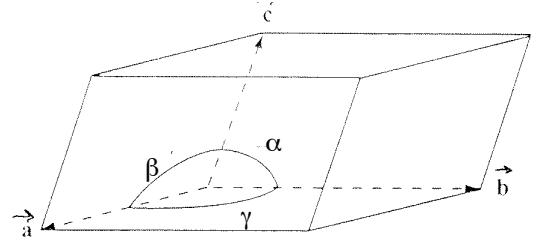


➤ Formules et définitions de base :

- Le **motif** est la plus petite entité discernable qui se répète périodiquement. Le **nœud** est un point où se trouve un motif.

- La **maille** (ou maille élémentaire) est l'unité de base à partir de laquelle on peut engendrer tout le cristal en faisant subir à celle-ci différentes translations suivant les 3 directions de l'espace. Toute l'information concernant une structure cristalline est contenue dans la maille. Une maille est en fait un parallélépipède. Une maille est donc caractérisée par 6 paramètres : 3 longueurs (a, b et c) et 3 angles (α , β et γ).

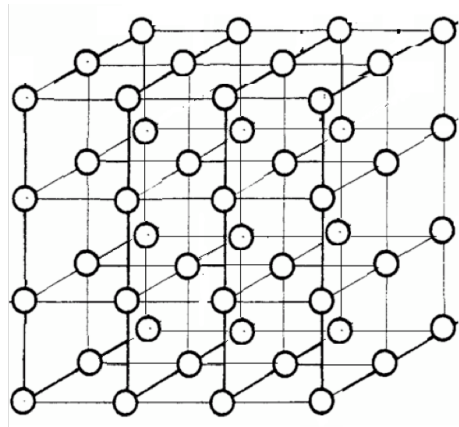
En générale, la maille est un cube : $a = b = c$ et $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.



- Le **réseau cristallin** est formé par l'empilement des mailles dans les trois directions de l'espace.

Exemple de réseau cristallin :

La maille est ici un petit cube.



- Le **nombre de motifs par maille ou la population de la maille** est une grandeur notée **Z** qui correspond au nombre de motifs appartenant en propre à la maille.

Un motif à l'intérieur de la maille compte pour 1 (car il n'appartient qu'à cette maille).

Un motif sur une face de la maille compte pour $\frac{1}{2}$ (car il appartient à 2 mailles).

Un motif sur une arête de la maille compte pour $\frac{1}{4}$ (car il appartient à 4 mailles).

Un motif sur un sommet de la maille compte pour $\frac{1}{8}$ (car il appartient à 8 mailles).

Un motif en dehors de la maille compte pour 0.

- **Multiplicité de la maille** : Une maille est dite simple si elle ne contient qu'un motif ($Z = 1$), elle est dite double si elle en contient 2 ($Z = 2$), ...

- La **coordinnence** d'une espèce (atome, ion, ...) est le nombre de plus proches voisins de cette espèce.

- **Masse volumique** :

$$\rho = \mu = \frac{\text{masse du contenu d'une maille}}{\text{volume de la maille}} = \frac{Z \cdot \text{masse d'un motif}}{\text{Volume de la maille}} = \frac{Z \cdot M_{\text{motif}}}{N_a \cdot \text{Volume de la maille}}$$

- La **compacité** d'une structure est la fraction de volume occupée par la matière. Il s'agit d'une grandeur sans dimension comprise entre 0 et 1 (ou entre 0 % et 100 %). La compacité est d'autant plus grande que la "place perdue" est faible.

$$C = \frac{\text{Volume des } Z \text{ motifs appartenant à la maille}}{\text{Volume de la maille}} = \frac{Z \cdot \text{Volume d'un motif}}{\text{Volume de la maille}}$$

- Tout réseau cristallin constitué de sphères identiques comporte nécessairement des portions d'espace non occupées. Ces portions d'espaces non occupées sont appelées **sites cristallographiques ou sites interstitiels**. On appelle **rayon (ou dimension) du site cristallographique** le rayon de la plus grosse sphère que l'on peut placer dans la cavité sans déformer la structure.

Un **site tétraédrique** est la cavité située au centre d'un tétraèdre régulier formé par 4 atomes. La coordinence d'un atome situé dans un site tétraédrique est de 4.

Un **site octaédrique** est la cavité située au centre d'un octaèdre régulier formé par 6 atomes. La coordinence d'un atome situé dans un site octaédrique est de 6.

Un **site cubique** est la cavité située au centre d'un cube formé par 8 atomes. La coordinence d'un atome situé dans un site cubique est de 8.

