Chapitre VI :
Cristallographie

Plan :

****

II- Systèmes cristallins 2

1- Notions sur les réseaux de Bravais (complément de cours) 2

2- Définitions : *motif, réseau, maille élémentaire* 3

a- Motif 3

b- Réseau 3

c- Maille conventionnelle 4

3- Nombre de motifs par maille 4

4- Mailles de Bravais 5

a- Mode simple ou primitif P 5

b- Mode centré, de symbole I 5

c- Mode à base centrée, de symbole S 5

d- Mode à faces centrées, de symbole F 5

5- Autres définitions 5

a- Famille cristalline 5

b- Coordinence 6

c- Compacité 6

d- Sites interstitiels cristallographiques 6

III- Empilement compact, pseudo-compact et non compact 8

1- Empilements compacts 8

a- Empilement de sphères jointives 8

b- Plan d'empilement de sphères jointives 8

c- Empilement ABAB ou ABCABC 8

2- Structure cubique à faces centrées ou cfc : *empilement ABCABC* 9

a- Maille conventionnelle cubique faces centrées 9

b- Caractéristiques de la structure cfc 10

c- Sites interstitiels octaédriques et tétraédriques de la structure cfc 10

3- Structure hexagonale compacte ou *hc* 12

a- Maille conventionnelle hc 12

b- Caractéristiques de la structure hc 12

c- Sites interstitiels octaédriques et tétraédriques de la structure hc (complément) 13

4- Empilements pseudo-compact : *cubique centré* 14

a- Maille conventionnelle cubique centrée ou cc 14

b- Caractéristiques de la structure cc 14

5- Empilements non compacts : *carbone diamant et carbone graphite* 15

a- Maille conventionnelle Carbone diamant 15

b- Maille conventionnelle Carbone graphite 16

****

Tous droits de l'auteur des œuvres réservés. Sauf autorisation, la reproduction ainsi que toute utilisation des œuvres autre que la consultation individuelle et privée sont interdites.

Extrait gratuit de document, le document original comporte 17 pages.

Chapitre VI : *Cristallographie*

L'objet de ce paragraphe de cours est de donner une description de l'empilement ***compact***, ***pseudo-compact*** et ***non compactes*** pouvant être observés pour des solides métalliques, covalents ou moléculaires.

Les atomes ou les molécules constituant le solide cristallin métallique, covalents ou moléculaires supposé ***parfait*** seront supposés être des sphères ***dures et indéformables***.

Différentes structures sont à connaître :

- Pour les structures ***compactes*** où l'empilement des sphères dans une portion de l'espace est maximale :
  - ***cubique faces centrées ou cfc***
  - et ***hexagonale compacte ou hc*** ;

- Pour les structures ***pseudo-compactes*** :
  - ***cubique centrée*** ;

- Pour les structures ***non compactes*** :
  - ***carbone diamant***
  - et ***carbone graphite*** ;

Les notions de ***coordinence***, de ***compacité***, de ***nombre de motifs*** et de ***maille conventionnelle*** sont à connaître….

II- Systèmes cristallins

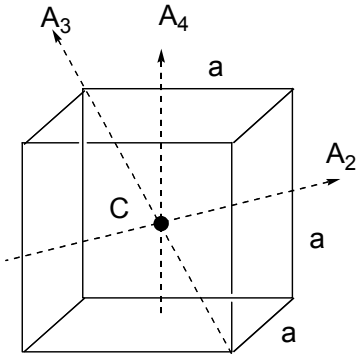
1- Notions sur les réseaux de Bravais (complément de cours)

A l'échelle macroscopique, la symétrie des cristaux se ramène à celle des polyèdres dont les seuls éléments de symétrie sont des **axes A_n**, invariance par rotation autour de l'axe A_n de $2\pi/n$, des ***miroirs m*** et un ***centre de symétrie C***.

L'association de ces divers éléments conduit à 7 combinaisons possibles, définissant ***sept systèmes cristallins*** :

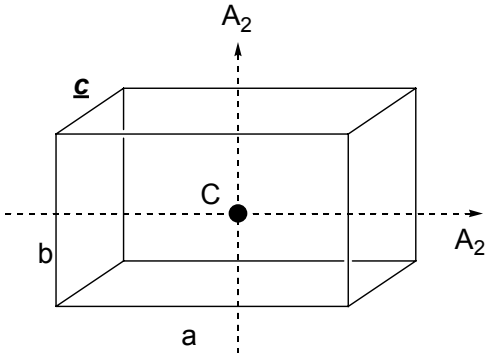
Tous droits de l'auteur des œuvres réservés. Sauf autorisation, la reproduction ainsi que toute utilisation des œuvres autre que la consultation individuelle et privée sont interdites.

