

Chapitre 1

Généralités et notions de cristallographie

Introduction

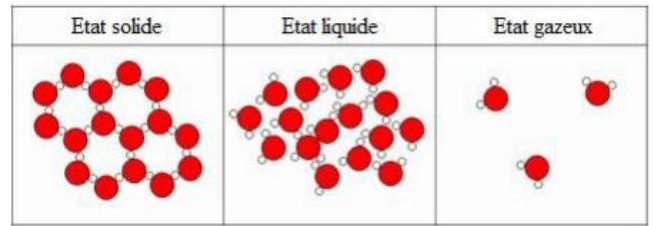
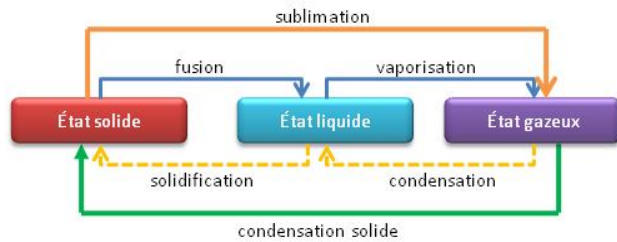
- La cristallographie est la science des cristaux. Le mot cristal d'origine grecque (krystallos) signifie « solidifié par le froid ». Les grecs pensaient que le cristal de roche (le quartz) provenait de la transformation de la glace par le froid.
- Le mot «Cristallographie» (ou description des cristaux) est introduit pour la première fois en 1723 par Maurice-Antoine Cappeller (1685-1769).
- L'une de caractéristiques essentielles de l'état cristallin est l'anisotropie des propriétés physiques. La manifestation la plus évidente de cette anisotropie est l'aspect extérieur des cristaux qui sont limités par des faces naturelles planes (polyèdres).
- La première loi quantitative de la cristallographie, la loi sur la constance des angles (mesures des angles entre les faces de cristaux de quartz).
- La seconde loi (loi des indices rationnels), en admettant que les cristaux étaient constitués d'assemblage de parallélépipèdes identiques. Il découle de cette notion que la position de chaque face d'un cristal peut être repérée dans l'espace par trois nombres entiers.
- C'est en 1849 qu'Auguste Bravais énonce le postulat qui constitue la base de la cristallographie :

«Etant donné un point P, quelconque dans un cristal, il existe dans le milieu, une infinité discrète, illimitée dans les trois directions de l'espace de points, autour desquels l'arrangement de la matière est la même qu'autour du point P».

De ce postulat résulte la notion de réseau tridimensionnel cristallin et toutes les propriétés de symétrie qui en découlent.

Les états physiques de la matière

La matière peut exister sous trois états : L'état gazeux, l'état liquide et l'état solide. Les liquides et les gaz sont des fluides, déformables sous l'action de forces très faibles, ils prennent la forme du récipient qui les contient.



-**État solide** : les grains de matière sont ordonnés et liés les uns aux autres.

-**État vapeur** : les grains de matière se déplacent, sont séparés par du vide, l'ensemble est très désordonné.

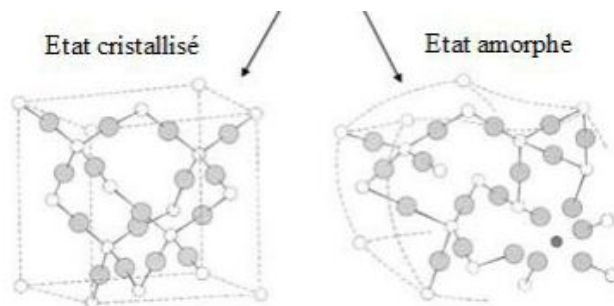
-**État liquide** : les grains de matière bougent en glissant les uns contre les autres.

Les solides ont une forme propre, leur déformation exige des forces importantes.

Les solides peuvent exister sous deux états différents :

- l'état désordonné caractérisé par une structure non ordonnée c'est le cas des systèmes **amorphes**, par exemple les verres.

