
R 22

Cristallographie



22.1 Notions



— Maille —

Une maille est définie par le triplet de vecteur \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} , tel que ce triplet soit une base de \mathbb{R}^3 . Cet triplet n'est pas unique. Soit M et N deux points du cristal. On a :

$$\overrightarrow{MN} = p \vec{a} + q \vec{b} + r \vec{c}$$

Ce triplet définit un volume élémentaire. Un cristal est composé de multiples mailles périodiquement disposées.

Une maille simple est définie comme une maille ne contenant que des atomes au sommets de la base. Par extension, on définit la multiplicité d'une base. En général, on préfère les mailles multiples.

On souhaite remplir un volume avec des sphères dures d'une manière dense. On forme, par couches, un réseau hexagonal. On empile les plans hexagonaux, de façon décalée. On peut décaler les plans de plusieurs façons. Ceci crée différentes structures.



— Compacité —

On définit la compacité comme le volume occupé par les atomes sur le volume de la maille :

$$C = \frac{V_{\text{atomes}}}{V_{\text{maille}}}$$



— Remarque —

Dans le décompte des atomes, il ne faut pas oublier qu'un atome peut appartenir à plusieurs mailles, donc ne pas compter pour 1 mais pour $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{4}$, ...



— Site —

On appelle site, "trou" dans la structure permettant d'y "loger" une entité.

Il existe deux types de sites :

- Site tétraédrique : ce site est le centre d'un tétraèdre. Il est caractérisé par $z = \frac{a}{4}$ ou $z = \frac{3a}{4}$. Dans ce cas, on a :

$$r = R \left(\sqrt{\frac{3}{2}} - 1 \right)$$

- Site octaédrique : ce site est le centre d'un octaèdre. Il est caractérisé par :

$$r = R (\sqrt{2} - 1)$$



— Coordinence —

On appelle coordinence le nombre d'atomes les plus proches entourant un atome (par exemple, un atome de césium entouré de six atomes de chlorure dans une structure).

22.2 Les différentes structures

22.2.1 Structure dense

22.2.1.1 Structure Cubique à Faces Centrées : CFC

On définit cette structure comme un cube, possédant un atome à chacun de ses sommets et un au centre de chaque face. Dans cette structure, le rayon des atomes est donné par :

$$R = \frac{a\sqrt{2}}{4}$$

On montre que la compacité de cette structure est : $C = \frac{\pi\sqrt{2}}{6} = 0,74$.

C'est la structure la plus compacte que l'on peut obtenir avec des sphères. D'autre part, on montre que l'on peut obtenir la valeur de a , paramètre de la maille, c'est-à-dire longueur d'un côté, en connaissant la masse volumique du cristal.

22.2.1.2 Structure Hexagonale Compacte : HC

On définit cette structure comme un empilement décalé d'hexagones possédant un atome sur chacun de ses sommets, et un au centre de l'hexagone.

22.2.2 Structure non compacte

On dit d'une structure qu'elle est non compacte si sa compacité est inférieure à 0,74.

22.2.2.1 Structure Cubique Simple : CS

On définit cette structure comme un cube, possédant un atome à chacun de des sommets du cube. Le rayon des atomes est donné par :

$$R = 2a$$

La compacité est $C = \frac{\pi}{6} = 0,52$.

22.2.2.2 Structure Cubique Centrée : CC

On définit cette structure comme un cube, possédant un atome à chacun de ses sommets et un au centre du cube. Le rayon des atomes est donné par :

$$R = \frac{a\sqrt{3}}{4}$$

La compacité est $C = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} = 0,68$.

22.3 Exemples de cristaux à connaître

22.3.1 Chlorure de Césium : CsCl

Dans ce cristal, les ions chlorure sont disposés en structure cubique centré. Les ions césium sont aussi disposés en structure cubique centré, décalés d'une demi-diagonale de cube par rapport aux ions chlorure.

22.3.2 Chlorure de sodium : $NaCl$

Les ions chlorure sont disposés en structure cubique à faces centrées. Les ions sodium sont également disposés en structure *CFC*, décalés d'une demi-arête par rapport au chlorure.

