c**) sont les 3 vecteur de base de la maille). La maille assure le paramétrage dans l'espace et donne le cristal. Il existe une infinité de mailles élémentaires de volume

***Un réseau** spatial est constitué par un ensemble de points appelés nœuds, de dimension infinie, obtenu par translation dans l'espace de trois vecteurs non coplanaires, **a, b** et **c**, qui déterminent les directions et les distances entre les nœuds du réseau. Dans le cristal, chaque nœud du réseau possède un environnement identique pour une direction donnée.

***Le motif** constitue l'élément de base dont la répétition suivant le réseau spatial engendre le cristal. Le motif peut être un atome ou un groupe d'atomes ayant une orientation et une géométrie bien déterminées.



Notons que les angles entre les vecteurs **a, b** et **c** peuvent être quelconques. La position d'un nœud quelconque du réseau est donnée par le vecteur $\vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$ (avec **u, v** et **w** nombres entiers) qui représente également une translation du réseau

III.3. Réseaux et systèmes cristallins

Le réseau est défini par un ensemble de trois vecteurs non coplanaires qui joignent les nœuds entre eux:

$$\vec{c} \oplus \begin{array}{c} \vec{a} \\ \vec{b} \end{array} \quad \vec{T} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

où **u, v** et **w** sont des **entiers**.

ou le réseau est superposable à lui-même par translation d'un vecteur tel que: Une **maille** est un volume qui pave l'espace sans vide ni recouvrement si on lui applique un ensemble de translations du réseau. Une propriété très importante va apparaître, celle que **tous les nœuds possèdent le même environnement** (c.-à-d. le même « entourage »). Cela signifie que le réseau de nœuds regardé dans une certaine direction, à partir d'un nœud particulier, aura exactement la même apparence que le réseau regardé dans la même direction à partir de n'importe quel autre nœud du réseau.

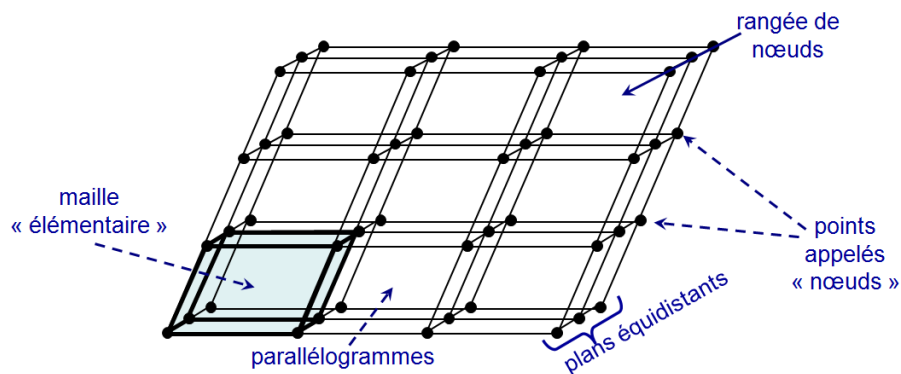


Fig III-3. : Représentation d'une maille élémentaire et de son réseau cristallin.

Une **maille élémentaire** est un parallélépipède formé par trois vecteurs de translation non coplanaires joignant des nœuds du réseau. Les trois vecteurs forment un trièdre direct.

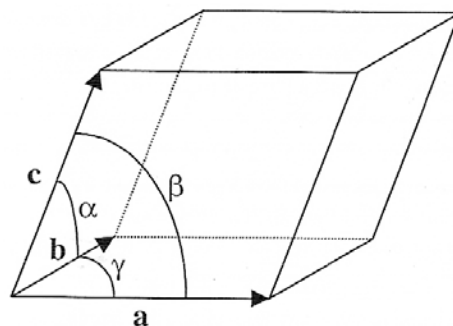
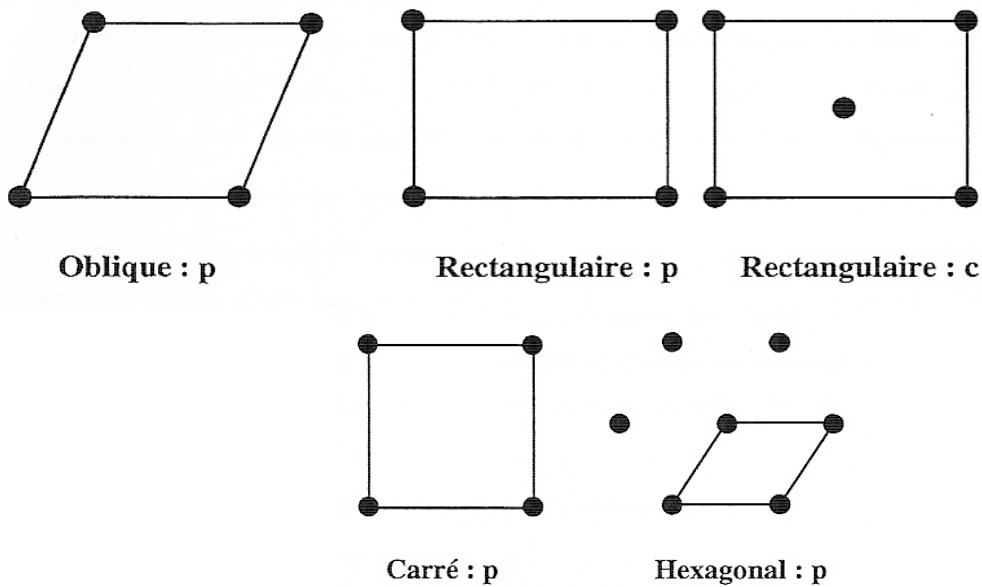


Fig II-2: représentation d'une maille élémentaire

Il faut donc connaître six paramètres : les modules a , b , c , et les angles α , β et γ .

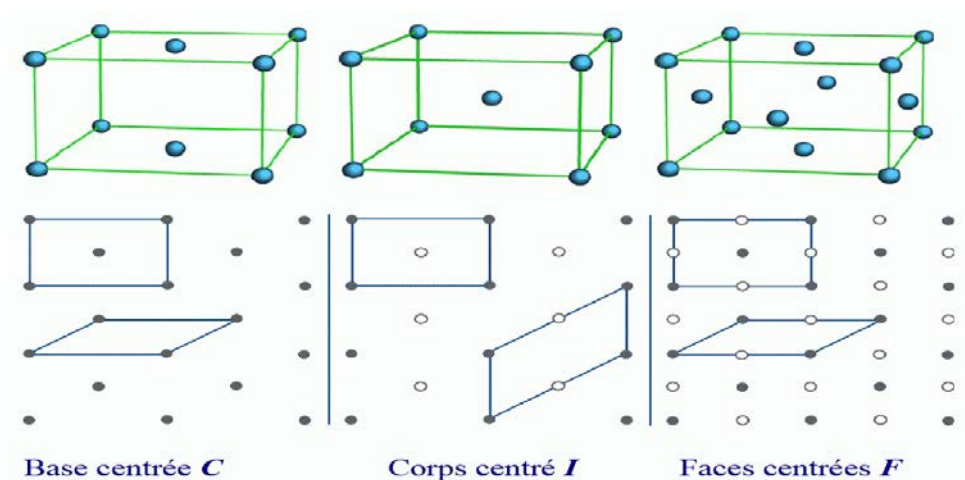
III.3.1.Mode de Réseau :

