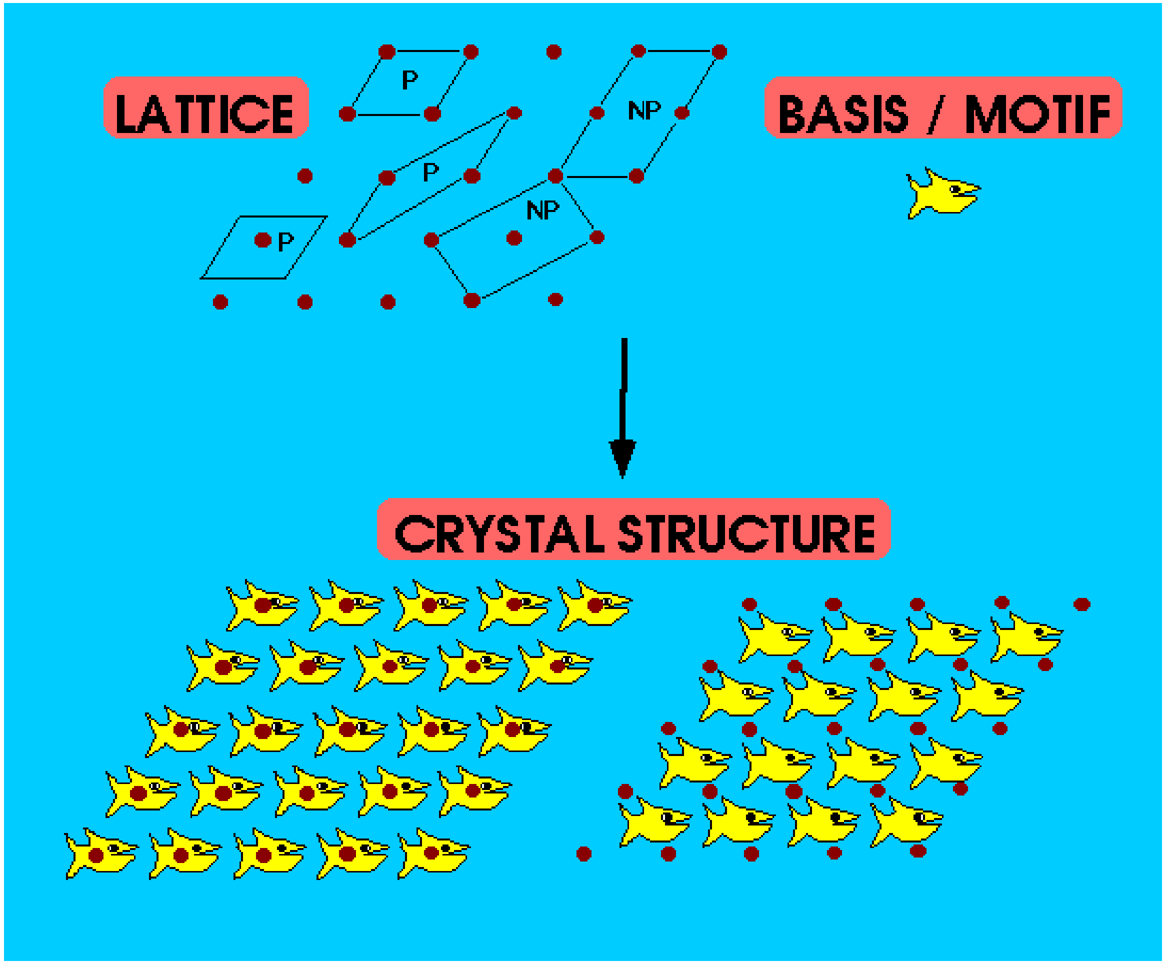
2) Structure du cristal parfait

2.1 Rappels de cristallographie

2.1.1 Introduction

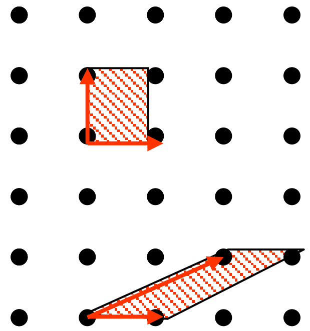
Cristal=motif + réseau (de Bravais)



2) Structure du cristal parfait

$$\vec{t} = p\vec{a} + q\vec{b} + r\vec{c} \qquad p,q,r \in \mathbb{Z} \qquad \Omega = \vec{a}.(\vec{b} \times \vec{c})$$

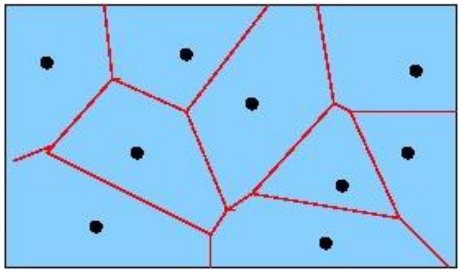
Différents choix possibles



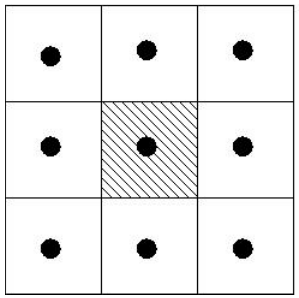
Tout « triplet » (a,b,c) de volume Ω est un choix possible pour définir la maille primitive

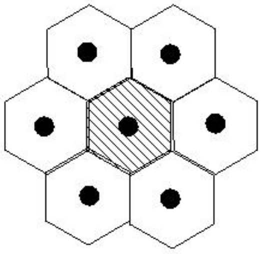
Maille primitive « intelligente »: cellule de Voronoi (cellule de Wigner Seitz pour le cristal)

Cas général



Cas périodique

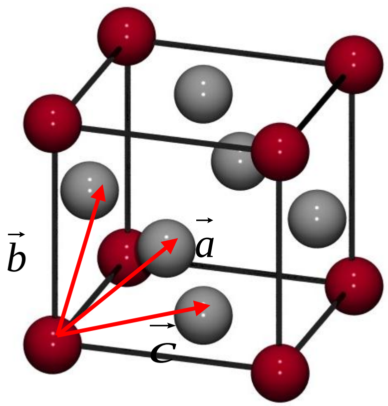




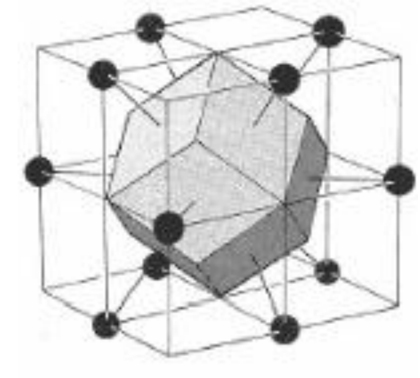
2) Structure du cristal parfait

Structure cristallographique | **Cellule de Wigner Seitz**

CFC
Cubique
Faces Centrées



$$\begin{cases} \vec{a} = \frac{a}{2}(\vec{y}+\vec{z}) \\ \vec{b} = \frac{a}{2}(\vec{x}+\vec{z}) \\ \vec{c} = \frac{a}{2}(\vec{x}+\vec{y}) \end{cases}$$

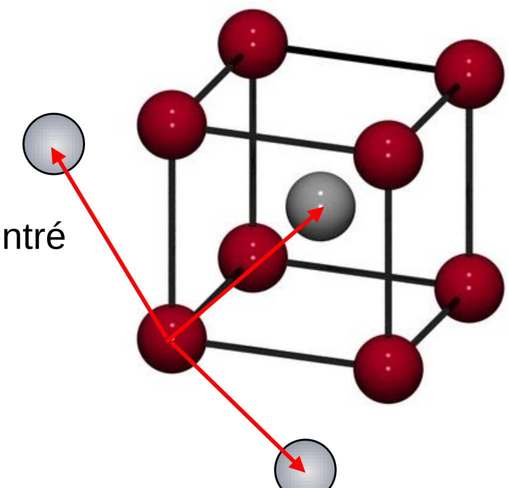


$$\Omega = \frac{a^3}{4}$$

Maille oblique: 1 atome/maille
Maille cubique: 4 atomes/maille

$$\Omega = \left(\vec{a}\times\vec{b}\right)\cdot\vec{c}$$

CC
Cubique Centré



$$\begin{cases} \vec{a} = \frac{a}{2}(-\vec{i}+\vec{j}+\vec{k}) \\ \vec{b} = \frac{a}{2}(\vec{i}-\vec{j}+\vec{k}) \\ \vec{c} = \frac{a}{2}(\vec{i}+\vec{j}-\vec{k}) \end{cases}$$

