

CRISTALLOGRAPHIE, TD

En l'absence de cours de Cristallographie dans le tronc commun du Cycle Ingénieur Civil, il a été décidé d'intégrer au cours matériaux de deuxième année un "kit de survie" de cristallographie sous la forme d'un TD. Le texte de TD comprend une partie importante de "cours" de cristallographie très simplifiée destiné à introduire les concepts essentiels et à les placer correctement dans l'architecture globale de la cristallographie. En particulier les parties concernant les diverses "échelles" de symétries sont essentielles pour saisir l'impact réel de l'organisation cristalline sur les propriétés des solides cristallins.

Les questions destinées à mettre en œuvre les concepts présentés dans le texte sont énoncées en italique.

1 SYMÉTRIE D'ORIENTATION, GROUPE PONCTUEL

Une espèce cristalline qui cristallise dans un milieu parfaitement homogène et isotrope, croît sous une forme macroscopique polyédrique qui présente des relations de symétrie entre ses faces. Par exemple le carbone diamant croît naturellement sous la forme simple d'un octaèdre régulier (figure 2.1). Il est facile d'identifier des éléments de symétrie qui laissent une telle forme invariante : par exemple une rotation de $\pi/2$ autour d'un axe passant par deux sommets opposés de l'octaèdre laisse celui-ci invariant. Cet élément de symétrie est appelé axe de symétrie directe d'ordre 4 (parce que $\pi/2 = 2\pi/4$) et est noté C_4 . Un octaèdre présentant six sommets (soit trois paires de sommets opposés), il admet trois axes de symétrie directe d'ordre 4.

1.1 ÉLÉMENTS DE SYMÉTRIE D'ORIENTATION DU DIAMANT

Identifier les autres éléments de symétrie (axes de symétrie directe, plan de symétrie, centre de symétrie) qui laissent la forme octaédrique du diamant invariante.

On notera que les axes et plans de symétrie d'une forme passent nécessairement par un point qui est le centre de la forme, celui-ci correspondant éventuellement à un centre de symétrie. On parle ainsi d'éléments de symétrie ponctuelle, qui sont également nommés éléments de symétrie d'orientation.

1.2 ÉLÉMENTS DE SYMÉTRIE D'ORIENTATION DE LA CHALCOPYRITE

En plus des axes de rotations directes autour d'un axe, des plans de symétrie et du centre de symétrie, il existe un autre type d'éléments de symétrie appelés axes de symétrie inverse d'indicatif q ($q \in \mathbb{N}$). L'opération de symétrie attachée à cet axe correspond à la composition d'une rotation de $2\pi/q$ autour de cet axe, et d'une symétrie par rapport à un point de l'axe (symétrie centrale).

La figure 2.a présente une forme de croissance de la chalcopirite qualifiée par les minéralogistes "prisme à section carrée à terminaisons en façade de toiture".

Cette forme admet un axe de symétrie inverse. Indiquer la direction de cet axe de symétrie inverse et préciser quel est son indicatif.

Bien que cette forme soit invariante par la composée d'une rotation de $2\pi/q$ suivie par une symétrie centrale, est-elle invariante par chacune de ces deux opérations de symétrie prises isolément ?

L'identification de tous les éléments de symétrie d'une forme permettrait de vérifier que ces éléments forment un groupe fini appelé le groupe ponctuel de la forme.

1.3 LE PRINCIPE DE CURIE

Indépendamment de l'intérêt minéralogique que présentent les caractéristiques géométriques des formes de croissance des cristaux, celles-ci sont l'expression la plus facilement observable de l'anisotropie de l'état cristallin. Cette anisotropie se traduit en effet dans nombre de propriétés macroscopiques. Par exemple, l'aimantation spontanée en tout point d'un cristal ferromagnétique est une propriété macroscopique intrinsèque à ce cristal qui se représente par un vecteur dont la direction se singularise par rapport à toute autre direction de ce cristal. D'autres propriétés physiques telles que la conductivité électrique, l'indice optique, la pyroélectricité, la piézoélectricité, etc., peuvent être anisotropes dans les cristaux. La caractérisation de cette anisotropie se traduit par l'existence de directions particulière du cristal autour desquelles la propriété étudiée présente des relations de symétrie de rotation d'ordre discret ou infini.

