



Fig. 1: Cristaux de C diamant

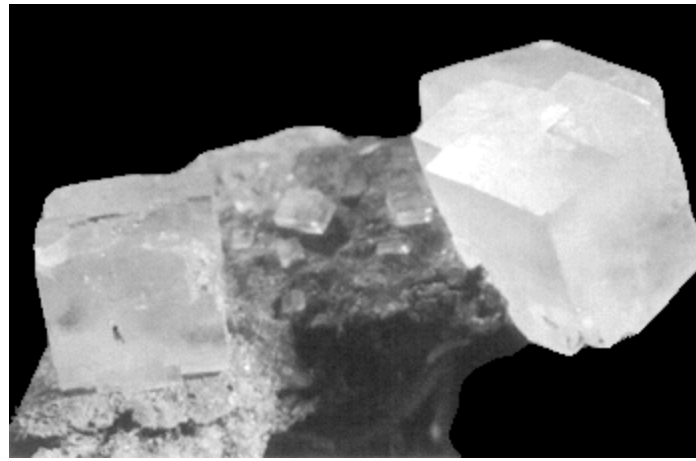


Fig. 2: Cristaux de NaCl

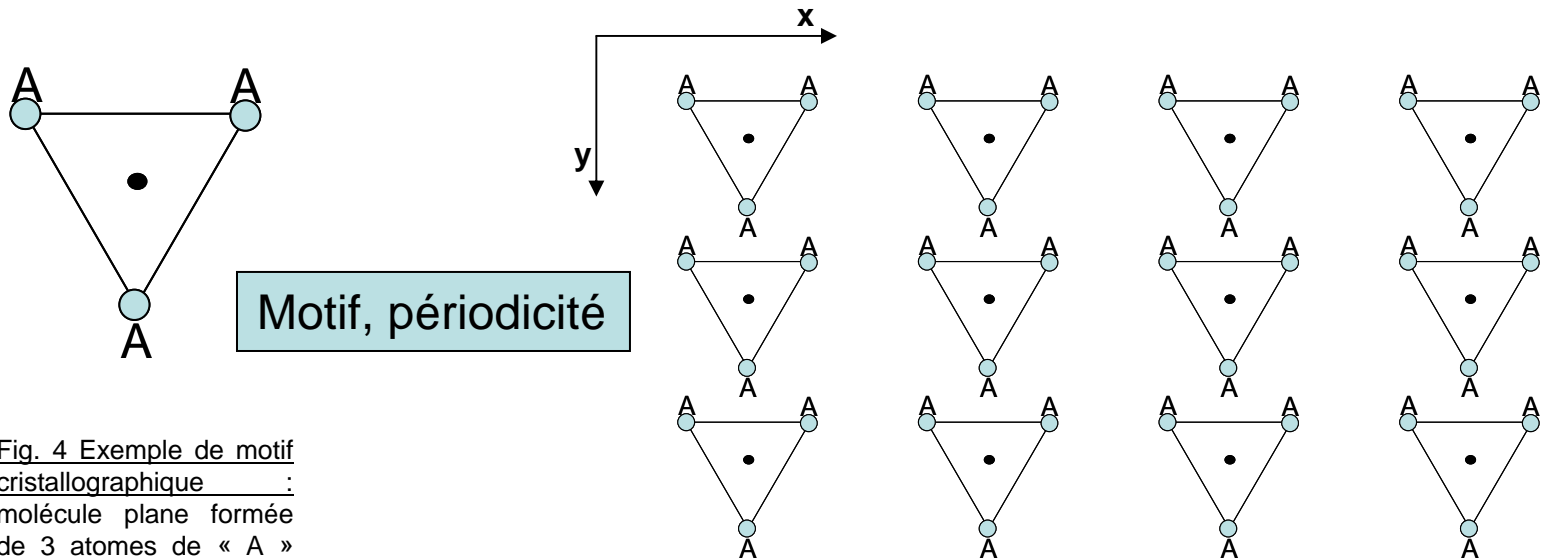
Fig. 3: Cristal de H<sub>2</sub>O

Fig. 4 Exemple de motif cristallographique : molécule plane formée de 3 atomes de « A » (centre de gravité représenté)

Fig. 5: Répétition du motif cristallographique suivant deux directions de l'espace (x,y)

# Notions de Cristallographie

(illustrations en relation avec le cours)

