

# **Chapitre 2 – Les Réseaux Cristallins**

# Introduction

➤ La matière solide → cohésion forte

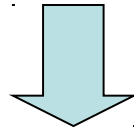
Un corps solide :

➤ n'occupera pas tout l'espace d'une pièce (comme le ferait un gaz)

➤ ne prendra la forme de son contenant (comme le ferait un liquide).

➤ C'est l'état de la matière la plus dense ← Existence d'attraction.

➤ La matière contrainte à occuper un minimum d'espace →  
adopte souvent des configurations régulières

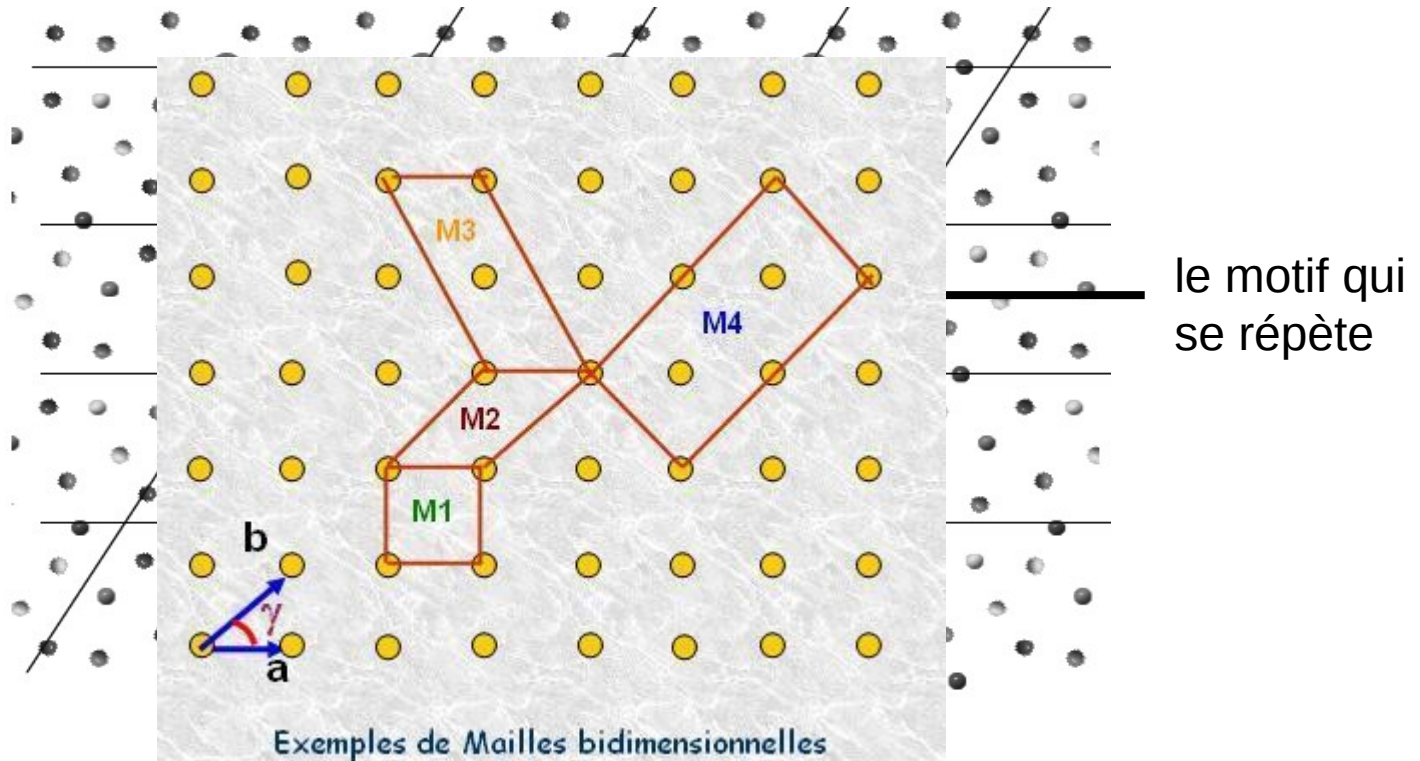


**ce sont les cristaux**

Les matériaux solides irréguliers sont appelés « **matériaux amorphes** ».

# 1. Concept de périodicité

Exemple 2D



- ensemble de points qui se répètent périodiquement dans le plan
- Un solide cristallin idéal est une répétition infinie d'unités structurales identiques dans l'espace.
- L'unité répétée peut être un atome simple ou un groupe d'atomes.

On peut donc décrire un cristal par un réseau périodique et une unité de base

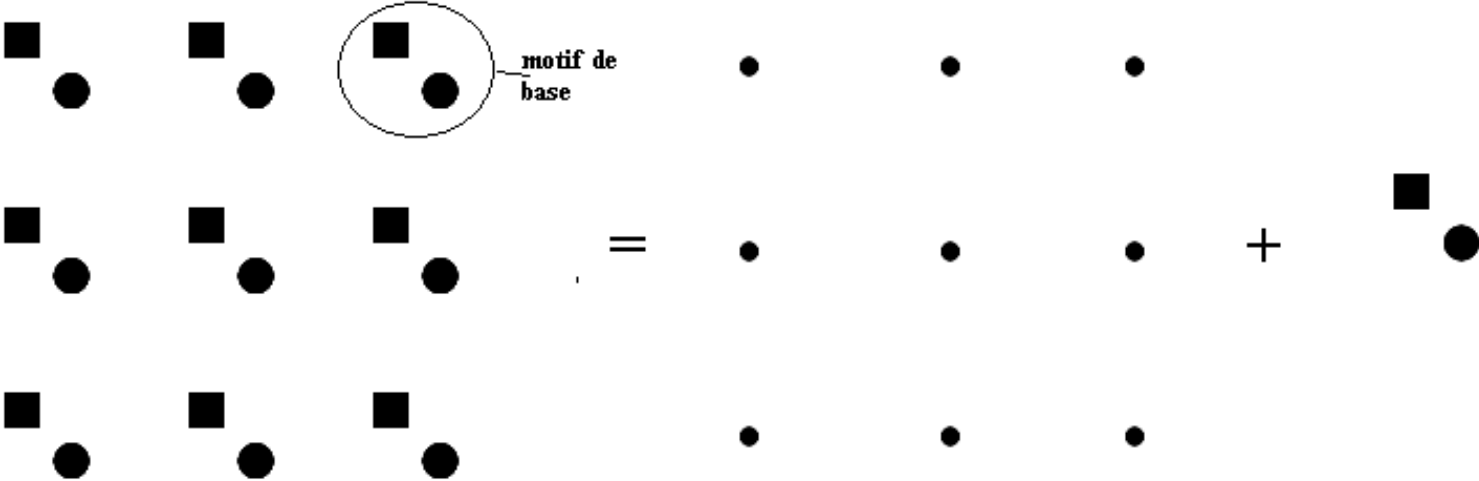
**structure cristalline**

=

**Réseau**

+

**base**



## 2. Approche descriptive de l'état solide

- Un solide cristallisé est un ensemble de particules réparties de façon périodique dans un empilement tridimensionnel infini.
- Cet arrangement définit le réseau cristallin.
- Un ensemble de maille forme le réseau cristallin de la structure du solide.

