

STU

Univercité de jijel



La Cristallographie



scan par Imadeddine
site : tajribaty.com



I.1 INTRODUCTION

En 64 avant JC, **Strabo**, invente le mot "**Krystallos**" pour désigner le quartz. Le mot "cristal" est d'origine grecque, et provient de : **kruos** (froid) et **stellesoai** (solidifier). La cristallographie est la science des cristaux, au sens large. Elle étudie : la formation, la croissance, la forme extérieure, la structure interne et les propriétés physiques de la matière cristallisée. Les propriétés physico-chimiques d'un cristal sont étroitement liées à l'arrangement spatial des motifs dans la matière. L'état cristallin est défini par un caractère périodique et ordonné à l'échelle atomique ou moléculaire. Le cristal est obtenu par translation dans toutes les directions d'une unité de base appelée maille élémentaire. L'histoire de la cristallographie s'étale principalement sur 2 siècles (19-20ème), ce qui correspond à l'âge d'or de la physique dans beaucoup de domaines.

La toute première loi de la cristallographie est celle *de la constance des angles* entre les faces des cristaux (c'est-à-dire des angles dièdres) ; elle a été découverte et énoncée par **STENON** (17e siècle). **Romé de l'Isle**, en reprenant les travaux de Stenon, remarque en 1772 que, bien que les faces des cristaux soient en général de taille différente du fait même de leur croissance, deux faces adjacentes font entre elles toujours des angles égaux.

La deuxième loi fondamentale de la cristallographie, dite des caractéristiques entières, a été découverte au 18e siècle, par l'abbé **Haüy**, à la suite de l'observation de cristaux de calcite se morcelant toujours suivant des directions planes déterminées identiques, ou clivages, en donnant des surfaces brillantes. C'est l'abbé **René Just Haüy** qui va réaliser le bond en avant et ceci par une découverte fortuite. En faisant tomber un cristal de calcite, il découvre qu'en se brisant, les fragments de tailles différentes présentent toujours le même caractère de facette que le cristal d'origine. Haüy en déduit que le cristal d'origine peut être décrit par un empilement de "molécules" semblables qu'il nomme "**molécule intégrante**". **Gabriel Delafosse**, élève d'Haüy remplacera le terme de molécule intégrante par celui de "**maille élémentaire**".

En 1830 **J. F. Ch. Hessel** montra qu'il ne peut exister que 32 sortes de symétries dans les polyèdres cristallins, et que seuls les axes de symétrie **2, 3, 4 et 6** sont possibles. Mais son travail fut ignoré à l'époque et ne fut révélé que soixante ans plus tard par **L. Sohnke**. En 1848, **Auguste Bravais** rend une étude purement mathématique sur la classification des cristaux. Il décrit l'ensemble des structures possédant des symétries d'orientation compatibles avec la triple périodicité des cristaux dans les trois directions de l'espace. Il trouve ainsi **32 classes de symétrie réparties en 14 types de réseaux**, les réseaux de Bravais que l'on peut regrouper en **7 systèmes** définissant la forme de la maille. C'est ensuite **Miller**, au 19e siècle qui, appliquant à la cristallographie les méthodes de la *géométrie analytique*, créa un système de notations rationnelles (**indices de Miller**) pour désigner l'orientation des faces. Cette notation est toujours largement utilisée, car elle est simple et performante.

En 1890, **Fedorov et Schönflies**, en prenant en compte à la fois les opérations de translation et les symétries d'orientation, définissent les **230 classes cristallines**. Cependant, avant d'arriver à l'utilisation de la diffraction des rayons X en 1912 par **LAUE** qui apportera la preuve expérimentale de la théorie réticulaire. Enfin, on doit à **Wulff**, au début de 19e, d'avoir mis au service de la cristallographie un outil géométrique remarquable, la **projection stéréographique**, et de l'avoir rendu commode à utiliser grâce au **canevas de Wulff**. Celui-ci permet de faciliter grandement les études morphologiques et simplifie les calculs préliminaires sur les réseaux.

I.2 DEFINITIONS

1. **Le motif ou la base** : on appelle motif ou base ; l'objet élémentaire constituant le réseau cristallin. Il peut être un atome ou une molécule ou un ion.
2. **Le cristal** : un cristal est un assemblage infini, régulier et périodique de motif.
3. **Structure amorphe** : le mot amorphe ou non cristallin signifie sans forme. Il s'agit d'un matériau dans lequel les motifs sont rassemblés de manière désordonnée. C'est le contraire d'un cristal. Les solides

amorphes typiques sont les verres et les polymères non cristallisés (plastiques, caoutchoucs, bois, papier, peinture, pâte à modeler, etc.)

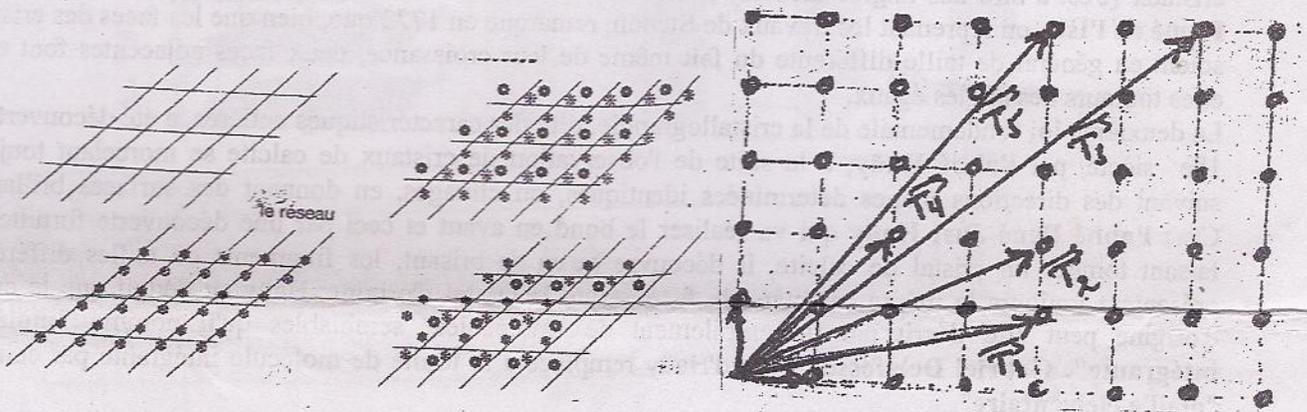
4. **Le nœud** : les nœuds d'un réseau cristallin sont les points où sont placés les motifs. Ou : points d'intersection d'une infinité de droites appelées rangées réticulaires.

