

II. Caractéristiques des Structures cristallins

II.1. Multiplicité de la maille :

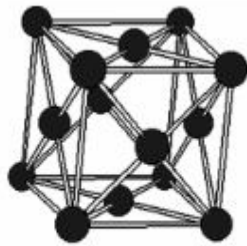
Combien de sphères dans chaque maille élémentaire.

On ne doit pas compter directement les sphères représentées sur la maille élémentaire, car certaines sont partagées entre plusieurs mailles.

Maille élémentaire : Cubique Faces Centrées

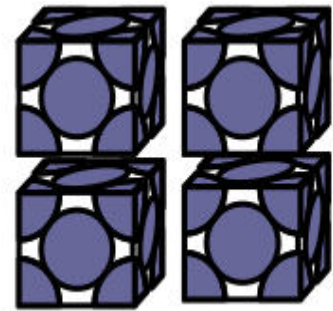
(En vue éclatée)

14 sphères apparaissent
Ce n'est pas la multiplicité

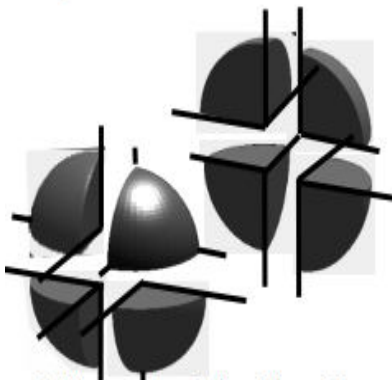


Mais la majorité des
sphères sont partagées
entre plusieurs mailles :

→ Il ne faut en compter
qu'une partie

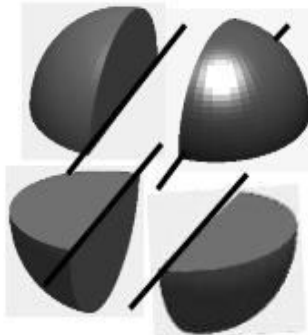


Sphère sur un coin de la maille



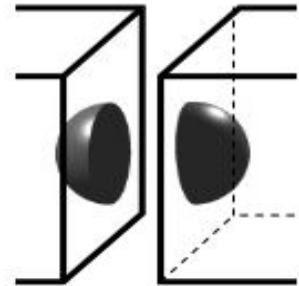
→ Elle appartient à 8 mailles voisines
→ Compte pour 1/8

Sphère sur une arête de la maille



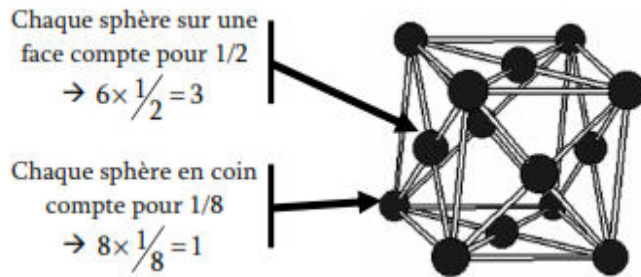
→ Elle appartient à 4 mailles voisines
→ Compte pour 1/4

Sphère sur une face de la maille



→ Elle appartient à
2 mailles voisines
→ Compte pour 1/2

Application à la structure cubique face centrée :



Multiplicité totale du CFC :

$$N_{CFC} = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$$

II.2. Compacité :

Elle caractérise la densité de la structure cristallographique

Compacité :

$$C = \frac{V_{\text{occupé par les sphères}}}{V_{\text{total de la maille}}} \quad (\text{sans unité, en général en \%})$$

Exemple : compacité de la structure cubique simple :

Volume occupé par les sphères = $N \cdot \frac{4}{3} \pi R^3$

Volume de la maille = $a^3 = (2R)^3$ (les sphères sont tangentes)

$$C = \frac{V_{\text{occupé par les sphères}}}{V_{\text{total de la maille}}} = \frac{N \times \frac{4}{3} \pi R^3}{(2R)^3} = \frac{\pi}{6} = 52\%$$

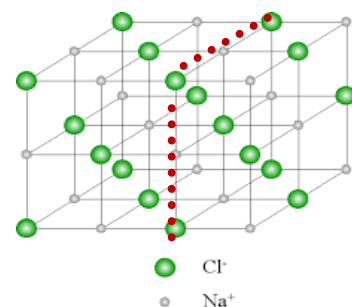
II.3. Coordonnées réduites :

Ils sont relatifs à une seule maille de telle façon de ne pas faire intervenir les vecteurs de bases.