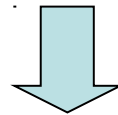
### Un Cristal monoatomique



- *Infini* : la distance entre deux atomes voisins est de quelques angströms ( $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$ )
- Dans un cristal de  $1 \mu\text{m}^3$ , il y a  $10^{12}$  atomes



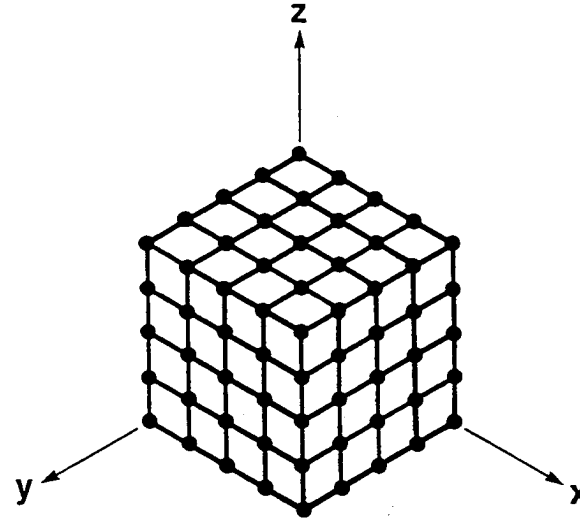
- *Régulier* : les atomes sont empilés de manière ordonnée, selon un schéma répétitif ou "réseau" (*lattice* en anglais).



**Périodicité + des symétries**

**Un réseau** est un ensemble de points, ou "noeuds", en 3 dimensions

Schéma à 3D

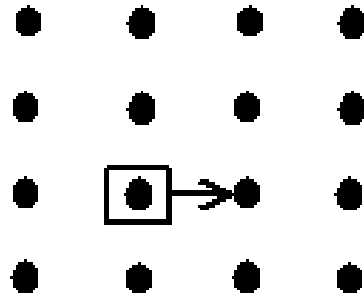


## ***Solide cristallin***

- \* *Symétrie*
- \* *Ordre à longue distance*
- \* *Arrangement régulier dans l'espace*
- \* *Conséquence* → *anisotropie*

## Invariance par translation

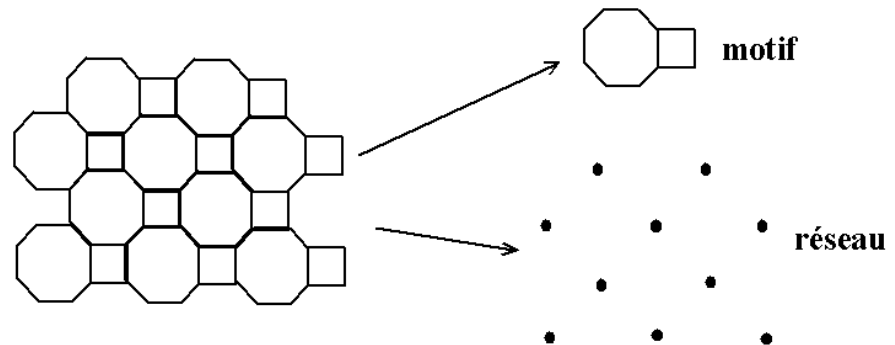
lorsque l'on se translate dans l'espace selon certains vecteurs, on retrouve exactement le même environnement. Il y a donc une périodicité spatiale.



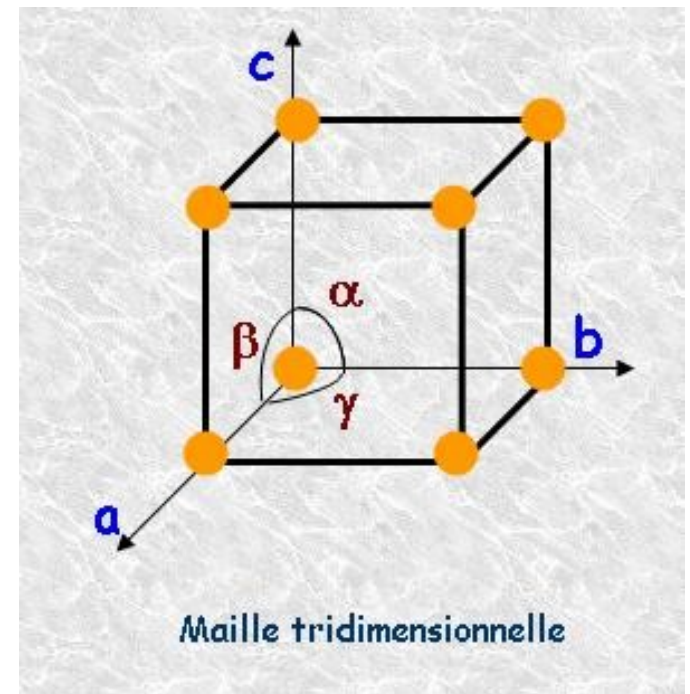
Le réseau est donc un objet mathématique descriptif

- A chaque noeud de ce réseau se trouve un "motif", c'est à dire un objet physique, souvent un atome.
- Le motif peut être une molécule simple ou complexe

*Illustration de la notion de motif et de réseau dans un carrelage*



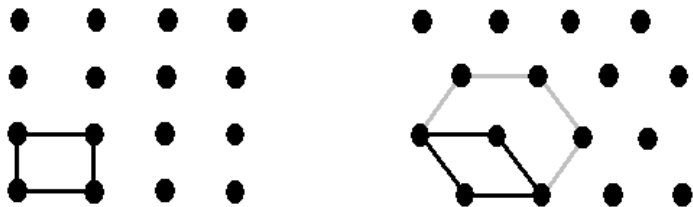
A 3 dimensions, la symétrie de translation d'un réseau est donnée par trois vecteurs