22.3.3 Sulfure de zinc

Il existe deux formes de cette structure :

- Forme Blende : Forme du diamant
- Forme Würtzite : Structure Hexagonale Compacte (Un site tétraédrique sur deux est occupé)

22.4 Représentation des différentes mailles

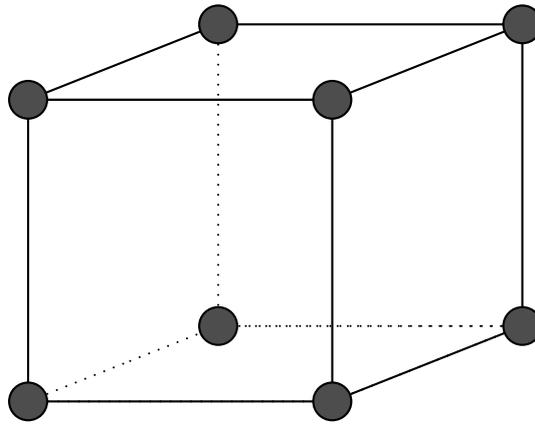


FIGURE 22.1 – Maille cubique simple

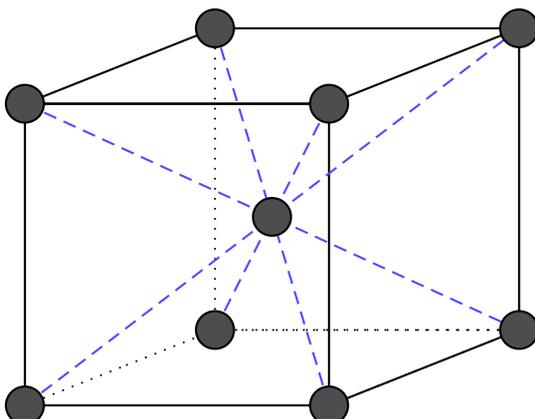
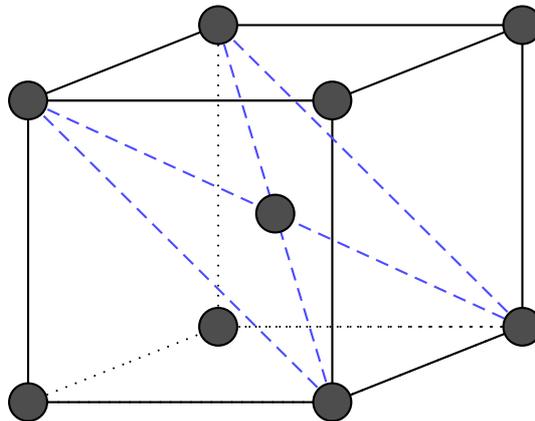