A deux dimensions, il existe cinq modes de réseau, dont l'un n'est pas primitif (rectangulaire centré) :



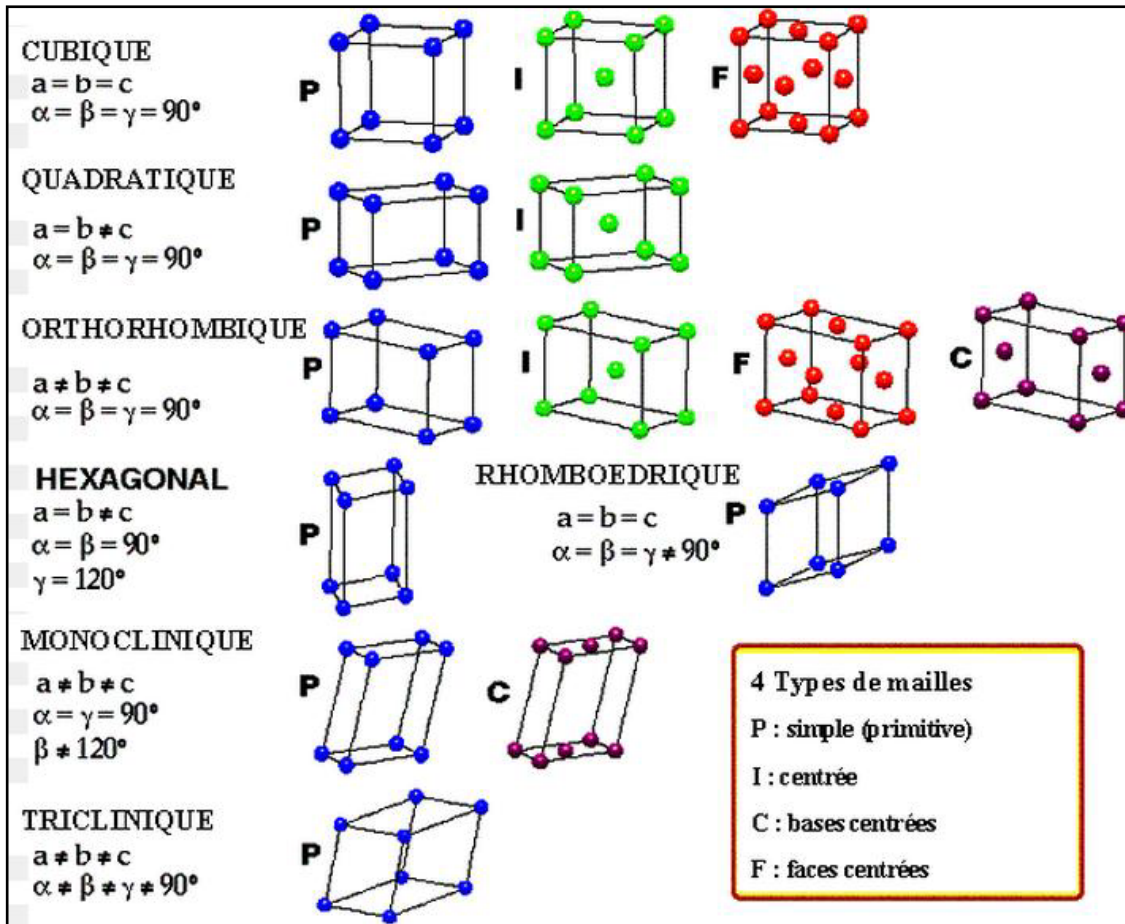
A trois dimensions, on empile ces réseaux 2D dans la 3^e direction. Comme à 2D, on peut avoir des mailles centrées. La maille du réseau peut être :

primitive *P* à base centrée *C* à corps centré *I* à faces centrées *F*



III.3.2.les quatorze réseaux de BRAVAIS :

Selon les paramètres de maille a , b , c et les angles α , β et γ , on dénombre 7 systèmes de Bravais ou systèmes réticulaires. En plaçant dans les mailles primitives des nœuds supplémentaires (au centre des bases, au centre de chacune des faces ou au centre de la maille) on obtient quatorze réseaux cristallins distincts (réseaux de Bravais).



III.3.3. Historique



Auguste Bravais, né le 23 août 1811 à Annonay et mort le 30 mars 1863 au Chesnay près de Versailles, est un astronome, physicien, minéralogiste et géologue français réputé pour ses travaux fondamentaux en cristallographie, en particulier les réseaux de Bravais et les lois de Bravais. Ce polytechnicien qui a choisi le service de la marine française, puis l'enseignement

des mathématiques appliquées et de la physique, a laissé de remarquables observations en géologie, en minéralogie sur les réseaux cristallins, en géophysique sur l'atmosphère, sur les phénomènes optiques et sur les rivages des côtes, avant de devenir membre de l'Institut en 1854.

III.4.Directions et plans cristallographiques

III.4.1. Directions cristallographiques

L'indexation des directions cristallines est plus directe que celle des plans. Considérons un vecteur R d'origine O et d'extrémité R :

$$\mathbf{R} = A\mathbf{a} + B\mathbf{b} + C\mathbf{c}$$

FIG: Maille (a, b, c) avec le vecteur \mathbf{R} qui indique

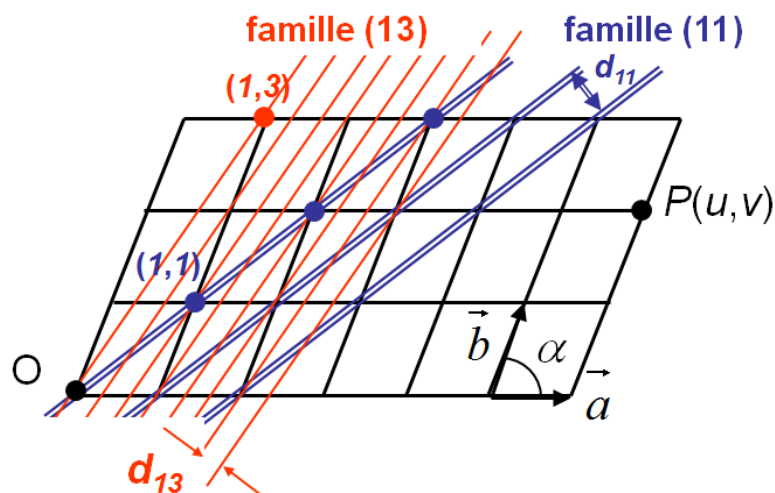
une direction cristallographique. On note que

dans (3.8), $OA = A$, $OB = B$ et $OC = C$.

La notation de la direction pourra donc se faire par les indices u, v, w obtenus en divisant les coordonnées de R (OA , OB et OC) par un nombre n choisi de telle manière que u, v, w soient entiers et le plus petit possible.