Ils sont choisis de deux manières :

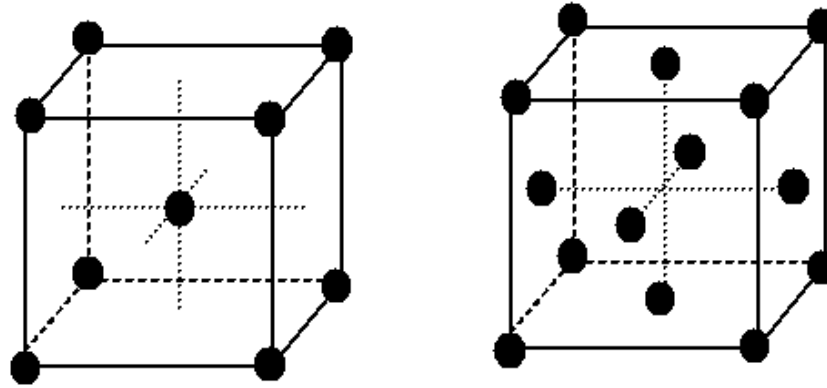
- Les plus petits vecteurs, ou
- Doivent correspondre à une maille de forte symétrie

Le réseau est un empilement de mailles élémentaires.

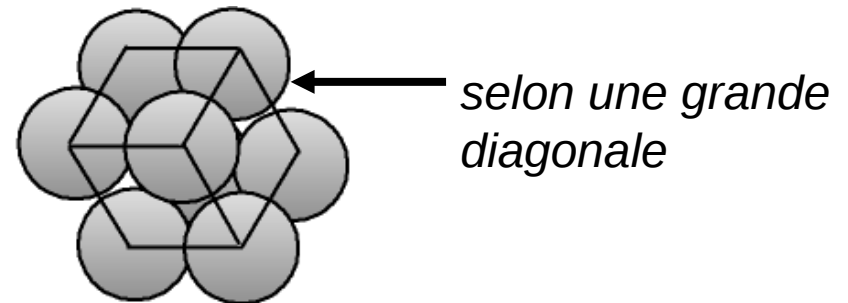
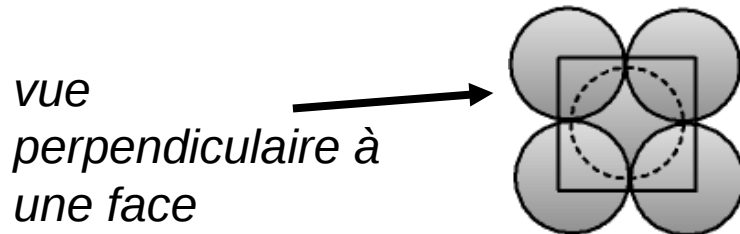




Les motifs sont donc situés aux noeuds du réseau : 8 sommets  
Cependant, parfois ils sont situés :  
au centre de la maille -- structure dite "centrée"  
aux centres des faces -- structure dite "à faces centrées".



*Modèle des sphères dures pour une structure cubique centrée*



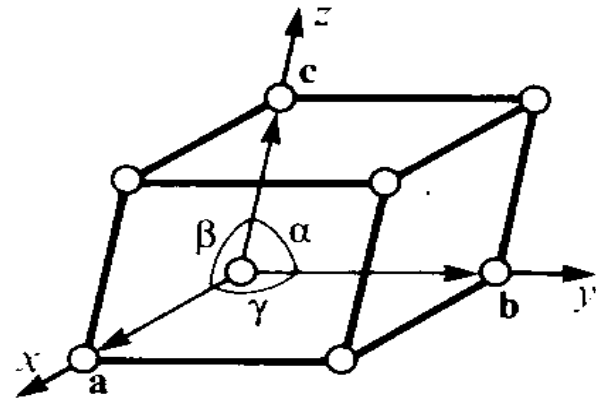
Pour des raisons de clarté, on les représente comme des petites billes

## 2.1 - Paramètres de maille

Dans le cas général, la plus petite entité correspondant à un parallélépipède, elle est défini par :

trois vecteurs non coplanaires  $\vec{a}, \vec{b}$  et  $\vec{c}$

trois angles  $\alpha, \beta$  et  $\gamma$ .



○ nœuds de la maille

Une particule  $\rightarrow$  un nœud

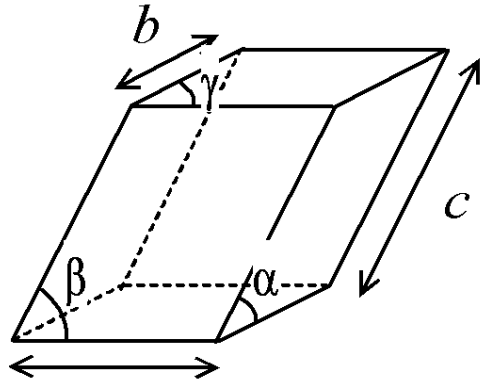


définie par  $x, y$  et  $z$ .

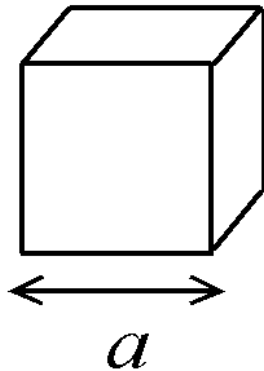
Le vecteur de translation s'écrit  $\vec{r} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$

Les  $n_i$  sont des entiers

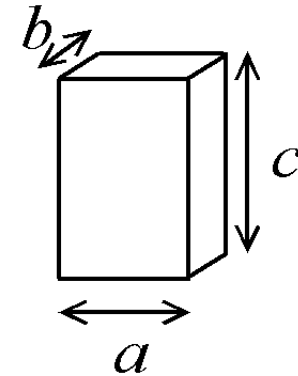
Dans le cas le plus complexe, le réseau **triclinique**, on a 6 paramètres : trois dimensions  $a$ ,  $b$  et  $c$ , et trois angles  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$