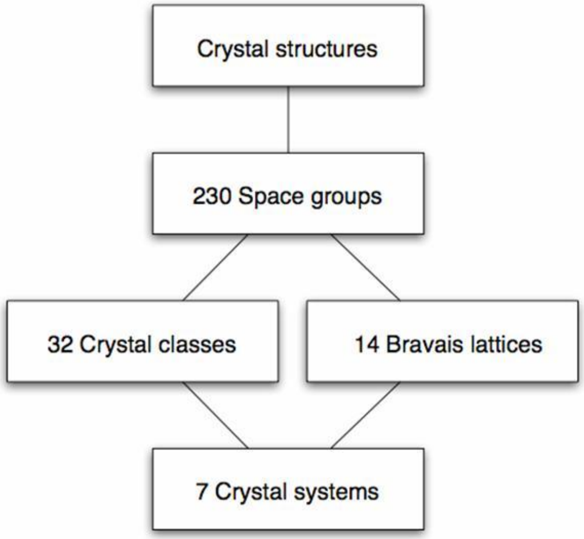
$$\Omega = \frac{a^3}{2}$$

Maille oblique: 1 atome/maille
Maille cubique: 2 atomes/maille

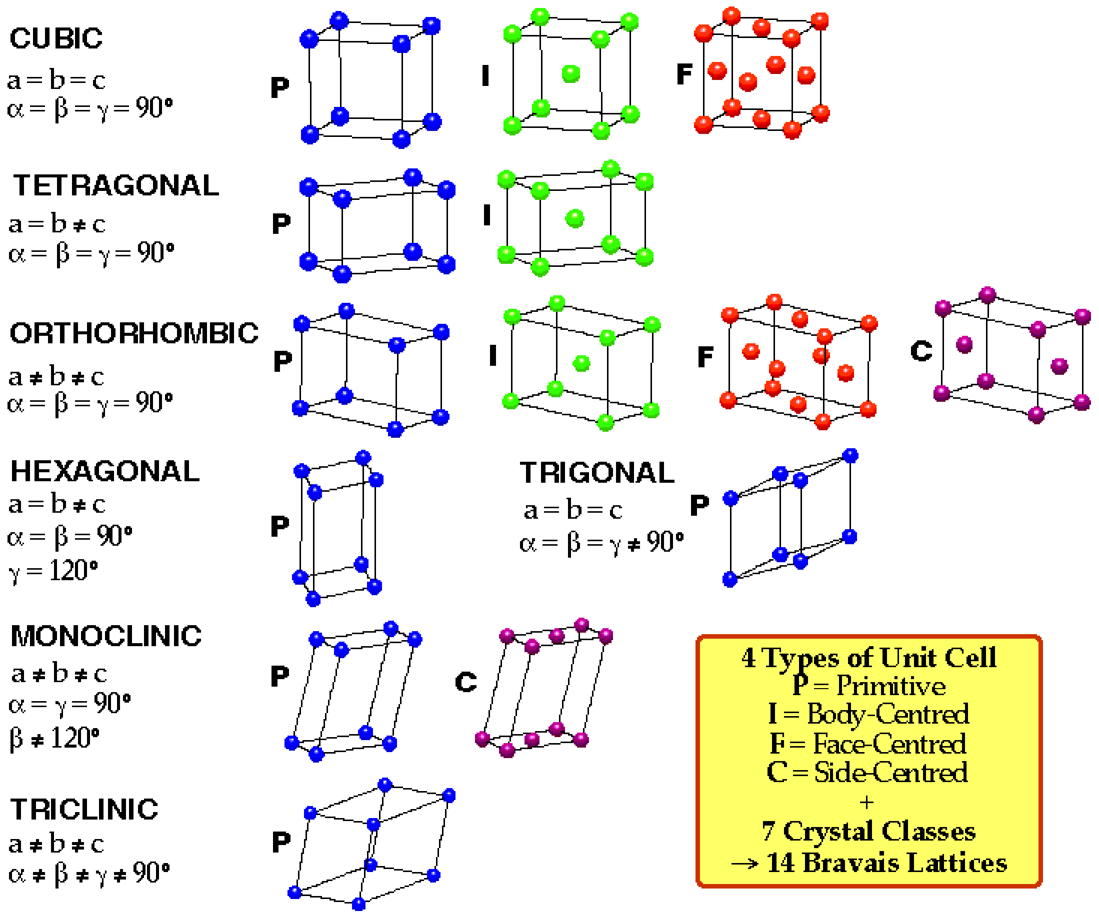
Exercice: déterminer la liste des premiers voisins

2.1.2 Classification et cristallographie

Cristallographie=classification des cristaux en fonction de leur symétrie



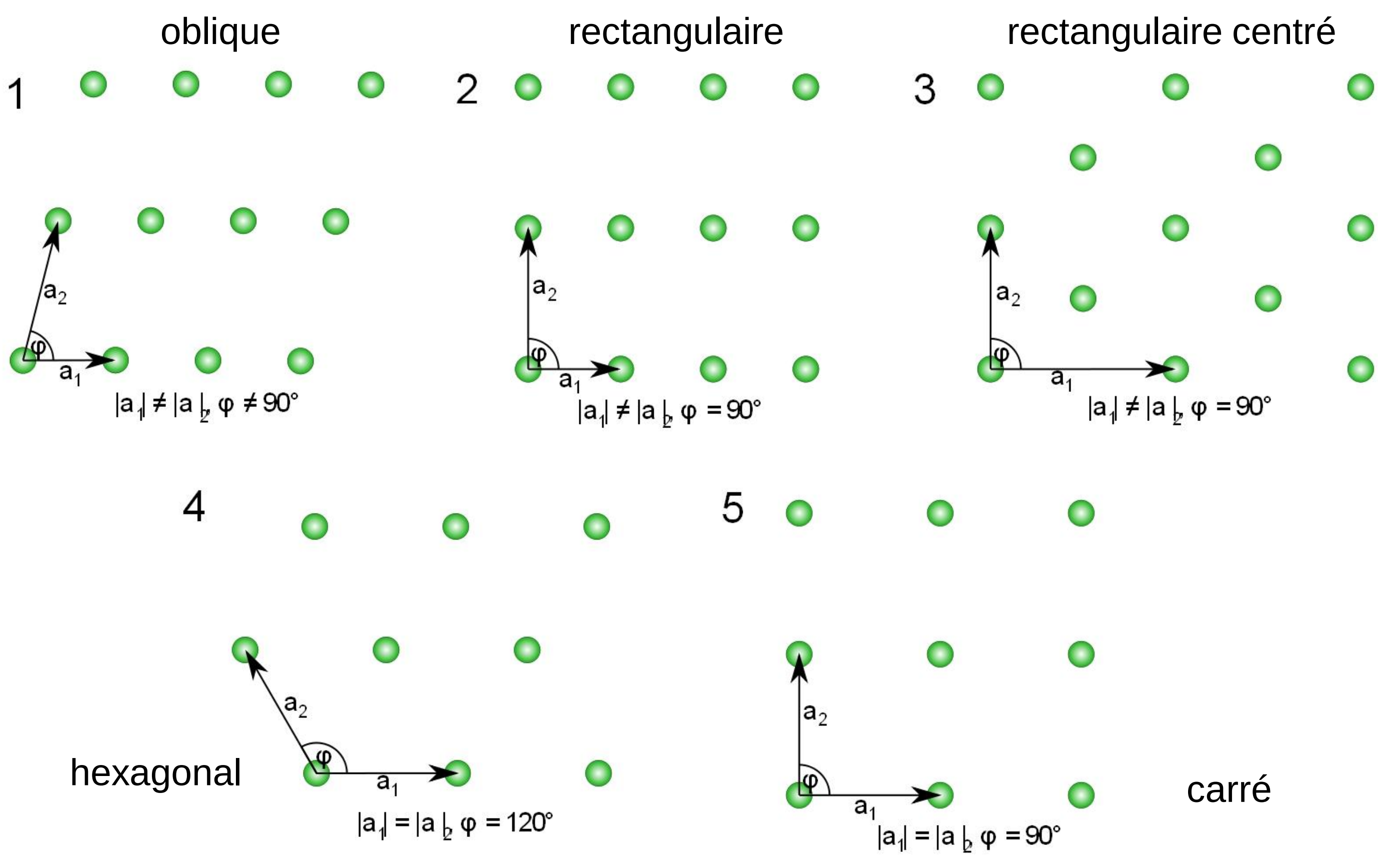
Web site



2) Structure du cristal parfait

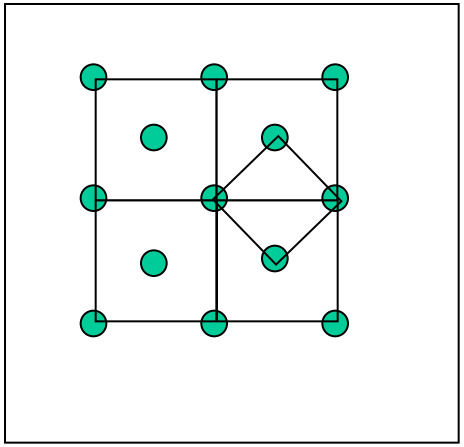
En dimension 2 c'est beaucoup plus simple!

