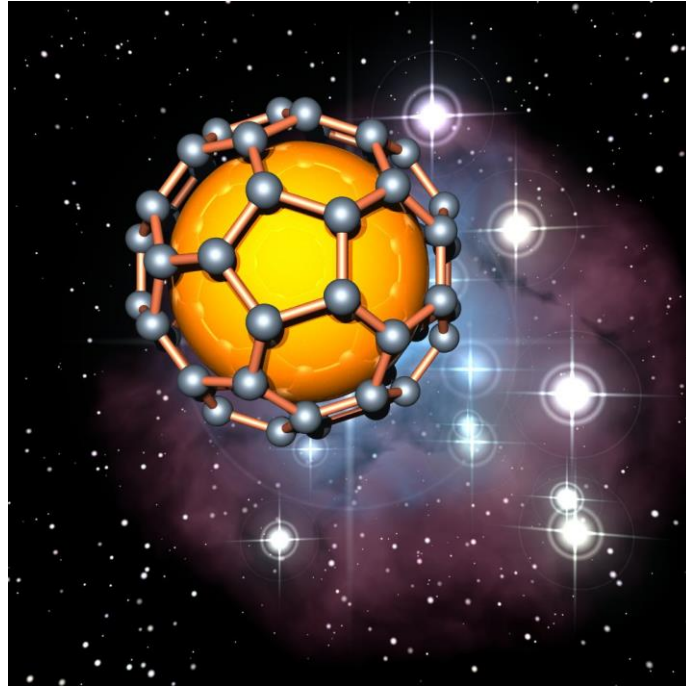


DEPARTEMENT DE CHIMIE



Cristallographie Géométrique

SMP 4

Pr Mohamed EL OMARI

Lcsab@yahoo.fr

WhatsApp 0667280501

2019 - 2020

Chapitre 2

Cristallographie géométrie : Notions de base

La cristallographie est la science qui permet la description géométrique d'un solide cristallin : forme extérieure, structure interne, croissance, propriétés physiques. Elle est basée sur différents postulats et lois.

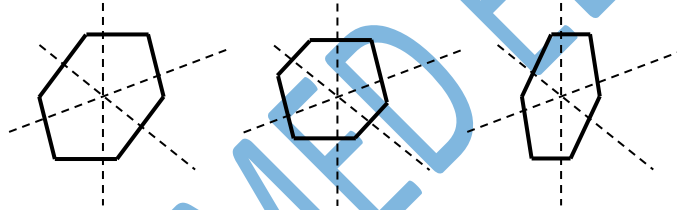
I- Lois

- **Loi de constance des angles** (Sténo en 1669 puis Romé de l'Isle en 1772) :

Dans les cristaux d'une même espèce cristalline, l'extension des faces n'est pas un caractère constant. Mais au contraire, les angles entre faces ou entre arêtes sont constants chez tous les individus de l'espèce.



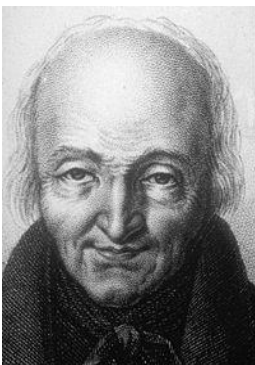
Nicholas Steno
(1638 – 1686)



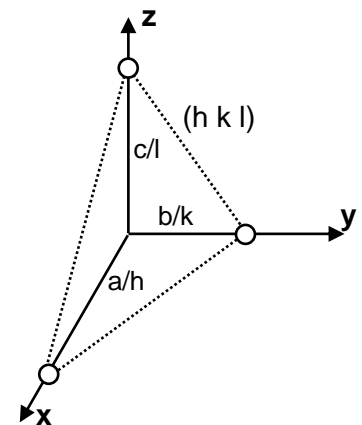
Jean-Baptiste Louis Romé de l'Isle (1736 – 1790)

- **Loi des indices rationnels simples** (R ; J ; Haüy en 1784) :

Si on choisit un système d'axes concourants, parallèles à trois arêtes non parallèles entre elles, toute face découpe sur ces axes trois segments proportionnels à a/h , b/k et c/l où h , k et l peuvent toujours être des entiers petits.