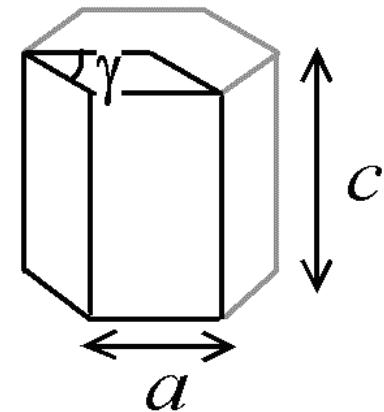
**cubique**, un seul paramètre de maille,  $a$



**orthorhombique**, on n'en cite que trois,  $a$ ,  $b$  et  $c$



**hexagonal**, on en cite également trois,  $a$ ,  $c$  et  $\gamma=120^\circ$

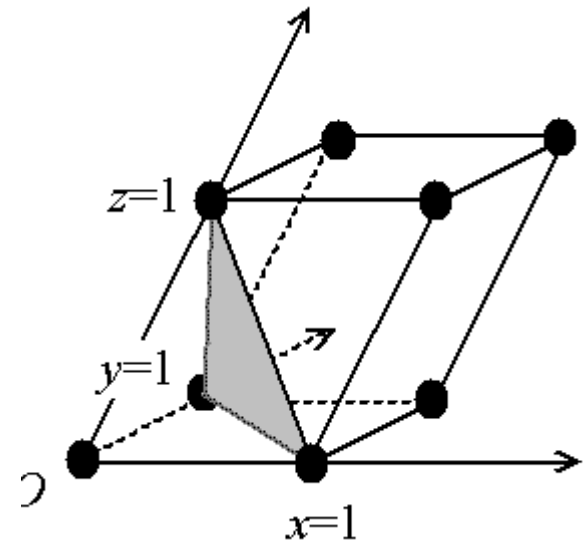


## 2.2 - Plans nodaux (plans atomiques) et indices de Miller

*Définition :*

on appelle un **plan nodal** l'ensemble des noeuds situés sur un plan de l'espace.

Étant donné que la plupart des motifs étudiés sont des atomes uniques, on parle souvent de "plan atomique".



Cette orientation est donnée par trois nombres entiers mis entre parenthèse, dits "indices de Miller", et traditionnellement appelés  $h$ ,  $k$  et  $l$  ; on parle ainsi de plans (100), (110)...

Il faut d'abord définir une base vectorielle liée au réseau

En général, la base est quelconque, c'est à dire ni orthogonale, ni normée sauf pour les systèmes cubiques.

L'orientation d'un plan est décrite, comme en mathématiques, par la donnée de son vecteur normal.

- Dans le cas d'un réseau cubique, ce vecteur est perpendiculaire au plan.
- Dans le cas d'un réseau quelconque, il n'est plus perpendiculaire au sens "angle droit",
- Ce sont les coordonnées de ce vecteur qui forment les indices de Miller.
- Pour les valeurs négatives, on place une barre au dessus de l'indice

$$(-1,1,2) \longrightarrow (\bar{1} 1,2)$$

- il y a une infinité de plans parallèles entre eux.
- La distance qui sépare deux plans parallèles voisins est appelée "distance inter-réticulaire", et est notée  $d_{hkl}$ .
- On remarque que plus les indices de Miller sont élevés, plus les plans sont proches (plus  $d_{hkl}$  est petit).

## 2.3 - Calculs sur les mailles

La longueur de l'arrête dépend du rayon des atomes (puisque ceux-ci s touchent). On peut donc calculer la masse d'une maille, en fonction du nombre et de la nature des atomes qu'elle contient, et son volume : ceci donne accès à la masse volumique de la matière.

L'écart entre la masse volumique mesurée et la valeur théorique permet de savoir s'il y a des défauts, comme des "bulles" provoquant des gonflements, des atomes étrangers (plus légers ou plus lourds)...

### Compacité :

la compacité est le rapport entre le volume occupé par les atomes et le volume d'une maille. Elle est donc toujours inférieure à 1.

$$\text{Compacité} = \frac{\text{Volume occupé par les atomes dans une maille}}{\text{Volume total de une maille}}$$

Si l'on comprime un cristal, les atomes ont moins de place, donc il peut prendre une structure plus compacte

### 3. Réseaux de Bravais

Tous les réseaux cristallins peuvent être décrits à partir de 7 mailles élémentaires qui définissent les 7 systèmes cristallins

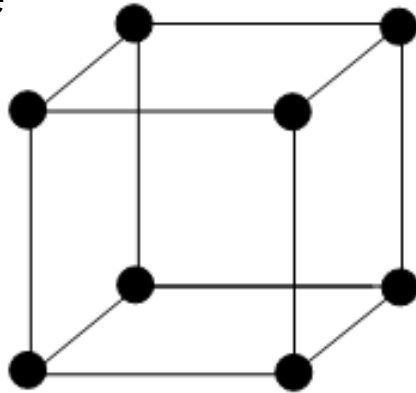
Système	(a, b et c) et ( $\alpha$ , $\beta$ et $\gamma$ )
Triclinique	$a \neq b \neq c$ ; $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
Monoclinique	$a \neq b \neq c$ ; $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$
Orthorhombique	$a \neq b \neq c$ ; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Quadratique	$a = b \neq c$ ; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Hexagonale	$a = b \neq c$ ; $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120$
Rhomboédrique	$a = b = c$ ; $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Cubique	$a = b = c$ ; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

En plus Il y a deux sortes de mailles, simple et multiple

- Une maille simple contient seulement des nœuds aux sommets de la maille.
- Une maille multiple en contient aux centres des faces et/ou au milieu.