FIGURE 22.2 – Maille cubique centré

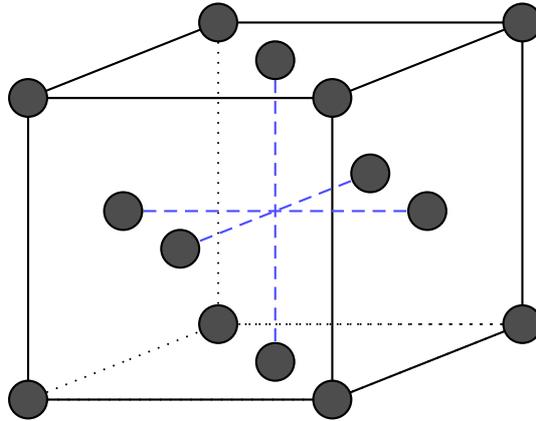


FIGURE 22.3 – Maille cubique à faces centrées

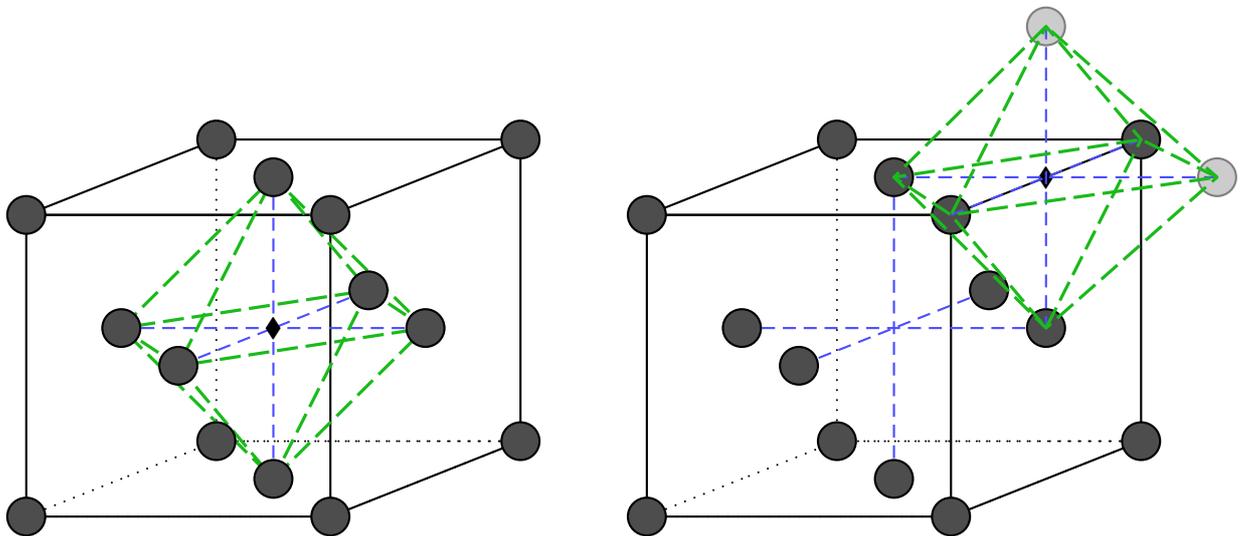
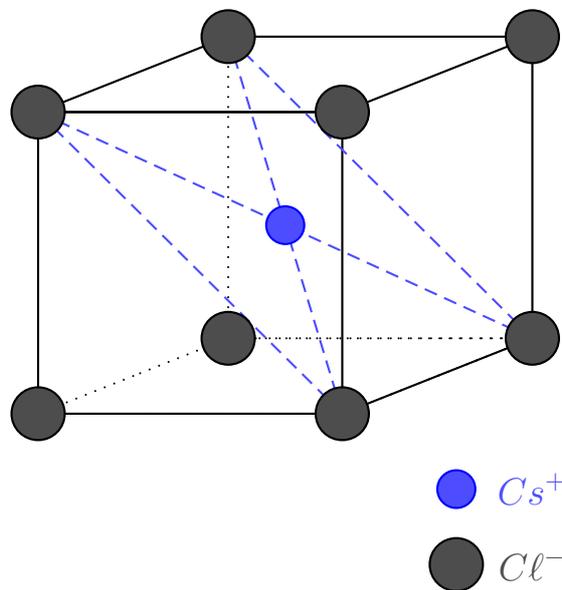