La notation de la direction est donnée par les indices entre crochets $[uvw]$. On notera que la direction $[\overline{u}\overline{v}\overline{w}]$ est de sens opposé à $[uvw]$.

a). Indexation des nœuds ; cas 2D



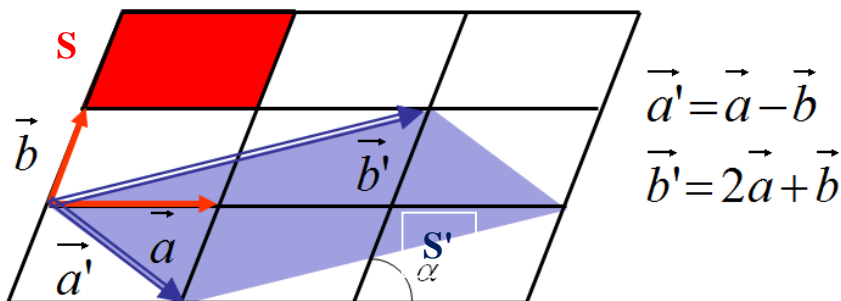
- Tous les nœuds ont la même propriété: le choix de l'origine est *arbitraire*
- Tout nœud P du réseau est tel que: $\vec{r} = \overrightarrow{OP} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$ u, v, w entiers
- Coordonnées relatives : $u = \frac{x}{a}, v = \frac{y}{b}, w = \frac{z}{c}$

b). Mailles multiples ; changements de base

- Une maille conventionnelle peut ainsi être préférée à une maille primitive
- Un changement de base peut mieux faire apparaître des propriétés de symétrie



on peut donc calculer la nouvelle surface S' de la maille conventionnelle par rapport à la surface S de la maille élémentaire.



- surface du parallélogramme rouge :

$$S = \|\vec{a} \wedge \vec{b}\| \quad \|\vec{a} \wedge \vec{b}\| = \|\vec{a}\| \cdot \|\vec{b}\| \cdot \sin \alpha$$

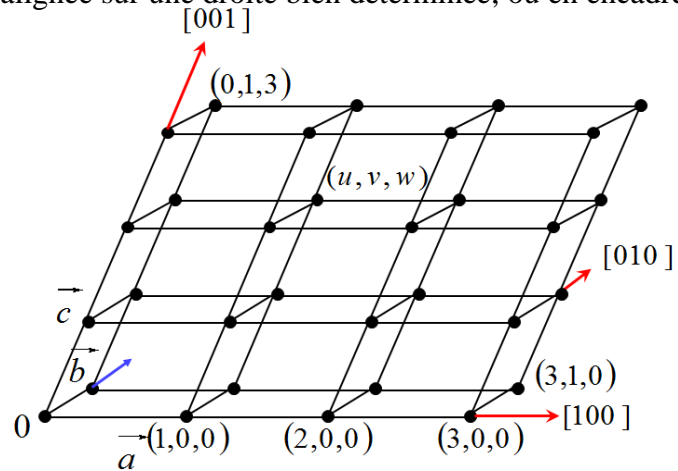
- surface du parallélogramme bleu :

$$\begin{aligned} S' &= \|\vec{a}' \wedge \vec{b}'\| = \|(\vec{a} - \vec{b}) \wedge (2\vec{a} + \vec{b})\| \\ &= \|(-2\vec{b} \wedge \vec{a}) + (\vec{a} \wedge \vec{b})\| = 3\|\vec{a} \wedge \vec{b}\| \\ &= 3 \times (S) \end{aligned}$$

Multiplicité : la maille bleue est bien **triple**

c). les rangées [uvw]

dans une rangée on trouve les nœuds alignés sur une droite bien déterminée, ou on encadre les directions entre deux crochets [uvw]

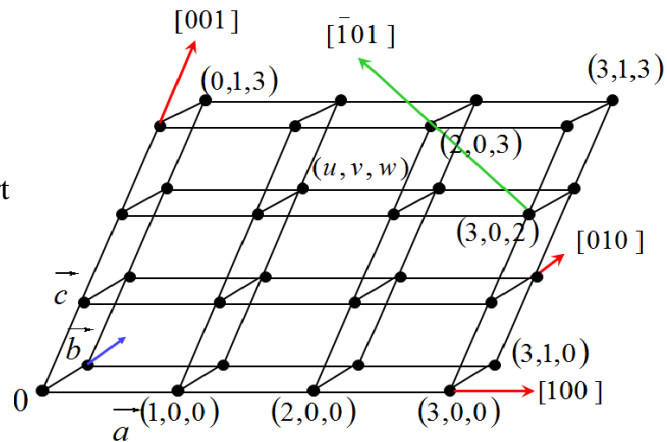


Les indices uvw d'une rangée sont les coordonnées du vecteur :

$$\overrightarrow{T_{uvw}} = \overrightarrow{OP} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

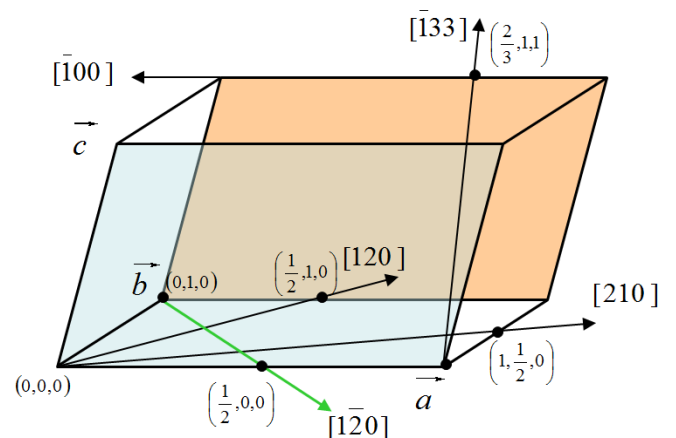
Exemple 1:

$[\bar{1}01]$ Indices de la rangée en vert



$$\overrightarrow{T_{\bar{1}01}} = (2,0,3) - (3,0,2) = (-1,0,1) = -\vec{a} + \vec{c}$$

Exemple 2 :



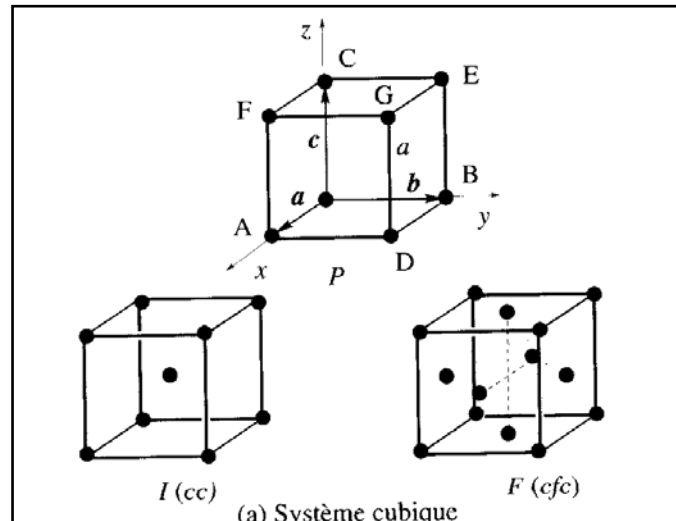
$$\overrightarrow{T_{120}} = \left(\frac{1}{2}, 0, 0\right) - (0,1,0) = \left(\frac{1}{2}, -1, 0\right) = \frac{1}{2}\vec{a} - \vec{b}$$

$[\bar{1}20]$

III.4.2. Plan réticulaires et indices de Miller

La position d'un nœud dans l'espace est spécifiée en indiquant sa position par rapport à un nœud du réseau choisi arbitrairement comme origine et en exprimant les coordonnées à l'aide des trois vecteurs a, b et c , qui définissent le réseau pris comme unité.