5. **Le réseau cristallin** : Un réseau cristallin est un ensemble de nœuds. Il présente la propriété de retrouver le même environnement lorsqu'on le translate dans l'espace selon certains vecteurs. Il y a donc une périodicité spatiale à l'origine de la régularité du cristal. À cause de la périodicité du réseau, chaque nœud est défini par le vecteur de translation suivant :

$$\vec{T} = m_1\vec{a} + m_2\vec{b} + m_3\vec{c} \quad m_1, m_2, m_3 \in Z \quad (\text{nombre entiers})$$

Chaque nœud est repéré par les coordonnées (m_1, m_2, m_3) . Les vecteurs \vec{a} , \vec{b} et \vec{c} sont les vecteurs de base ou les vecteurs fondamentaux de translation. On peut écrire donc la relation suivante :

le réseau + le motif (la base) = le réseau cristallin



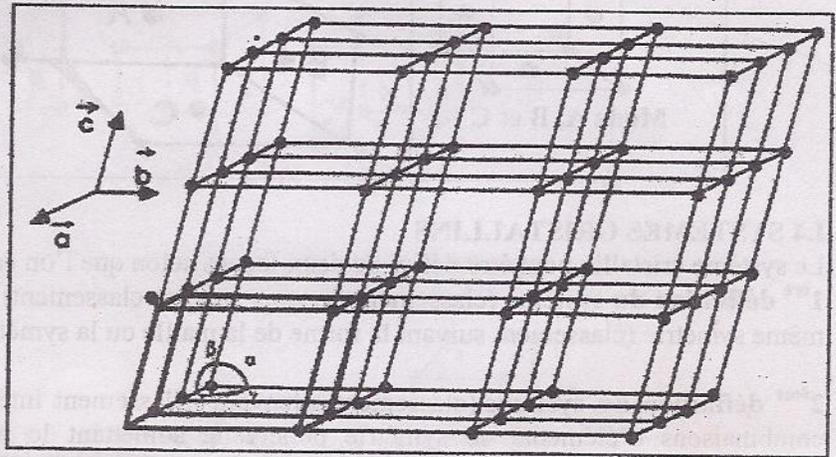
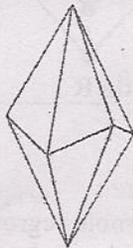
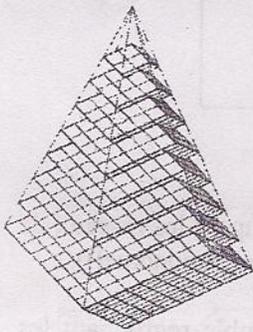
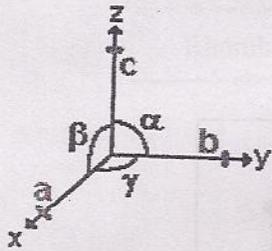
6. **La maille** : la structure périodique permet de limiter l'étude du cristal à celle de son unité microscopique qui le produit dans les trois dimensions de l'espace. Cette unité est appelée maille. On peut définir la maille comme la forme géométrique périodique dans le cristal. Le problème est que pour un cristal donné, on peut définir plusieurs mailles correspondant à plusieurs translations possibles. Ceci pose un problème, puisque deux mailles pourraient décrire un même cristal de deux manières différentes.

** **Maille primitive (simple)** : Elle est la maille la plus petite du réseau. On désigne la maille simple ou primitive par l'abréviation P. Elle est le parallépipède dont les sommets sont constitués de huit nœuds. Elle ne contient de nœuds ni dans son volume ni sur ses arêtes. A 2D : la maille est définie comme le parallélogramme construit sur deux translations et est formée d'un seul nœud.

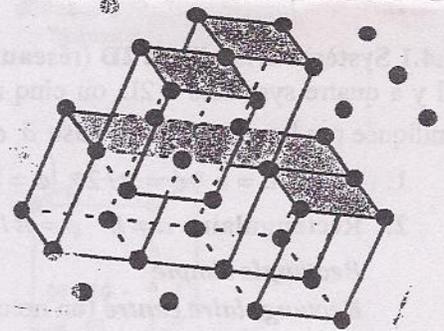
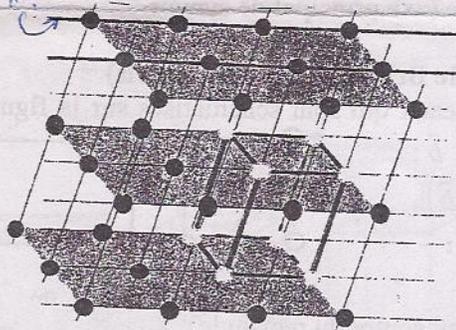
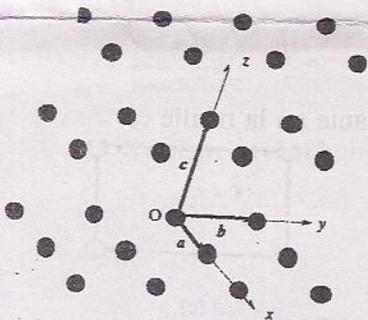
** **Maille multiple** : c'est une maille qui contient plus d'un nœud. En plus des 8 sommets du parallépipède, la maille multiple contient des nœuds dans son volume ou sur ses surfaces ou sur ses arêtes. Le choix d'une maille multiple pour représenter un réseau est dicté par le besoin de faire apparaître des symétries que la maille simple ne met pas en évidence.