L'abbé René Just Haüy
(1743 – 1822)



Haüy affirme ainsi que les cristaux résultent de l'empilement régulier de petits polyèdres. Lorsque l'on casse un cristal, celui-ci se brise toujours selon des directions privilégiées. Les morceaux obtenus présentent une grande parenté de forme.

II- Postulas

- **Postulat de Bravais** (1848) :



Auguste Bravais
(1811 – 1863)

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 le même qu'autour du point P et ce avec la même orientation.

Aboutit aux 32 classes cristallines et aux 14 réseaux de Bravais

- **Postulat de Schönflies - Fedorov** (1890) :



Schönflies
(1853 – 1928)

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 le même qu'autour du point P ou est une image de cet arrangement.



Fedorov
(1853 - 1919)

Aboutit aux 230 groupes d'espace

III-Structures internes

La cristallographie géométrie est la science qui permet d'identifier la structure interne d'un solide cristallin. Elle définit avec précision l'unité asymétrique chimique et le motif, leurs dispositions dans l'espace (nœuds et réseau), leur distribution selon une direction (rangée) et dans un plan (plan réticulaire), et le volume unitaire (la maille élémentaire).

1- Comment décrire un cristal ?

Un cristal est décrit à partir de ses atomes indépendants. Leur ensemble constitue l'unité asymétrique.

L'unité asymétrique

Plus petite portion de l'espace au sein de laquelle il n'existe pas 2 points équivalents. Aucun élément de symétrie du cristal ne s'y fait correspondre deux points.

Opérations de symétrie du cristal



Le motif

Le motif est l'unité chimique discernable la plus petite qui se répète périodiquement dans les trois sens de l'espace pour construire l'ensemble du cristal. Dans le motif n'existe pas 2 points équivalents par translation de réseau.