Exemples :

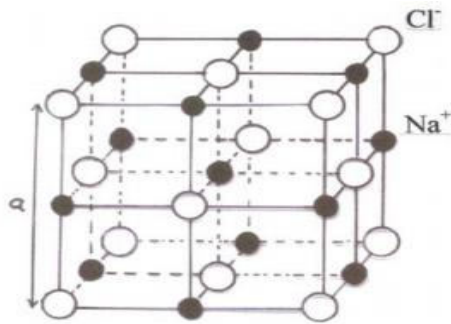
NaCl :

Les ions Cl^- : $(0,0,0)$; $(1/2,1/2,0)$; $(1/2,0,1/2)$; $(0,1/2,1/2)$

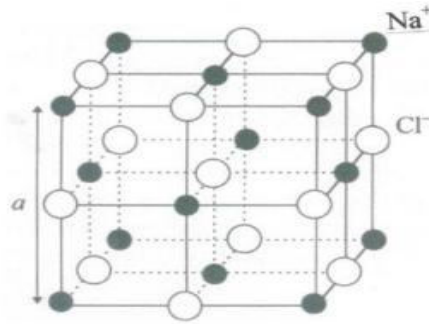


Les ions Na^+ : $(1/2,0,0)$; $(0,1/2,0)$; $(0,0,1/2)$; $(1/2,1/2,1/2)$;

les anions occupent un CFC et les cations occupent les centres des arêtes et le milieu du cube



Origine sur l'anion



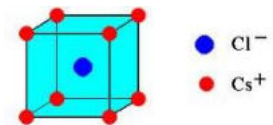
Origine sur le cation

CsCl :

Le chlorure de césium cristallise dans un réseau cubique centré, les coordonnées réduites sont :

Les ions Cl^- : $(0,0,0)$

Pou Cs^+ : $(1/2,1/2,1/2)$



II.4. La Masse volumique « ρ » et la densité « d » d'un solide

La densité d est une donnée très importante dans l'étude des structures cristallines.

$$\rho = \frac{\text{masse du solide (en g/cm}^3\text{)}}{\text{Son volume}}$$

Si on se réfère à une maille:

$$\rho = \frac{\text{masse de la maille}}{\text{volume de la maille}}$$

masse de la maille = $z \times$ masse du motif = $z \times$ Masse molaire du motif / N_a

D'où :

$$\rho = \frac{z M_{\text{motif}}}{N v_{\text{maille}}}$$

o

Avec :

z = nombre de motifs par maille

M_{motif} = masse molaire du motif

N_a = nombre d'Avogadro

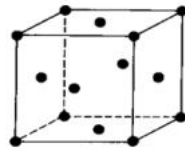
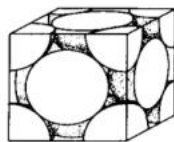
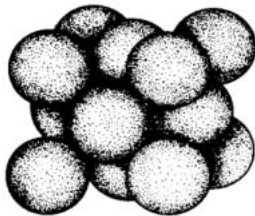
v_{maille} = volume de la maille

$$d = \frac{\text{masse d'un certain volume du solide (sans unités)}}{\text{masse du même volume d'eau}}$$

Pour les solides :

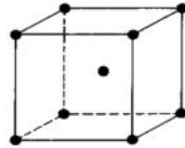
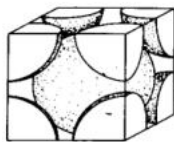
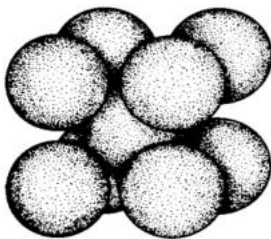
$$\rho \text{ (en g/cm}^3\text{)} = d \text{ (sans unités)}$$

Modèle compact et modèle éclaté de quelques réseaux cristallins



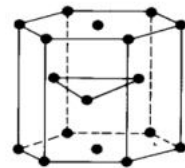
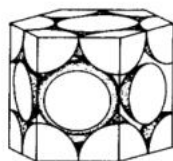
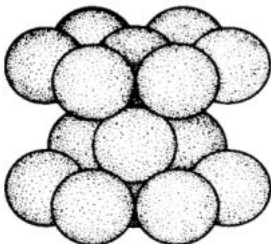
(a)

cubique à faces centrées (c.f.c.)



(b)

cubique centré (c.c.)



(c)

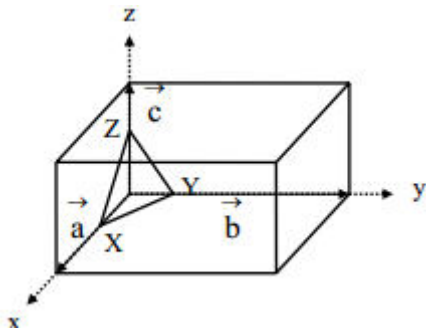
hexagonal compact (h.c.)

III. Plans réticulaires et indices de Miller :

Toute droite passant par deux nœuds constitue une rangée réticulaire. Tout plan passant par trois nœuds du réseau constitue un plan réticulaire. Pour indexer les plans du cristal, on utilise généralement les indices de Miller.

Les indices de Miller ($h\ k\ l$) sont tels que le plan correspondant coupe les arêtes: a en a/h , b en b/k et c en c/l .

Pour représenter un plan nous avons besoin de 3 points: Le plan réticulaire (1 3 2) coupe: l'axe ox en $a/1$, l'axe oy en $b/3$, l'axe oz en $c/2$.



Les familles de plans réticulaires sont dénotées par les indices de Miller (hkl)