17 groupes d'espace   5 réseaux de Bravais

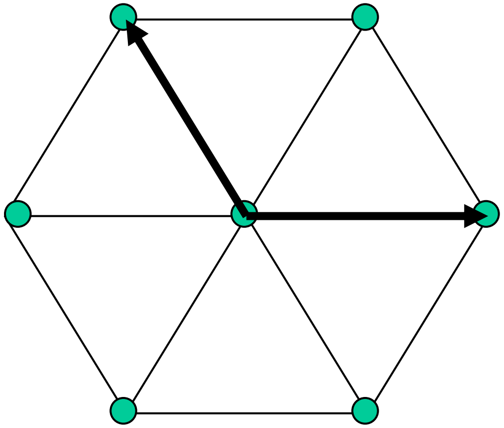


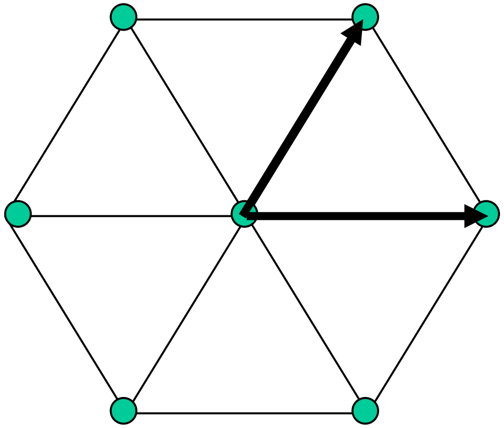
2) Structure du cristal parfait

carré centré= carré



2 mailles élémentaires possibles pour l'hexagonal

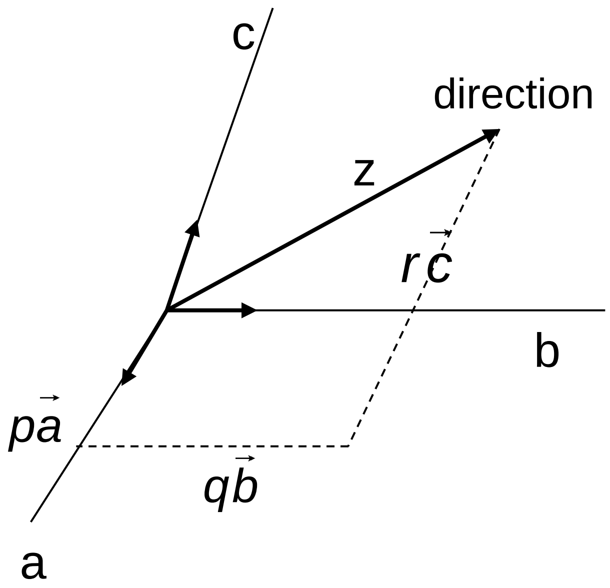




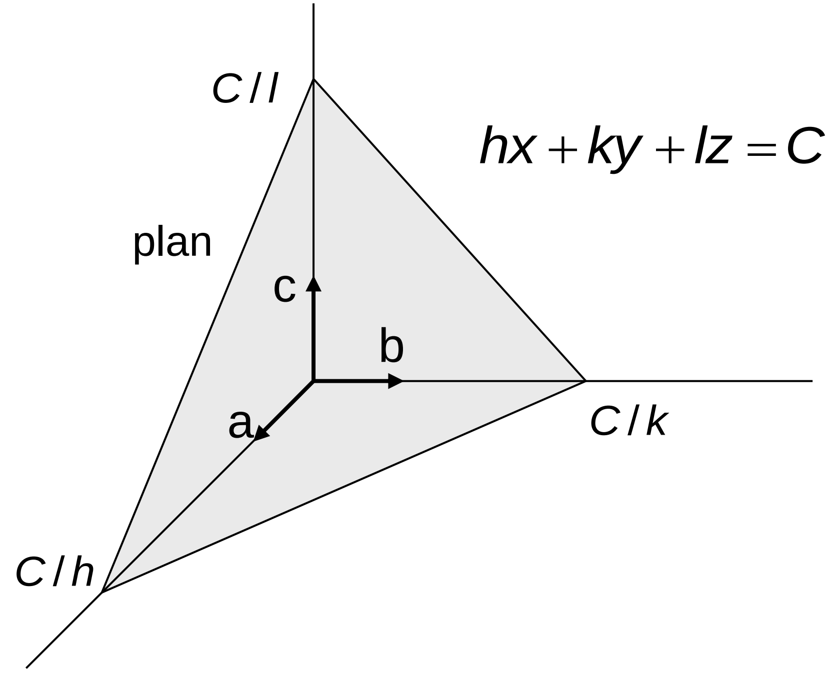
2) Structure du cristal parfait

2.1.3 Se repérer dans un cristal: directions et plans atomiques

rangée réticulaire $[p,q,r]$



plan réticulaire (h,k,l) (Indices de Miller)

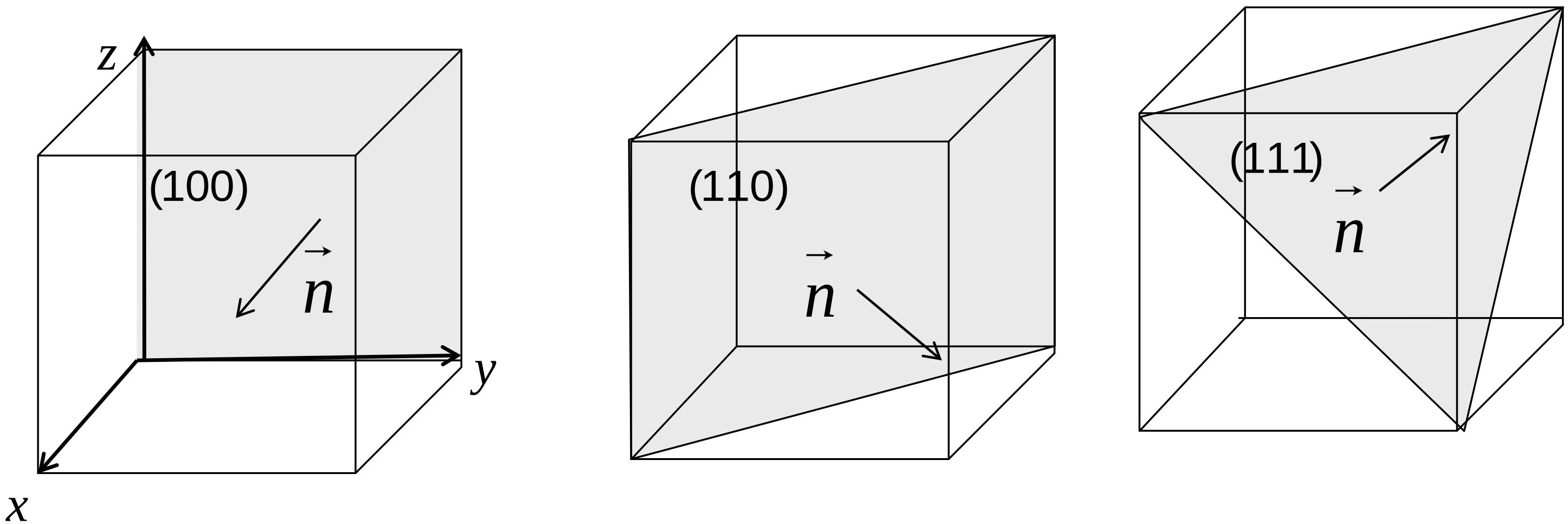


2) Structure du cristal parfait

Système cubique

Dans un système cubique la rangée [h,k,l] est perpendiculaire au plan (h,k,l)

Le vecteur $\vec{n} = h\vec{x} + k\vec{y} + l\vec{z}$ est perpendiculaire au plan (h,k,l)



Distance inter-plan

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

(h,k,l) désigne également l'orientation d'une **surface cristalline**

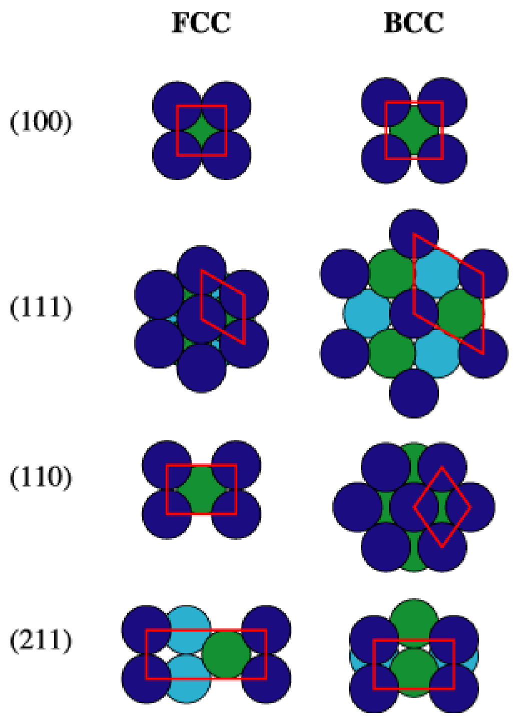
Les surfaces les plus denses sont celles de « bas » indice de Miller