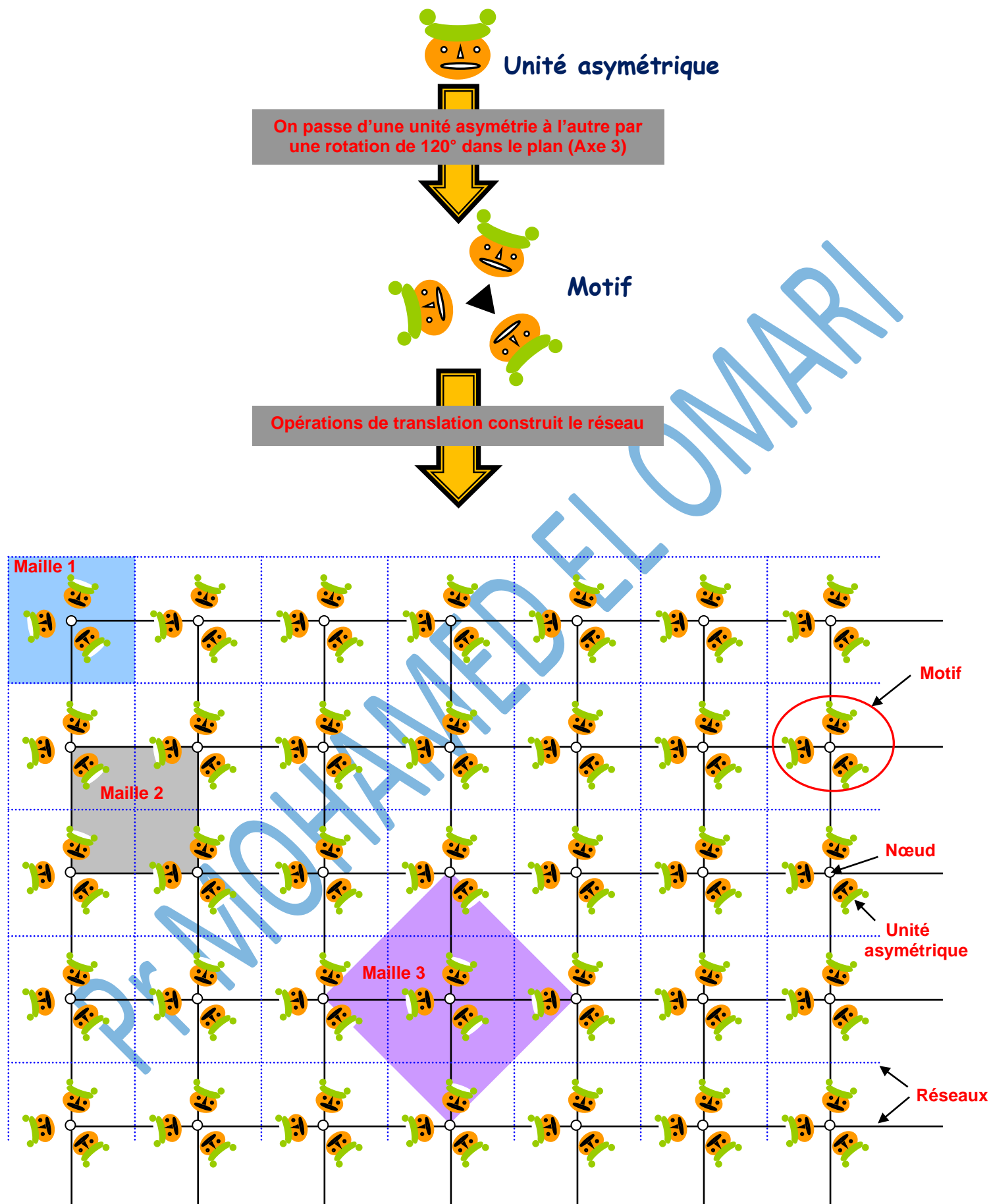
Opérations de translation du cristal



Le cristal

Décrit par un **réseau** : assemblage triplement périodique de motifs.

Pr MOHAMED EL OMARI



α- Réseau cristallin

Le réseau cristallin est un squelette virtuel qui permet la description géométrique d'un solide cristallin. Il caractérise la symétrie réelle du cristal et réduit chaque motif élémentaire en un point appelé **nœud**. Plusieurs réseaux sont possibles pour un état cristallin mais seul celui qui respecte la symétrie du cristal est retenu.

β- Nœud

Le nœud est un point du réseau cristallin qui peut être occupé ou non par un élément chimique. Les nœuds se déduisent les uns des autres par des translations \vec{T} :

$$\vec{T} = m.\vec{a} + n.\vec{b} + p.\vec{c}$$

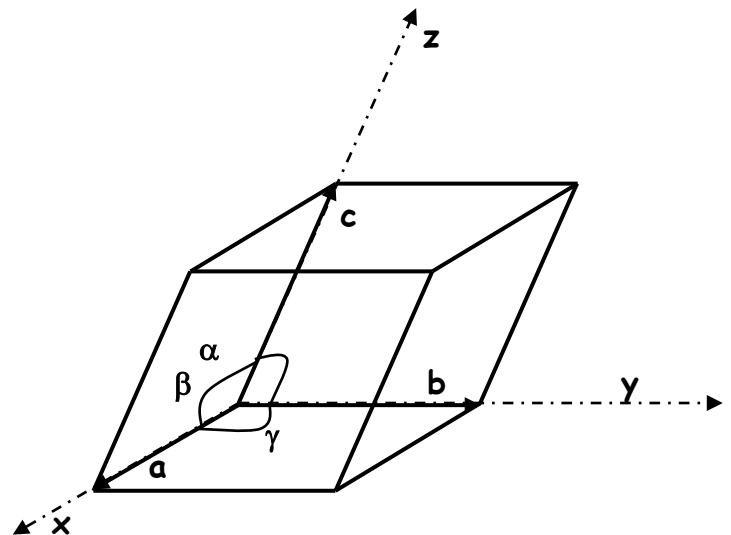
où \vec{a} , \vec{b} , et \vec{c} sont des vecteurs de base, non coplanaires, et m , n et p sont des entiers.

Les coordonnées d'un nœud sont notées (m, n, p) et appelées **coordonnées réduites**. Réciproquement, l'ensemble des nœuds constituent le réseau cristallin dont l'unité de base est la maille.

2- Qu'est ce qu'une maille ?

