

Glossaire de cristallographie

Limité aux termes utilisés dans le programme officiel de 2PC et de 1-PCSI/SI

On se place dans l'espace à 3 dimensions et on se limite à l'étude des cristaux idéaux et périodiques

Partie mathématique

Réseau : ensemble de points de l'espace (ces points sont appelés des **nœuds**) répartis périodiquement.

Un **réseau** est défini par trois **vecteurs de translation fondamentaux** de l'espace notés **a**, **b** et **c** tels que tout vecteur qui relie deux nœuds (N_1 N_2) quelconques du réseau soit de la forme :

$$N_1N_2 = n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b} + n_3 \mathbf{c} ;$$

n_1, n_2 et n_3 étant des entiers relatifs

Une **maille** est un volume de l'espace qui le remplit totalement par translation. On dit que la maille **pave** l'espace. **Une maille doit contenir en propre un nombre entier de nœuds.**

Une maille qui contient un nœud en propre est dite **élémentaire** (ou primitive ou simple).

Le parallélépipède construit sur les vecteurs **a**, **b** et **c** forme toujours une maille élémentaire. Ce n'est pas la seule possible.

Partie chimie

Un **cristal** est formé de l'association d'un **réseau** et d'un **motif** (parfois appelé base).

Un motif peut être constitué de 1 atome (exemple des métaux dit cc et cfc) ou de plusieurs atomes (2 dans le cas des métaux dits hc), de plusieurs ions ou d'une ou de plusieurs molécules.

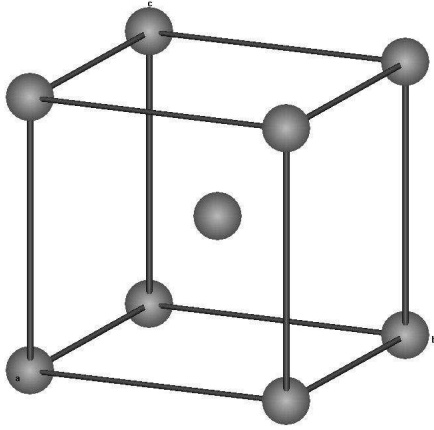
Dans tous les cas le motif est électriquement neutre.

Parfois, les **mailles conventionnelles** (dites aussi de Bravais, bien que ce mot ne soit pas au programme) sont plus commodes à dessiner que les mailles élémentaires. Dans le cadre du programme, c'est le cas des mailles cubiques centrées (cc ou Cubique *I* à l'international) et cubiques à faces centrées (cfc ou Cubique *F* à l'international).

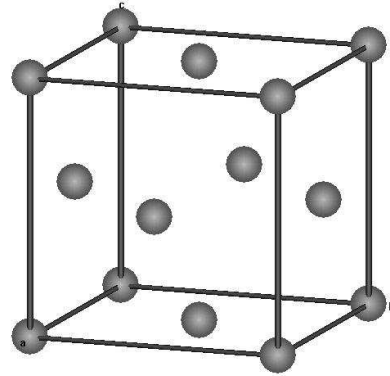
La maille cubique simple (cs) est un cube qui présente un nœud à chaque sommet. Elle contient un nœud en propre. Elle est donc élémentaire. (Cas du chlorure de Caesium).

La maille cc est un cube qui présente un nœud à chaque sommet et un au centre. Elle contient deux nœuds en propre. On dit que sa **population** est de 2 motifs par maille. (Cas de certains métaux alcalins, du fer α ...).

