

2) Le lithium cristallise dans une structure hexagonale de paramètres $\begin{cases} a = 0,311 \text{ nm} \\ c = 0,509 \text{ nm} \end{cases}$

Critère de compacité : $c = \sqrt{\frac{8}{3}} a$ soit $\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} \approx 1,633$

Or $\frac{c}{a} = \frac{0,509}{0,311} \approx 1,637 \rightarrow$ on peut tout à fait considérer la structure c hex. compacte.

3) Système cubique centré

Coordination $C(E/E) = 8$

Compacité : $\epsilon_I = \frac{Zat \frac{4}{3}\pi R^3}{a^3} = 68\%$
 \uparrow \uparrow
 $v_c = a^3$ $a_I = \frac{4R}{\sqrt{3}}$

Structure hexagonale compacte

C(E/E) = 12

Compacité : $\epsilon_H = \frac{Zat \frac{4}{3}\pi R^3}{a^3 \sqrt{2}} = 74\%$
 \uparrow \uparrow
 $v_c = a^3 \sqrt{2}$ $a_H = 2R$

SM4.7

H_2 mm Zr \rightarrow hydure interstitiel d'atomes H de la réseau métallique de Zr.
c.f.c

1) Dans un système cfc il existe 2 types de sites:

- les sites tétraédriques avec : $\frac{r_T}{r} \leq \sqrt{\frac{3}{2}} - 1 \approx 0,225$ $r_{Te} = 0,225 r$
- cf cours pour les calculs
- les sites octaédriques avec : $\frac{r_o}{r} \leq \sqrt{2} - 1 \approx 0,414$ $r_{oe} = 0,414 r$

2) $r_H = 0,037 \text{ nm}$
 $r = R(\text{Zr}) = 0,162 \text{ nm}$ } $\frac{r_H}{r} = 0,228$ \rightarrow compatible avec l'occupation d'1 site octaédrique
 $> r_{Te}$
 incompatible avec l'occupation d'1 site tétraédrique.
 (mais "limite" \rightarrow d'où 3°)

3) Si les atomes occupent tous les sites ils occupent, pour une maille cfc (avec

$Z_{\text{Zr}} = \frac{1}{8} \cdot 8 + \frac{1}{6} \cdot 6 = 4$ at. de Zr/maille cfc :

- les 8 sites tétraédriques
 - les $1 + 12 \cdot \frac{1}{4} = 4$ sites octaédriques
- $\rightarrow Z_H = 12$ at de H/maille cfc

\equiv 1 at de Zr pour 3 atomes de H

d'où la formule de l'alliage : $Zr H_3$

ex 1.5 $N_o = 6 \cdot \frac{1}{2} = 3$ sites octaédriques/maille $H_T =$