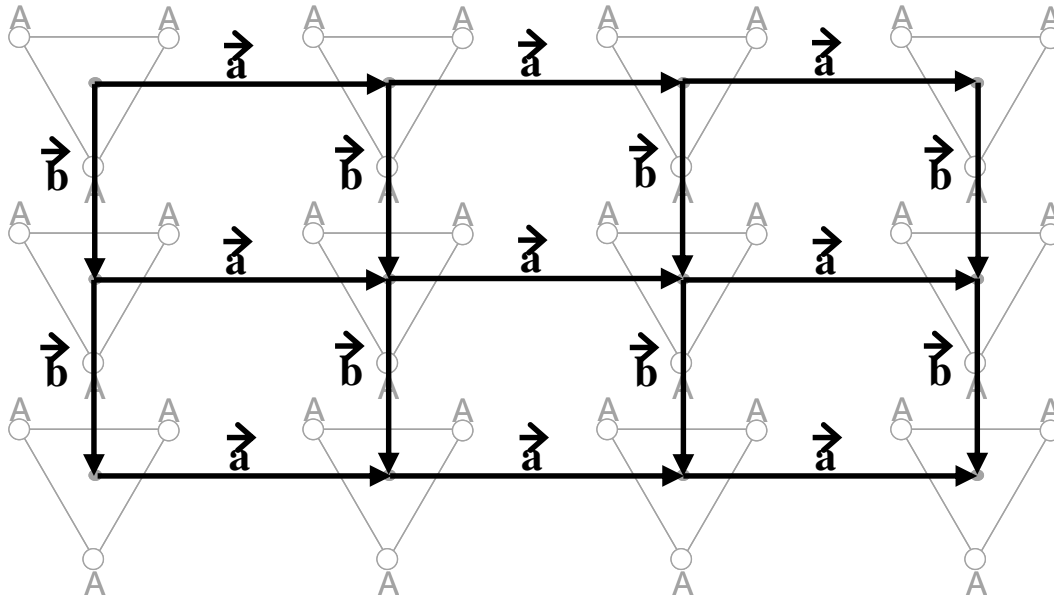
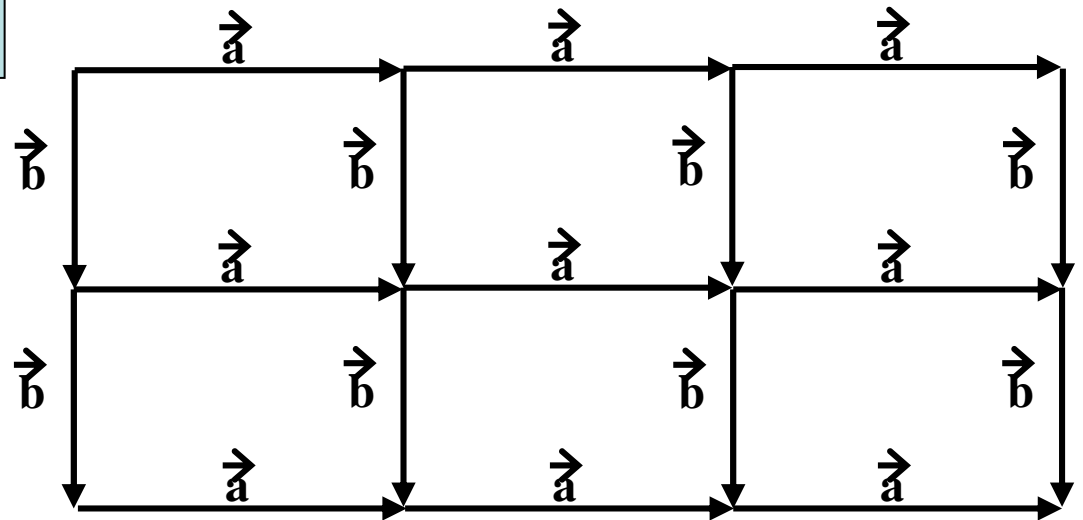


Fig. 6 Réseau : mise en évidence des translations élémentaires .

Translations, réseau

Fig. 7 : réseau bidimensionnel défini par les centres de gravités (cf figure 6).



# Notions de Cristallographie

(illustrations en relation avec le cours)

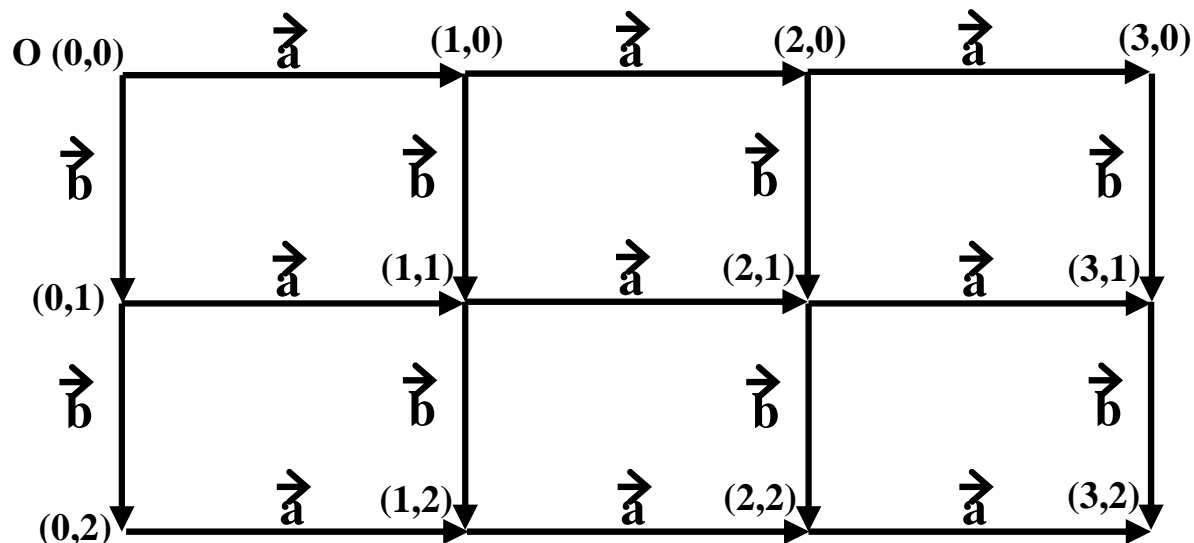
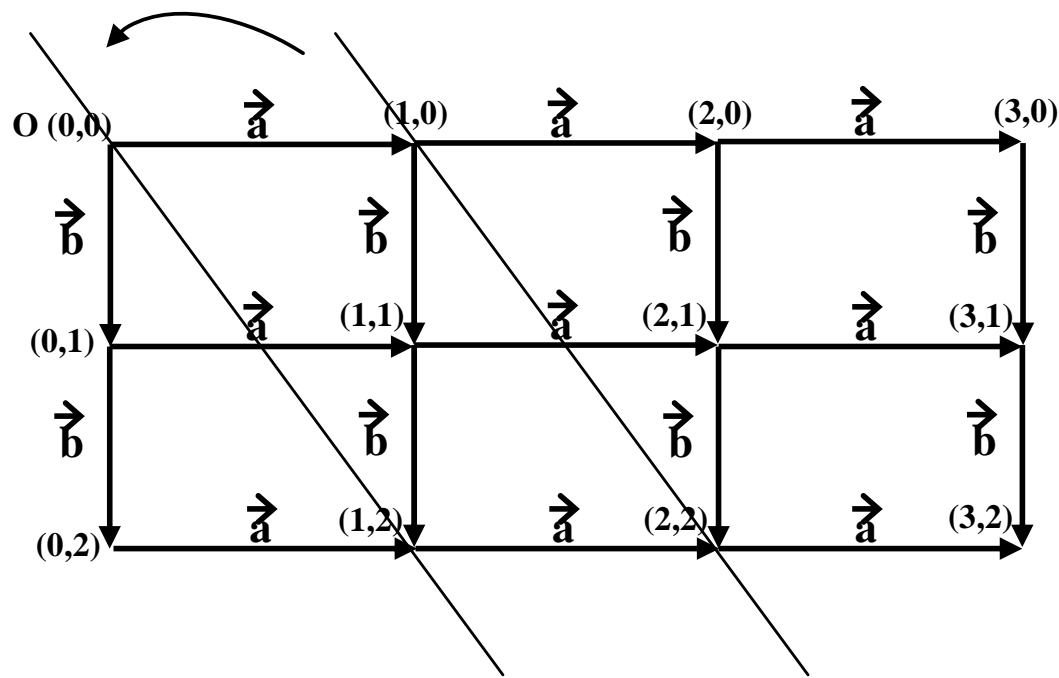