Par exemple, pour la maille cubique de la figure suivante

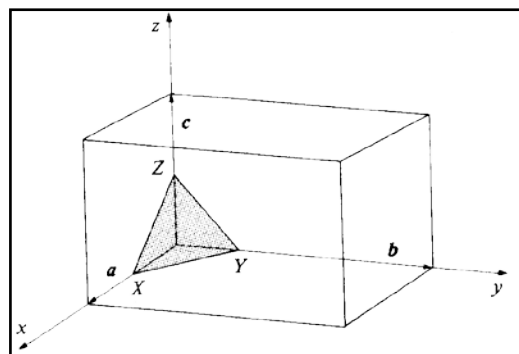


les points A, B et C ont respectivement comme coordonnées 100, 010 et 001, les points D, E, F, 110, 011, 101 et le point G, 111. Dans le réseau cubique centré, l'atome situé au centre du cube a comme coordonnée $1/2, 1/2, 1/2$.

Pour une famille de plans donnée, le plan réticulaire le plus proche de l'origine coupe les axes de la maille en:

$$\frac{a}{h}, \frac{b}{k}, \frac{c}{l}$$

Pour indexer les plans du cristal, on utilise généralement les **indices de Miller**. Dans un cristal qui a pour maille a, b et c , considérons un plan réticulaire quelconque (figure)



- Le plan réticulaire est un plan qui passe par des nœuds. Les indices de Miller (h, k, l ; entiers) caractérisent la position du plan dans l'espace et se définissent par rapport au premier plan voisin de l'origine (ordre $m=1$) : Les indices h, k , et l sont appelés les **indices de Miller**. Ils permettent de définir la famille de plans (hkl).
- Un plan ($h \ k \ l$) découpe sur les axes les segments :
 $OA=a/h,$ $OB=b/k,$ $OC=c/l$.
 Si le plan ne coupe pas un axe (il est parallèle à l'axe), l'indice est nul (ex : le plan réticulaire (120) est parallèle à OZ).
- L'équation d'un plan d'ordre m s'écrivant :
 $h \cdot X/a + k \cdot Y/b + l \cdot Z/c = m$
- pour qu'un nœud (u, v, w ; $X=ua, Y=vb, Z=wc$) soit dans ce plan, on doit avoir
 $hu + kv + lw = m$ (vérifiez cette condition).
- Le triplet (hkl) définit en fait une famille de plans réticulaires ($-\infty < m < +\infty$) dont le plan d'ordre $m=0$ passe par l'origine.

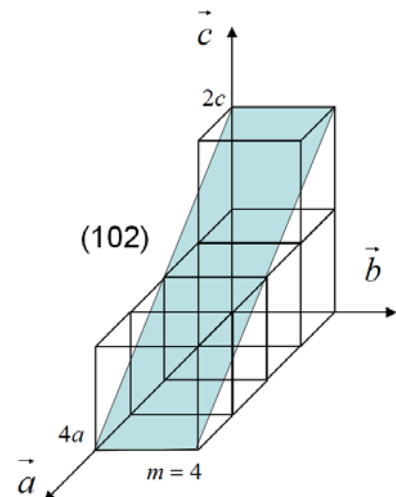
Par définition des indices de Miller d'un plan (hkl) , On peut montrer que la forme générale pour l'équation de *tout* plan (hkl) s'écrit :

$$hu + kv + lw = m$$

- h, k, l entiers *premiers entre eux*, sont les **indices de Miller**
- ceci vaut pour les 7 systèmes de Bravais (triclinique, cubique , hexagonal etc.)

Exemple 1 :

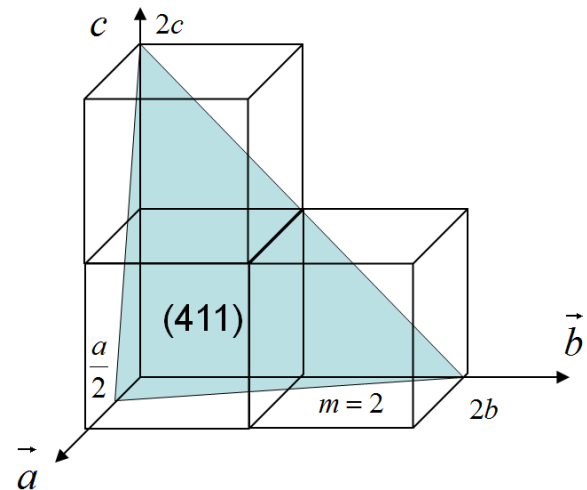
	Axe x	Axe y	Axe z
intercepts	$4a$	∞b	$2c$
u, v, w	4	∞	2
$1/u, 1/v, 1/w$	$1/4$	0	$1/2$
PPCM = m	4	4	4
PPCM $\times 1/u$	1	0	2
hkl	102		



Équation du plan : $u + 2w = 4$

Exemple 2 :

	Axe x	Axe y	Axe z
intercept	$a/2$	$2b$	$2c$
u, v, w	$1/2$	2	2
$1/u, 1/v, 1/w$	2	$1/2$	$1/2$
PPCM = m	2	2	2
PPCM $\times 1/u \dots$	4	1	1
hkl	411		



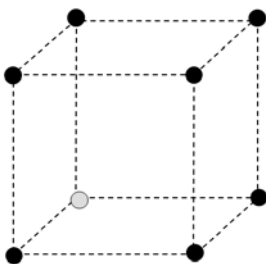
Équation du plan : $4u + v + w = 2$

III.5. Les différentes mailles cristallines :

En distingue quatre mailles cristallines dans les sept systèmes cristallins

- **maille élémentaire** : un parallélépipède pavant l'espace sans vide ni recouvrement ;
- **maille primitive** : une maille élémentaire ne contenant qu'un seul nœud par maille ;
- **maille multiple** : une maille élémentaire contenant plus d'un nœud par maille ;
- **maille conventionnelle** : une maille élémentaire, éventuellement multiple, compatible avec la symétrie du cristal.

