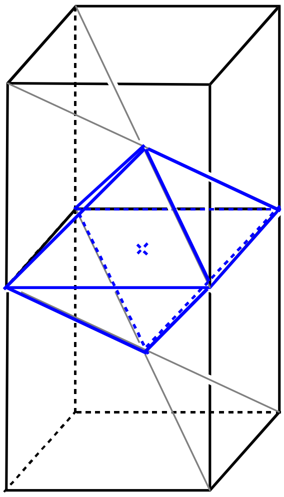
Sites intersticiels de la maille cubique centrée (C.C)

Sites octaédriques (délimités par 6 atomes)

Centrés au centre d'une face :



Sommets de l'octaèdre :

◆Centre des 2 cubes ayant en commun la face considérée et sommets de cette face

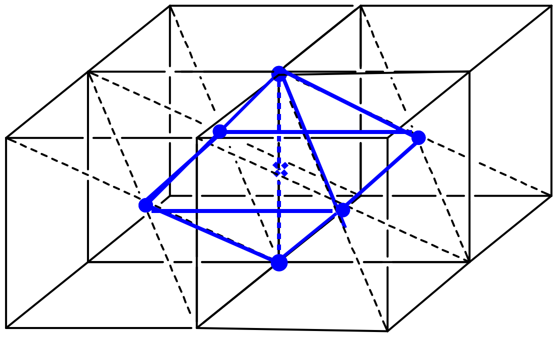
◆Distances sommets – centre de l'octaèdre

$d_{1O} = a/2$

$$d_{2O} = \frac{a\sqrt{2}}{2}$$

Nombre par maille : $6 * \frac{1}{2} = 3$

Centrés au centre d'une arête



◆Sommets de l'octaèdre :

Centres des 4 cubes ayant en commun l'arête considérée et extrémités de cette arête

◆Distances sommets – centre de l'octaèdre

$d_{1O} = a/2$

$$d_{2O} = \frac{a\sqrt{2}}{2}$$

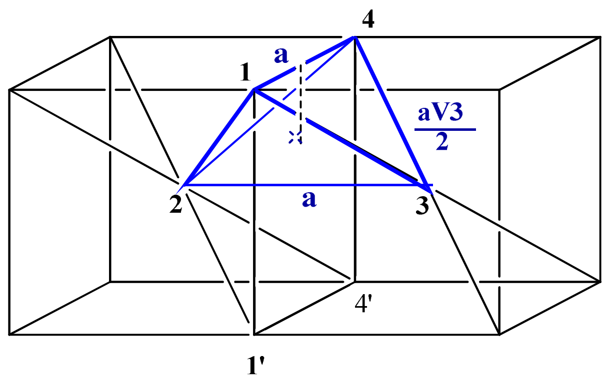
Nombre par maille : $12 * \frac{1}{4} = 3$

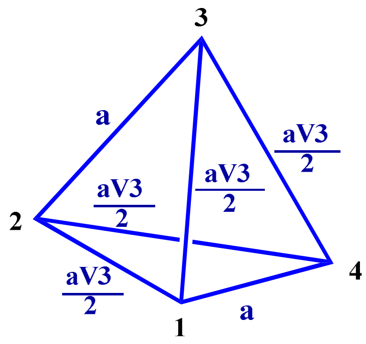
Au total on compte **6 sites octaédriques par maille**

Sites tétraédriques (délimités par 4 atomes)

Ils sont délimités par deux sommets (1 et 4) et deux centres de deux cubes voisins (2 et 3) ; les deux sommets (1 et 4) sont situés sur la face commune aux deux cubes .

Le centre du tétraèdre se situe dans la face commune , à la verticale (pointillés) du milieu (d'où les deux coordonnées 1 / 2 et 0) de l'arête commune .





Nombre de sites tétraédriques par maille :
Le site tétraédrique représenté ci-dessus est partagé entre les deux mailles cubiques , il appartient donc pour 1 /2 à une maille . D'autre part , on peut tracer un site symétrique du premier à partir de l'arête (1' 4') ; autrement dit pour une arête on obtient 2 sites tétraédriques .

Finalement pour 12 arêtes on en compte $12 * 2 * \frac{1}{2} = 12$:

12 sites tétraédriques par maille

Pour les sites tétraédriques , la distance d'un sommet au centre vérifie : $d^2 = \left(\frac{a}{4}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2$ **soit**

$$\boxed{d = \frac{a\sqrt{5}}{4}}$$

Sites interstitiels - structure hexagonale compacte

Sites octaédriques

Les nœuds délimitant ce type de site appartiennent pour moitié au plan médian et pour moitié à l'une des faces. Aussi le centre de l'octaèdre se situe à mi-distance entre deux plans consécutifs de grande compacité.Il se situe à la verticale du centre de gravité d'un triangle inoccupé du plan médian.