- l'état ordonné caractérisé par une structure ordonnée correspond aux solides **cristallins**.



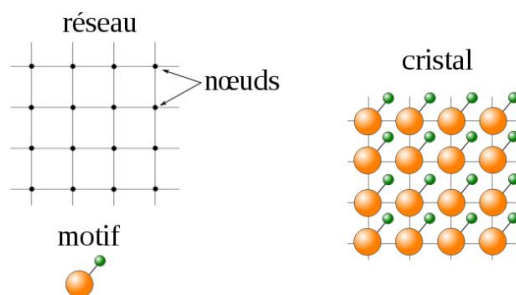
Un cristal :

Le cristal est constitué d'un assemblage périodique, régulier, répétitif de particules selon les trois directions de l'espace. La structure régulière et périodique, formée d'un ensemble ordonné d'un grand nombre d'atomes, de molécules ou d'ions. Il peut être décrit par translation suivant les trois directions de référence d'une entité de base qu'on appelle la maille. La description du cristal nécessite la connaissance du réseau et celle du motif.

Définition du réseau cristallin:

C'est un ensemble infini des points ordonnés et répartis régulièrement dans l'espace. Le réseau est engendré par la translation de la maille par les vecteurs de base, tous les nœuds du réseau sont définis par cette translation.

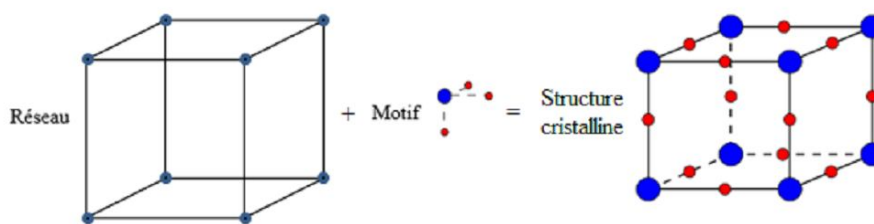
Vecteur de Translation s'écrit : $\vec{T} = u \vec{a} + v \vec{b} + w \vec{c}$: u, v et w trois entiers.
 \vec{a} , \vec{b} et \vec{c} les trois périodes suivant les trois directions de l'espace ox, oy et oz, respectivement. Ces points sont appelés **nœuds** du réseau.



Définition du motif :

Un motif est un atome (ion ou molécule) ou un groupement d'atomes de même nature ou de nature différente qui se répète, périodiquement, suivant les trois directions de l'espace pour décrire le cristal.

La structure cristalline = Cristal = Réseau + Motif

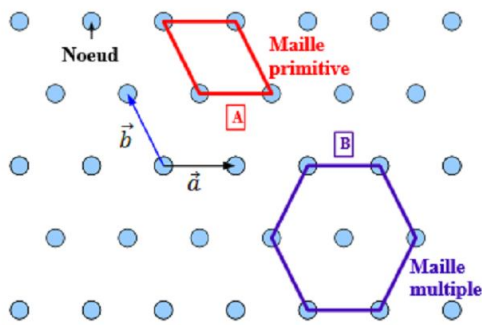


Structure cristalline tridimensionnelle.

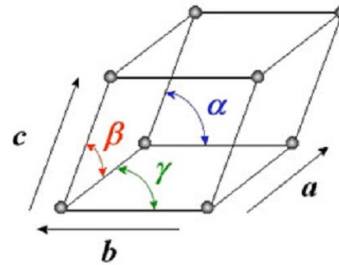
Définition de la maille :

Du point de vue géométrique, à deux dimensions, la maille est le plus petit parallélogramme qui suffit à décrire le plan (remplir tout le plan sans laisser de