Remarque : le terme maille élémentaire est le plus utilisé dans la littérature cristallographique francophone. Comme l'adjectif «élémentaire» le suggère, la maille en question ne contient qu'un seul nœud de réseau et coïncide donc avec la maille primitive ou simple. Toutefois, le terme est souvent utilisé comme synonyme d'une maille multiple. Dans ce cas, on obtient une « maille élémentaire » qui, étant multiple, n'a plus le caractère «élémentaire». L'usage de «maille élémentaire» pour désigner une maille multiple est abusif et doit être proscrit.

7. Vecteurs de base : Chaque maille est définie par 6 paramètres : trois paramètres de dimensions ($\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$) et trois paramètres d'angle (angles formés par deux axes). Par convention, on appelle a, b, c les paramètres du réseau ou les paramètres cristallins et \vec{a}, \vec{b} et \vec{c} sont les trois vecteurs de base, et α, β et γ les paramètres angulaires. On les place dans l'espace comme suit : $\alpha = (\vec{b}, \vec{c})$, $\beta = (\vec{a}, \vec{c})$, $\gamma = (\vec{a}, \vec{b})$ et $a = \|\vec{a}\|$, $b = \|\vec{b}\|$, $c = \|\vec{c}\|$.



Le volume de la maille est donné par le produit mixte des vecteurs \vec{a}, \vec{b} et \vec{c} comme suit :

$$V = |\vec{a} \cdot (\vec{b} \wedge \vec{c})| = |\vec{b} \cdot (\vec{c} \wedge \vec{a})| = |\vec{c} \cdot (\vec{a} \wedge \vec{b})|$$


8. La multiplicité Z : elle est le nombre de nœuds contenus dans une maille. La maille est dite multiple d'ordre Z . Ou encore :

à 2D : La multiplicité à 2D = surface de la maille multiple / surface de la maille simple.

à 3D : La multiplicité à 3D = volume de la maille multiple / volume de la maille simple.

I.3 LES 4 PRINCIPAUX TYPES (MODES) D'UNE MAILLE CRISTALLINE

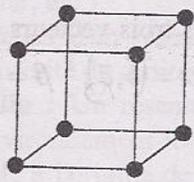
Chaque maille peut se décliner de 4 manières :

1. La maille primitive (notée P) : il y a un nœud à chaque sommet.
2. La maille centrée (notée I : de l'allemand Innenzentriertes) : il y a un nœud à chaque sommet + un nœud au centre de la maille.
3. La maille à faces centrées (notée F : de l'allemand Flächenzentriertes) : il y a un nœud à chaque sommet + un nœud au centre de chaque face.
4. La maille à deux faces centrées (notée A ou B ou C) : il y a un nœud à chaque sommet + un nœud au centre de deux faces opposées.

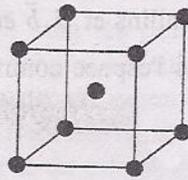
motif + réseau = réseau cristallin

réseau - motif = réseau

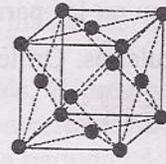
*** la forme primitive du système rhomboédrique est notée R.



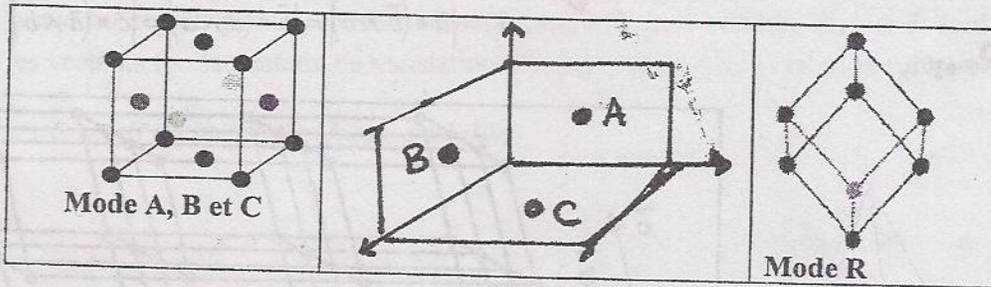
Mode P



Mode I



Mode F



I.4 SYSTEMES CRISTALLINS

Le système cristallin peut être défini de deux façons selon que l'on considère :

1^{ère} définition du système (classement français : ancien classement) : ensemble regroupant les réseaux de même symétrie (classement suivant la forme de la maille ou la symétrie maximale (groupe ponctuel)).

2^{ème} définition du système (classement allemand : classement international) : ensemble regroupant les combinaisons d'éléments de symétrie ponctuelle admettant le même repère de symétrie minimale (classement suivant la symétrie minimale (axe principal de symétrie)).