FIGURE 22.4 – Sites octaédriques de la structure cfc



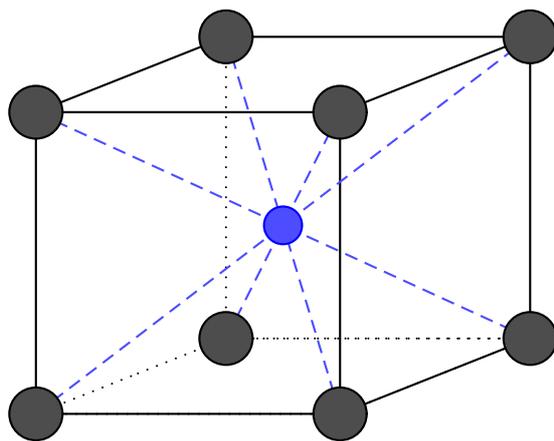


FIGURE 22.5 – Maille de chlorure de césium CsCl

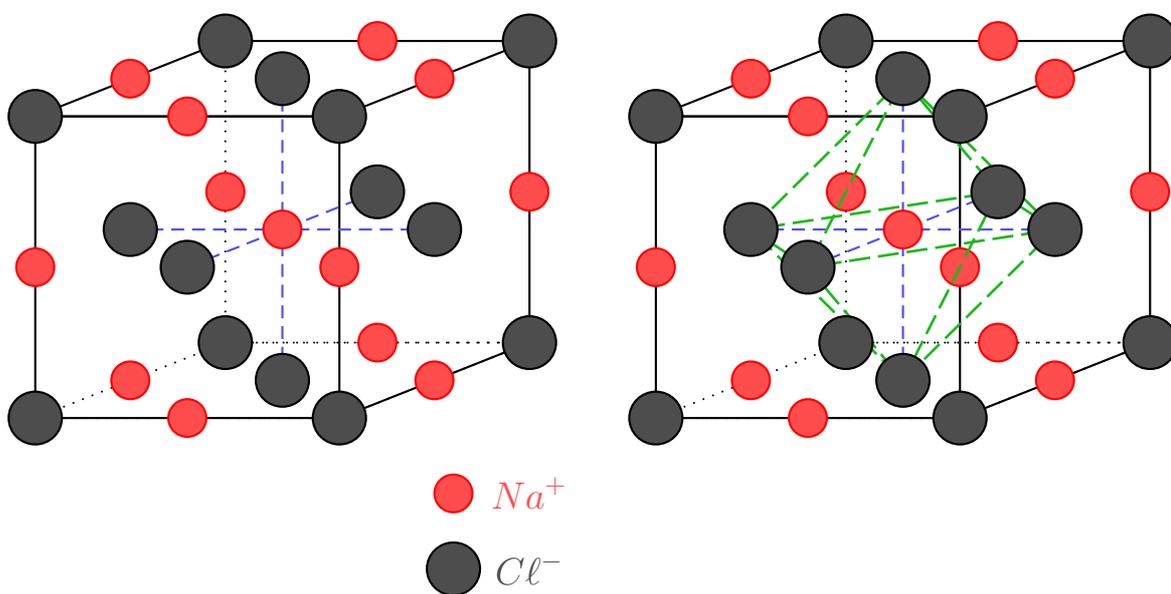


FIGURE 22.6 – Maille de chlorure de sodium NaCl

Autre présentation possible :

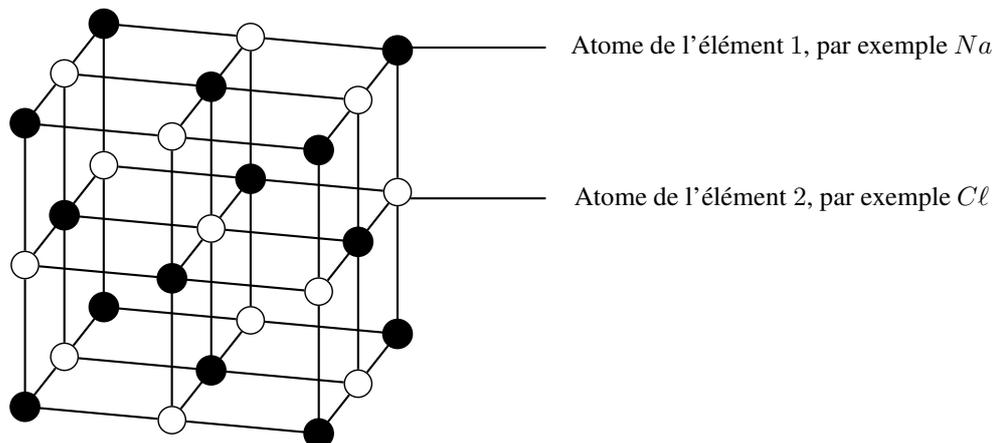
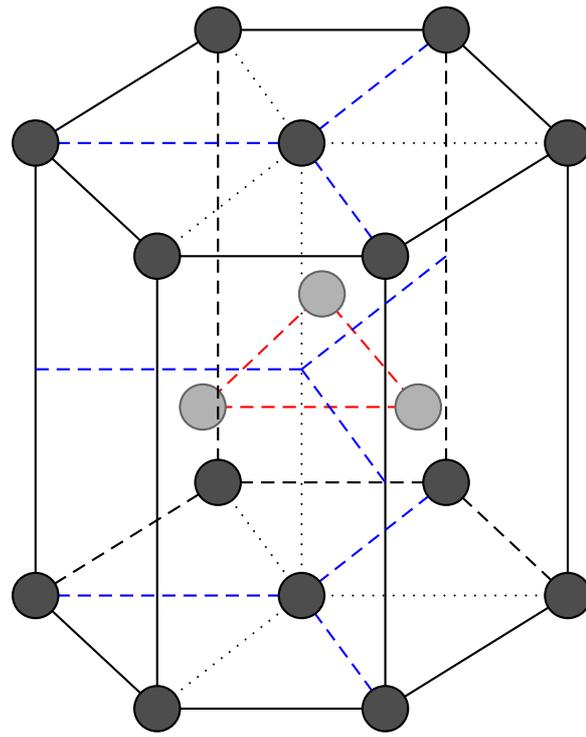
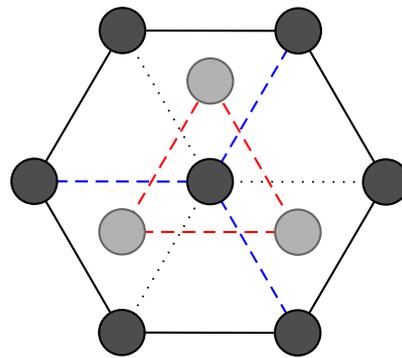