2) Structure du cristal parfait

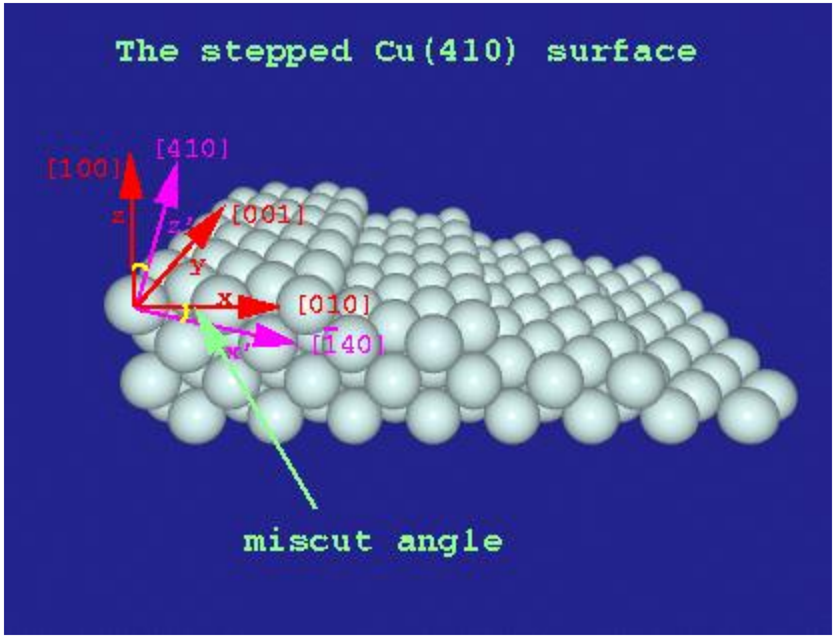
Surfaces cristallines

Le vecteur $\vec{n} = h\vec{x} + k\vec{y} + l\vec{z}$ désigne la normale au plan de surface (h, k, l)

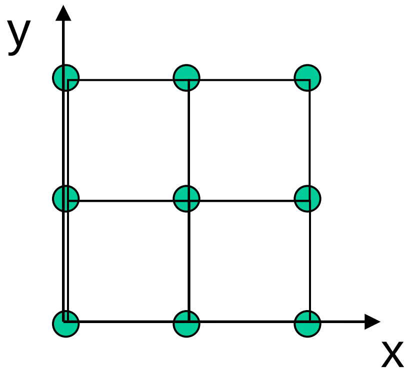
Quelques surfaces simples

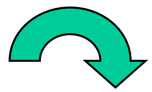


surfaces vicinales (ou « à marche »)

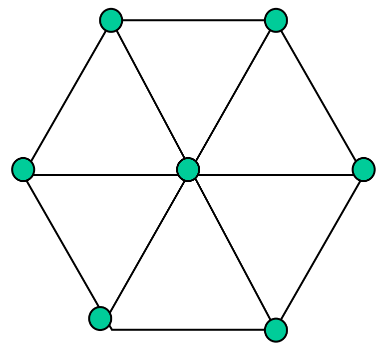


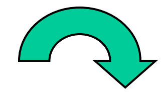
2.1.4 Symétries permises et interdites





$\frac{\pi}{2}$ π

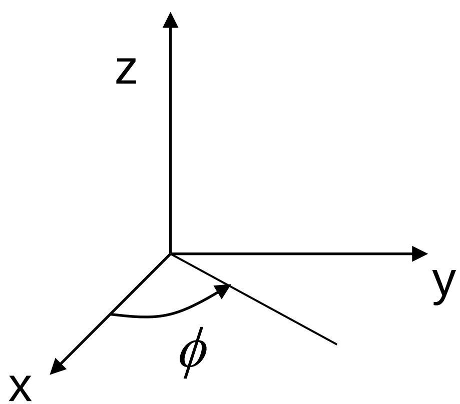




$\frac{\pi}{3}$ $\frac{2\pi}{3}$

$$\phi = 0, \frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{2}, \frac{2\pi}{3}, \pi$$

$\phi = \frac{2\pi}{5}$ est-elle possible?



$$R_\phi = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$Tr(R_\phi) = (1 + 2\cos\phi) \notin \mathbb{Z}$$

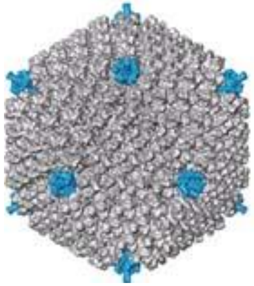
$\phi = \frac{2\pi}{5}$ impossible

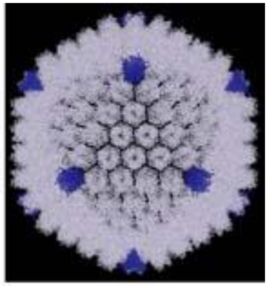
La symétrie 5 est impossible dans un cristal périodique

2) Structure du cristal parfait

Pourtant la symétrie 5 est très présente dans la nature

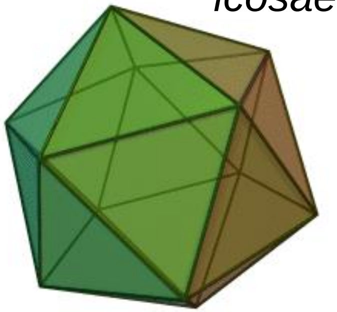
oursin





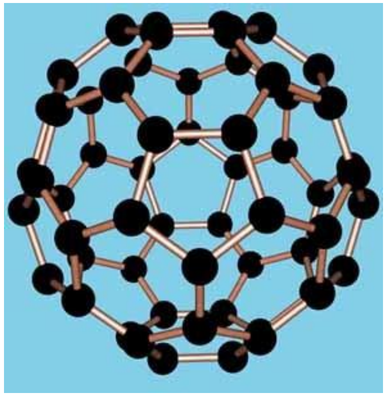
Virus icosaédrique (adenovirus etc..)

icosaèdre



20 faces triangulaires

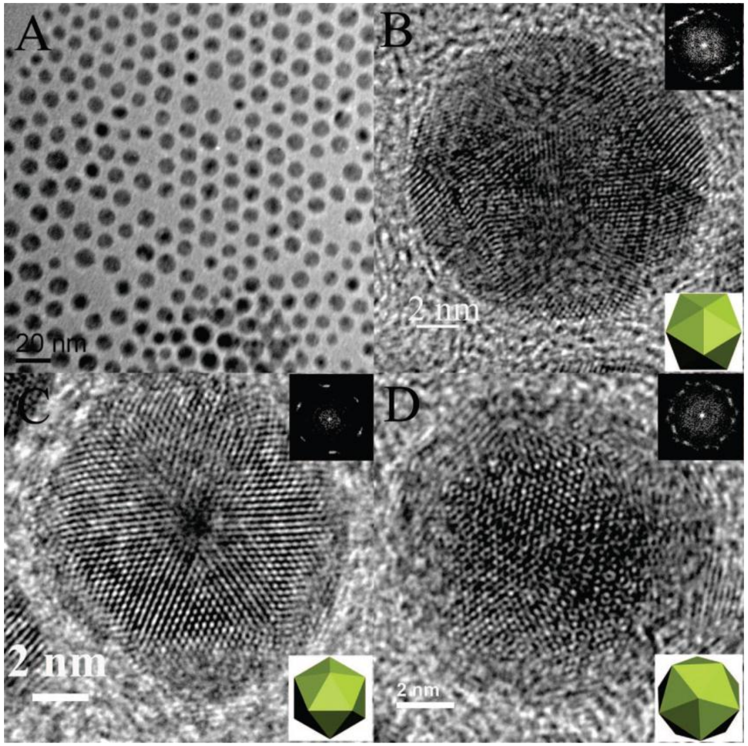
Chaque axe reliant le centre
à un sommet est de symétrie 5



C60

2) Structure du cristal parfait

→ Agrégats icosaédriques

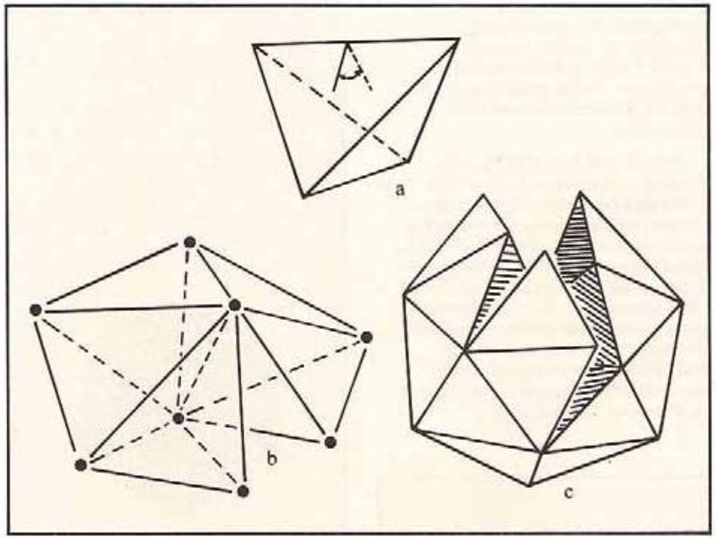


ACS Nano 2009, 139 (2008)

2) Structure du cristal parfait

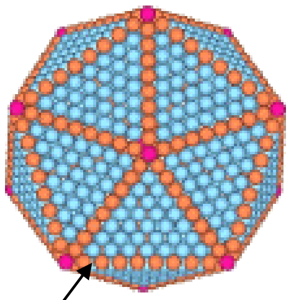
icosaèdre

20 tétraèdres
légèrement irréguliers
sur un réseau CFC



Défavorable pour les grandes tailles
(énergie élastique)