Une maille élémentaire ou cristallographique :

- est unique,
- est un parallélépipède bâti sur les vecteurs de base \vec{a} , \vec{b} et \vec{c} non coplanaires, ayant la même origine et forment entre eux les angles α , β et γ .
- est la portion d'espace, de volume minimal, telle que, par translation entières, elle assure le pavage du réseau cristallin, inclut les motifs, elle redonne le cristal.
- Le volume V d'une maille élémentaire est égal à la valeur du produit vectoriel mixte : $V = (\vec{a} \wedge \vec{b}) \times \vec{c}$

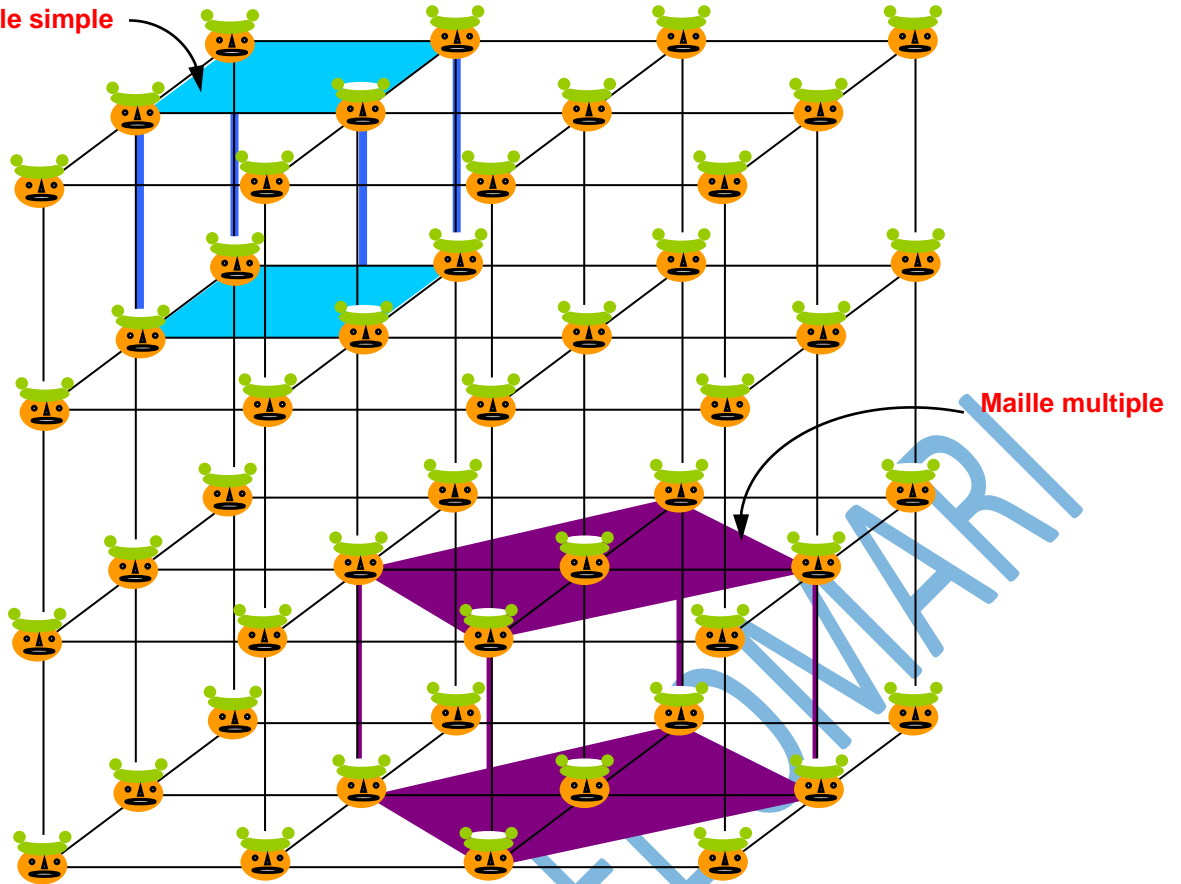


(x, y, z) est le repère cristallographique

α- Multiplicité d'une maille

Elle correspond au nombre de motifs par maille élémentaire. Elle est notée m ou z . Une maille est dite primitive (simple) s'elle contient un seul motif ($z = 1$). Elle est multiple lorsqu'elle contient plus d'un motif ($z > 1$).