Exemple dans le système cubique simple



cubique simple CS : Mode P

maille élémentaire = maille primitive = maille conventionnelle

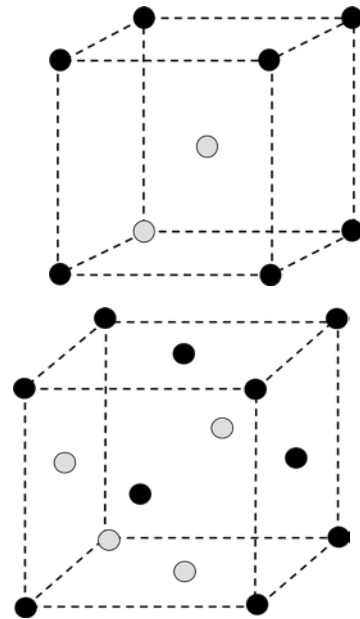
la maille élémentaire est un cubique centré (CC) : Mode I

la maille conventionnelle est une maille multiples avec 2 nœuds par maille

dans ce troisième cas, la maille élémentaire est de type cubique a face centré (CFC) : Mode F

la maille conventionnelle = maille multiple

4 nœuds par maille



III.6. Empilement dans les cristaux métalliques

Les structures métalliques peuvent être considérées comme des empilements compacts ou partiellement compacts d'atomes identiques, qui sont pris pour des sphères rigides. Cet empilement permet de comprendre la liaison métallique est celui qui considère les métaux comme des ions positifs baignant dans un nuage électronique.

III.6.1. Empilements de couches compactes

Les empilements compacts sont le résultat d'une succession de plans (ou couches) atomiques compacts caractérisée par un maximum d'espace occupé, Un minimum de vide.

La succession de plans compacts conduit à deux types de structures : CFC (cubique à faces centrées) et HC (hexagonal compact).

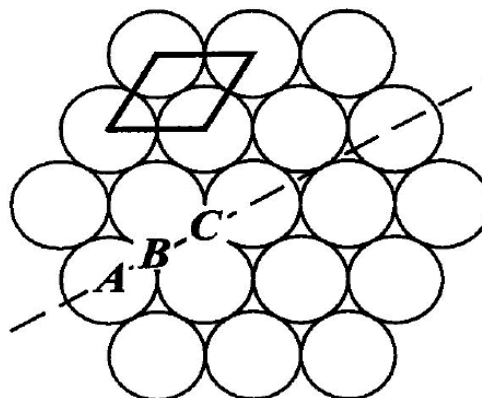


Fig III-3 : Empilement compact

On empile des couches de manière à ce que les atomes de la couche supérieure soient placés dans les interstices de la couche inférieure

- Il y a trois interstices possibles: A, B ou C
- La 1^{ère} couche est en A, la 2^{ème} est en B
- Il y a deux choix pour la 3^{ème}: A ou C

empilement de plans ABABAB caractéristique d'une structure hexagonale compacte notée hc.

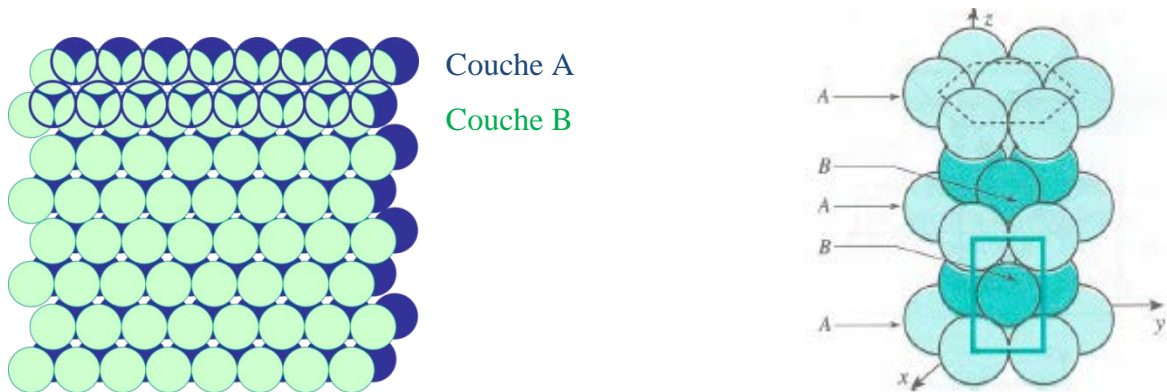


Fig III-4 : Empilement de plans donnant lieu à une structure hexagonale compacte (HC)

la Maille élémentaire Hexagonale **P** avec une multiplicité de 2 atomes/maille

les positions atomiques en $0\ 0\ 0$ et $\frac{2}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{2}$, Nombre de voisins : 12

empilement de plans ABCABCABC caractéristique d'une structure cubique face centrée notée cfc

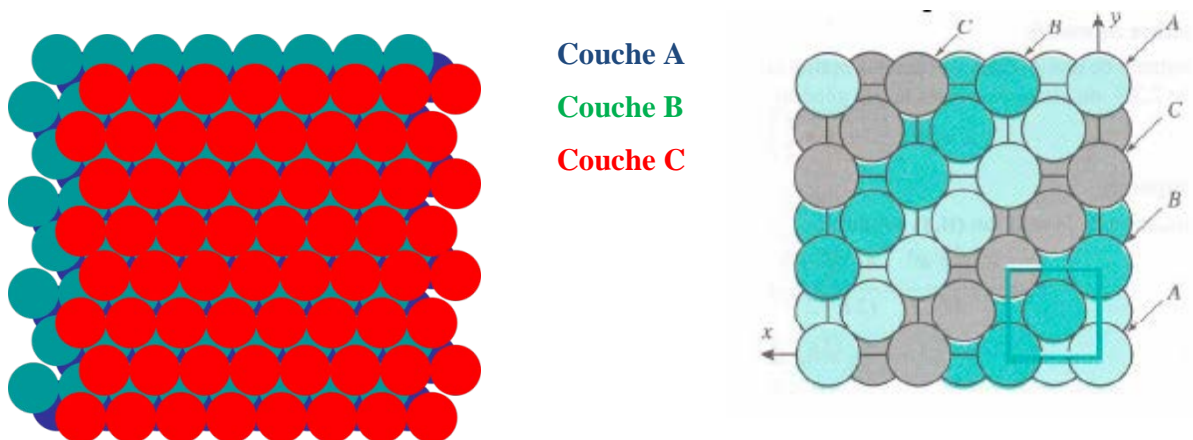


Fig. III-5 : Succession de plans compacts de type ABC donnant lieu à une structure.

La Maille élémentaire est Cubique F avec une multiplicité de 4 atomes/maille

les positions atomiques en $0\ 0\ 0$, $\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$, $\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}$ et $0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$

Nombre de voisins : 12

a). Caractéristiques d'une structure compacte :

Une structure compacte est caractérisée par deux grandeurs:

➤ **La coordinence (ou nombre de coordination)**

La coordinence est le nombre de plus proches voisins au contact d'une sphère.

➤ **La compacité**

C'est le rapport entre le volume des sphères et le volume réel occupé par l'ensemble des sphères. C'est un nombre inférieur à 1.