Minimisation de l'énergie
de surface

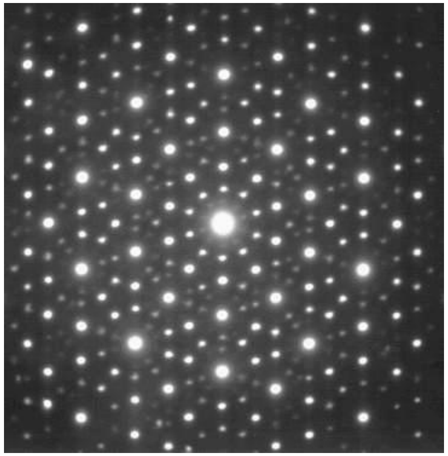


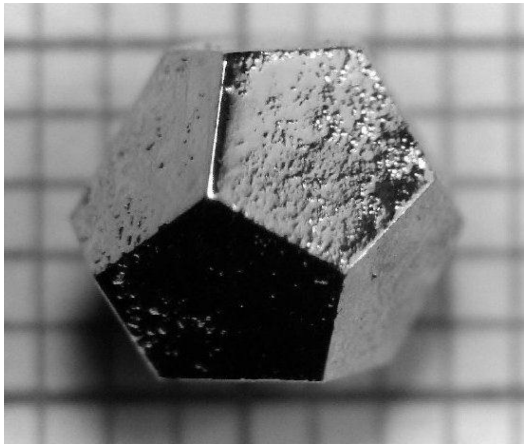
Surface dense (111)

2) Structure du cristal parfait

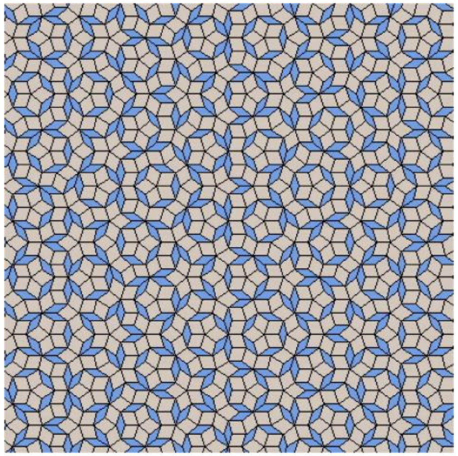
→ quasicristaux

Dan Shechtman
Prix Nobel de Chimie 2011





Ordre à longue distance et symétrie 5 sont compatibles dans les quasicristaux



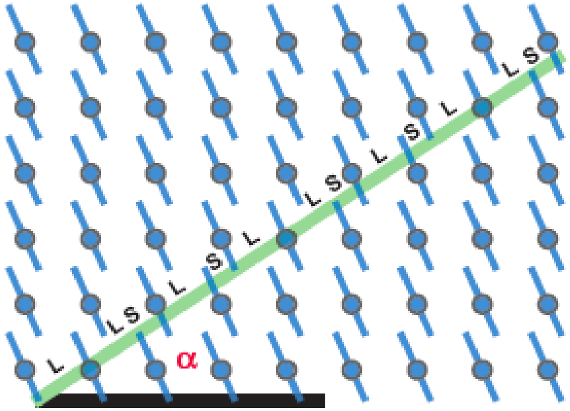
Ordre à longue distance n'implique pas la périodicité

Pavage de Penrose avec 2 losanges.
multitudes de pavages possibles

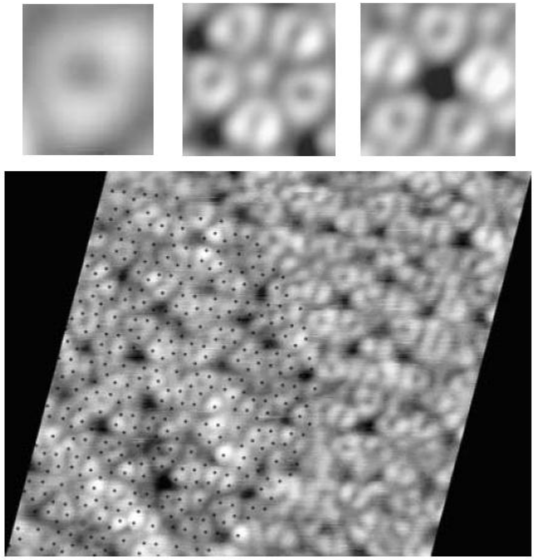
Généralisation de la notion de symétrie
(pas d'axe de symétrie particulier)

2) Structure du cristal parfait

Quasicristal= coupe d'un cristal de dimension supérieure

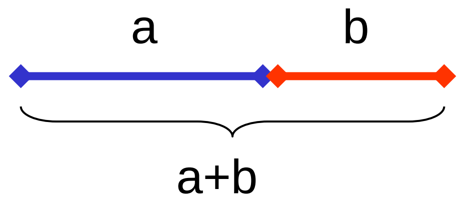


Surface d'un quasicristal: on voit les atomes!



2) Structure du cristal parfait

→ Le nombre d'or



a+b est à **a** ce que **a** est à **b**!