Le Principe de Curie énonce les relations entre les symétries des propriétés macroscopiques des cristaux et l'organisation atomique des cristaux. Sa formulation exacte est :

"Lorsque certaines causes produisent certains effets, les éléments de symétrie des causes doivent se retrouver dans les effets produits. De même, lorsque certains effets révèlent une certaine dissymétrie, cette dissymétrie doit se retrouver dans les causes qui leur ont donné naissance"

On résume ce principe sous les formes :

"Les symétries des causes sont incluses dans celles des effets".

"Les effets peuvent être plus symétriques que les causes"

"Il n'y a pas de génération spontanée de dissymétrie"

La forme de croissance d'un cristal étant l'effet dont la cause est l'empilement des atomes selon l'organisation spécifique à l'espèce considérée, on doit pouvoir corréler les observations effectuées sur la forme de croissance de la chalcopyrite avec la description de la structure atomique du cristal de chalcopyrite.

Afin de clarifier la signification de l'expression "plus symétrique", nous allons comparer les éléments de symétrie de la forme de chalcopyrite à ceux d'un prisme droit à base carrée.

Représenter une projection de ce prisme sur le plan de sa base carrée ainsi qu'une projection sur le plan d'un de ces côtés. Sur ces deux figures, indiquer les éléments de symétries de ce prisme, en particulier les plans de symétrie qui sont représentés par la trace de leur intersection avec le plan de projection. Repérer quels sont les éléments de symétrie du prisme droit qui ne sont pas des éléments de symétrie de la forme de la chalcopyrite.

L'axe de symétrie inverse d'ordre q identifié comme élément de symétrie de la forme de la chalcopryrite apparaît-il dans les éléments de symétrie du prisme droit ? Ce prisme droit est-il invariant par l'axe de symétrie inverse en question ? Comparer qualitativement l'orbite du groupe ponctuel de la forme de la chalcopryrite à celle du groupe ponctuel du prisme droit.

Dessiner une nouvelle forme qui soit symétrique par l'axe principal de symétrie directe du prisme droit et qui ne soit pas symétrique par l'axe de symétrie inverse de la chalcopryrite.

Quelle est la forme "la plus symétrique"?

2 STRUCTURE CRISTALLINE, RÉSEAU, SYMÉTRIE DE POSITION

2.1 RÉSEAU, MOTIF

La figure 2-3 présente la structure atomique de la chalcopryrite à l'aide d'une part, de la vue en perspective d'une maille, d'autre part de la projection cotée de cette maille orthogonalement à z .

La périodicité de l'état cristallin se traduit par la mise en évidence dans la structure atomique d'un cristal du réseau cristallin. L'origine du réseau étant choisie arbitrairement de préférence au centre d'un atome de la structure, les nœuds du réseau correspondent aux points de la structure atomique pour lesquels le paysage orienté vu depuis ces points est identique au paysage orienté vu depuis l'origine. (Les nœuds sont des points "homologues".) Les nœuds définissent un réseau tridimensionnel. Tout vecteur joignant deux nœuds est une translation du réseau. Une maille est un parallélépipède dont les sommets sont des nœuds. Les arêtes de la maille définissent une base (**a**, **b**, **c**) et toute combinaison linéaire à coefficients entiers de ces vecteurs de base, est une translation du réseau.

Le contenu d'une maille s'appelle le motif. Le cristal est alors équivalent à la juxtaposition dans les directions x , y et z de cette maille répétée à l'identique. On retiendra que le choix de l'origine est arbitraire et que tout parallélépipède dont les sommets sont des nœuds du réseau peut être choisi pour maille. (On évoquera ultérieurement ce qui justifie le choix de la maille utilisée pour décrire la structure de la chalcopryrite parmi une infinité de possibilités.)

*Indiquer sur la figure 2-3 les vecteurs de base **a**, **b** et **c** d'une maille de la chalcopryrite.*

L'origine de la maille - et donc du réseau - ayant été choisie au centre d'un atome de cuivre, tous les nœuds du réseau se trouvent nécessairement au centre d'un atome de cuivre. Réciproquement, les centres des atomes de cuivre correspondent-ils tous à un nœud du réseau ? Indiquer les nœuds du réseau sur la vue en perspective. En déduire qu'il existe des translations du réseau qui s'expriment, dans la base définie par les trois arêtes de la maille, à l'aide de coefficients fractionnels. Donner un exemple.