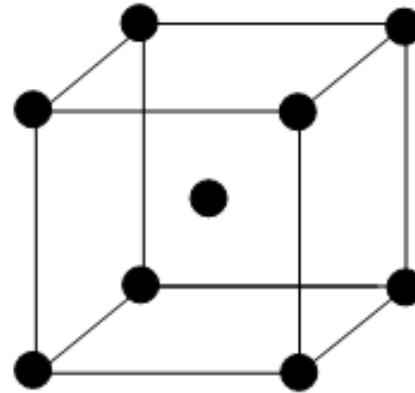
# Différents types de mailles

Simple



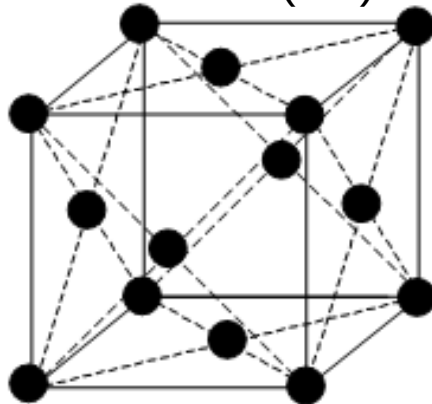
Mode P

au centre de la maille (C)



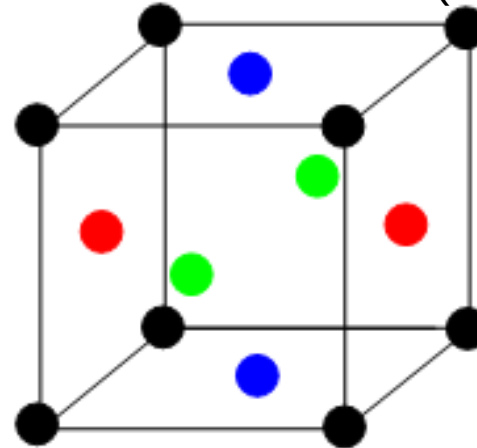
Mode I

au centre des faces (FC)



Mode F

au centre des bases (BC)



Mode A, B et C

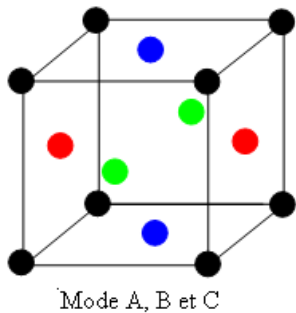


Trois remarques se dégagent :

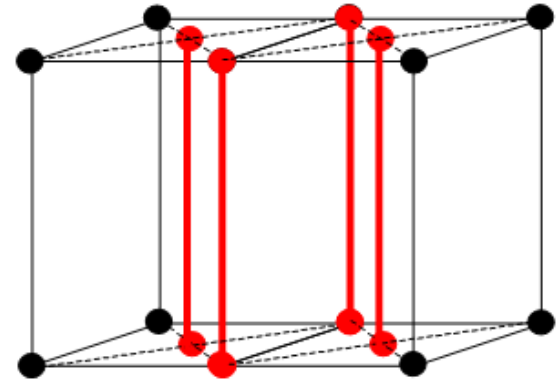
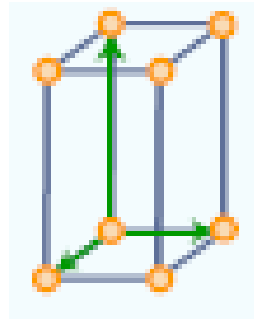
- Les systèmes cristallins ne dépassent jamais 4 modes de réseaux
- Tous les systèmes possèdent le mode P
- Si on essaie de rajouter des modes supplémentaires, on retrouve toujours les modes de départ

**Exemple:**

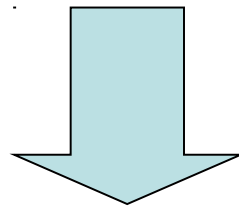
Si on essaie de rajouter le mode c pour le quadratique on retrouve le mode P



+

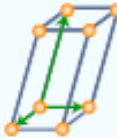

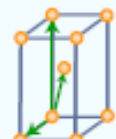
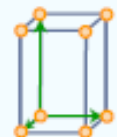
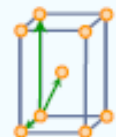
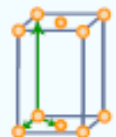
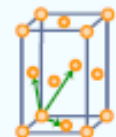

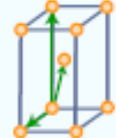


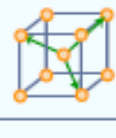




Si on combine les différents 7 systèmes cristallins avec les 4 modes des mailles  
On obtient ce que l'on appelle 14 réseaux de Bravais



## 4 Lattice Types

7 Crystal Classes

Bravais Lattice	Parameters	Simple (P)	Volume Centered (I)	Base Centered (C)	Face Centered (F)
Triclinic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} \neq \alpha_{23} \neq \alpha_{31}$				
Monoclinic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$ $\alpha_{12} \neq 90^\circ$				
Orthorhombic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
Tetragonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
Trigonal	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} < 120^\circ$				
Cubic	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
Hexagonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = 120^\circ$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				

## 4. Détermination Indices de Miller

Considérons une maille élémentaire munie de son repère

le plan d'orientation  $(hkl)$  le plus proche de l'origine mais ne passant pas par l'origine, coupe l'axe des  $x$  en  $1/h$ , l'axe des  $y$  en  $1/k$ , l'axe des  $z$  en  $1/l$ ,

si l'un des indices est nul, alors le plan est parallèle à l'axe, avec la convention :

$$\frac{1}{0} = \infty$$

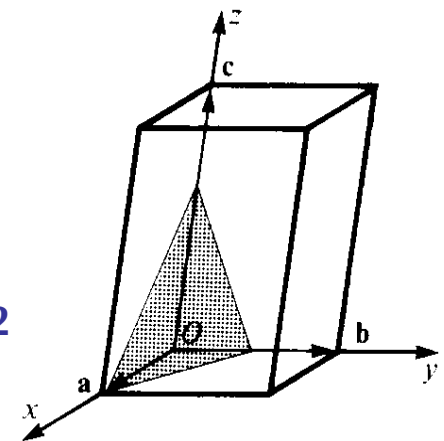
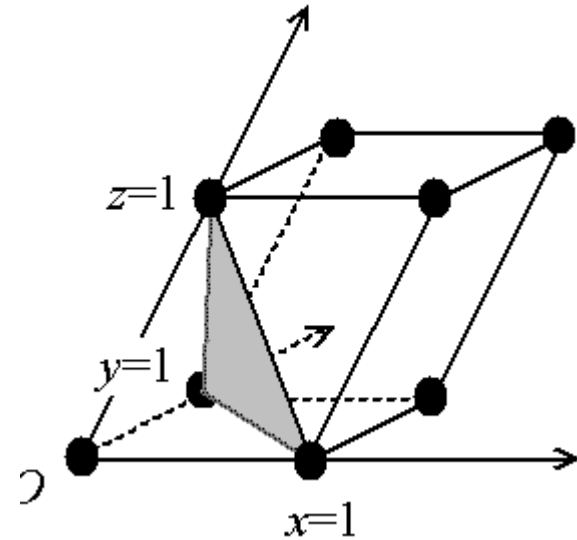
- 1- déterminer les points d'intersection l'origine des 3 axes ne doit pas être dans le plan)
- 2- prendre les inverses
- 3- réduire les 3 fractions au plus petit commun dénominateur
- 4- prendre les numérateurs

