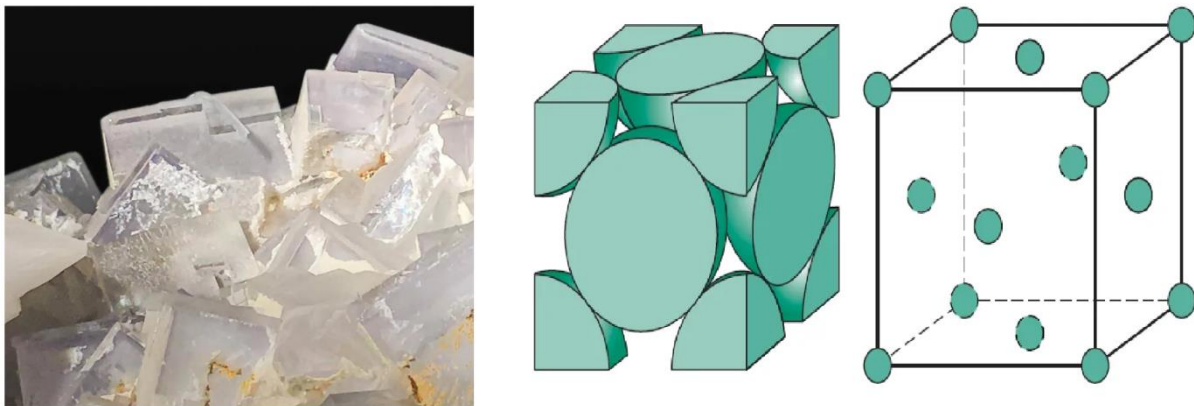


## I.8. Définition d'une forme cristalline

Les cristaux que l'on trouve dans la nature présentent souvent des formes géométriques externes régulières, caractérisées par une disposition ordonnée des faces extérieures, qui reflète une structure interne régulière à l'échelle microscopique. Un cristal est constitué par l'assemblage périodique d'atomes ou de molécules. Des méthodes expérimentales, comme la radiocristallographie, ont révélé que la plupart des solides sont en réalité polycristallins, c'est-à-dire composés de nombreux petits cristaux de dimensions microscopiques.

La texture des minéraux est déterminée par l'arrangement ordonné des molécules qui les constituent. Lors de leur formation, ces molécules s'organisent en un réseau parfaitement régulier, à condition qu'aucun facteur perturbateur ne vienne altérer leur disposition. Cela permet la formation de cristaux aux faces géométriques et symétriques. Il est important de distinguer la forme cristalline (apparence extérieure) de la structure cristalline (organisation interne). Un minéral qui se forme dans un milieu limité ou perturbé peut ne pas présenter une forme cristalline visible, mais sa structure cristalline reste intacte dans toutes ses parties. Ainsi, une forme cristalline implique toujours une structure cristalline sous-jacente.



Tout solide cristallin possède une structure cristalline unique, définie par un motif atomique ou moléculaire répété périodiquement dans l'espace selon un réseau de Bravais. Ce réseau est caractérisé par trois périodicités ( $a$ ,  $b$ ,  $c$ ), dont les nœuds sont occupés par le motif. On peut donc résumer ainsi :

**Structure cristalline (Corps) = Motif (Chair) + Réseau de Bravais (Os).**

### I.8.1. Exemples de structures cristallines

Pour comprendre une structure cristalline, il est essentiel de préciser certaines caractéristiques de référence, telles que le système cristallin, le motif et sa répartition périodique dans le réseau. Voici deux exemples illustratifs : l'halite ( $\text{NaCl}$ ) et la chalcopirite ( $\text{CuFeS}_2$ ).

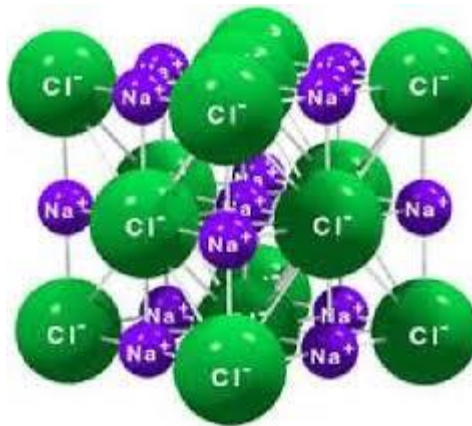
### I.8.1.1. Le chlorure de sodium (NaCl)

La structure cristalline du chlorure de sodium est basée sur un réseau cubique à faces centrées (CFC). Elle comprend deux motifs : les atomes de sodium (Na) et les atomes de chlore (Cl), appartenant à la famille des cristaux ioniques. Les atomes de chlore occupent les sommets et les centres des faces du cube, tandis que les atomes de sodium se situent au centre de la maille et au milieu de chaque arête.

Chaque atome de chlore est entouré de six atomes de sodium, et inversement. La distribution des atomes dans la maille est la suivante :

Cl : (0, 0, 0)

Na : ( $\frac{1}{2}$ , 0, 0), (0,  $\frac{1}{2}$ , 0), (0, 0,  $\frac{1}{2}$ ), ( $\frac{1}{2}$ ,  $\frac{1}{2}$ ,  $\frac{1}{2}$ ).