Extrait gratuit de document, le document original comporte 17 pages.



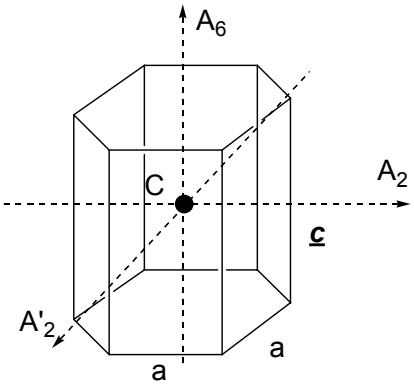
3 A_4
4 A_3
6 A_2
3 m_4
6 m_2
C

Cubique (symbole **c**) **[cube]**



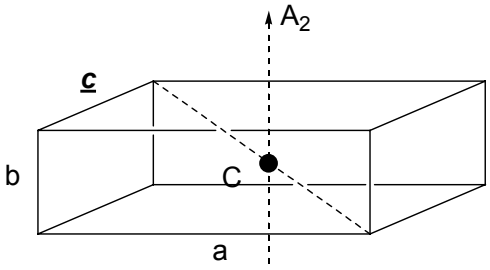
3 A_2
3 m_2
C

Orthorhombique
(symbole **o**)
[prisme droit à base rectangle]



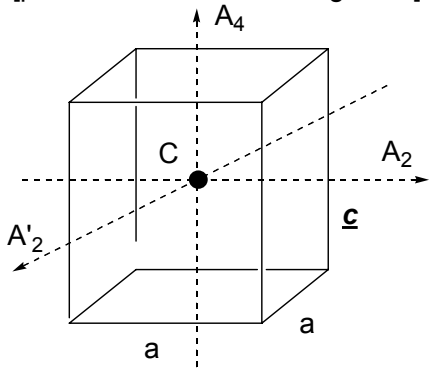
1 A_6
3 A_2
3 A'_2
1 m_6
3 m_2
3 m'_2
C

Hexagonal (symbole **h**)
[prisme droit à base hexagonale]



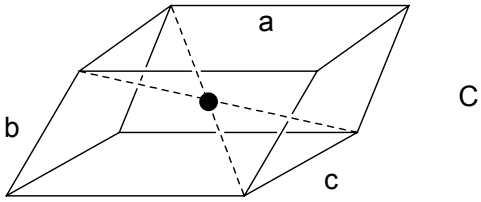
A_2
m_2
C

Monoclinique
(symbole **m**)
[prisme droit à base parallélogramme]



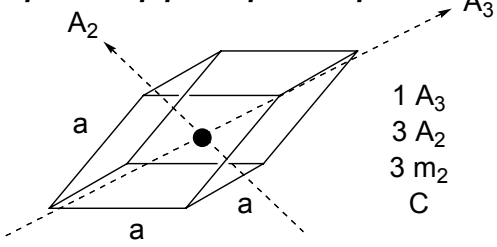
1 A_4
2 A_2
2 A'_2
1 m_4
2 m_2
2 m'_2
C

Quadratique (ou tétragonal)
(symbole **q**)
[prisme droit à base carrée]



C

Triclinique (symbole ***a)***
parallélépipède quelconque



1 A_3
3 A_2
3 m_2
C

Rhomboédrique (symbole r)
[rhomboèdre (polyèdre à
faces losanges)]

Figure : *Systèmes cristallins*

2- Définitions : *motif, réseau, maille élémentaire*

a- Motif

Entité volumique discernable qui se répète périodiquement. Pour un cristal, à l'échelle microscopique, le motif est une particule (atome, ion ou molécule).

b- Réseau

Toute translation de vecteur $\vec{t} = m\,\vec{a} + n\,\vec{b} + p\,\vec{c}$ (avec m, n et p entiers) amène le système en coïncidence avec lui-même.

Tous droits de l'auteur des œuvres réservés. Sauf autorisation, la reproduction ainsi que toute utilisation des œuvres autre que la consultation individuelle et privée sont interdites.

Extrait gratuit de document, le document original comporte 17 pages.

A partir d'un point O choisi arbitrairement comme origine, toute translation de vecteur $\vec{t}$ définit un ensemble de points, appelés nœuds, qui constituent le réseau.