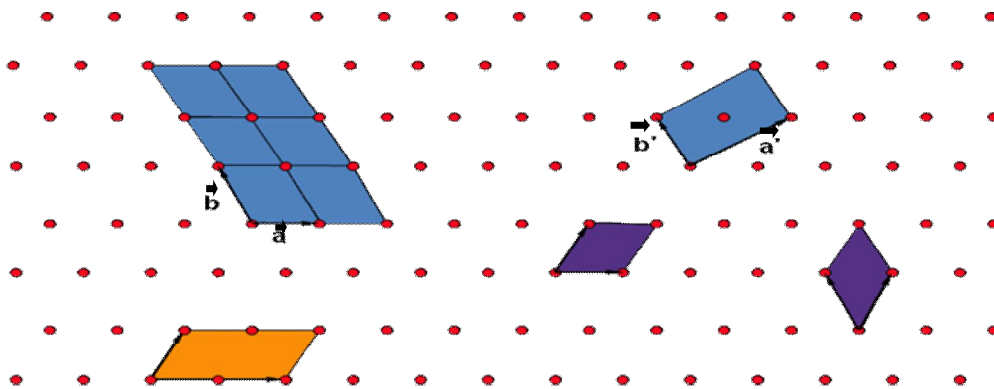
lacunes), cette maille est définie par les vecteurs \vec{a} , \vec{b} et l'angle compris entre ces deux vecteurs.



Maille et réseau bidimensionnel



Maille et réseau tridimensionnel



La surface d'une maille est donné par le produit vectoriel des deux vecteurs \vec{a} et \vec{b} :

$$S = |\vec{a} \wedge \vec{b}| = |\vec{a}| |\vec{b}| \sin(\angle \vec{a}, \vec{b})$$

Toutes les mailles primitives ont la même surface, les mailles d'ordre n ont une surface égale à nS (n est égal au nombre de nœuds dans la maille).

Exemple : $\vec{a}' = 2\vec{a} + \vec{b}$ $\vec{b}' = \vec{b}$

$$S' = |\vec{a}' \wedge \vec{b}'| = |(2\vec{a} + \vec{b}) \wedge \vec{b}| = |2\vec{a} \wedge \vec{b} + \vec{b} \wedge \vec{b}| = |2\vec{a} \wedge \vec{b}| = 2S$$

A trois dimensions, la maille est la plus petite entité (le plus petit volume) correspondant à un parallélépipède, construit par les vecteurs de bases non coplanaires \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} et trois angles α , β et γ . Les longueurs a, b, c sont des arêtes du parallélépipède soit :

$$V = |\vec{a}(\vec{b} \wedge \vec{c})|$$

$$V = abc\sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}$$

Il existe deux types de maille :

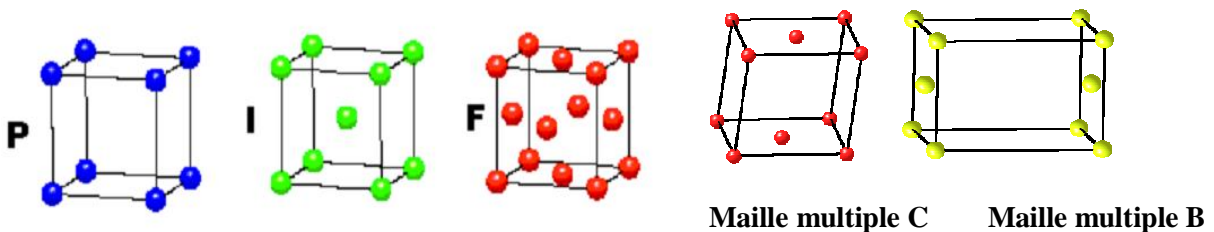
Maille simple (primitive) P: contient seulement des nœuds aux sommets de la maille. ces coordonnées sont (0,0,0)

Maille multiple : contient plus des nœuds aux sommets :

1-soit au centre du volume \longrightarrow **Maille multiple I**

2-soit aux centres de toutes les faces \longrightarrow **Maille multiple F**

3-soit aux centres de deux faces opposées \longrightarrow **Maille multiple A, B, C**