$$1, 1/2, 2/3$$

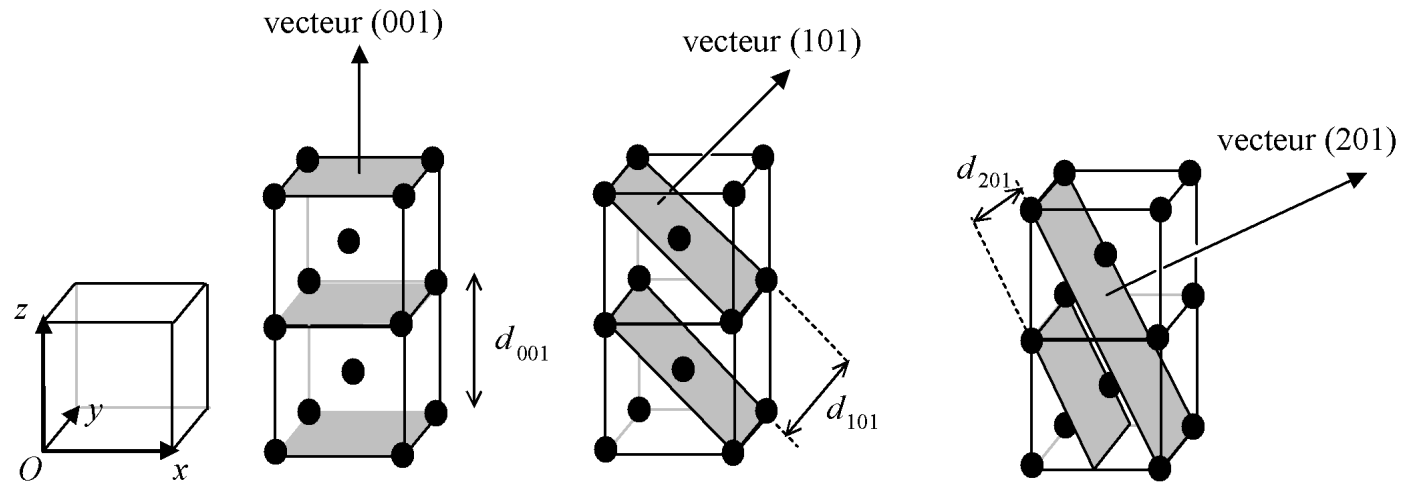
$$1, 2, 3/2$$

$$2/2, 4/2, 3/2$$

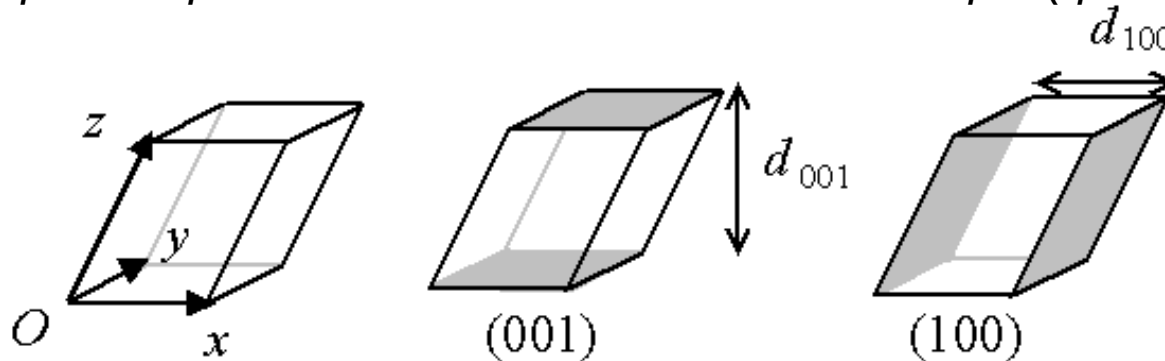
$$2, 4, 3$$



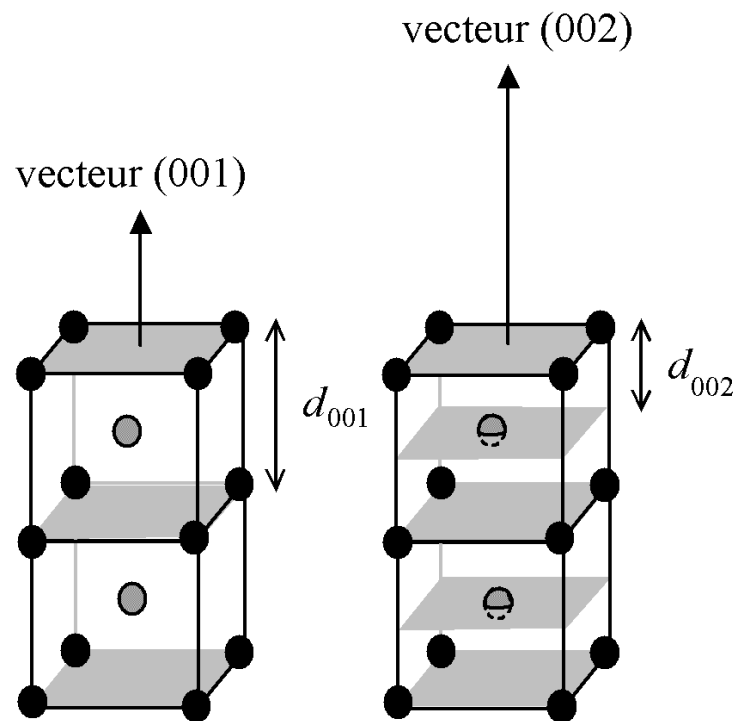
# Plans nodaux, vecteurs normaux et distance inter-réticulaire dans un réseau cubique



## Exemples de plans nodaux dans un réseau triclinique (quelconque)



Dans le cas où il y a des noeuds au centre des mailles ou des faces, il peut y avoir des "sous-plans" d'indices supérieurs