En tenant compte du fait que certains nœuds sont communs à plusieurs mailles adjacentes, compter le nombre de nœuds qui sont attribués en propre à une maille.

En tenant compte du fait que les atomes placés aux sommets, où sur une face, ou une arête de la maille sont communs à plusieurs mailles adjacentes, donner pour chacun des

éléments chimiques le nombre d'atomes attribués en propre à une maille. En déduire la formule chimique de la chalcopryrite. Expliquer la relation entre ces nombres d'atomes et le nombre de nœuds en propre à la maille.

Calculer la masse volumique de la chalcopryrite.

Décrire le motif attaché à cette maille en établissant une liste des atomes attribués en propre à la maille et en précisant leurs coordonnées dans la base définie par les trois arêtes de la maille. De manière à ce que le motif corresponde effectivement au nombre d'atomes en propres, il ne faut pas que l'un des atomes choisis pour constituer ce motif puisse se déduire d'un autre atome du motif par une translation de vecteur égal à une combinaison entière de vecteurs de base de la maille. On choisit donc les atomes dont les coordonnées dans cette base sont toutes strictement inférieures à 1.

2.2 ÉLÉMENTS SYMÉTRIE DE POSITION

La mise en évidence de l'existence d'un réseau montre que l'organisation des atomes dans la structure cristalline est invariante par translation. Cette structure atomique est également invariante par des éléments de symétrie tels que des axes de rotation, (directe ou inverse) des plans de symétrie, des centres de symétrie, ainsi que, éventuellement, des éléments conjuguant axe de symétrie ou plan de symétrie avec une composante translatrice tels que, respectivement, des axes hélicoïdaux et des plans de symétrie avec glissement. Cependant, cette invariance par symétrie n'a de sens que si le cristal est considéré comme infini dans toutes les directions de l'espace. La périodicité de la structure cristalline permet de se limiter à l'identification des éléments de symétrie dans les limites d'une maille.

Vérifier que le principe de Curie est respecté en identifiant et en positionnant, sur la projection cotée de la chalcopryrite, l'axe de symétrie inverse qui a été identifié sur la forme de croissance de ce composé (§ 1.2). Cet axe de symétrie inverse se répète à différentes positions dans la maille et il peut être nécessaire de dessiner plusieurs mailles adjacentes pour "voir" ces axes.

Les éléments de symétrie de la structure atomique du cristal sont placés à des positions déterminées de la structure et assurent le recouvrement, par symétrie entre positions atomiques, de l'ensemble du cristal. Ces éléments de symétrie sont alors nommés éléments de symétrie de position ou de recouvrement. Le cristal étant considéré comme infini, le nombre d'éléments de symétrie de position d'une structure cristalline est infini (bien que le nombre d'éléments de symétrie que l'on puisse identifier dans une maille soit, lui, fini). Les éléments de symétrie d'une structure cristalline forment un groupe infini nommé groupe d'espace de la structure cristalline.

Toujours orthogonalement à la projection cotée, il existe des axes hélicoïdaux qui sont donc parallèles aux axes de symétrie inverse déjà examinés, mais qui, bien entendu, se placent à des positions différentes de ces derniers. Un axe hélicoïdal n_m est attaché à une opération de symétrie composée d'une rotation de $2\pi/n$ et d'une translation de vecteur $m/n \cdot \mathbf{t}$ ou \mathbf{t} est le plus petit vecteur du réseau parallèle à l'axe de la rotation. Placer ces axes hélicoïdaux sur la projection cotée et préciser leurs caractéristiques (c'est-à-dire les valeurs de n et m).

Comment se traduit macroscopiquement, en termes de symétrie, l'invariance de la structure atomique de la chalcopirite par ces axes hélicoïdaux ?

On montre facilement que pour qu'un élément de symétrie attaché à une opération de rotation (axe de symétrie directe, axe de symétrie inverse, axe hélicoïdal) soit compatible avec la périodicité de la structure cristalline, il faut que l'ordre de la rotation soit **1, 2, 3, 4** ou **6** (**1** correspond à l'identité). Du fait du principe de Curie, il résulte de la limitation dans les ordres de symétrie des éléments de symétrie de position une limitation identique pour les ordres des éléments de symétrie d'orientation (symétrie ponctuelle, cf. § 1.3) des propriétés macroscopiques des cristaux.