Maille simple



Il se trouve qu'un motif est partagé par n mailles, dans ce cas il se compte $\frac{1}{n}$ pour la maille considérée ainsi :

- un motif à l'extérieur de la maille se compte pour 0,
- un motif au sommet de la maille est commun à 8 mailles et se compte pour $\frac{1}{8}$,
- un motif sur une arête de la maille est commun à 4 mailles et se compte pour $\frac{1}{4}$,
- un motif dans une face de la maille est commun à 2 mailles et se compte pour $\frac{1}{2}$ et
- un motif à l'intérieur de la maille, n'appartient qu'à elle, se compte pour 1.

β - Rangée

Une rangée est une droite qui passe par deux nœuds au moins du réseau cristallin. Il s'agit d'une distribution monodimensionnelle des motifs. Une rangée est notée $[u \ v \ w]$ avec u , v , et w sont des nombres entiers qui représentent les coordonnées réduites du premier nœud rencontré par cette rangée à partir d'une origine de départ prise au hasard. Des rangées parallèles et équidistants constituent une famille de rangées, auront la même notation $[u \ v \ w]$. Une famille de rangées passe par tous les nœuds du réseau cristallin.

γ- Plan réticulaire

Un plan réticulaire passe par, au moins, trois nœuds non colinéaires du réseau cristallin. L'équation générale d'un plan dans un trièdre Oxyz est de la forme :

$$h \cdot \left(\frac{x}{a}\right) + k \cdot \left(\frac{y}{b}\right) + l \cdot \left(\frac{z}{c}\right) = m$$

Avec *h*, *k* et *l* sont des entiers appelés **indices de Miller**, ils définissent l'orientation du plan appelé **plan réticulaire** et noté **(h k l)**. *m* étant l'ordre du plan (h k l) par rapport à l'origine du trièdre.

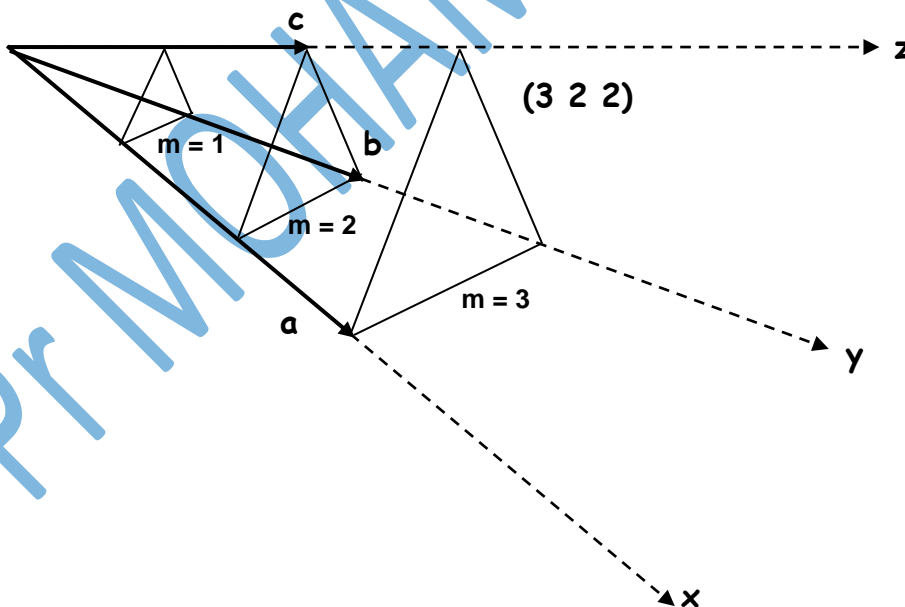
Un plan réticulaire (h k l) coupe les vecteurs de base \vec{a} , \vec{b} et \vec{c} en :

$$x = \frac{a}{h}, y = \frac{b}{k} \text{ et } z = \frac{c}{l}$$

Des plans parallèles et équidistants constituent une famille de plans réticulaires, auront les mêmes indices de Miller *h*, *k* et *l*, et se diffèrent uniquement par l'ordre *m*. Une famille de plans réticulaires passent par tous les nœuds du réseau cristallin.

- * *m* = 0 ce qui implique que le plan passe par l'origine,
- * *m* = 1 correspond au plan le plus proche de l'origine,

La distance entre deux plans réticulaires consécutifs de la même famille est appelée **distance interréticulaire** notée d_{hkl} .



Remarque : Lorsqu'un plan réticulaire est parallèle à un axe de référence, l'indice de Miller correspondant est nul.