I.4.1 Système cristallin à 2D (réseaux de Bravais bidimensionnels)

Il y a quatre systèmes à 2D ou cinq réseaux qui sont schématisés sur la figure suivante où la maille est indiquée par les vecteurs de base \vec{a} et \vec{b} :

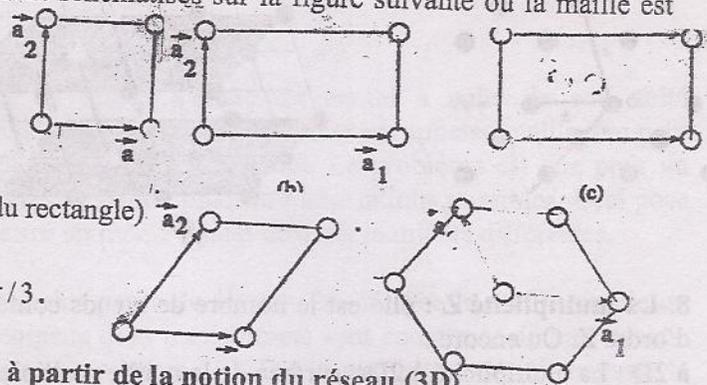
1. Carré $a = b$ $\phi = \pi/2$ ($\phi = (\vec{a}, \vec{b})$).
2. Rectangulaire $a \neq b$ $\phi = \pi/2$:

Rectangle simple

Rectangulaire centré (un nœud au centre du rectangle)

3. Oblique $a \neq b$ $\phi \neq \pi/2$.

4. Hexagonal ou triangulaire $a = b$ $\phi = 2\pi/3$.



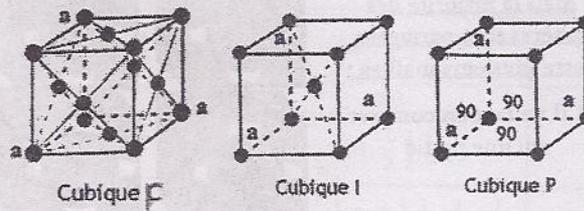
I.4.2 Les 7 systèmes et les 14 réseaux de Bravais à partir de la notion du réseau (3D)

Les réseaux à 3D sont appelés réseaux de Bravais qui a exprimé mathématiquement la notion du réseau. Le classement des 14 réseaux de Bravais va se faire en 7 systèmes. Dans cette partie, on va s'intéresser au premier classement de ces systèmes (1^{ère} définition).

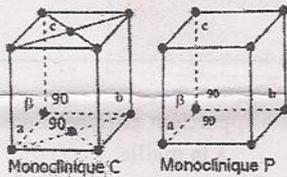
Système cristallin	Nombre de réseau Type de réseau	Paramètres
triclinique	1 P	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
monoclinique	2 P, C	$a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
orthorhombique	4	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

	P,I,F,C	
Tétragonal ou quadratique	2 P,I	$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
cubique	3 P,I,F	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
hexagonal	1 P	$a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ \gamma = 120^\circ$
Rhomboédrique	1 P	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ < 120^\circ$

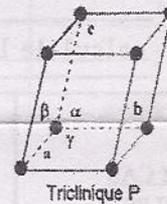
Système cubique



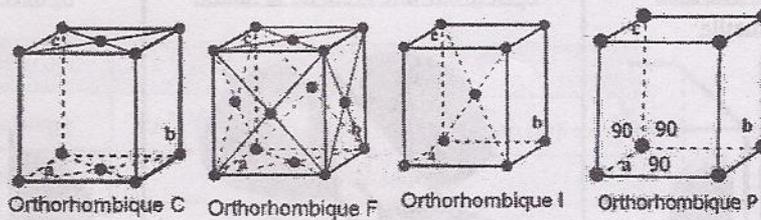
Système monoclinique



Système triclinique



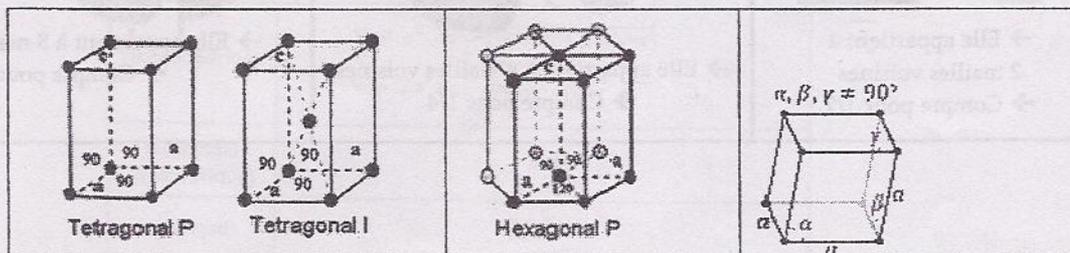
Système orthorhombique



Système quadratique

Système hexagonal

Système rhomboédrique



I.4.3 Les 7 systèmes et les 14 réseaux de Bravais à partir de la notion de symétrie (voir le chapitre III).

I.4.4 Coordonnées des nœuds et volume de chaque système cristallin

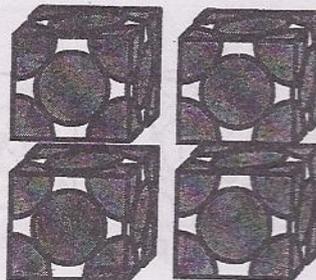
** Nombre des nœuds dans une maille (3D)

- Sur un sommet, le nœud appartient à 8 mailles et compte pour $1/8$.
- Sur une arête, le nœud appartient à 4 mailles et compte pour $1/4$.
- Sur une face, le nœud appartient à 2 mailles et compte pour $1/2$.
- À l'intérieur de la maille, le nœud appartient à une maille et compte pour 1.