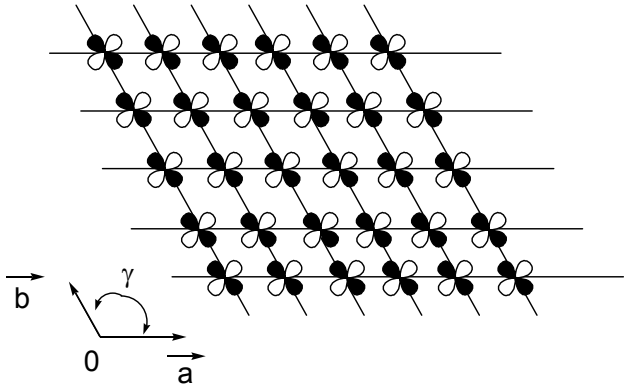


Figure : *Structure périodique et réseau de Bravais constitué par l'élément*

c- Maille conventionnelle

La ***maille conventionnelle*** correspond à une portion de l'espace telle que toute translation de vecteur $\vec{t}$ permette d'assurer le pavage de l'espace et donne le cristal en faisant ressortir sa principale symétrie

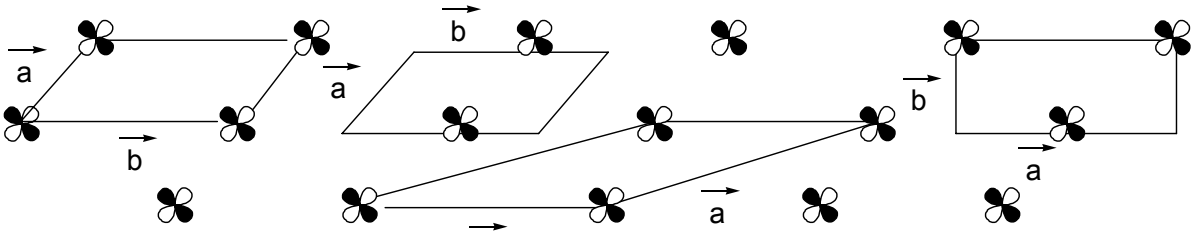


Figure : *Maille d'un réseau plan*

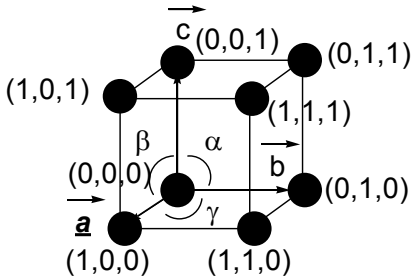


Figure : *Maille élémentaire d'un réseau cubique et coordonnées des nœuds*

Le ***volume de la maille conventionnelle*** est égal à la valeur numérique du produit vectoriel mixte :

$$V = \left(\vec{a} \wedge \vec{b}\right) \cdot \vec{c}$$

3- Nombre de motifs par maille

Une maille est dite unitaire si elle ne comporte qu'un seul motif, multiple si elle en comporte plusieurs. On détermine alors le nombre Z de ***motifs appartenant en propre à la maille***.

On peut faire le calcul suivant :

- un élément extérieur A à la maille compte pour 0 ;
- un élément à l'intérieur B de la maille compte pour 1 ;
- un élément au sommet C de la maille compte pour 1/8 ;
- un élément sur une arête D compte pour ¼ ;
- un élément sur une face E compte pour ½.

Tous droits de l'auteur des œuvres réservés. Sauf autorisation, la reproduction ainsi que toute utilisation des œuvres autre que la consultation individuelle et privée sont interdites.

Extrait gratuit de document, le document original comporte 17 pages.

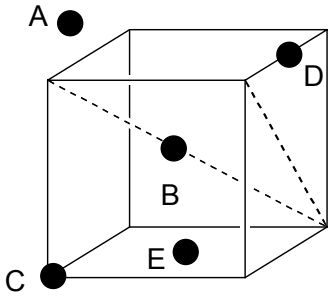


Figure : *Positions caractéristiques d'un élément dans une maille*

4- Mailles de Bravais

a- Mode simple ou primitif P

Maille élémentaire cubique décrite *figure 4*; 1 motif.

b- Mode centré, de symbole I

Maille élémentaire dans laquelle un motif identique à celui placé à l'origine occupe le centre de la maille; 2 motifs.

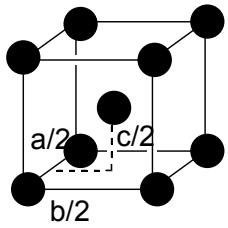


Figure : *Maille centrée I*

c- Mode à base centrée, de symbole S

Maille élémentaire dans laquelle un motif identique à celui placé à l'origine occupe le centre d'une face. La face opposée est automatiquement centrée; 2 motifs.