$$\varphi = \frac{1+\sqrt{5}}{2} = 1.6180339..$$

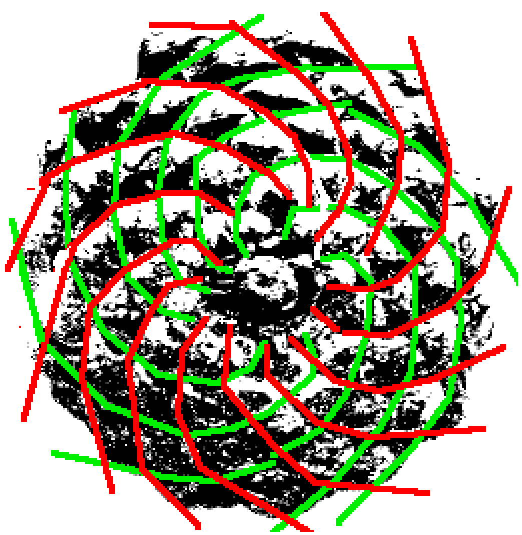
$$\varphi = 2\cos\frac{\pi}{5}$$

$$\varphi^2 = \varphi + 1$$

$$\varphi = 1 + \cfrac{1}{1+\cfrac{1}{1+\cfrac{1}{1+\ddots}}}$$

$$\varphi = \sqrt{1+\sqrt{1+\sqrt{1+\sqrt{1+\dots}}}}$$

pomme de pain



Arrangement des feuilles sur un tige

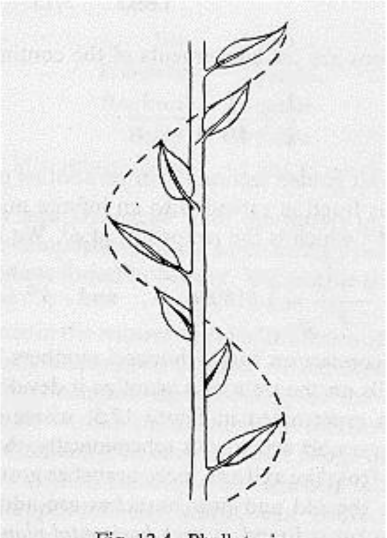


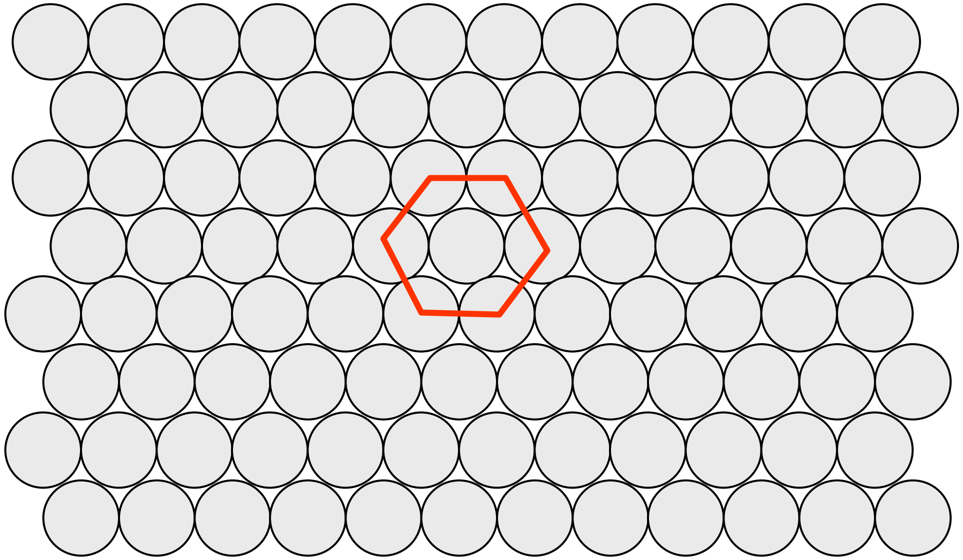
Fig. 12.4. Phyllotaxis

2.1.5 Empilements compacts

1D: trivial

Taux de remplissage=100%

2D: empilement de 1D



Taux de remplissage=85%

2) Structure du cristal parfait

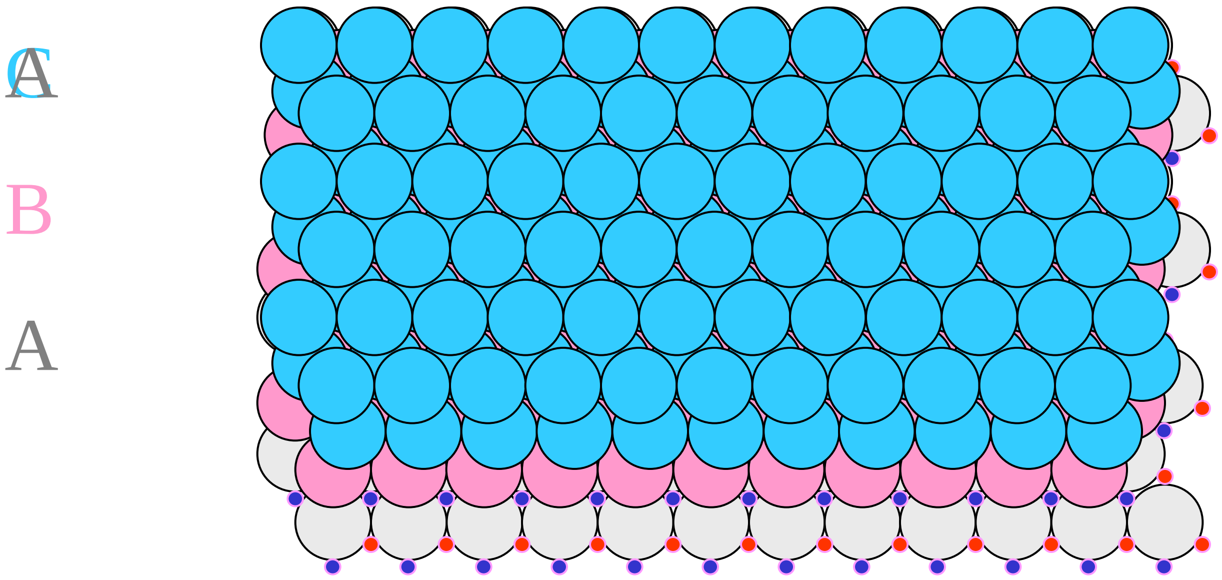
3D: connu depuis longtemps par les vendeurs d'orange mais démontré très récemment (conjecture de Kepler)

Un des 23 problèmes de **Hilbert** démontré par **Thomas Hales** (1998) à l'aide d'un programme informatique

2) Structure du cristal parfait

3D: empilement compact

Taux de remplissage=73%



2) Structure du cristal parfait

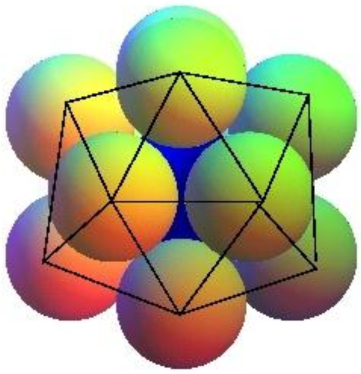
Est-ce bien l'empilement le plus compact?

1D: maximum de compacité

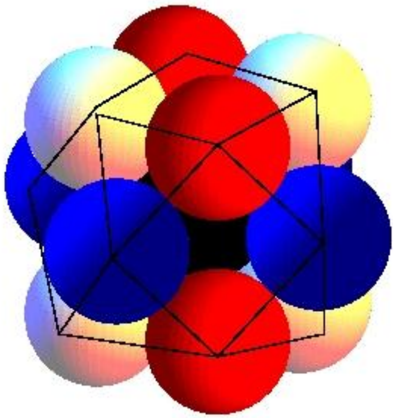
2D: les cercles sont tangents entre eux

3D: Il reste un peu d'espace entre les sphères

$\longrightarrow$ Problème de la 13eme sphère!



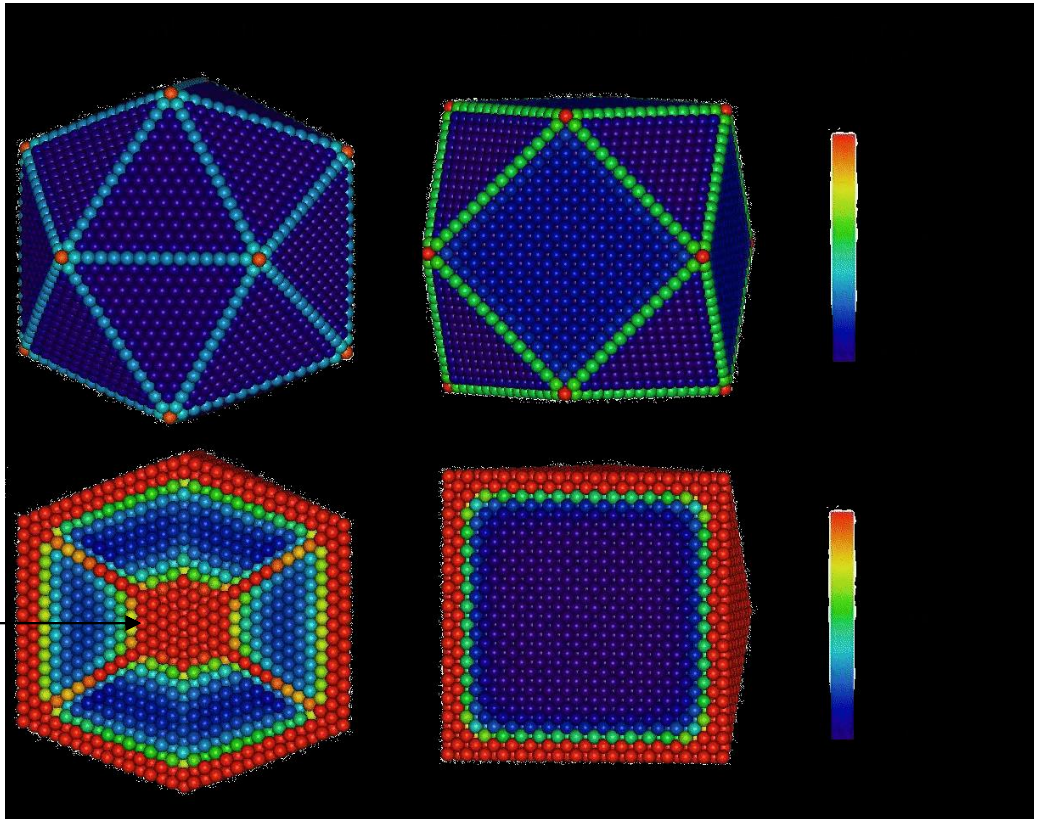
icosaèdre



cuboctaedre

Le plus petit cubo:
Atome central et ses 12
premiers voisins CFC

2) Structure du cristal parfait



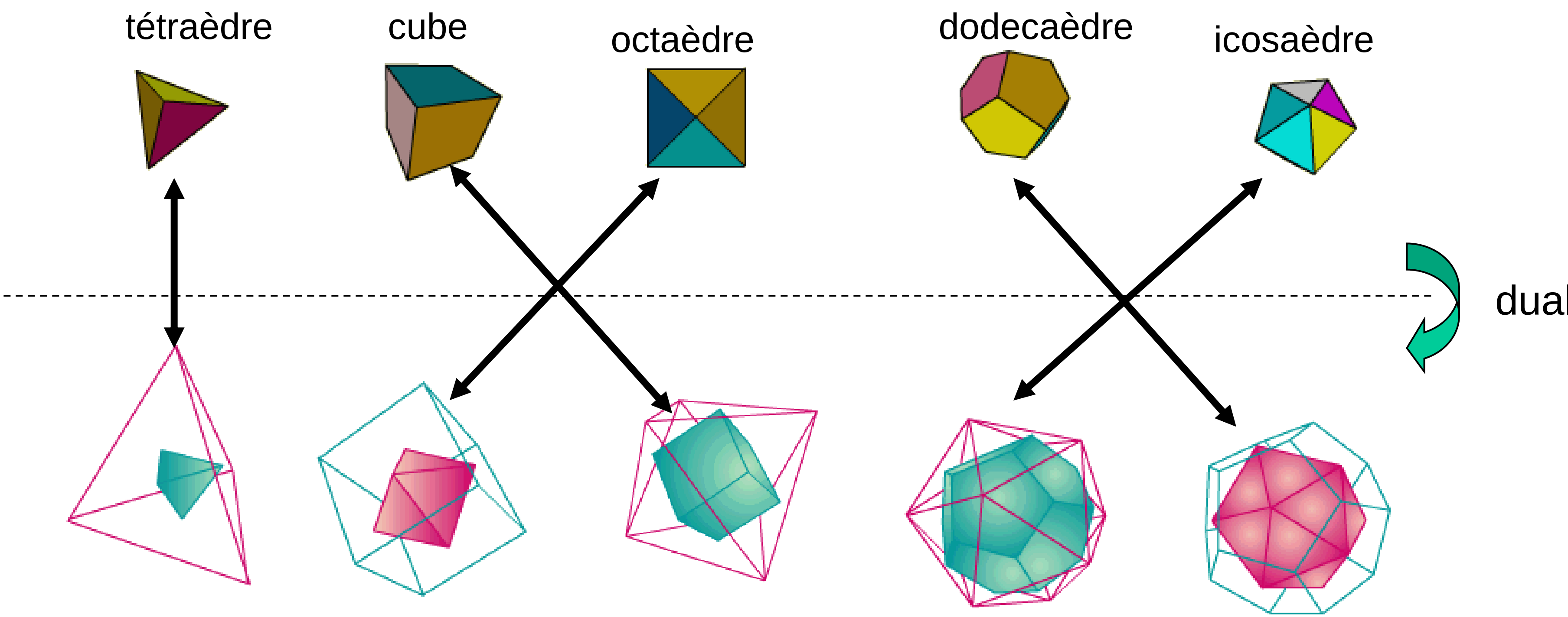
Forte tension au centre

icosaèdre cuboctaedre

Icosaèdre: favorable aux petites tailles mais défavorable aux grandes tailles du fait de l'énergie élastique qui finit par dominer.