Fig. 8 : réseau bidimensionnel dans lequel les nœuds du réseau sont repérés par leur coordonnées par rapport à l'origine  $O$ , fixée arbitrairement.

Noeuds, rangées

Fig. 9 : rangées  $[1,2]$  dans le réseau bidimensionnel défini précédemment (pour l'indexation, on considère la rangée passant par le nœud origine).



# Notions de Cristallographie

(illustrations en relation avec le cours)

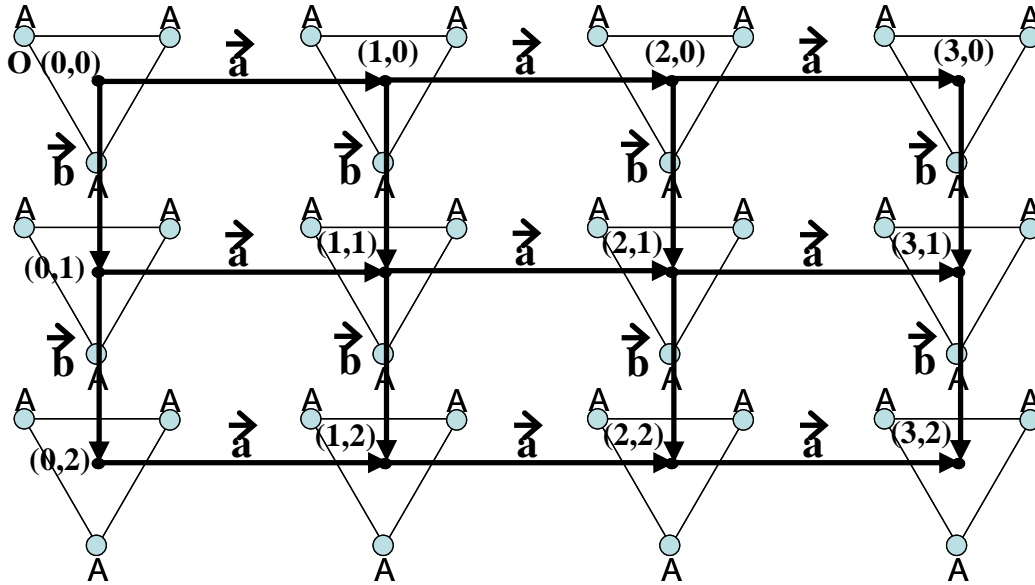
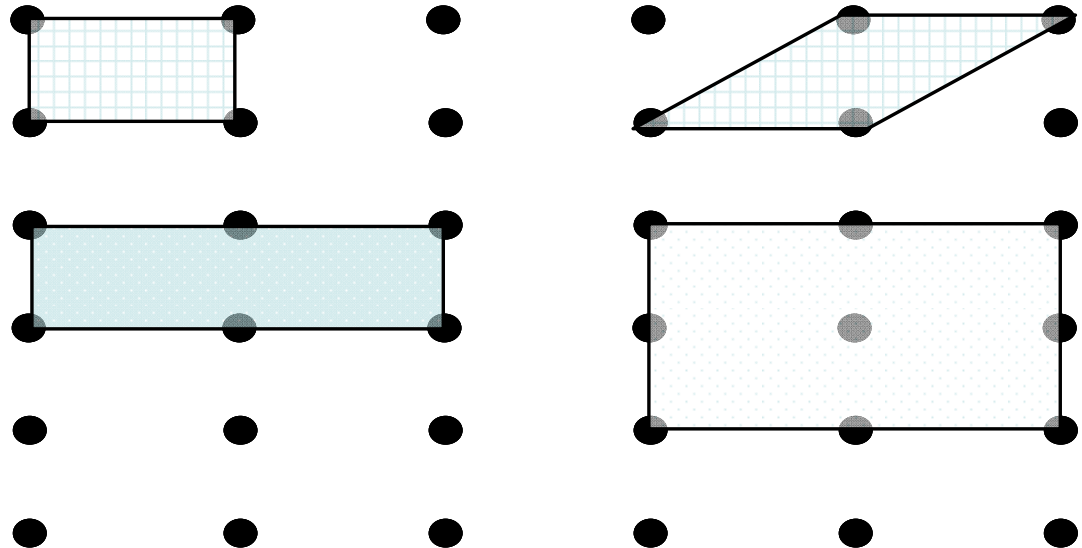


Fig. 10 : Reconstruction du cristal 2D sur la base du réseau ponctuel.