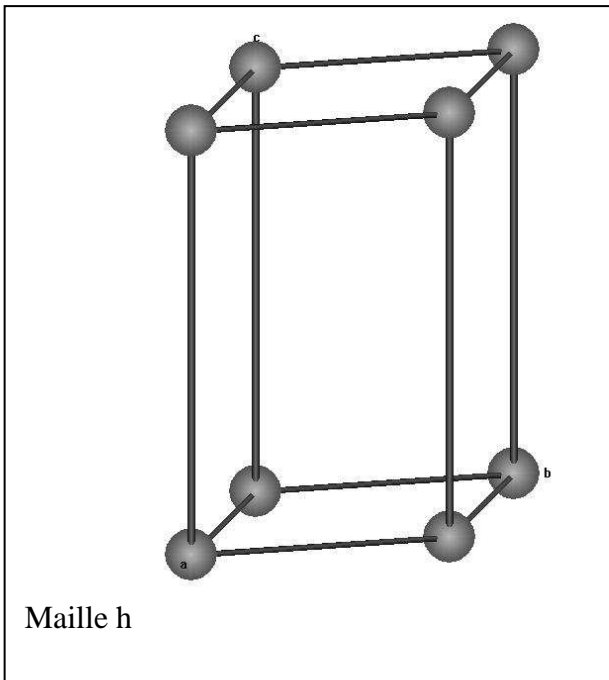
La maille cfc est un cube qui présente un nœud à chaque sommet et un aux centres des six faces. Elle contient quatre nœuds en propre. On dit que sa **population** est de 4 motifs par maille. (Cas de nombreux métaux, du chlorure de sodium, de sulfure de zinc variété blende, de la fluorine, du diamant, de la glace la plus courante..)



Maille cc :



cfc :



Maille h

La maille hexagonale (h) est une maille élémentaire. C'est un prisme droit à base losange d'angles 60° et 120° . Elle présente un nœud à chaque sommet. Les vecteurs **a** et **b** sont de même norme notée *a* et le vecteur **c** est de norme différente notée *c*.

Les quatre nœuds des angles à 120° comptent pour $1/6^{\text{ème}}$ (un tiers de cadran sur un demi espace) et les quatre nœuds des angles à 60° comptent pour $1/12^{\text{ème}}$ (un sixième de cadran sur un demi espace). Le tout fait bien 1. Certains ouvrages réalisent un décompte rapide ($8 \times 1/8^{\text{ème}}$) pour simplifier..... !

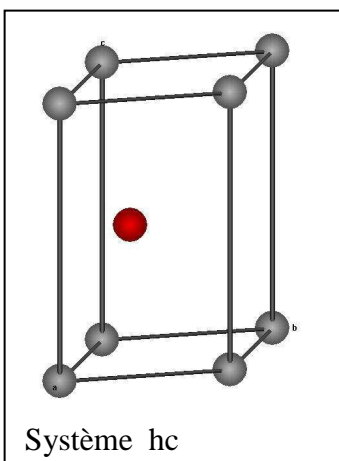
C'est la cas de la forme würtzite du sulfure de zinc, du graphite, des métaux tel le magnésium...

La **coordination** est le nombre de **plus proches voisins** (ppv) que possède un point.

Si le motif est monoatomique, la coordination de l'atome est celle du réseau : cas des métaux cc (coordination 8) et cfc (coordination 12).

Si le motif comporte plusieurs atomes ce n'est plus le cas. L'exemple le plus célèbre est celui de l'empilement hexagonal compact.

Pour le réseau si $c > a$, un nœud présente 6 ppv dans le plans **a b**. Si $c < a$, un nœud possède deux ppv (en $+c$ ou $-c$).



Système hc

Dans le cas des métaux décrits par le **système hc** ou la **structure hc** (*c* pour compacte), le motif comporte un atome au nœud (coordonnées 0,0,0) et un hors du nœud ($2/3, 1/3, 1/2$) en rouge sur le dessin.

La coordination des atomes est alors de 12 (valeur maximale) **si et seulement si** le rapport $c/a = \sqrt{8/3}$.

Le vecteur $2/3 \mathbf{a} + 1/3 \mathbf{b} + 1/2 \mathbf{c}$ est alors de norme *a*.

Il n'existe pas de maille hc ! La maille est h, donc élémentaire, et le motif présente deux atomes comme précédemment décrit.