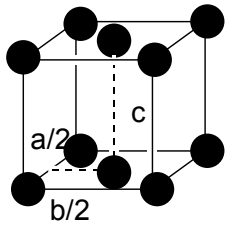


Figure : *Maille à base centrée S*

d- Mode à faces centrées, de symbole F

Maille élémentaire dans laquelle un motif identique à celui placé à l'origine occupe le centre de toutes les faces du polyèdre; 4 motifs :

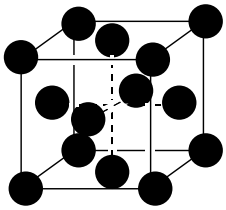


Figure : *Maille à faces centrées F*

5- Autres définitions

a- Famille cristalline

Une ***famille cristalline*** est constituée par l'ensemble des matériaux ayant même structure et présentant une forte analogie des propriétés chimiques et physiques (exemples : structure NaCl, CsCl, ReO_3...).

Tous droits de l'auteur des œuvres réservés. Sauf autorisation, la reproduction ainsi que toute utilisation des œuvres autre que la consultation individuelle et privée sont interdites.

Extrait gratuit de document, le document original comporte 17 pages.

b- Coordinence

La ***coordinence d'un atome A*** : nombre x de ses premiers voisins; elle se note [x].

c- Compacité

La ***compacité*** : nombre sans dimension qui mesure le taux d'occupation réel de l'espace par les atomes ou les ions assimilés à des sphères. Elle est toujours comprise entre 0 et 1 :

$$C = \frac{\text{volume des } n \text{ atomes d'une maille}}{\text{volume de cette maille}} = \frac{\sum_{j=1}^{n} \frac{4\pi}{3} R_j^3}{(\vec{a} \wedge \vec{b}) \cdot \vec{c}}$$

d- Sites interstitiels cristallographiques

Les ***sites interstitiels cristallographiques*** : un réseau comporte des sites non occupés et donc vides de matière (en raison de l'empilement dans l'espace de sphères), avec parmi ceux-ci des sites interstitiels qui coïncident avec le centre des polyèdres de coordination, réguliers ou non, ayant pour sommets les centres des premiers voisins du réseau cristallin.

Une condition géométrique à vérifier est la suivante :

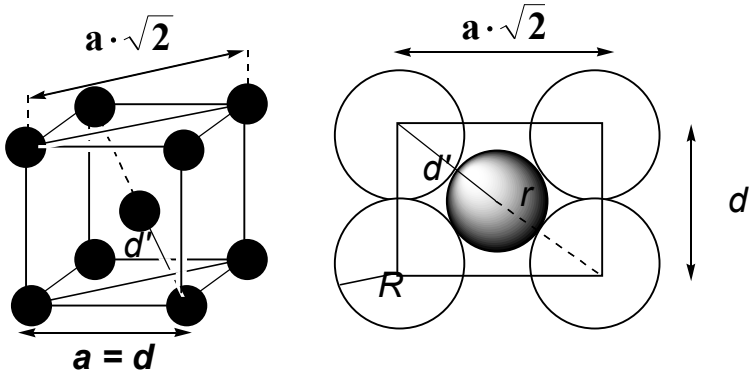
$$\boxed{R + r \leq d}$$

où R est le rayon des atomes sphériques tangents entre eux du réseau-hôte
et donc distants de $d = 2R$,
r le rayon de l'atome sphérique introduit dans le site interstitiel
et d' la distance entre le centre du polyèdre et l'un des sommets les plus proches.

Parmi ces sites, on trouve :

i- Site cubique C

- le polyèdre de coordination est un cube, d'arête $a = d$,
- aux sommets occupés par des ***sphères identiques***
- et possède une ***coordinence*** = [**8**].



$d' = a\sqrt{3}/2 = 2R$

$\sqrt{3}/2 = R\sqrt{3}$ avec $R + r \leq d'$ on a :

$$\boxed{r/R \leq \sqrt{3} - 1} \approx 0{,}732$$

ii- Site octaédrique O

- le polyèdre de coordination est un octaèdre, à 6 sommets,
- et 8 faces
- et possède une ***coordinence*** = [**6**].

Tous droits de l'auteur des œuvres réservés. Sauf autorisation, la reproduction ainsi que toute utilisation des œuvres autre que la consultation individuelle et privée sont interdites.

Extrait gratuit de document, le document original comporte 17 pages.