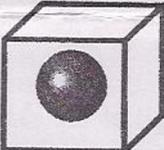
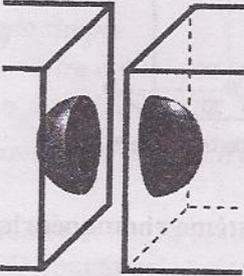
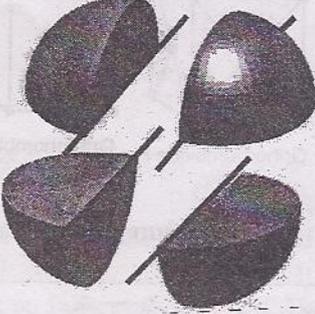
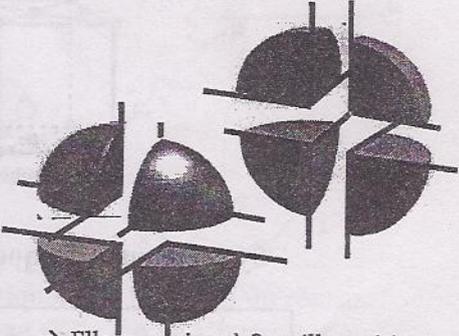


Mais la majorité des sphères sont partagées entre plusieurs mailles :

→ Il ne faut en compter qu'une partie



calcul de la multiplicité ?

<p>QUATRE CAS POSSIBLES</p>	<p><u>Sphère au centre de la maille</u></p> 	<p>→ Elle appartient entièrement à la maille → Compte pour 1 entier</p>
<p><u>Sphère sur une face de la maille</u></p>  <p>→ Elle appartient à 2 mailles voisines → Compte pour $1/2$</p>	<p><u>Sphère sur une arête de la maille</u></p>  <p>→ Elle appartient à 4 mailles voisines → Compte pour $1/4$</p>	<p><u>Sphère sur un coin de la maille</u></p>  <p>→ Elle appartient à 8 mailles voisines → Compte pour $1/8$</p>

NOM DU RÉSEAU	MODE DE RÉSEAU	COORDONNÉES DES NŒUDS	NOMBRE DE NŒUDS Z PAR MAILLE (MULTIPLICITE)
cubique primitif (simple)	P	000	1
cubique centré	I	$000, \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$	2
cubique à faces centrées	F	$000, \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0, 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}, \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}$	4
hexagonal	P	000	1
rhomboédrique	R	000	1
tétragonal (quadratique) primitif	P	000	1
tétragonal (quadratique) centré	I	$000, \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$	2
orthorhombique primitif	P	000	1
orthorhombique centré	I	$000, \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$	2
orthorhombique faces centrées	F	$000, \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0, 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}, \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}$	4
orthorhombique base C centrée	C	$000, \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$	2
monoclinique primitif	P	000	1
monoclinique base C centrée	C	$000, \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$	2
triclinique primitif	P	000	1

SYSTEME	VOLUME
triclinique	$a^2 b^2 c^2 (1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma)$
monoclinique	$abc \sin \beta$
orthorhombique	abc
hexagonal	$V = ca^2 \sin 120^\circ = ca^2 \frac{\sqrt{3}}{2}$
rhomboédrique	$V = a^3 \sqrt{(1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha)}$ ou $V = 2a^3 \sin \frac{\alpha}{2} \sqrt{\sin \frac{\alpha}{2} \cdot \sin \frac{3\alpha}{2}}$
tétragonal (quadratique)	$a^2 c$
cubique	a^3

1.5 ETUDE DE LA STRUCTURE CUBIQUE

Le système cubique est formé de trois types : 1. Cubique simple : noté CS, 2. Cubique centré: noté CC et 3. Cubique à faces centrées: noté CFC.

* **Cubique centré** : le CC est composé de deux mailles simples. L'une est formée par les sommets de la maille multiple alors que les sommets de la deuxième maille sont les nœuds centraux. La maille primitive du cubique centré est un rhomboédrique caractérisé par le paramètre $\frac{\sqrt{3}}{2}a$ dont les vecteurs de bases

sont donnés par les relations suivantes : $\vec{a}' = \frac{a}{2}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k})$, $\vec{b}' = \frac{a}{2}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k})$ et $\vec{c}' = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k})$

$\Rightarrow \|\vec{a}'\| = \|\vec{b}'\| = \|\vec{c}'\| = \frac{\sqrt{3}}{2}a \Rightarrow V' = \frac{1}{2}a^3$. Les coordonnées des nœuds : $(0,0,0)$ et $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, la maille multiple contient 2 nœuds. Parmi les matériaux cristallisant dans ce système, on peut citer les métaux alcalins (Li, Na, Rb, ...).

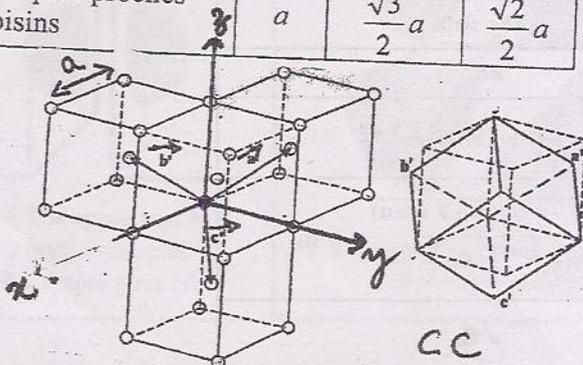
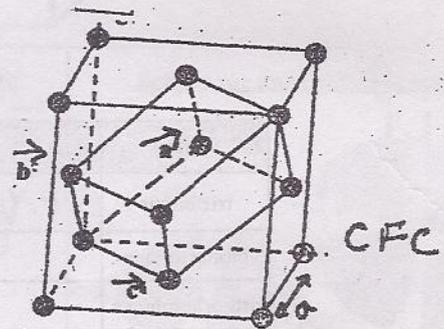
* **Cubique à faces centrées** : La maille primitive du cubique à faces centrées est un rhomboédrique caractérisé par le paramètre $\frac{\sqrt{2}}{2}a$ dont les vecteurs de bases sont donnés par les relations suivantes

: $\vec{a}' = \frac{a}{2}(\vec{j} + \vec{k})$, $\vec{b}' = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{k})$ et $\vec{c}' = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j}) \Rightarrow \|\vec{a}'\| = \|\vec{b}'\| = \|\vec{c}'\| = \frac{\sqrt{2}}{2}a \Rightarrow V' = \frac{1}{4}a^3$. La maille

multiple contient 4 nœuds dont les coordonnées des nœuds : $(0,0,0)$, $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$, $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. Parmi les matériaux cristallisant dans ce système, on peut citer les métaux tels que Al, Cu.