FIGURE 22.7 – Structure d'un cristal de type NaCl

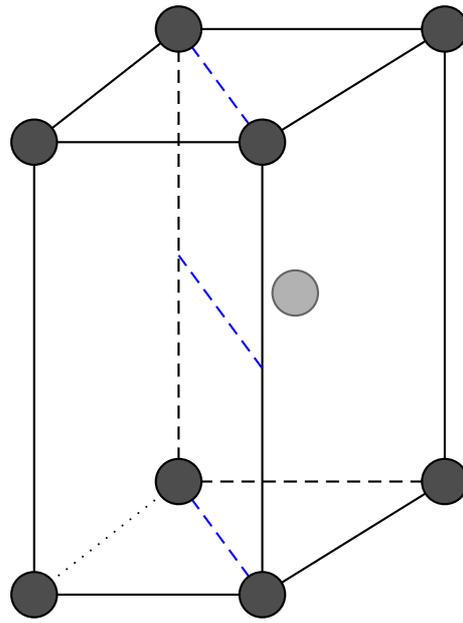


- atomes des couches supérieure et inférieure
- atomes de la couche intermédiaire

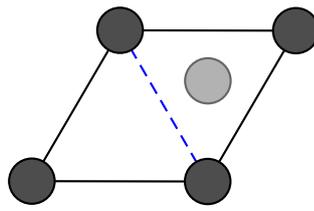


vue de dessus

FIGURE 22.8 – Maille multiple hexagonale compacte



- atomes des couches supérieure et inférieure
- atomes de la couche intermédiaire



vue de dessus

FIGURE 22.9 – Maille simple hexagonale compacte

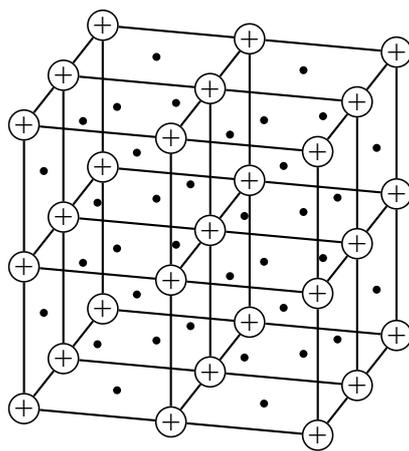


FIGURE 22.10 – Noyaux atomiques chargés positivement (+) entourés par des électrons délocalisés (•)