Noeuds du réseau et positions atomiques, mailles

Fig. 11 : exemples de mailles simples (quadrillées) et multiples dans un réseau 2D.



# Notions de Cristallographie

(illustrations en relation avec le cours)

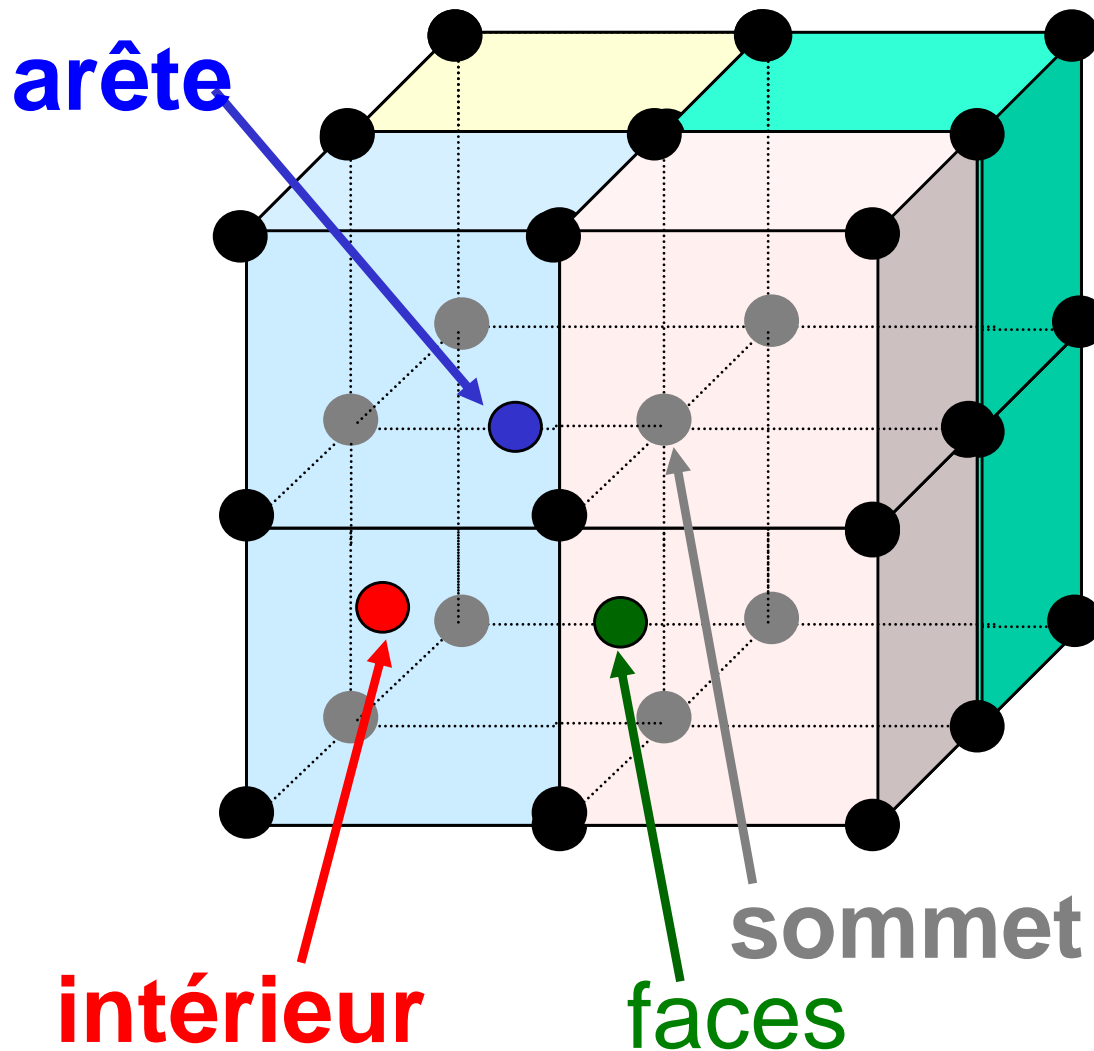


Fig. 12 : situations remarquables des nœuds du réseau concernant le calcul de la multiplicité (3D).

- Sommet :  $1/8$
- Arête :  $1/4$
- Face :  $1/2$
- Intérieur : 1

(schéma : Cours KHI202 Univ Bdx 1)

Décompte des noeuds  
du réseau / des atomes

# Notions de Cristallographie

(illustrations en relation avec le cours)

## Mode de réseau :

Dans certains cas, les positions des nœuds supplémentaires du réseau peuvent être aisément décrites à partir d'une ou plusieurs **translations supplémentaires**. Cela permet de définir des **modes de réseau**, en fonction des translations supplémentaires disponibles en sus des translations élémentaires du réseau.