La construction mathématique de tous les groupes d'espace qui respectent ces limitations a permis de dénombrer 230 groupes d'espace (groupes de Schönflies-Fedorov).

En résumé, (et en simplifiant), une structure cristalline présente donc des symétries (de position) qui forment un groupe (groupe d'espace) et il y a 230 groupes d'espace. D'après le principe de Curie, ce groupe de symétrie de position de la structure atomique résulte macroscopiquement en un groupe de symétrie d'orientation "minimum" que posséderont toutes les propriétés macroscopiques du cristal. Ce groupe de symétrie est alors le groupe ponctuel du cristal ou, à ce stade, de la structure cristalline.

On dénombre mathématiquement 32 groupes ponctuels. Les 230 groupes d'espace se "répartissent" sur ces groupes ponctuels, plusieurs groupes d'espaces se traduisant "macroscopiquement" par un même groupe ponctuel.

2.3 CLASSIFICATION DES STRUCTURES CRISTALLINES

Une classification des structures cristallines a été établie en fonction des symétries que possèdent ces structures.

On montre que, dans les limites des ordres de rotation compatibles avec la périodicité, les structures cristallines ne peuvent admettre que peu de combinaisons de directions d'axes de symétrie (axes directs, axes inverses, axes hélicoïdaux).

Par exemple, la structure de la chalcopirite présente une direction selon laquelle on a identifié plusieurs types d'axes attachés à une opération de rotation (axes inverses d'indicatif 4, axes hélicoïdaux de rotation $2\pi/4$). On peut alors montrer mathématiquement qu'une structure possédant une telle "direction d'ordre 4" ne peut pas présenter d'autres symétries attachées à une opération de rotation d'ordre (strictement) supérieur à 2. Dans le cas de la chalcopirite, les seuls autres axes de symétrie que présente la structure sont effectivement des axes d'ordre 2 (axes hélicoïdaux et axes directs) dans des directions parallèle et perpendiculaires à la direction d'ordre 4.

Les différentes combinaisons d'axes ont donné naissance à la classification en systèmes cristallins :

- | | | |
|--|---|------------------------|
| - pas d'axe de symétrie | : | système triclinique |
| - un axe avec rotation d'ordre 2 | : | système monoclinique |
| - trois axes (\square) avec rotation d'ordre 2 | : | système orthorhombique |
| - un axe avec rotation d'ordre 3 | : | système trigonal |

- un axe avec rotation d'ordre 4 : système quadratique (tétragonal)
- un axe avec rotation d'ordre 6 : système hexagonal
- quatre axes directs (ou inverses) d'ordre 3 : système cubique

Dans quel système doit-on classer la chalcopirite ?

Dans quel système doit-on classer le diamant dont nous avons examiné une forme de croissance au paragraphe 1.1. ?

2.4 LES RÉSEAUX DE BRAVAIS

Le réseau se déduisant de la structure, celui-ci présente des symétries (de position) qui se déduisent des symétries de la structure. En cela on retrouve encore une fois le Principe de Curie et, dans une certaine mesure, on peut dire que le réseau est "plus symétrique" que la structure atomique. On peut d'ailleurs facilement vérifier qu'un réseau est toujours "très" symétrique, dans le sens où les symétries qu'il présente sont toujours évidentes. Par exemple un réseau présente toujours des axes de symétrie directe.

Pour un système cristallin donné, les réseaux associés aux structures appartenant à ce système vont donc présenter des axes de symétrie directe dont les ordres sont ceux qui définissent ce système. Par exemple, le réseau d'une structure quadratique présente un axe direct d'ordre 4.

Il en résulte pour chacun de ces réseaux la possibilité de choisir une maille dont la géométrie mettra en évidence la symétrie principale du réseau (et donc celle de la structure). Par exemple la maille de la chalcopirite a la géométrie d'un prisme droit à base carrée qui met bien en évidence, parallèlement à **c** l'axe de symétrie d'ordre 4 du réseau. On remarque cependant que cette maille possède un nœud en son centre, ce qui lui donne au total deux nœuds en propre. On aurait donc pu choisir une autre maille, avec un seul nœud en propre, mais cette maille n'aurait pas mis la symétrie quaternaire en évidence.