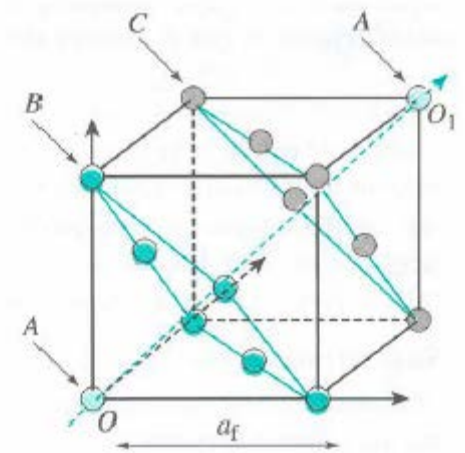
b). Structure cubique à faces centrées cfc :

Paramètre de maille $a=b=c$ et $\alpha=\gamma=\beta=90^\circ$

Relation entre le paramètre de maille a et le rayon R (de l'atome) :

$$a = 2R\sqrt{2}$$

Appartenance ou nombre d'atomes/maille : 4



Coordinance : 12

Compacité :

$$C = \frac{4 \cdot \frac{4}{3} \pi R^3}{16R^3 \sqrt{2}} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0.74$$

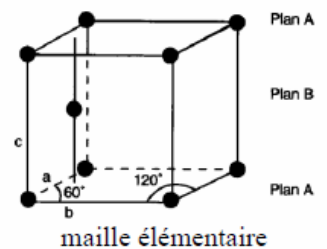
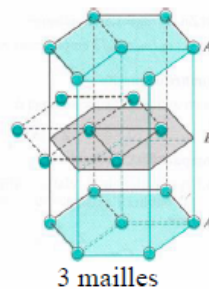
C). Structure hexagonale compacte hc

Paramètre de maille $a=b$, c et $\alpha=\beta=90^\circ$ et $\gamma=120^\circ$

Relation entre les paramètres de maille a et c et le rayon R (de l'atome) :

$$a=2R \text{ et } C = 4R\sqrt{2/3}$$

Coordinance : 12



Compacité :

$$C = \frac{2 \cdot \frac{4}{3} \pi R^3}{8R^3 \sqrt{2}} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0.74$$

III.6.2. structure cubique centrée cc (empilement non compact)

La structure cubique centrée est caractérisée par un empilement de type ABAB dans la disposition carrée.

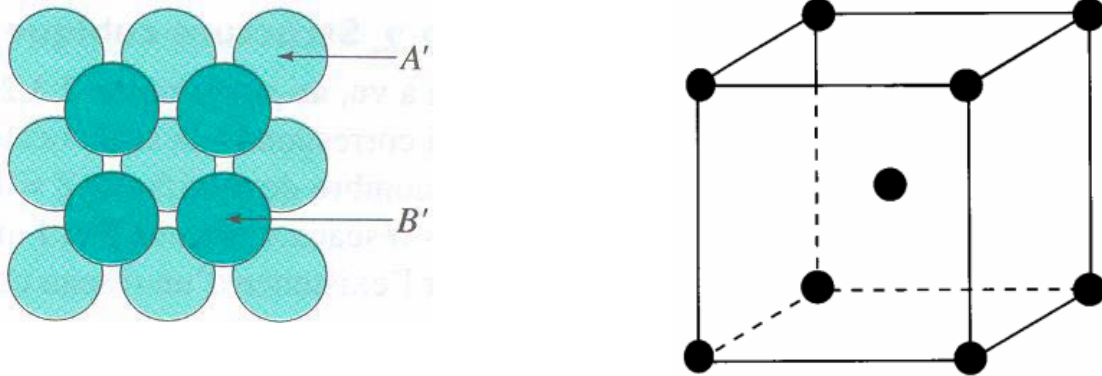


Fig.III.6 : Empilement semi compact de plans donnant lieu à une structure cubique centrée(CC)

La Maille élémentaire est Cubique centré **I** avec 2 atomes/maille

Les coordonnées des atomes sont au 0 0 0 et 1/2 1/2 1/2

Nombre de plus proche voisins : 8 (cube)

Paramètre de maille $a=b=c$ et $\alpha=\gamma=\beta=90^\circ$

Relation entre les paramètres de maille a et le rayon R (de l'atome) : $a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$

Coordination : 8

Compacité :

$$C = \frac{2 \cdot \frac{4}{3} \pi R^3}{\frac{a^3}{3\sqrt{3}}} = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} = 0.68$$

III.6.3. Existence de sites interstitiels :

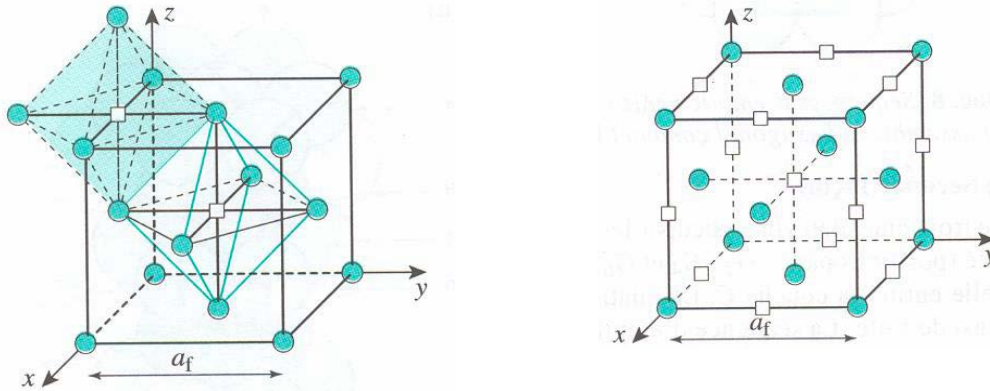
La compacité des structures des métaux étant inférieure à 1, des « sites » pourront accueillir éventuellement d'autres atomes.

On définit deux types de sites:

- des sites tétraédriques: situés au centre d'un tétraèdre défini par 4 atomes en contact.
- des sites octaédriques: situés au centre d'un octaèdre défini par 6 atomes.

a). Structure cfc

- site octaédrique



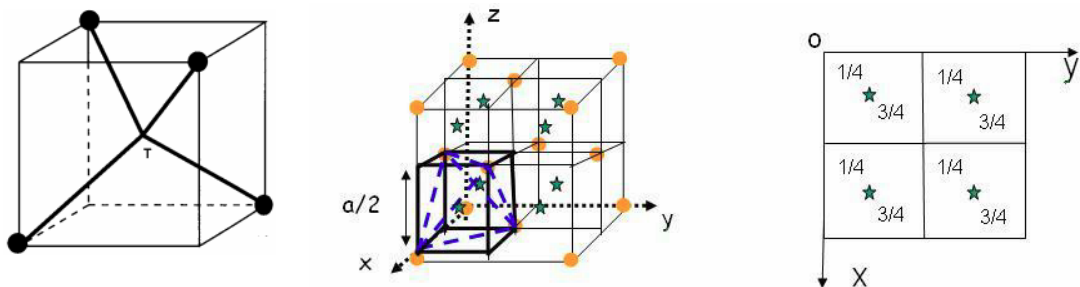
On dénombre 4 site octaédrique par maille :

- 12 sites placés au milieu des arêtes du cube, chaque arête étant commune à 4 cubes ne compte que pour 1/4, soit $12 \times 1/4 = 3$ Arêtes de la maille en : $(1/2, 0, 0)$, $(0, 1/2, 0)$ et