<b>P (Primitif) :</b>	<b>aucune translation supplémentaire du mode de réseau</b>
<b>I (Centré) :</b>	<b>(1/2 1/2 1/2 )</b>
<b>F (Faces centrées) :</b>	<b>(1/2 1/2 0) (1/2 0 1/2) (0 1/2 1/2)</b>
<b>C (Bases centrées) :</b>	<b>(1/2 1/2 0)</b>

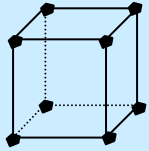
*Bien sûr, la définition suivante doit être respectée : « Toute translation associée à un point du cristal, un point équivalent par cette translation »*

*C'est-à-dire, à un atome (par exemple) auquel on applique une translation correspondra un autre atome de même nature chimique, qui aura un environnement identique.*

# Notions de Cristallographie

(illustrations en relation avec le cours)

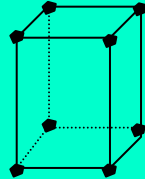
*cubique*



$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

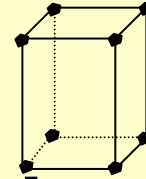
*quadratique*



$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

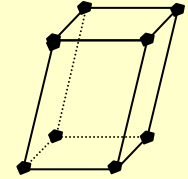
*orthorhombique*



$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

*monoclinique*



$$a \neq b \neq c$$

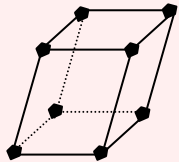
$$\alpha = \gamma = 90^\circ$$

$$\beta \neq 90^\circ$$

## Les systèmes cristallins :

Ils traduisent les relations existant entre les paramètres de maille et définissent la symétrie de base de la maille

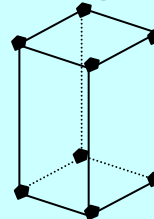
*rhomboédrique*



$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

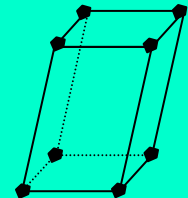
*hexagonal*



$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$$

*triclinique*



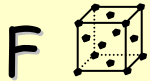
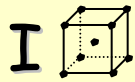
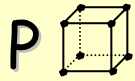
$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma$$

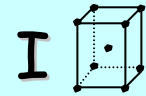
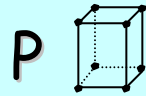
# Notions de Cristallographie

(illustrations en relation avec le cours)

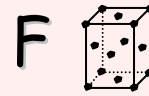
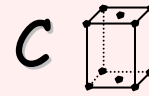
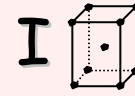
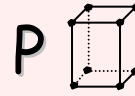
## Cubique



## Quadratique



## Orthorhombique



**Réseaux de Bravais :**  
 Combinaisons des  
 systèmes cristallins et  
 des modes de réseau

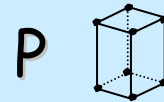
## Monoclinique



## Rhomboédrique



## Hexagonal



## Triclinique





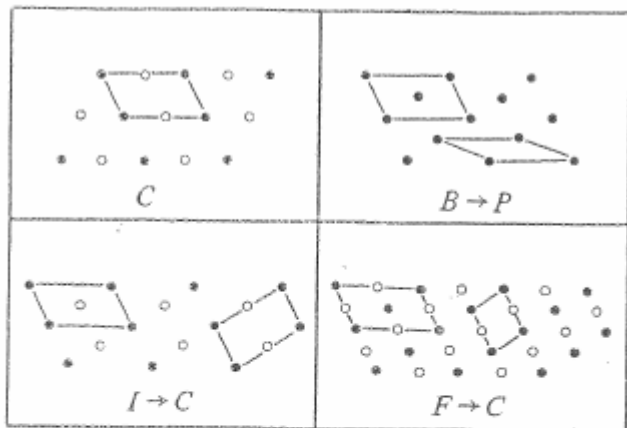


Fig. 1.39. Dans le système monoclinique, les modes I et F peuvent être transformés en C moyennant un autre choix des axes.

Les noeuds  $\circ$  sont à  $b/2$  au dessus du plan des noeuds  $\bullet$ .

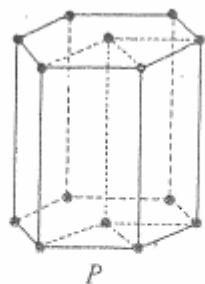


Fig. 1.45. Réseau du système hexagonal.

La maille unité est le tiers du prisme droit à base hexagonale, prisme dont la symétrie est  $6/mmm$ .

**Réseaux de Bravais :**  
Exemples de réseaux de Bravais interdits ou inutiles

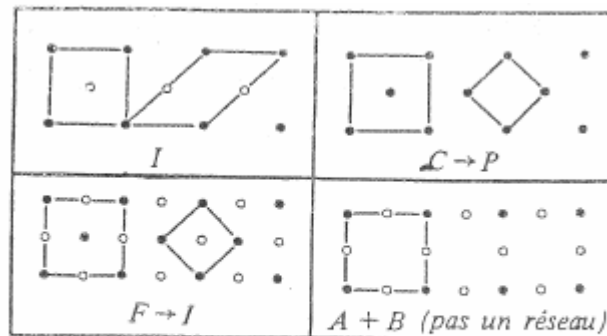


Fig. 1.44. Projections des noeuds des réseaux quadratiques.