On obtient donc pour chaque système cristallin une géométrie de maille particulière. La maille étant définie par les paramètres a , b , c et les angles α (angle de **b** à **c**), β (angle de **c** à **a**) et γ (angle de **a** à **b**), on obtient pour un système cristallin donné une géométrie de maille définie comme suit :

- triclinique : $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ quelconques
- monoclinique : a, b, c, α quelconques, $\beta = \gamma = \alpha/2$
- orthorhombique : a, b, c quelconques, $\alpha = \beta = \gamma = \alpha/2$
- quadratique : $a = b, c$ quelconque, $\alpha = \beta = \gamma = \alpha/2$
- cubique : $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = \alpha/2$
- trigonal et hexagonal : $a = b, c$ quelconque, $\alpha = \beta = \alpha/2, \gamma = 2\alpha/3$

(Attention les réseaux et les mailles relevant des systèmes cristallins trigonaux et hexagonaux présentent quelques subtilités que l'on ne peut pas présenter ici).

Il est très important de bien comprendre que cette correspondance entre système cristallin et géométrie de maille ne fonctionne que dans un sens. C'est-à-dire qu'il existe, par exemple, des structures du système orthorhombique pour lesquelles on pourra trouver une maille telle que $a = b \neq c$ et $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. Cette maille ressemble à une maille quadratique, mais le solide cristallin en question n'en devient pas pour autant un "quadratique" et reste un "orthorhombique".

La figure 2- 4 présente la structure cristalline du composé intermétallique ordonné TiAl (qui est largement étudié dans l'objectif d'applications aéronautiques). La perspective correspond-t-elle à une maille de cette structure. Énoncer les caractéristiques de cette maille. À quel système cristallin doit-on rattacher cette structure ?

Dessiner sur la projection cotée une autre maille qui mette en évidence le système cristallin trouvé, sans qu'il puisse y avoir d'ambiguïté sur le choix de ce système.

2-5 LES MODES DE RÉSEAU

Pour un système cristallin donné, la géométrie de maille correspondante peut s'adapter à plusieurs réseaux. Ces différents réseaux correspondent à différents agencements de nœuds dans la maille, qui respectent les symétries caractéristiques du système. Ces différents agencements de nœuds s'appellent des modes.

Ainsi, par exemple, pour le système cubique, on dénombre trois modes de réseau possible :

- le mode primitif (P) correspondant aux réseaux défini par une maille caractéristique de ce mode ne possédant des nœuds qu'à ses 8 sommets (soit un seul nœud en propre),
- le mode centré (ou corps centré, I) qui présente un nœud au centre de la maille en plus des nœuds à ses sommets (ce qui lui donne deux nœuds en propre),
- le mode faces centrées (F) qui présente un nœud au centre de chaque face de la maille en plus des nœuds à ses sommets (ce qui lui donne quatre nœuds en propre).

Les modes possibles varient en fonction des systèmes et l'on dénombre au total, c'est-à-dire tout systèmes confondus, 14 réseaux, appelés réseaux de Bravais qui sont décrits dans la figure 2 du chapitre 1.

À quel mode faut-il rattacher le réseau de la chalcopyrite ?

Le mode faces centrées n'est pas retenu pour le système quadratique. Pourquoi ?

3 RÉSEAU

On s'intéresse ici au réseau qui a été identifié à partir de la structure cristalline : on laisse de côté, pour le moment, le motif atomique. Les nœuds du réseau sont des points au sens mathématique du terme : ce ne sont en aucun cas des atomes, ils n'ont pas de dimension, de rayon, de nature chimique. Le réseau est totalement défini par son système, son mode et les paramètres de la maille. Le réseau est considéré comme infini. On peut

arbitrairement choisir une origine. Les nœuds se voient alors attribuer des coordonnées \mathbf{p} , \mathbf{q} et \mathbf{r} dans le repère $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$

Donner les coordonnées du nœud placé au centre de la maille de la chalcopyrite.