Maille simple P	Maille multiple I	Maille multiple A,B,C	Maille multiple F
nœud 1 (0,0,0)	nœud 1 (0,0,0) nœud 2 (0,1/2,0)	nœud 1 (0,0,0) A nœud 2 (0,1/2,1/2) B nœud 2 (1/2,0,1/2) C nœud 2 (1/2,1/2,0)	nœud 1 (0,0,0) nœud 2 (1/2,1/2,0) nœud 3 (0,1/2,1/2) nœud 2 (1/2,0,1/2)

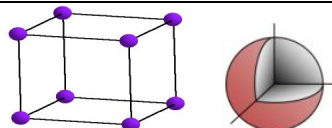
Multiplicité de la maille m:

c'est le nombre de nœuds ou des atomes, ou des motifs que contient la maille.

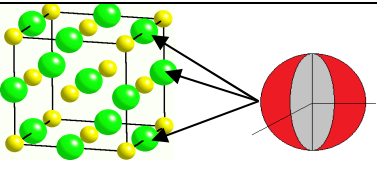
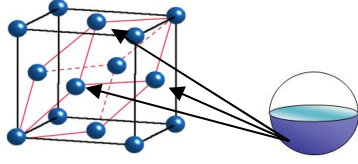
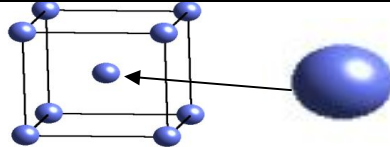
$$m = n_s \cdot (1/8) + n_a \cdot (1/4) + n_f \cdot (1/2) + n_c \cdot (1)$$

n_s : nombre des atomes existant dans les sommets de la maille, et chaque atome participe par (1/8) de l'atome.

- à chaque sommet : $8 \times 1/8 = 1$ atome



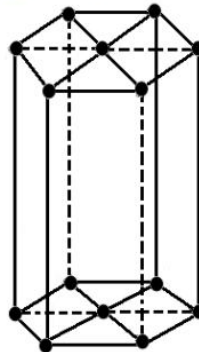
Maille simple (primitive)

<p>na : nombre des atomes existents dans les arêtes de la maille, et chaque atome participe par (1/4) de l'atome.</p> <p>• sur chaque arête : $12 \times 1/4 = 3$ atomes</p>	
<p>nf : nombre des atomes existents dans les faces de la maille, et chaque atome participe par (1/2) de l'atome.</p> <p>• sur chaque face : $6 \times 1/2 = 3$ atomes</p>	
<p>nc : nombre des atomes existents dans le centre de la maille.</p>	

Exemple d'une maille multiple hexagonale: $m = ns/6 + na/3 + nb/2 + ni.1$

Une maille hexagonale est formée par la juxtaposition des 3 mailles primitives : $m = 3$

- ♦ 1/6 de nœud à chaque sommet
--> 2 nœuds/maille
- ♦ 1/2 nœud au milieu de chaque base---> 1 nœud/maille
- ♦ Soit au total: $2+1 = 3$ nœuds/maille.



Rangée réticulaire ou direction [uvw]

Suivant les conventions internationales, une direction-rangée du réseau cristallin d'équation :

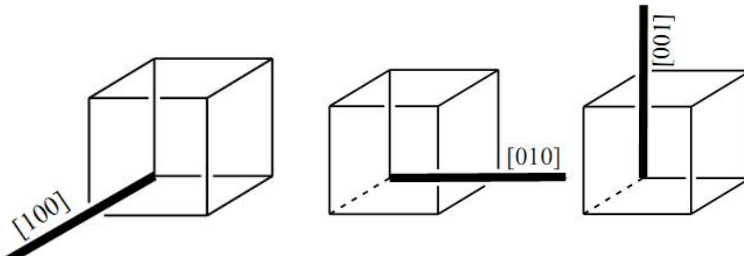
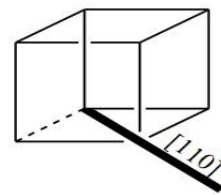
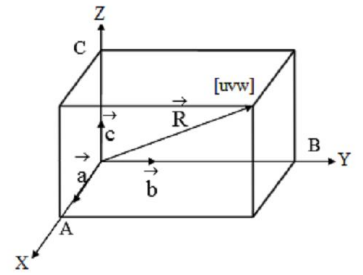
$$\vec{R} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} ; u, v \text{ et } w \text{ entiers.}$$

Se note [uvw]. (indices entre des crochets, sans virgules de séparation).