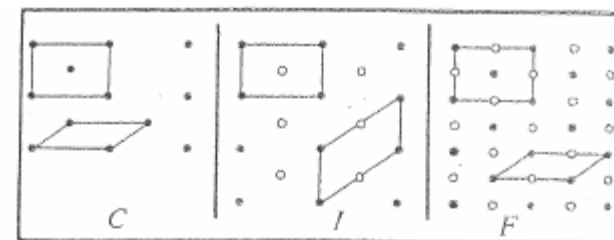


Fig. 1.41. Projections des noeuds des réseaux orthorhombiques.

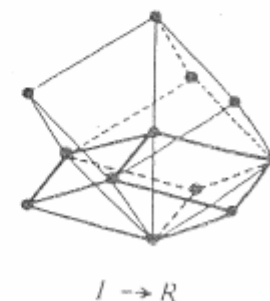
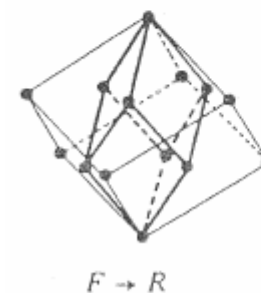
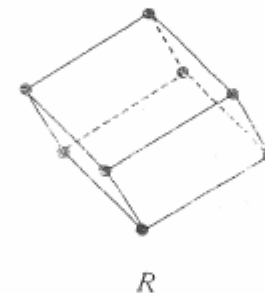
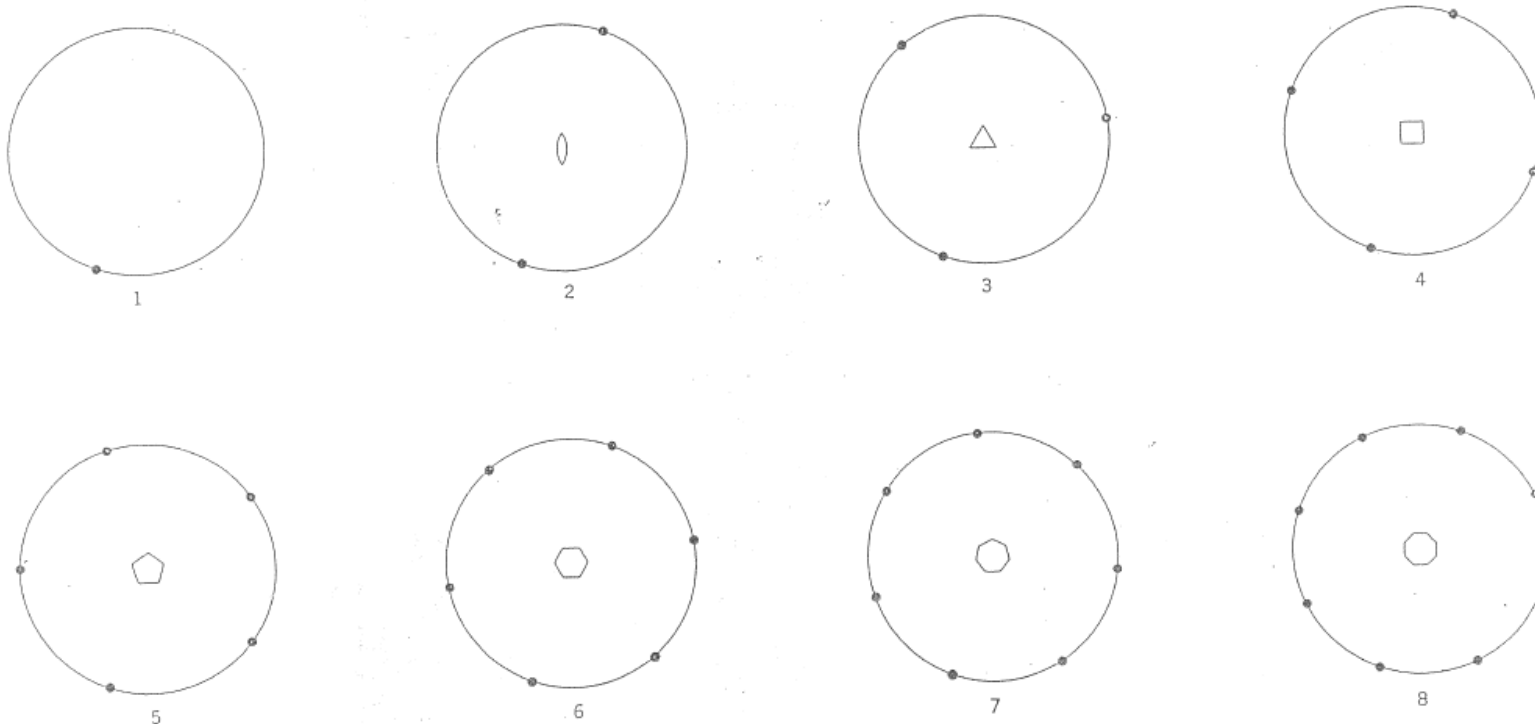


Fig. 1.42. Système rhomboédrique. Les modes F et I deviennent R par un choix convenable des axes.

## Symétrie :

Un élément de symétrie relie entre eux des points équivalents.

*Il existe des symétries de translation (du réseau, du mode de réseau) de rotation et de réflexion. Exemple des axes de rotation.*



Repetition produced by the operations of the proper rotation axes,  $n$ .