3-1 RANGÉES RÉTICULAIRES

Une rangée réticulaire passe par deux nœuds du réseau. Le vecteur paramétrique d'une rangée réticulaire est le vecteur directeur de la rangée dont le module correspond à la distance entre deux nœuds consécutifs de cette rangée. Les indices $[\mathbf{uvw}]$ d'une rangée correspondent aux coordonnées d'un vecteur directeur de la rangée, avec \mathbf{u} , \mathbf{v} et \mathbf{w} entiers premiers entre eux. Un indice négatif se note avec une barre sur le nombre. Si certains indices sont supérieurs à 9, on intercale des virgules.

Dans le réseau de la chalcopyrite, donner les indices et les vecteurs paramétriques des rangées correspondant aux arêtes de la maille, aux diagonales des faces de la maille, aux diagonales de la maille.

3-2 PLANS RÉTICULAIRES

Un plan réticulaire passe par trois nœuds. L'équation d'un plan réticulaire passant par l'origine du réseau a la forme :

$$hx + ky + lz = 0$$

Un nœud de coordonnées (p, q, r) appartient donc à ce plan si :

$$hp + kq + rz = 0$$

Les plans réticulaires parallèles à ce plan ont pour équation :

$$hp + kq + rz = t \quad (t \in \mathbf{Z})$$

Ces plans forment une famille de plans réticulaires

En précisant que l'un des deux plans réticulaires de cette famille, premiers voisins de celui passant par l'origine a pour équation :

$$hp + kq + rz = 1,$$

on peut démontrer que $(h, k, l) \in \mathbf{Z}^3$ et que les équations des plans successifs de la famille correspondent respectivement aux équations :

$$hp + kq + rz = t \text{ avec } t \text{ décrivant } \mathbf{Z}$$

Les entiers h , k et l sont appelés indices de Miller de la famille de plan, et sont notés (hkl) . On peut montrer que si la maille de référence est simple, c'est-à-dire possède un seul nœud en propre, h , k , et l sont premiers entre eux.

Dans le réseau de la chalcopyrite, donner les indices de Miller (hkl) des familles de plans orthogonaux aux vecteurs de base de la maille en vérifiant que le plan premier voisin de l'origine a effectivement pour équation $hp + kq + rz = 1$.

Même question pour les familles de plans parallèles aux plans diagonaux de la maille.

On considère la direction de rangée réticulaire $[uvw]$ et la famille de plans réticulaires (hkl) tels que le triplet (h, k, l) est proportionnel au triplet (u, v, w) . Cette direction est-elle toujours orthogonale à cette famille de plan ?

3.3 LE RÉSEAU RÉCIPROQUE

On détermine le réseau réciproque d'un réseau cristallin (appelé réseau direct) repéré par la base $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$ comme un réseau repéré par la base $(\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \mathbf{A}_3)$ dont les vecteurs \mathbf{A}_j vérifient :

$$\mathbf{A}_j \cdot \mathbf{a}_i = \delta_{ij}$$

(Attention, en réalité ces relations ne constituent pas une définition de principe du réseau réciproque !)

On en déduit les relations permettant d'exprimer $\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2,$ et \mathbf{A}_3 en fonction de $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2,$ et \mathbf{a}_3 :

$$\bar{\mathbf{A}}_1 = \frac{(\bar{a}_2 \wedge \bar{a}_3)}{(\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3)}, \bar{\mathbf{A}}_2 = \frac{(\bar{a}_3 \wedge \bar{a}_1)}{(\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3)}, \bar{\mathbf{A}}_3 = \frac{(\bar{a}_1 \wedge \bar{a}_2)}{(\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3)}$$

Que représente le produit mixte qui apparaît dans ces expressions ?

$(\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \mathbf{A}_3)$ est appelée la base réciproque de $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$

Déterminer la base réciproque de la base choisie pour la chalcopyrite en précisant la direction de chacun des vecteurs $\mathbf{A}, \mathbf{B},$ et \mathbf{C} dans la base $(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c})$ ainsi que leur module.

Les modules de $\mathbf{a}, \mathbf{b},$ et \mathbf{c} correspondant aux paramètres de la maille, on les exprime en Å (Ångström). Quelle unité doit-on utiliser pour les modules de $\mathbf{A}, \mathbf{B},$ et \mathbf{C} ?

Cette base réciproque permet donc de construire un nouveau réseau (le réseau réciproque) constitué de nœuds. Un vecteur du réseau réciproque se note $[\mathbf{uvw}]^*$.