Le tableau suivant donne les caractéristiques de réseaux cubiques :

Type de réseau	CS	CC	CFC
Volume de la maille multiple	a^3	a^3	a^3
Volume de la maille primitive	a^3	$\frac{1}{2}a^3$	$\frac{1}{4}a^3$
Nombre de nœuds par maille	1	2	4
Nombre de plus proches voisins	6	8	12
Distance entre plus proches voisins	a	$\frac{\sqrt{3}}{2}a$	$\frac{\sqrt{2}}{2}a$



1.6 ETUDE DE QUELQUES STRUCTURES CRISTALLINES

1. Chlorure de sodium

La structure du chlorure de sodium est illustrée par la figure suivante. La maille multiple est cubique CFC. La maille primitive est cubique simple de paramètre $a/2$. La base est formée un ion de Na^+ et d'un

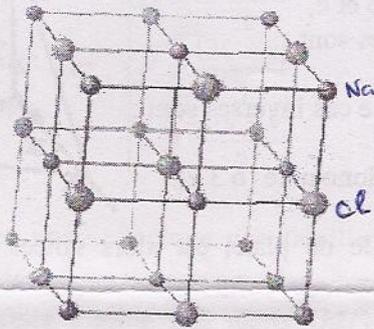
ion de Cl^- . Les positions des atomes sont : $\text{Cl}^- : (0,0,0), (1/2,1/2,0), (0,1/2,1/2), (1/2,0,1/2) \Rightarrow 4$
 $\text{Na}^+ : (1/2,0,0), (0,0,1/2), (0,1/2,0,1/2), (1/2,1/2,1/2)$
 molécules de NaCl (4 motifs ou bases). Le nombre de nœuds : 4 de Cl^- et 4 nœuds de Na^+ . Chaque ion est entouré de six ions d'autres espèces. La distance de plus proches voisins = $a/2$.

2. Le Diamant

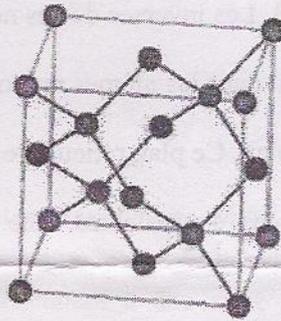
La maille multiple est cubique. Elle est formée par l'intersection de deux mailles CFC. La maille multiple contient 8 atomes de carbone dont les positions sont :

A l'intérieure de la maille : $(1/4,1/4,1/4), (3/4,3/4,1/4), (3/4,1/4,3/4), (1/4,3/4,3/4)$

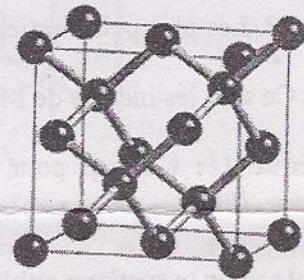
A l'extérieure de la maille : $(0,0,0), (1/2,1/2,0), (0,1/2,1/2), (1/2,0,1/2)$. Le nombre de plus proches voisins = 4 et la distance entre plus proches voisins est $\frac{\sqrt{3}}{4}a$. Le motif comprend deux atomes situés en $(0,0,0)$ et $(1/4,1/4,1/4)$.



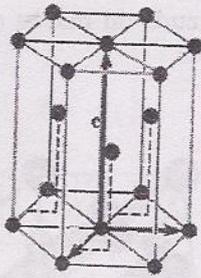
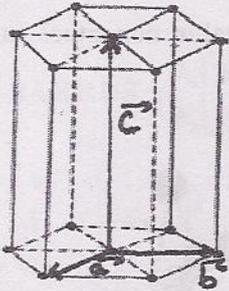
NaCl



Diamant



3. Hexagonal compact (hcp) (hexagonal close packing) :



La maille multiple est formée de deux mailles primitives hexagonales. La base est formée de 2 atomes situés en $(0,0,0)$ et $(2/3,1/3,1/2)$.

1.7 RANGEES RETICULAIRES (DIRECTION)

Les directions permettent de déterminer l'orientation cristalline ou la rangée du réseau. Ces indices sont notés $[uvw]$. Les nombres négatifs sont notés avec un trait au-dessus (\bar{u} se lit moins u). La rangée $[uvw]$ contient plusieurs nœuds. L'ensemble des directions obtenues par symétries est appelé famille de direction ou les rangées équivalentes. On le note : $\langle uvw \rangle$. Exemple pour le système cubique : $\langle 110 \rangle \equiv (110), (101), (011), (\bar{1}10), (\bar{1}01), (0\bar{1}1), \dots$

Exercice : représenter les directions suivantes dans un cubique.

1.8 INDICES DE MILLER

Haüy a défini les indices (P, Q, R) qui permettent de repérer dans l'espace les faces d'un cristal. Miller pour simplifier, a dit qu'il ne fallait pas utiliser P, Q, R , mais leurs inverse $(1/P, 1/Q, 1/R)$ qui seront notés h, k, l . Ils doivent être entiers, premiers entre eux et de valeurs simples. Les indices de Miller sont (hkl) . Ils sont déterminés comme suit :

Un repère $(O, \vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ tel que le point O soit sur un noeud du réseau, étant choisi :

- on trouve les abscisses des points intersections du plan avec les trois axes soutenus par les vecteurs \vec{a}, \vec{b} et \vec{c} .
- on prend l'inverse de ces valeurs et on détermine les plus petits entiers h, k et l qui sont dans le même rapport que ces inverses. Les nombres ainsi obtenus sont les *indices de Miller* du plan, qui sont notés $(h k l)$.