Axe propre  $C_n$   $n$ : ordre de l'axe, rotation  $\frac{2\pi}{n}$   
 ex.  $C_3 \Rightarrow$  rotation d'angle  $\frac{2\pi}{3}$   
 $n=3$

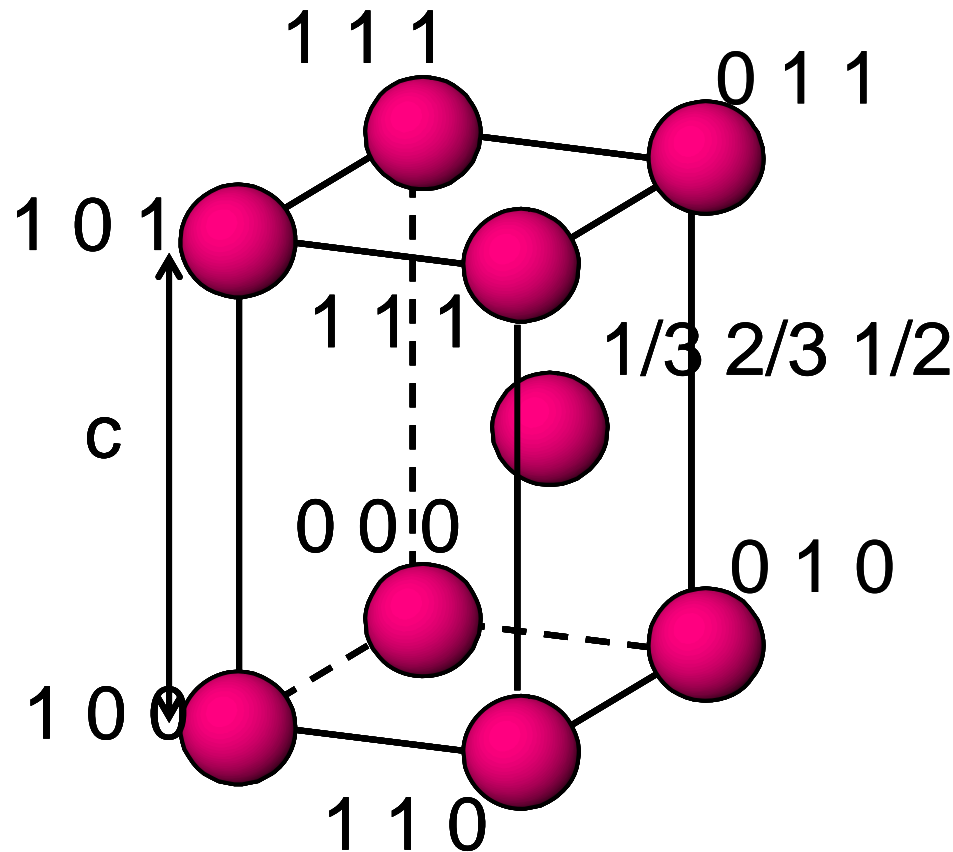
# Notions de Cristallographie

(illustrations en relation avec le cours)

## Notion d'atome cristallographiquement indépendant :

Les positions atomiques dans la maille élémentaire peuvent être reliées entre elles par des éléments de symétrie; on parle alors de positions équivalentes. L'atome occupant la position permettant de retrouver les autres par symétrie est désigné comme l'atome cristallographiquement indépendant.

*Dans le cadre de ce cours, on ne considéra pour cette définition que la symétrie de translation.*



## Réseau hexagonal compact :

*Deux atomes indépendants en  $(000)$  et  $(1/3, 2/3, 1/2)$*

*Position  $(000)$  + translation  $(100)$  → position équivalente  $(100)$*

*Position  $(000)$  + translation  $(010)$  → position équivalente  $(010)$*

*Position  $(000)$  + translation  $(001)$  → position équivalente  $(001)$*

*Pos.  $(000)$  + tr.  $(100)$  + tr.  $(010)$  → Pos. équiv.  $(110)$*

*Pos.  $(000)$  + tr.  $(100)$  + tr.  $(001)$  → Pos. équiv.  $(101)$*

*Pos.  $(000)$  + tr.  $(010)$  + tr.  $(001)$  → Pos. équiv.  $(011)$*

*Pos.  $(000)$  + tr.  $(100)$  + tr.  $(010)$  + tr.  $(001)$  → Pos. équiv.  $(111)$*

*Aucune translation ne permet de relier la position atomique  $(000)$  à la position atomique  $(1/3, 2/3, 1/2)$  → nécessité d'utiliser un second atome cristallographiquement indépendant en  $(1/3, 2/3, 1/2)$*

# Notions de Cristallographie

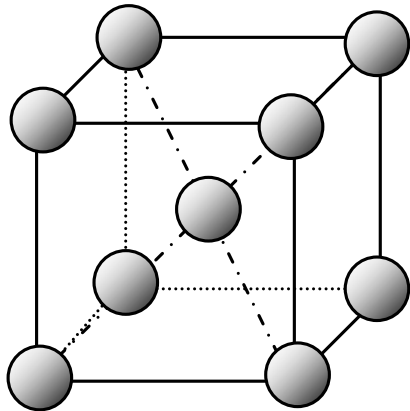
(illustrations en relation avec le cours)

## Notion de coordinence :

L'environnement d'un atome est décrit à l'aide de deux informations :

- la coordinence : c'est le nombre de premiers voisins, c'est-à-dire le nombre d'atomes à proximité immédiate de l'atome dont on évalue la coordinence.
- Le polyèdre de coordination : il s'agit de la figure géométrique formée par les premiers voisins de l'atome considéré (tétraèdre, octaèdre, cube...)