On peut de la même manière que précédemment construire la base réciproque de la base réciproque.

Construire la base $(\mathbf{a}^{**}, \mathbf{b}^{**}, \mathbf{c}^{**})$ réciproque de la base réciproque de la chalcopyrite. Comparer le réseau que l'on construit à partir de cette dernière base, avec le réseau direct de la chalcopyrite. Discuter...

Un vecteur $[\mathbf{uvw}]$ qui appartient au plan vectoriel $\bar{\mathbf{P}}$ parallèle à la famille de plans réticulaires (\mathbf{hkl}) , vérifie :

$$h\mathbf{u} + k\mathbf{v} + l\mathbf{z} = 0$$

Cette équation s'écrit :

$$[\mathbf{hkl}]^* \cdot [\mathbf{uvw}] = 0$$

On en déduit que le vecteur du réseau réciproque $[\mathbf{hkl}]^*$ est orthogonal à la famille de plan (\mathbf{hkl}) du réseau direct.

Le réseau réciproque étant construit sur la base $(\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C})$, le vecteur \mathbf{A} est un vecteur de ce réseau qui se note $[\mathbf{100}]^*$. Quels sont les indices de la famille de plans du réseau direct orthogonaux à ce vecteur ?

Même question pour le vecteur $[\mathbf{220}]^* = 2(\mathbf{A}+\mathbf{B})$.

3.4 DISTANCES INTERRÉTICULAIRES

Deux nœuds possédant, par définition, le même paysage orienté, la distance entre deux plans réticulaires d'une même famille (\mathbf{hkl}) est une constante appelée distance interréticulaire des plans (\mathbf{hkl}) et notée $d_{\mathbf{hkl}}$.

Calculer géométriquement $d_{\mathbf{110}}$ et $d_{\mathbf{200}}$.

On montre aisément que :

$$d_{\mathbf{hkl}} = \|\llbracket \mathbf{hkl} \rrbracket^*\|^{\square 1}$$

Vérifier que $d_{\mathbf{200}} = \|\llbracket \mathbf{200} \rrbracket^*\|^{\square 1} = \frac{1}{2} \|\llbracket \mathbf{100} \rrbracket^*\|^{\square 1}$

Le calcul géométrique de $d_{\mathbf{222}}$ est-il facile? Qu'en est-il du calcul de $\|\llbracket \mathbf{222} \rrbracket^*\|^{\square 1}$?

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

K.D. Phan : Cours de Minéralogie, École des Mines de Paris (1990)

K.D. Phan, P.Podvin : Cristallographie Géométrique, Travaux dirigés, et travaux pratiques, École des Mines de Paris, Direction des Études, cours TC2332 (1995-1999)

D. Fargue, J.P. Hénon, K.D. Phan : Cours de Cristallographie, Diffraction des rayonnements par les cristaux, École des Mines de Paris, Direction des Études, cours TC2332 (1996)