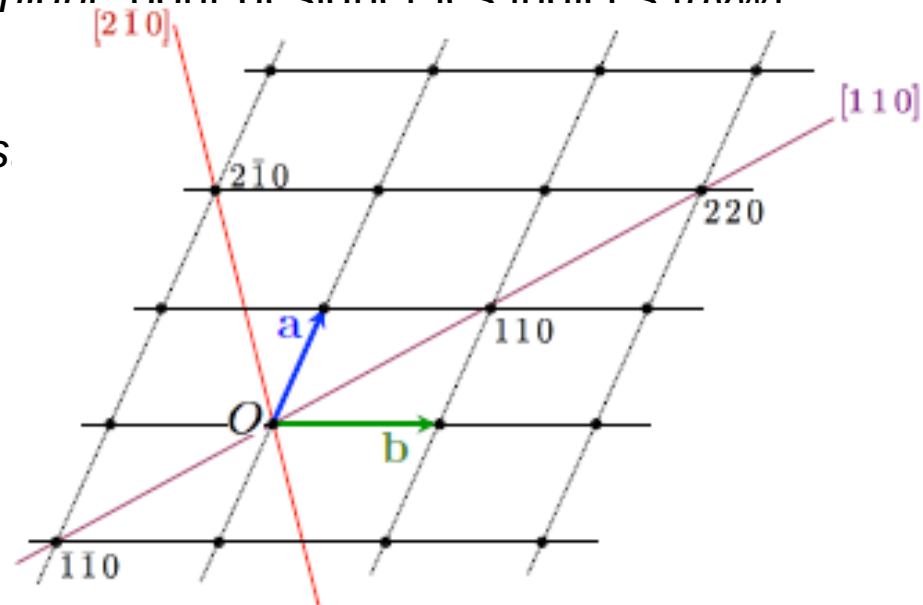
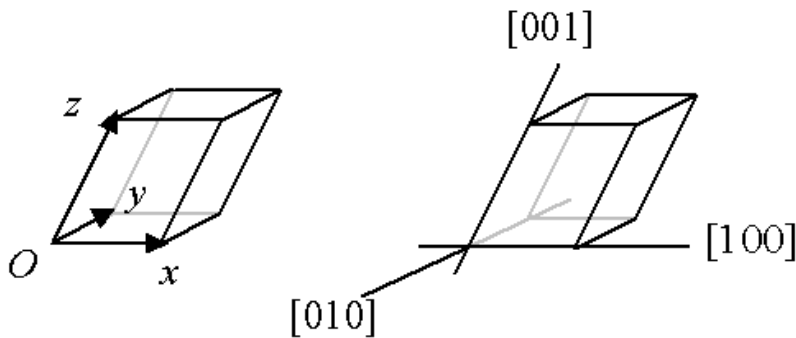
## 5. Rangées nodales

*Définition :*

On appelle **rangée nodale** une droite de l'espace passant par des noeuds du cristal.

- De même que pour les plans nodaux, on parle souvent de "rangées atomiques".
- Les indices de Miller d'une rangée sont notés entre crochets  $[uvw]$ .
- $u$ ,  $v$  et  $w$  sont des entiers qui sont les composantes d'un vecteur de la droite,
- Les nombres négatifs étant notés avec une barre au-dessus.
- On parle aussi de *direction cristallographique* pour désigner les indices  $[uvw]$

Indice de Miller de quelques directions cris



## 6. Cas des structures cubiques

Dans le cas des structures cubiques, on peut appliquer toutes les relations classiques de la géométrie et de la trigonométrie

la distance inter-réticulaire : 
$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$
 où  $a$  est le paramètre de la maille.

De plus, d'après les symétries des structures cubiques, on voit que les plans (100), (010) et (001) sont équivalents.

Plans

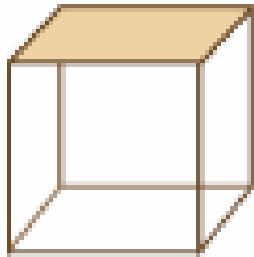
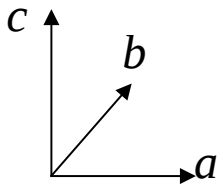
*Famille*  $\{110\}$   $\Rightarrow$  (110),  $(\bar{1}10)$ , (101),  $(\bar{1}01)$ , (011) et  $(0\bar{1}1)$

Directions :

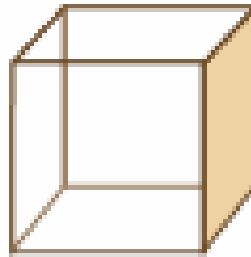
*Famille*  $\langle 110 \rangle$   $\Rightarrow$  [110],  $[\bar{1}10]$ , [101],  $[\bar{1}01]$ , [011] et  $[0\bar{1}1]$

Mais ceci n'est malheureusement valable que pour les réseaux cubiques...

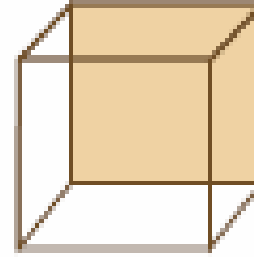
**Exercice 1 :** Déterminez les indices de Miller des plans suivants:



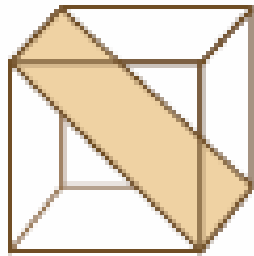
(001)



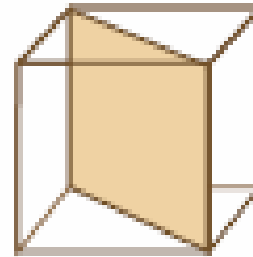
(100)



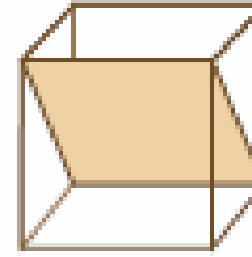
(010)



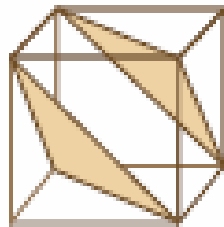
(101)



(110)



(011)