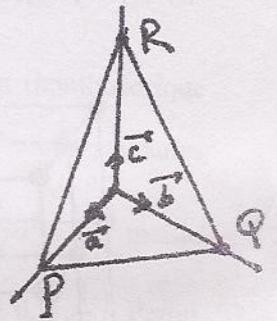
Si le plan est parallèle à un des axes de coordonnées, son intersection est rejetée à l'infini, l'indice correspondant est nul. Si le plan coupe l'axe dans sa partie négative, l'indice correspondant est négatif.

Dans ce cas le signe moins est souvent placé au-dessus de l'indice : $(hkl) \equiv (h\bar{k}l)$.

Exemple : Les intersections du plan avec les axes de coordonnées a, b et c , ont respectivement pour abscisses: 1, 2, 3. Les inverses de ces nombres sont :

1, 1/2, 1/3. Les plus petits entiers qui sont dans les mêmes rapports que ces inverses sont :

6, 3, 2. Ce sont les indices de Miller du plan. Ce plan réticulaire sera donc noté $(6\ 3\ 2)$.

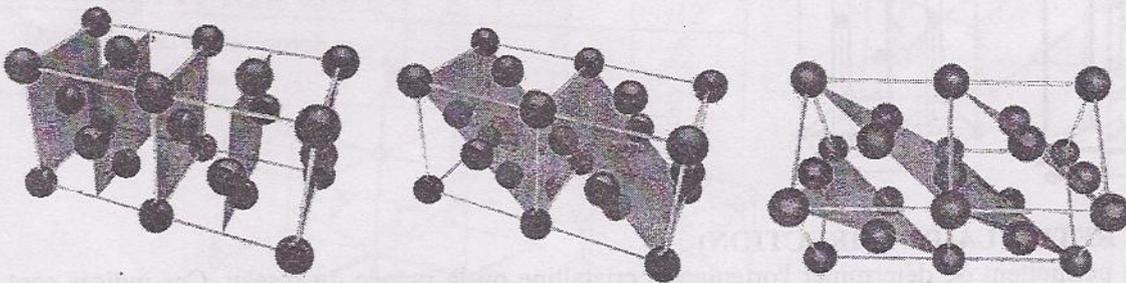


Remarque 1 : Comme pour les rangées équivalentes, une famille de plans est alors notées entre accolades : $\{hkl\}$.

Exemple pour le système cubique : $\{100\} = (100), (010), (001), (\bar{1}00), (0\bar{1}0), (00\bar{1})$.

Remarque 2 : la direction $[hkl]$ est perpendiculaire au plan (hkl) .

Remarque 3 : Le plan réticulaire est un plan passant par trois noeuds du réseau cristallin non situés sur une même droite. Ce plan contient donc une infinité d'autres noeuds.

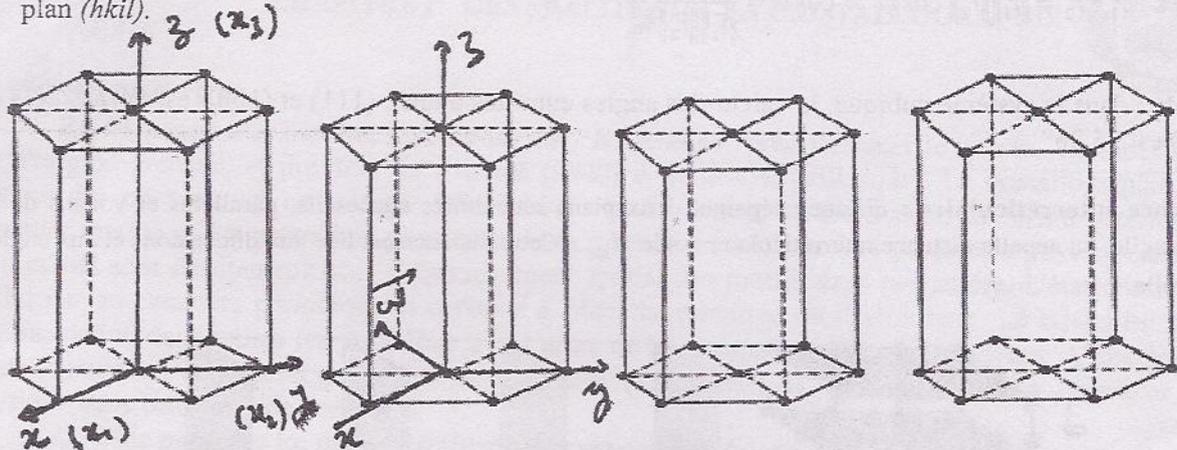


Remarque 4 : Système hexagonal

Pour le système hexagonal et la notation des plans, on utilise deux notations :

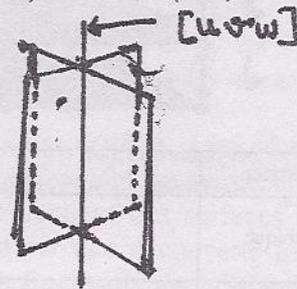
- **Notation de Miller :** on utilise trois axes (ou trois indices h, k, l) et les directions $[hkl]$. Pour cette notation la direction $[hkl]$ n'est pas perpendiculaire au plan (hkl) .
- **Notation de Miller-Bravais :** Dans le cas de la structure hexagonale et à cause de la symétrie, on définit un quatrième indice pour désigner les plans $(hkil)$, c'est la notation de Miller-Bravais. L'indice i , placé en troisième position, il est défini par la relation : $i = -(h + k)$. Pour la structure hexagonale, il est commode d'introduire donc un troisième axe noté \vec{a}_2 plus les vecteurs \vec{a}, \vec{b} qui

sont désignés par les axes \bar{x} et \bar{y} . Ces trois axes sont situés dans le même plan, de même longueur et forment entre eux un angle de 120° . Pour cette notation la direction $[hkil]$ est perpendiculaire au plan $(hkil)$.