FIGURES

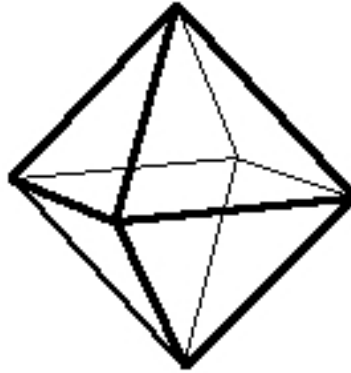


Figure 2-1 : Forme de croissance du carbone diamant en octaèdre régulier

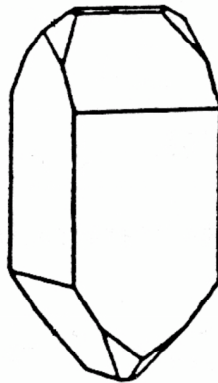


Figure 2-2 : Forme de croissance de la chalcopyrite

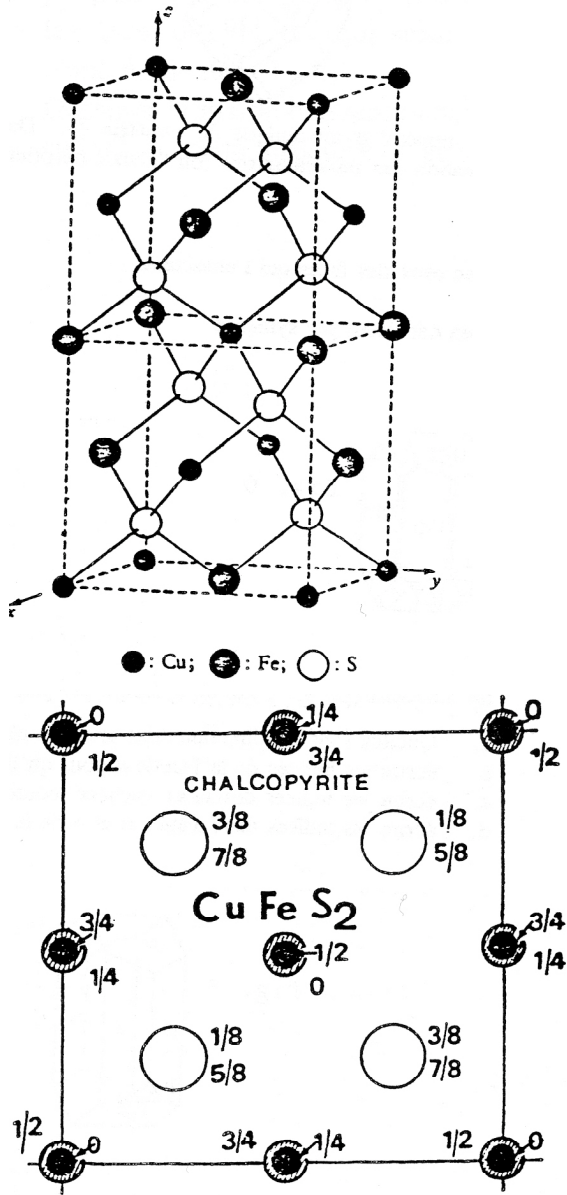
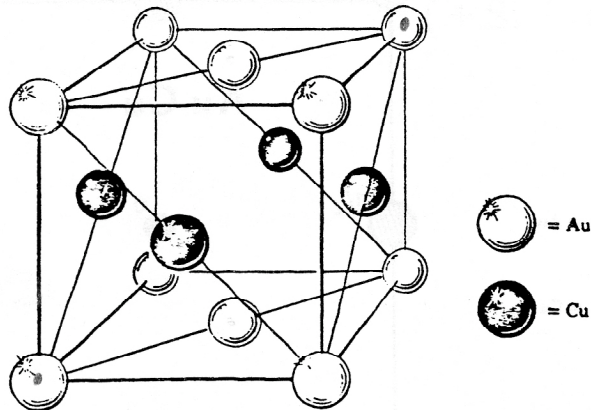
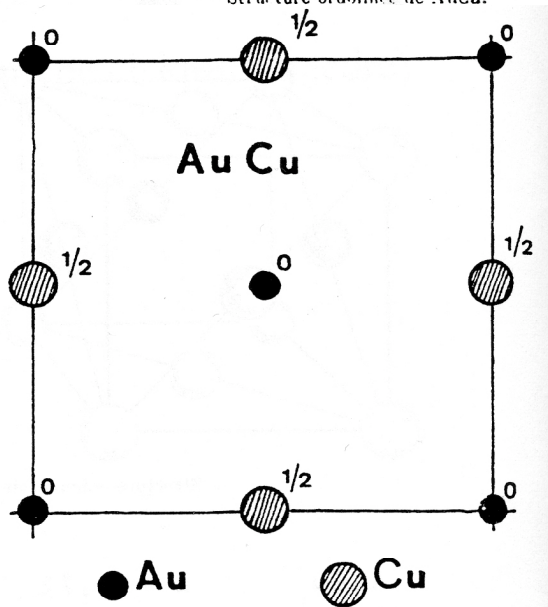


Figure 2-3 : Structure de la chalcopyrite, perspective et projection cotée.

$$a = b = 5,25 \text{ \AA}, c = 10,32 \text{ \AA}$$



— Structure ordonnée de AuCu.

Figure 2-4 : Structure de TiAl: perspective et projection cotée. $a = 3,72\text{\AA}$

(remarquer qu'il y a inversion dans les symboles des atomes entre les deux figures)