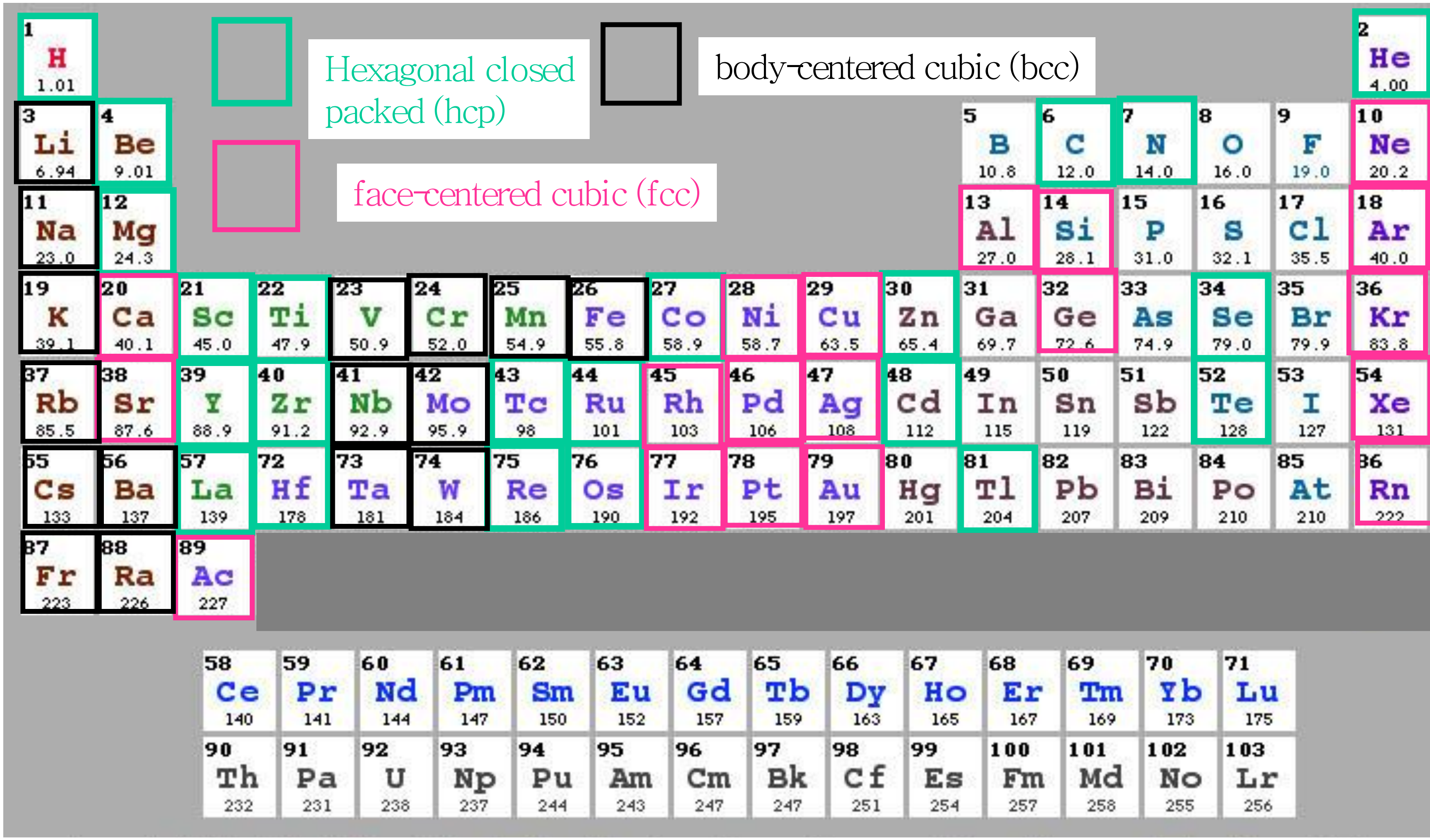
2) Structure du cristal parfait

Solides Platoniciens



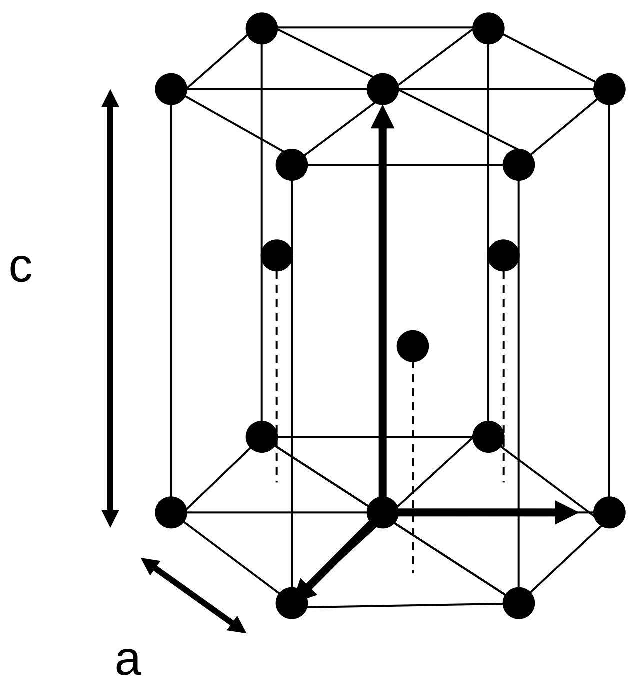
2) Structure du cristal parfait

2.1.6 Structures cristallographiques courantes

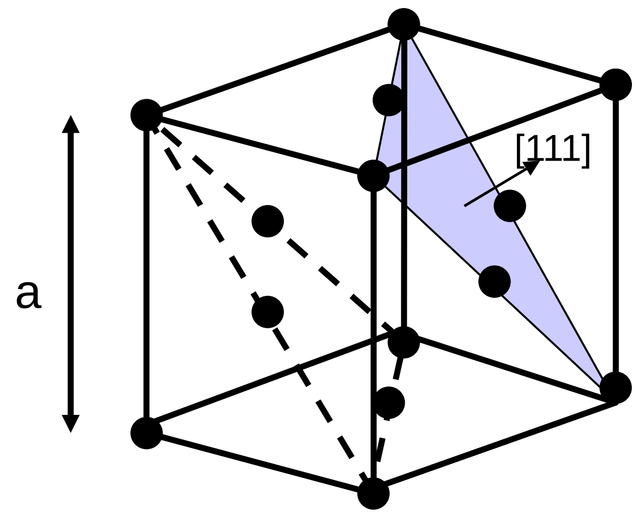


2) Structure du cristal parfait

ABABAB= hexagonal compact



ABCABC= CFC

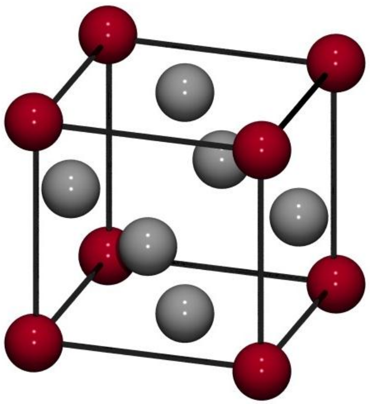


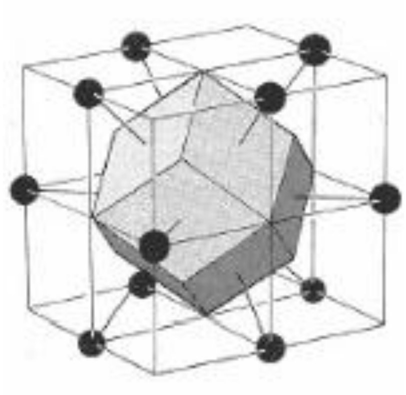
plans (111)
les plus denses

Nombre d'opérations de symétrie	24	48
Paramètres de réseau	(a,c) $\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}}$ (cas idéal)	a