$(0, 0, 1/2)$

- 1 site placé au centre du cube. $(1/2, 1/2, 1/2)$

- site tétraédrique

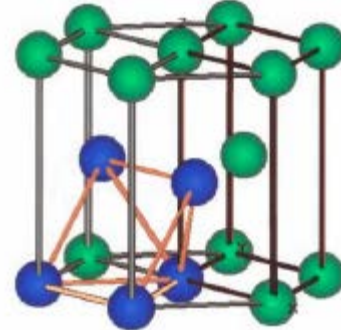
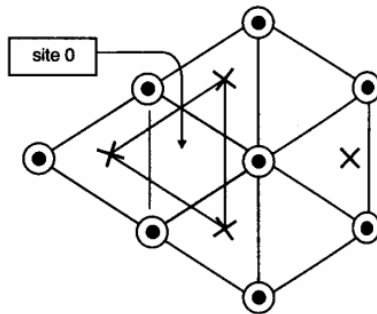


La maille CFC peut être divisée en 8 petits cubes d'arrête $a/2$. Le centre de chaque petit cube constitue un site tétraédrique, ce qui donne un total de 8 sites tétraédrique /maille CFC.

les positions des sites tétraédrique : 4 à $z=1/4$ et 4 à $z=3/4$. Les coordonnées xyz de ces sites : $(1/4, 1/4, 1/4)$; $(1/4, 1/4, 3/4)$; $(1/4, 3/4, 1/4)$; $(1/4, 3/4, 3/4)$; $(3/4, 1/4, 1/4)$; $(3/4, 1/4, 3/4)$; $(3/4, 3/4, 1/4)$; $(3/4, 3/4, 3/4)$

b) . Structure hc

Cette structure peut être représentée soit par une maille hexagonale (= maille triple), soit par une pseudo - maille (= 1/3 de la maille hexagonale).

➤ **Sites octaédriques**

en compte 2 site octaédrique par maille, donc 2 positions :

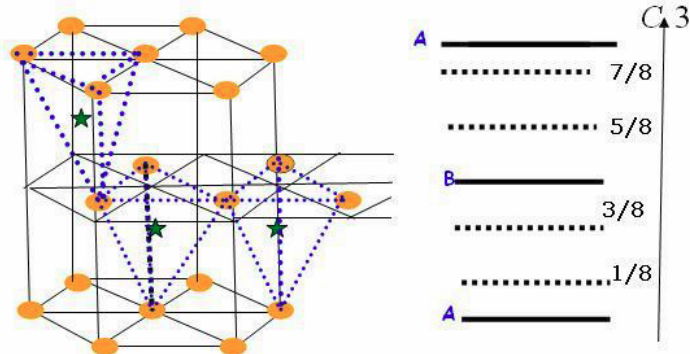
$(1/3, 2/3, 1/4)$; $(1/3, 2/3, 3/4)$.

dans la structure Hc en compte 2 site octaédrique

➤ **site tétraédrique**

se trouvent sur les plans : $1/8$, $3/8$, $5/8$ et $7/8$ ce qui donne 4 sites tétraédriques par maille

au postions $(2/3, 1/3, 1/8)$; $(0, 0, 3/8)$; $(0, 0, 5/8)$; $(2/3, 1/3, 7/8)$.



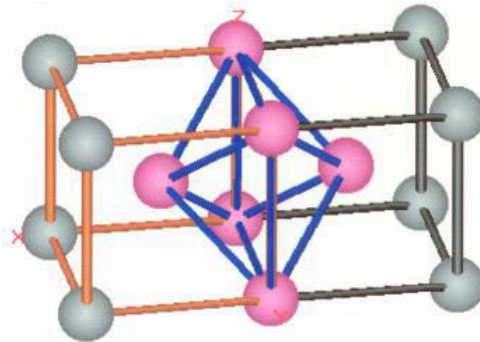
c). Structure cubique centrée CC

Dans cette structure qui dérive d'un assemblage non compact, les atomes occupent les sommets et le centre de la maille.

➤ site octaédrique

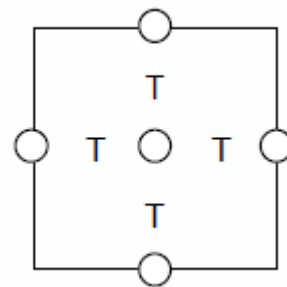
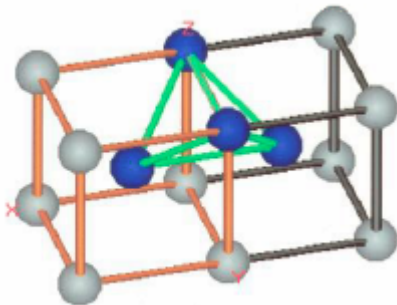
ils sont situés au centre des faces et au centre des arêtes

leur position sont $(1/2, 1/2, 0)$; $(1/2, 0, 1/2)$; $(0, 1/2, 1/2)$; $(1/2, 0, 0)$; $(0, 1/2, 0)$; $(0, 0, 1/2)$



➤ site tétraédrique :

Il existe également des sites 4 site tétraédriques par face carrée, soit $4 \times (6 \times 1/2) = 12$ par maille. Ils se situent en $(1/2, 0, 1/4)$, $(1/4, 0, 1/2)$, $(1/2, 0, 3/4)$, $(3/4, 0, 1/2)$...etc



III.7. Les défauts cristallins

Le cristal parfait décrit ne se rencontre jamais dans la nature, en raison de la présence de défauts dans la structure cristalline. Ceux-ci modifient de manière considérable les propriétés des matériaux.

La présence et le nombre de défauts dépend du type de liaison chimique, de la pureté du cristal, de la méthode de préparation, ainsi que des traitements thermiques et/ou mécaniques subis.

Les défauts de structure couramment rencontrés dans les cristaux sont de trois types:

- Les défauts ponctuels sont de l'ordre de grandeur du volume d'un atome.
- Les défauts linéaires ou dislocations sont des perturbations de la structure du cristal situées le long d'une ligne d'atomes ou d'une rangée réticulaire.
- Les défauts bidimensionnels ou défauts plans mettent principalement en jeu des imperfections comme celles situées à l'interface séparant deux cristaux.

III.7.1. Défauts ponctuels :

Les défauts ponctuels se traduisent par une perturbation de l'ordre cristallin, lorsqu'un défaut existe à l'échelle d'un atome, on parle alors d'un **défaut ponctuel** en dépit du fait que ce défaut occupe un certain volume.

Tous les défauts ponctuels déforment le réseau et génèrent un champ de contrainte dans le cristal qui englobe un volume largement plus grand que celui du défaut même.

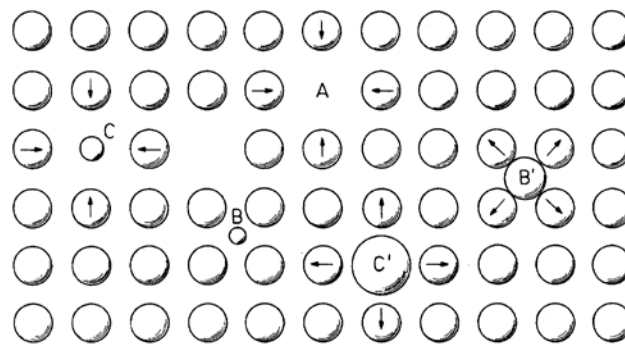


Fig III-7: Types de défauts ponctuels dans un cristal: (A) lacune; (B) atome étranger interstitiel; (B') atome auto-interstitiel; (C, C') atomes étrangers en substitution.

a.) Lacune : Les lacunes correspondent à un site vide à un emplacement où devrait normalement se trouver un atome laissé dans la structure .