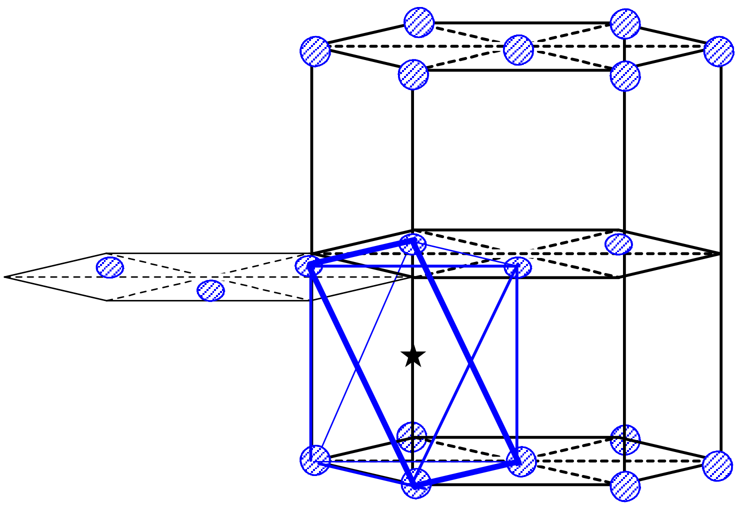
Au total il y a **6 sites octaédriques**

Position des six nœuds délimitant un site octaédrique :

- les nœuds sur une des faces sont situés 2 sur des sommets consécutifs et 1 au centre de la face.

Ces trois nœuds se trouvent à la verticale des sommets du triangle inoccupé du plan médian à partir duquel on peut repérer le centre de l'octaèdre.(★)

- Les nœuds du plan médian appartiennent pour deux à la maille considérée et le troisième se situe à l'extérieur



Rayon r_O d'un atome pouvant se loger dans un site octaédrique :

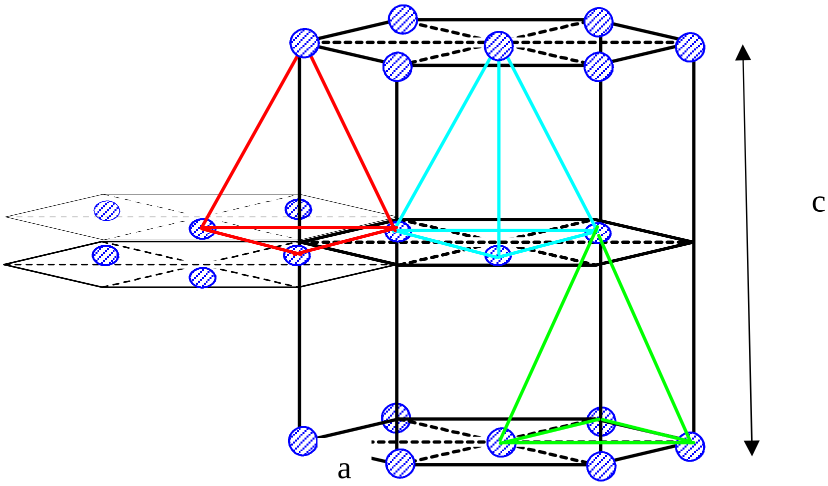
Le centre du site est aussi le centre d'un carré de coté a : $R + r_O = \frac{a\sqrt{2}}{2}$

Et pour une structure compacte 2R = a

$$\boxed{\frac{r_O}{R} = \sqrt{2} - 1}$$

Sites tétraédriques :

Pour les quatre nœuds qui délimitent ces sites , trois appartiennent à un même plan et le quatrième à un plan consécutif :



$1^{ère}$ catégorie : On relie les trois noeuds du plan médian au centre d'une des faces.
Au total il y en a 2

$2^{ème}$ catégorie : on relie toujours trois noeuds du plan médian à un nœud d'une face mais
-seul un des nœud du plan médian appartient à la maille considérée , les deux autres sont extérieurs
- le nœud situé sur une face est un sommet.
Un tel site tétraédrique est centré sur une arête verticale
Par ailleurs ce vide est partagé entre plusieurs mailles ;
On compte six arêtes verticales et sur chaque arête on peut placer centres de tétraèdres ; soit 12 sites tétraédriques. Cependant chaque arête appartient à trois mailles ;
Finalement , on compte 12*(1/3) =4 sites tétraédriques de cette catégorie.

$3^{ème}$ catégorie : on relie 2 nœuds consécutifs et le centre d'une face à un nœud du plan médian.
Les nœuds de la face sont situés à la verticale des sommets du triangle du plan médian admettant le $4^{ème}$ nœud comme centre.
On en compte 6

Au total , on compte $\boxed{\textbf{12 sites tétraédriques.}}$

Rayon r_T d'un atome pouvant se loger dans un site tétraédrique :
Le centre du tétraèdre régulier est situé au ¾ de la hauteur égale à c / 2 : $R + r_T = \frac{3}{4}\frac{C}{2}$
Or 2R = a et $\frac{C}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}}$ $\quad R\left(1 + \frac{r_T}{R}\right) = \frac{3}{8}a\sqrt{\frac{8}{3}}$ $\quad \boxed{\frac{r_T}{R} = \sqrt{\frac{3}{2}} - 1}$

On peut remarquer que **Nombre de sites octaédriques = multiplicité**
Nombre de sites tétraédriques = 2* multiplicité