** Relation entre les deux notations : Soit $[uvw]$ et (hkl) ; $[UVTW]$ et $(hkil)$ avec $i = -(h+k) \Rightarrow$

$$\begin{cases} u = U - T \\ v = V - T \\ w = W \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} U = \frac{(2u - v)}{3} \\ V = \frac{(2v - u)}{3} \\ T = \frac{-(u + v)}{3} \end{cases}$$



* **Plan en zone** : lorsque une famille des plans réticulaires $(h_1 k_1 l_1), (h_2 k_2 l_2), \dots$ est parallèle à une même rangée $[uvw]$, on dit que ces plans forment une zone, la rangée $[uvw]$ est appelée **axe de zone**. La condition pour qu'une famille des plans (hkl) appartienne à une zone est : $hu + kv + lw = 0$. La zone est déterminée comme suit :

si on a deux plans $(h_1 k_1 l_1), (h_2 k_2 l_2) \Rightarrow \begin{cases} h_1 u + k_1 v + l_1 w = 0 \\ h_2 u + k_2 v + l_2 w = 0 \end{cases}$. La solution est effectuée en utilisant la règle

de **SARRUS** : $\begin{vmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \end{vmatrix} \Rightarrow \begin{cases} u = k_1 l_2 - k_2 l_1 \\ v = -h_1 l_2 + h_2 l_1 \\ w = h_1 k_2 - h_2 k_1 \end{cases}$ ou on utilise le déterminant symbolique :

$$\begin{vmatrix} u & v & w \\ h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \end{vmatrix} \Rightarrow u = \begin{vmatrix} k_1 & l_1 \\ k_2 & l_2 \end{vmatrix}, v = - \begin{vmatrix} h_1 & l_1 \\ h_2 & l_2 \end{vmatrix}, w = \begin{vmatrix} h_1 & k_1 \\ h_2 & k_2 \end{vmatrix}$$

* **Plan réticulaire (hkl) défini à partir de deux rangées**

Considérons les rangées $[u_1 v_1 w_1]$ et $[u_2 v_2 w_2]$, on se propose de déterminer les indices de la famille (hkl) , à laquelle ils appartiennent. Pour trouver les composantes hkl , il est commode d'utiliser la règle de

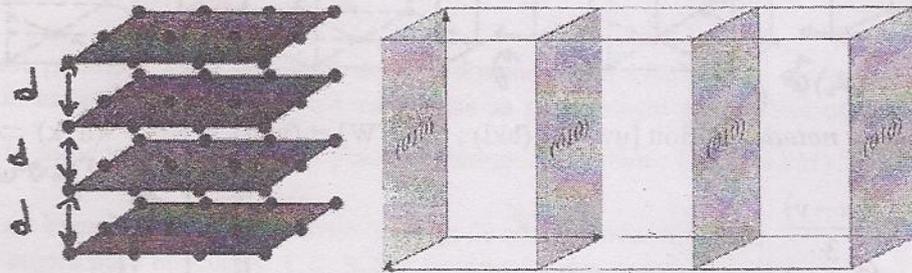
SARRUS ou le déterminant symbolique comme suit : $\begin{cases} hu_1 + kv_1 + lw_1 = 0 \\ hu_2 + kv_2 + lw_2 = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} h = v_1 w_2 - v_2 w_1 \\ k = -(u_1 w_2 - u_2 w_1) \\ l = u_1 v_2 - u_2 v_1 \end{cases}$

(X) *calculs*

* **Angle entre deux plans (hkl) :** l'angle entre les deux plans $(h_1k_1l_1), (h_2k_2l_2)$ est l'angle φ entre leurs normales : $\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 = \|\vec{r}_1\| \|\vec{r}_2\| \cos \varphi \Rightarrow \cos \varphi = \frac{\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2}{\|\vec{r}_1\| \|\vec{r}_2\|}$

Exemple : dans le système cubique, la valeur des angles entre les plans : (111) et (100) est $54,73^\circ$; (111) et (110) est $35,26^\circ$

* **Distance interréticulaire :** distance séparant deux plans réticulaires successifs, parallèles et voisins de la même famille, on appelle distance interréticulaire notée d_{hkl} . Cette distance est liée aux dimensions et aux angles de la maille.



SYSTÈME	X
cubique	$\frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$
quadratique	$\frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$
orthorhombique	$\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$
hexagonal	$\frac{4}{3} \frac{(h^2 + hk + k^2)}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$
monoclinique	$\frac{h^2}{a^2 \sin^2 \beta} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2 \sin^2 \beta} - \frac{2hl \cos \beta}{ac \sin^2 \beta}$
triclinique	$\frac{h^2}{a^2} \sin^2 \alpha + \frac{k^2}{b^2} \sin^2 \beta + \frac{l^2}{c^2} \sin^2 \gamma + \frac{2hk(\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma)}{ab} + \frac{2kl(\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha)}{bc} + \frac{2lh(\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta)}{bc}$ $1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma$
rhomboédrique	$\frac{1}{a^2} \frac{(h^2 + k^2 + l^2) \sin^2 \alpha + 2(hk + kl + lh) \cos^2 \alpha - \cos \alpha}{1 + 2 \cos^3 \alpha - 3 \cos^2 \alpha}$

$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{X}}$

Système cubique : $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$, Système quadratique : $d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$

Système orthorhombique : $d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$, Système hexagonal : $d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{4}{3} \frac{(h^2 + hk + k^2)}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$