Les indices négatifs sont surlignés $[\bar{u}\bar{v}\bar{w}]$

Exemple : $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$

Pour u, v et w sont tout simplement les coordonnées d'un vecteur reliant l'origine O (0,0,0) du repère Oxyz avec un autre point qui se trouve sur la surface de la maille.



Exemples

Pour la direction cristallographique noté [110] et représentée par le vecteur qui relie l'origine O (0,0,0) au point A de coordonnées (1,1,0), et de même les directions [100], [001]. Le paramètre de maille **a** est considéré égal à 1.

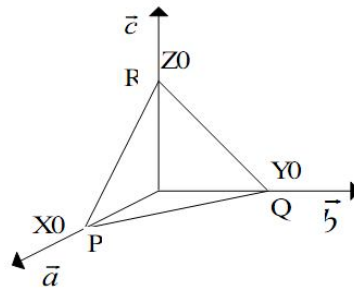
Plan réticulaire (hkl)

Un plan réticulaire (plan cristallin) d'équation :

$$h.x + k.y + l.z = m ; m = (0, 1, 2, \dots) \text{ et } h, k, l \text{ entiers.}$$

Se note (hkl). (indices entre des parenthèses sans virgules de séparation).

$h = a/x_0$; $k = b/y_0$; $l = c/z_0$ (a, b, c sont les paramètres de la maille et x_0, y_0, z_0 les abscisses des points d'interaction du plan avec les axes Ox, Oy, Oz)



Exemple:

Pour h , k et l sont les inverses des longueurs découpées sur les axes ox , oy et oz respectivement par le plan noté (hkl) . h , k , l les indices de Miller

Par exemple le plan le plan noté (110) :

il découpe l'axe ox en 1 : l'inverse de 1 est égal à 1 donc $h=1$

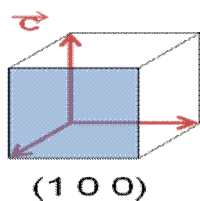
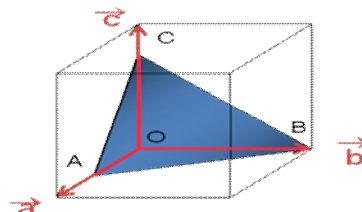
il découpe l'axe oy en 1 : l'inverse de 1 est égal à 1 donc $k=1$

il est parallèle à oz (donc il découpe oz dans l'infini) : l'inverse de l'infini est égal à 0 donc $l = 0$

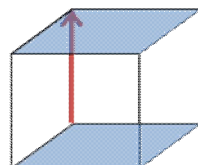
$$\left. \begin{array}{l} OA = 1/2 a \\ OB = 1 b \\ OC = 3/4 c \end{array} \right\} \Rightarrow \begin{array}{l} h \propto 2 \\ k \propto 1 \\ l \propto 4/3 \end{array}$$

Il faut h , k et l entiers :