2) Structure du cristal parfait

CFC

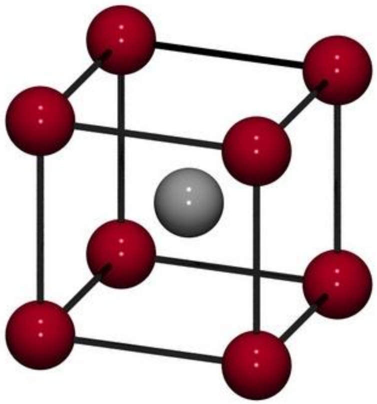




WS

Maille oblique: 1 atome/maille
Maille cubique: 4 atomes/maille

CC

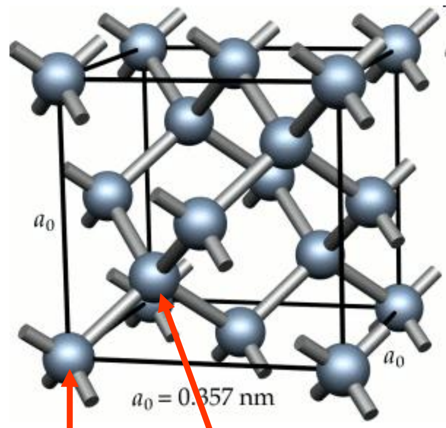


WS

Maille oblique: 1 atome/maille
Maille cubique: 2 atomes/maille

2) Structure du cristal parfait

•Structure diamant



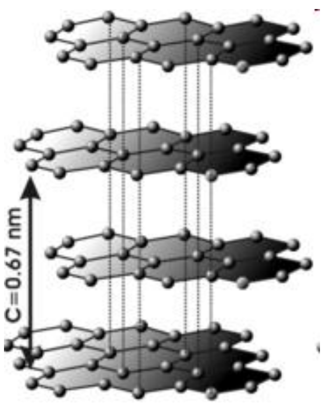
(000) (¼ ¼ ¼)

solides covalents:
C(diamant)
Si,Ge etc.

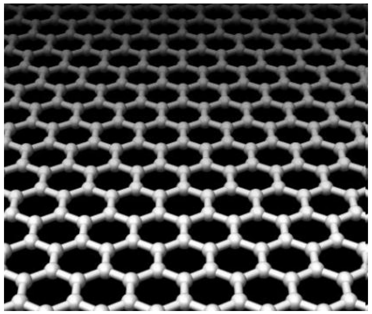
Taux de remplissage=34%

CFC (2 atomes par maille)

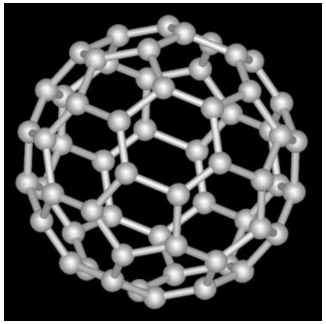
•Le Carbonne dans tous ses états



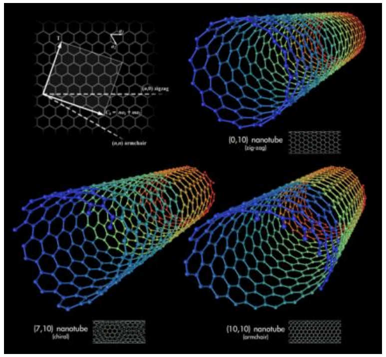
graphite



graphène



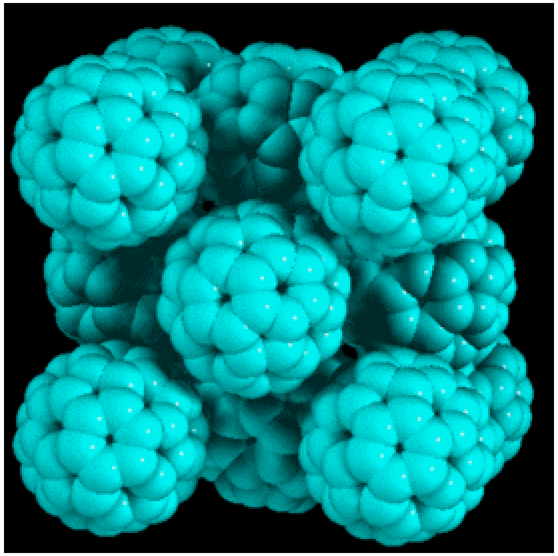
fullerène



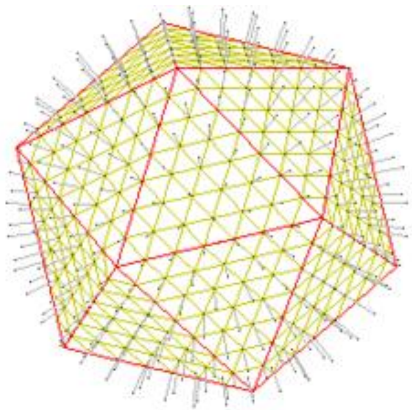
nanotubes

- La cristallisation du C60

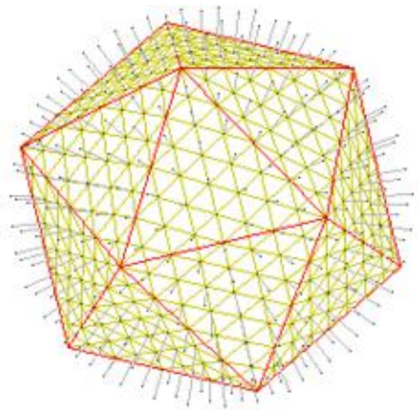
Les molécules de C60 (en interaction faible de type VdW) cristallisent à basse température sur un réseau cfc. Un certain désordre orientationnel apparait au-delà d'une certaine température.



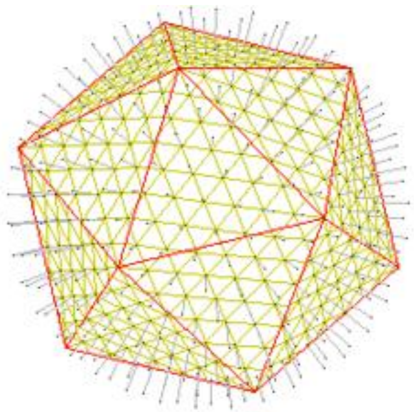
2.1.7 Pavage de la sphère



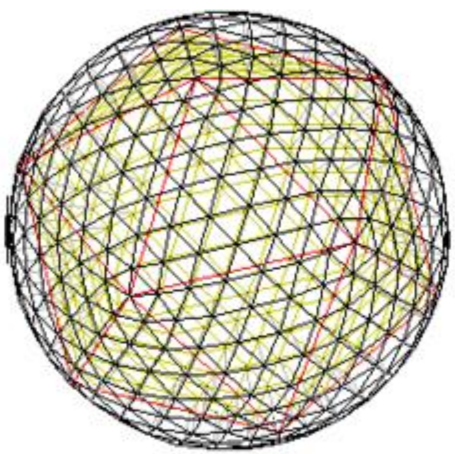
Géode V-7-0



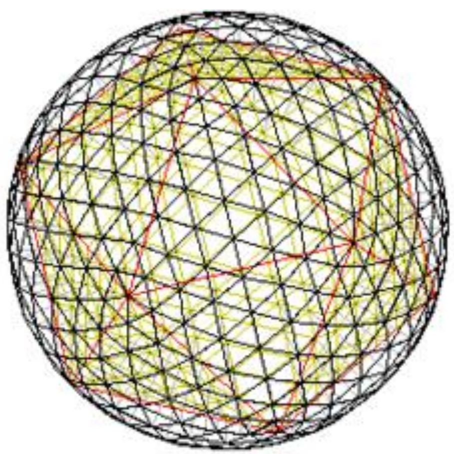
Géode V-4-4



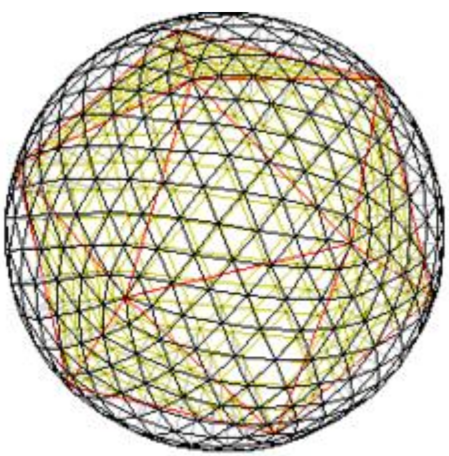
Géode V-5-3



Géode V-7-0



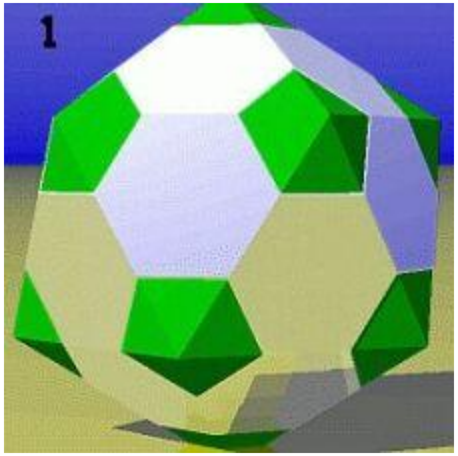
Géode V-4-4



Géode V-5-3

2) Structure du cristal parfait

Le ballon de foot C60



(cliquez sur le ballon)

La tente géode