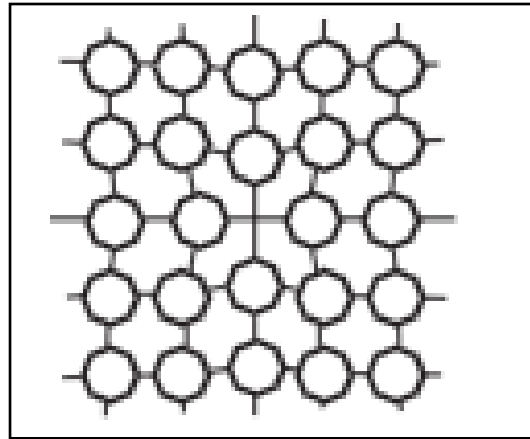


Fig III-8 Lacune dans un cristal

b.) Interstitiel: Les atomes interstitiels sont des atomes excédentaires disposés en un emplacement normalement inoccupé dans une structure, ou bien des impuretés placées sur des sites normalement vides.

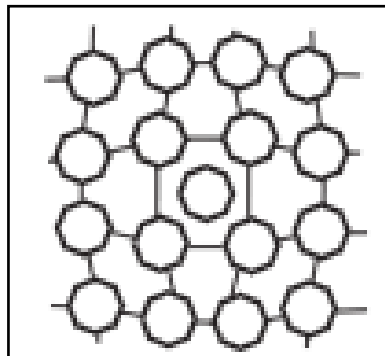
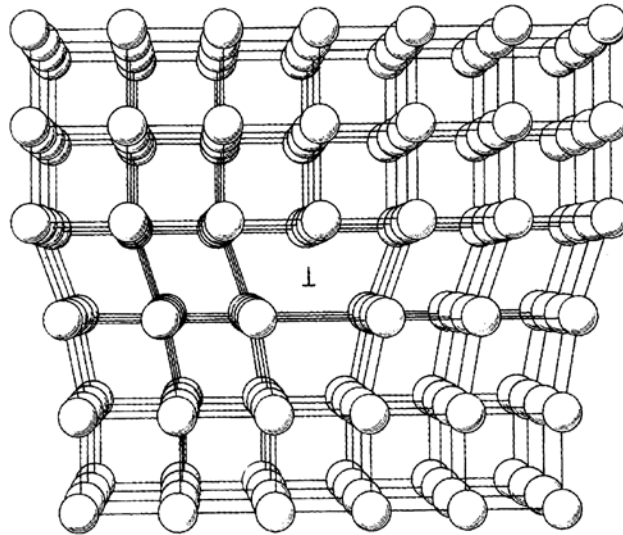


Fig III-9. : Atome en position interstitielle

III.7.2. Défauts linéaires

La *dislocation* est un défaut du cristal qui résulte d'une perturbation de la structure centrée autour d'une ligne (rangée réticulaire). Les dislocations sont obtenues par le glissement d'une partie du cristal le long d'un plan. La ligne de dislocation proprement dite correspond à la ligne du plan de glissement séparant la partie du cristal qui a glissé de celle qui est restée immobile. Pour permettre de reformer les liaisons interatomiques, il est nécessaire que le déplacement s'effectue le long du plan de coupe ABCD. Le vecteur qui caractérise l'amplitude, la direction et le sens du déplacement des atomes de la dislocation est appelé

vecteur de Burgers, b . Il existe dans ce plan deux directions de déplacement particulières: On distingue les **dislocations coin**, pour lesquelles b est perpendiculaire à la ligne de dislocation, et les **dislocations vis**, pour lesquelles b est parallèle à la ligne de dislocation. Les autres dislocations sont dites mixtes.



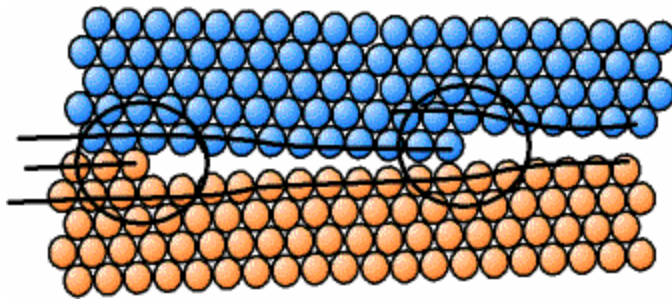
FigIII-10 : la structure d'une dislocation-coin dans un cristal à réseau cubique (d'après Kittel, 1976). La ligne de dislocation se trouve au centre du dessin. Dans un plan perpendiculaire à la ligne de dislocation, elle est entourée de 5 atomes.

III.7.3. Défauts surfaciques ou plans

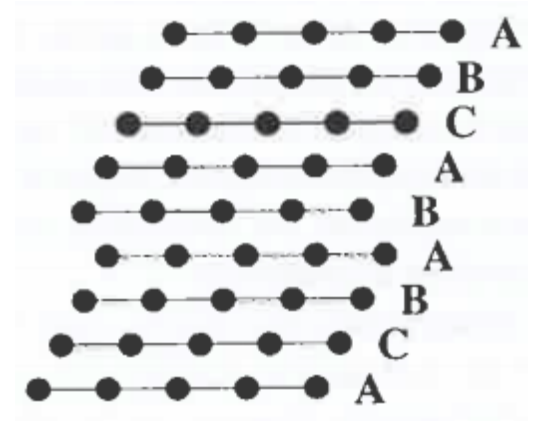
Le premier défaut visible par rapport au cristal parfait est le défaut planaire qui correspond à une région perturbée du cristal dont le volume est comparable à celui d'un plan d'atomes. Un cristal a donc nécessairement une surface libre, qui est en contact avec l'environnement : air, eau, vide, gaz de combustion, milieu de réaction...

La forme de la surface est décrite par le modèle TLK, pour *terraces*, *ledges*, *kinks* (terrasses, marches, décrochements). Elle comporte en effet

- des surfaces planes correspondant à des plans atomiques denses, ou «terrasses» ;
- des «marches» linéaires entre deux terrasses ;
- la linéarité des marches est parfois brisée par des «décrochements».



(a)



(b)

Fig III-11 : (a) Représentation schématique de l'arrangement des atomes au niveau d'un joint de grain dans un échantillon polycristallin. (b) Défaut d'empilement produit par l'absence d'un plan C dans la séquence ...ABC ABC A... constituant une structure cubique compacte. *Figure (b) extraite du livre « Bases physiques de la plasticité des solides », par J.-C. Tolédano.*

III.7.4 . Default volumiques :

Les défauts dits « volumiques » sont essentiellement des cavités, des phases non désirées, des inclusions (morceaux de matière étrangère, provenant de l'élaboration, par exemple particules venant d'un creuset). Ils proviennent notamment de l'élaboration du matériau (frittage des céramiques, métallurgie des poudres ou capillaires de fluide pour les cavités) ou de l'endommagement de celui-ci lors de son utilisation. On trouve aussi des défauts géométriques tels que les « cordes » dans les verres ou l'hétérogénéité de taille des bulles dans les matériaux mousseux.