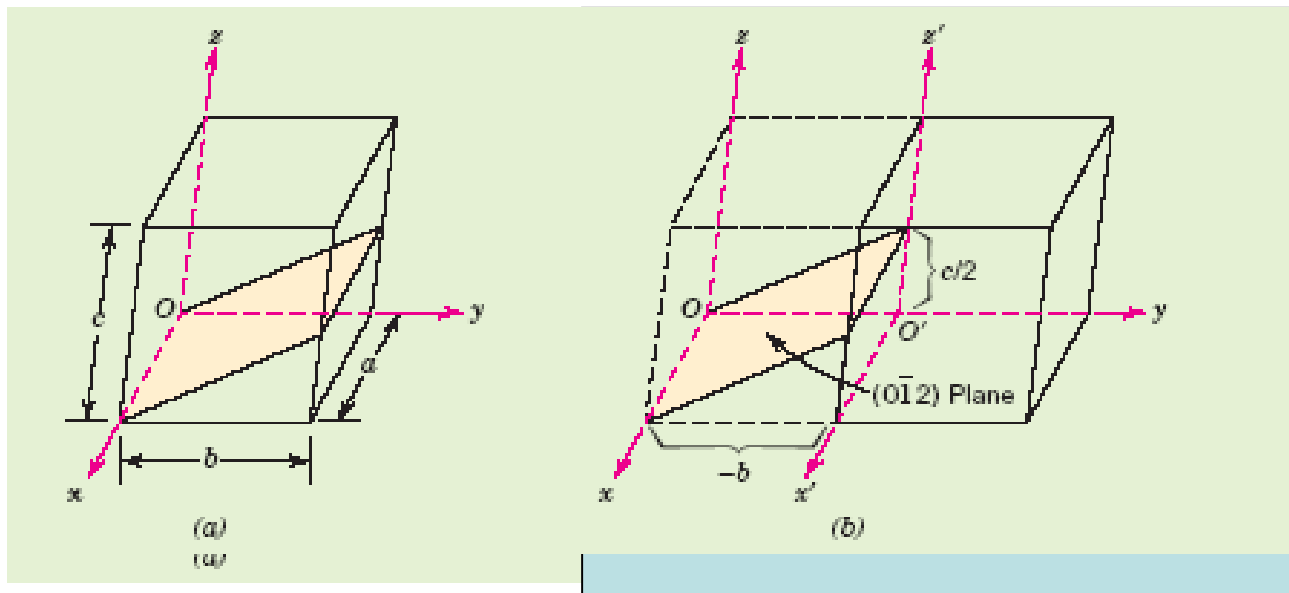


(111)



# Exercice 2

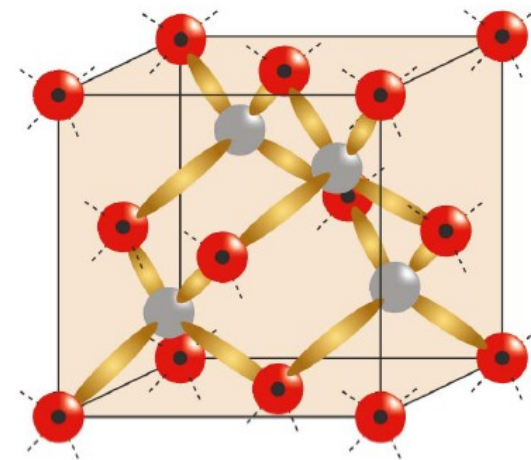
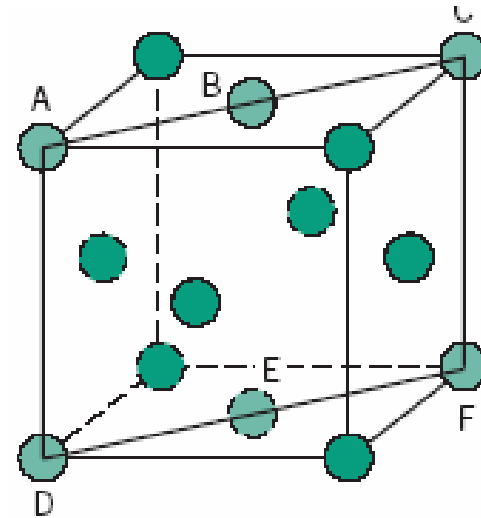
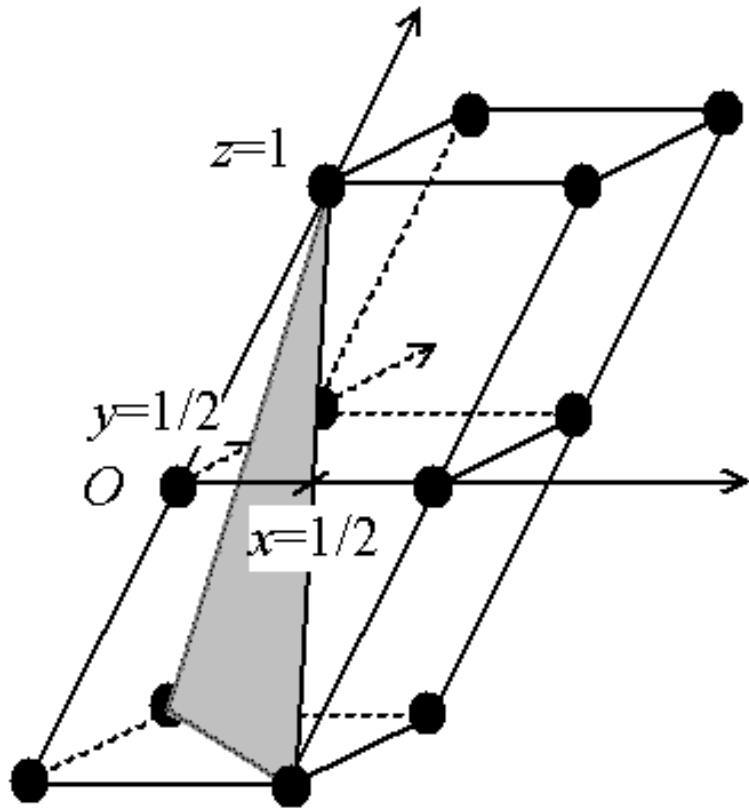
Donnez les indices de Miller pour le plan montré ci-dessous



	$x$	$y$	$z$
Intercepts	$\infty a$	$-b$	$c/2$
Intercepts (in terms of lattice parameters)	$\infty$	$-1$	$\frac{1}{2}$
Reciprocals	$0$	$-1$	$2$
Reductions (unnecessary)			
Enclosure		$(0\bar{1}2)$	

# Exercice 3

Numérotez les atomes et donnez leurs positions, dans les structures suivantes



# Exercice 4

Déterminez les indices de Miller des plans suivants