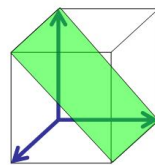
$$\Rightarrow (h k l) = (6 3 4)$$



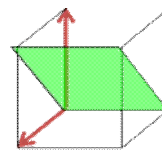
$(1 0 0)$



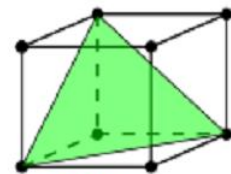
$(0 0 1)$



$(0 1 1)$



$(-1 0 1)$

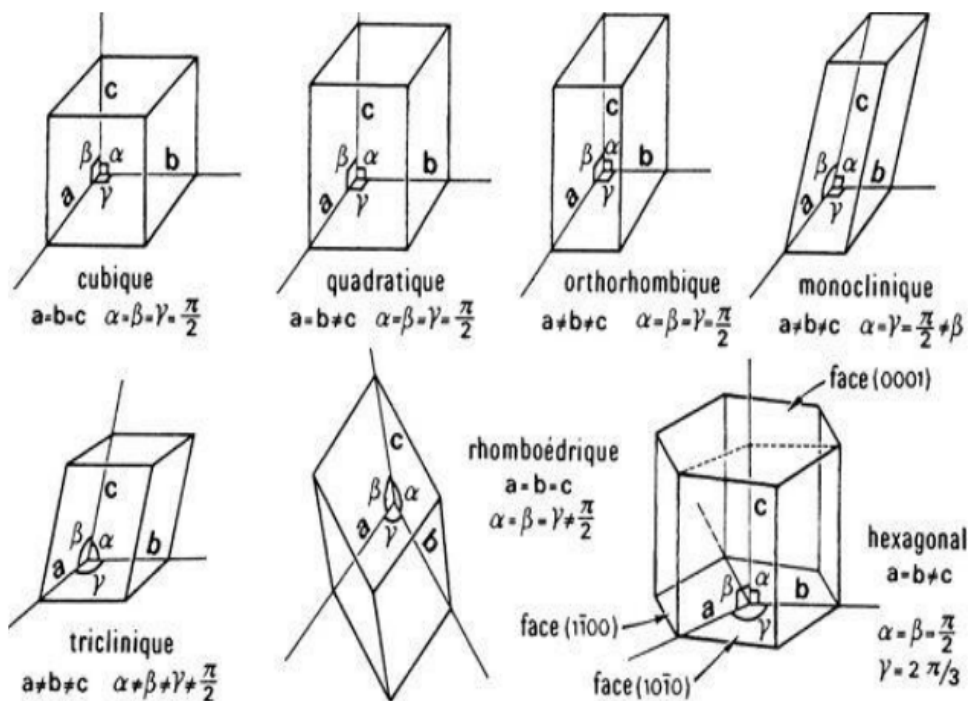


$(1 1 1)$

$\left. \begin{array}{l} \text{L'axe des } x \text{ en } a \\ \text{L'axe des } y \text{ à } \infty \\ \text{L'axe des } z \text{ à } \infty \end{array} \right\} \text{ Les indices de Miller de ce plan sont } (100)$

Les systèmes cristallins

Bien avant la description atomique des cristaux, en recherchant mathématiquement les structures qui sont compatibles avec une périodicité dans les trois directions de l'espace, Auguste Bravais (1848) a montré que le nombre de systèmes cristallins possibles était très limité. Il a répertorié 14 types de réseaux qui sont des variantes de seulement 7 systèmes cristallins, Qu'ils sont engendrés par les différentes combinaisons possibles d'un côté entre les paramètres linéaires (a , b et c) et de l'autre côté entre les paramètres angulaires (α , β et γ).



Les réseaux de Bravais

Toutes les combinaisons possibles entre les 7 systèmes cristallins (c'est-à-dire les 7 formes géométriques des mailles sans tenir compte de la présence des atomes), et les 4 modes de réseaux (présence des atomes) aboutissant aux 14 réseaux de Bravais.

Les 14 réseaux cristallins de Bravais	
Système cubique $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ $a=b=c$	
Système tétragonal $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ $a=b \neq c$	
Système orthorhombique $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ $a \neq b \neq c$	
Système hexagonal $\alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$ $a=b \neq c$	
Système monoclinique $\alpha=\gamma=90^\circ, \beta \neq 120^\circ$ $a \neq b \neq c$	
Système triclinique $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ $a \neq b \neq c$	
Système rhomboédrique $\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$ $a=b=c$	