- Longueur de la diagonale d'une face d'un cube d'arête a : $a\sqrt{2}$

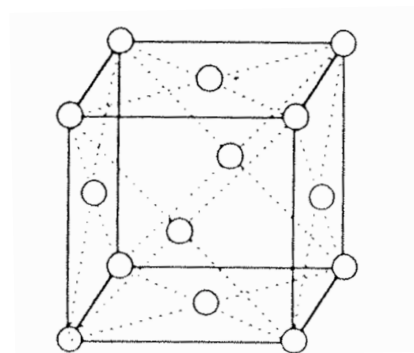
- Longueur de la diagonale d'un cube d'arête a : $a\sqrt{3}$

- Volume d'une sphère de rayon r : $V = \frac{4}{3}\pi r^3$

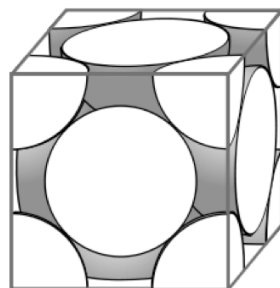
➤ **Cas des cristaux métalliques** : les motifs sont des atomes métalliques

La seule structure cristalline au programme est la **structure cubique à faces centrées : cfc.**

Les motifs sont placés aux sommets et au centre des faces d'un cube.



Les atomes sont assimilés à des sphères qui sont tangentes suivant les diagonales des faces du cube.



On peut démontrer que $C = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0,74$. Il s'agit d'une structure compacte.

Les sites tétraédriques sont placés au centre des 8 petits cubes. Ils sont donc situés au centre des tétraèdres définis par un sommet et les centres des 3 faces correspondant à ce sommet.

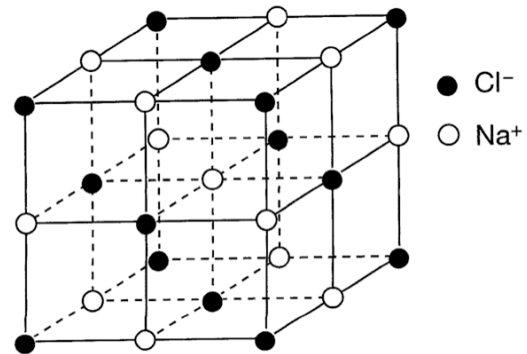
Les sites octaédriques sont placés au centre du cube et au milieu de chaque arête (ils sont alors au centre des octaèdres définis par les 2 sommets de l'arête et les centres des faces définissant cette arête).

➤ Cas des cristaux ioniques :

Les motifs sont des ions, assimilés à des sphères. La cohésion du cristal est assurée par l'attraction coulombienne entre anions et cations.

Les cristaux ioniques se présentent sous la forme de deux réseaux : l'un anionique, l'autre cationique, qui s'interpénètrent. Les anions étant en général plus gros que les cations, on considèrera que le réseau hôte est le réseau anionique. On considèrera alors que les cations, plus petits, viennent occuper les sites cristallographiques du réseau hôte anionique. Les forces d'attractions électrostatiques tendent à mettre en contact cations et anions, les forces de répulsion visent en revanche à séparer les espèces de même signe. Par conséquent, il y a non contact entre anions, non contact entre cations et contact entre anions et cations.

Exemple : Structure cristalline du chlorure de sodium NaCl

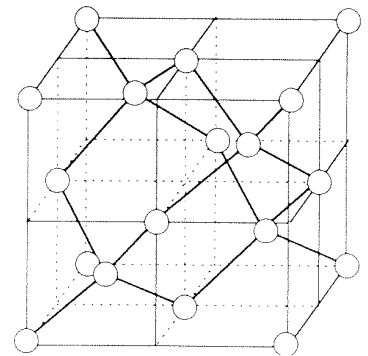


➤ Cas des cristaux covalents :

Les motifs sont des atomes. Dans un cristal covalent, les atomes sont unis par des liaisons covalentes localisées. Un tel cristal constitue une macromolécule covalente de très grande taille. La cohésion du système est assurée par des liaisons de covalence entre les atomes.

Exemple : Structure cristalline du diamant

Les atomes de carbone occupent les sommets et les centres des faces d'un cube ainsi que le centre de 4 petits cubes alternés (un sur 2). On constate que chaque atome de carbone est au centre d'un tétraèdre formé par 4 autres atomes de carbone



➤ Cas des cristaux moléculaires :

Les motifs sont des molécules. La cohésion des cristaux est assurée par des interactions relativement faibles à savoir les interactions intermoléculaires (entre molécules de motifs) qui peuvent être de deux types : les interactions de Van der Waals et les liaisons hydrogène. Exemples : cristaux de glace, de CO₂, ...

Exemple : Structure cristalline du diiode