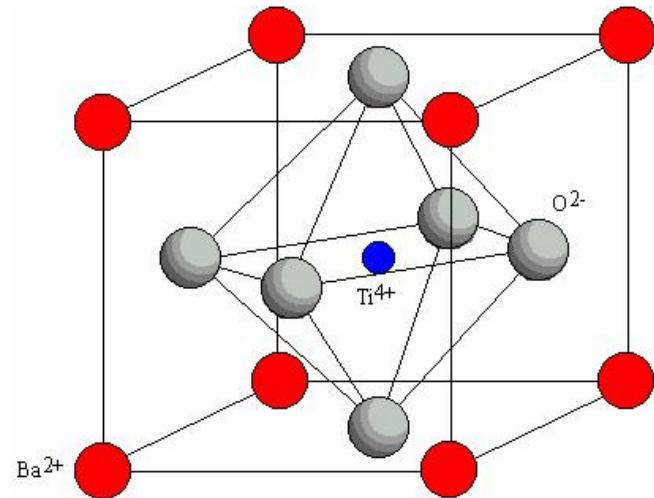
matériau formé  
d'un seul élément chimique



*Atome au centre de la maille  
Voisins : 8 atomes aux sommets*

*sa coordinence est 8, son  
polyèdre de coordination un cube*

matériau formé de  
plusieurs éléments chimiques



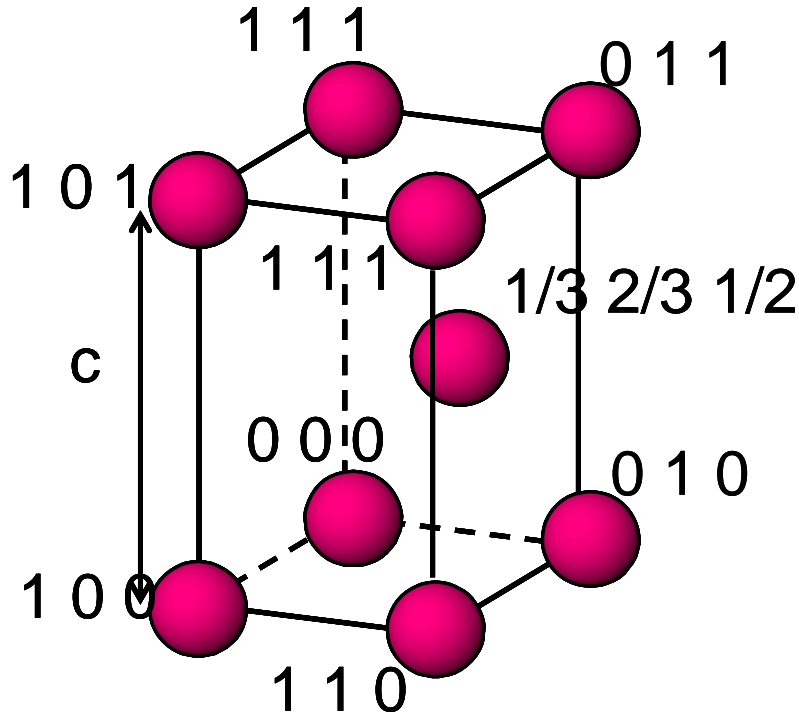
*$\text{Ti}^{4+}$  au centre de la maille  
Voisins : 6 ions  $\text{O}^{2-}$  aux centre des faces  
sa coordinence est 6, son polyèdre de  
coordination un octaèdre*

# Notions de Cristallographie

(illustrations en relation avec le cours)

## Z, Nombre d'unités formulaires par maille :

Attention, Z fait référence à la formule chimique du cristal, pas au nombre d'atomes contenus dans la maille.



### Structure cristalline du cobalt :

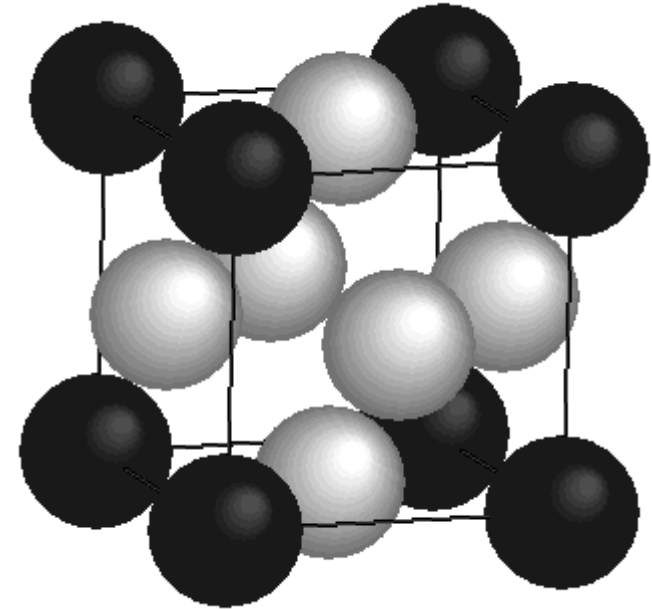
Cobalt aux sommets :  $8 \times 1/8 = 1$  Co/maille

Cobalt en  $(1/3 \ 2/3 \ 1/2)$  :  $1 \times 1 = 1$  Co/maille

Contenu de la maille :  $\text{Co}_2$

Formule chimique du cobalt : Co

Z = 2 unités formulaires Co / maille



### Structure cristalline d'un alliage Cu-Au:

Au aux sommets :  $8 \times 1/8 = 1$  Au/maille

Cu au centre des faces :  $6 \times 1/2 = 3$  Cu/maille

Contenu de la maille :  $\text{Cu}_3\text{Au}$

Formule chimique de l'alliage:  $\text{Cu}_3\text{Au}$

Z = 1 unité formulaire  $\text{Cu}_3\text{Au}$  / maille