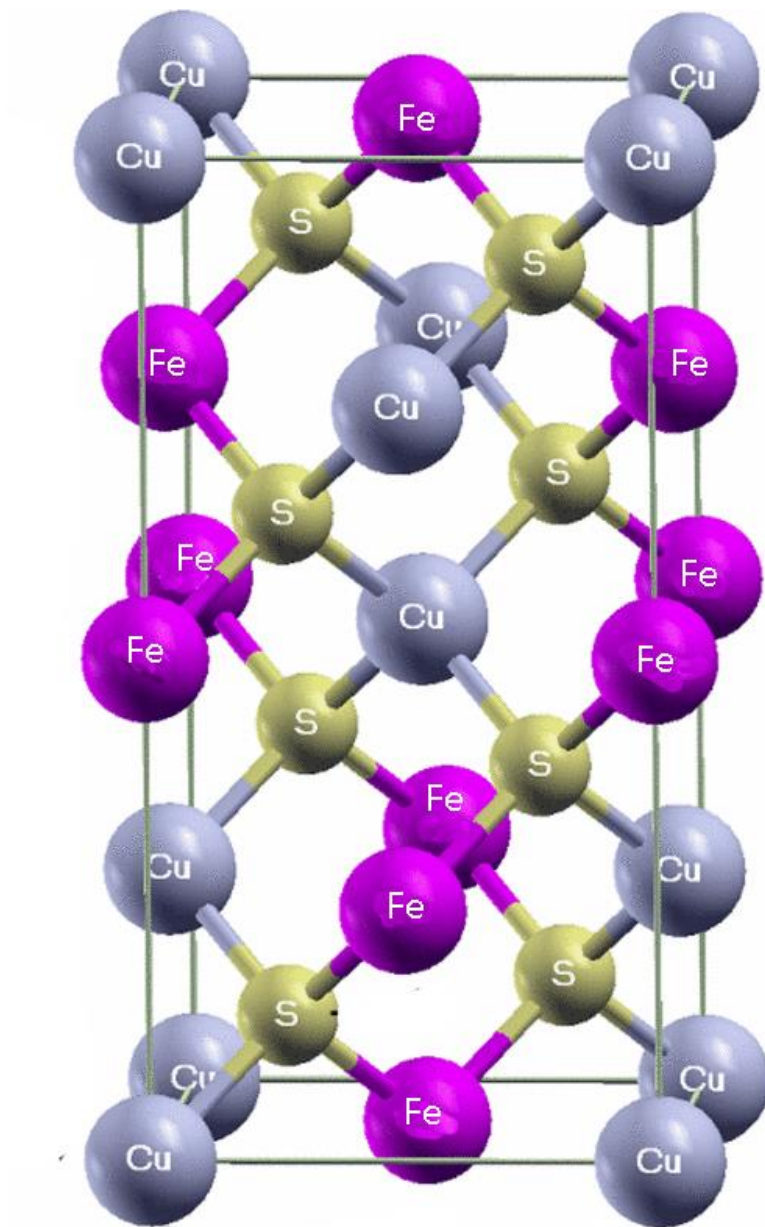
### I.8.1.2. La chalcopyrite (CuFeS<sub>2</sub>)

La structure cristalline de la chalcopyrite est définie dans un réseau tétragonal centré (I). Elle est constituée de trois motifs : le cuivre (Cu), le fer (Fe) et le soufre (S), d'où son appellation de bisulfure de fer et de cuivre.

Les atomes de cuivre occupent les sommets, le centre et les faces du parallélépipède, tandis que les atomes de fer se situent au milieu des arêtes de l'axe oz et sur les faces. Les atomes de soufre, quant à eux, sont positionnés à l'intérieur de la structure, aux coordonnées suivantes :

( $\frac{1}{4}$ ,  $\frac{1}{4}$ ,  $\frac{1}{4}$ ), ( $\frac{1}{4}$ ,  $\frac{1}{4}$ ,  $\frac{5}{4}$ ), ( $\frac{3}{4}$ ,  $\frac{1}{4}$ ,  $\frac{3}{4}$ ), ( $\frac{3}{4}$ ,  $\frac{1}{4}$ ,  $\frac{7}{4}$ ),

( $\frac{1}{4}$ ,  $\frac{3}{4}$ ,  $\frac{3}{4}$ ), ( $\frac{1}{4}$ ,  $\frac{3}{4}$ ,  $\frac{7}{4}$ ), ( $\frac{3}{4}$ ,  $\frac{3}{4}$ ,  $\frac{1}{4}$ ), ( $\frac{3}{4}$ ,  $\frac{3}{4}$ ,  $\frac{5}{4}$ ).



## I.9. Autres propriétés vectorielles

### I.9.1. La compacité (C)

La compacité représente le pourcentage du volume de la maille occupé par les atomes, considérés comme des sphères. Elle est définie par le rapport entre le volume occupé par les atomes

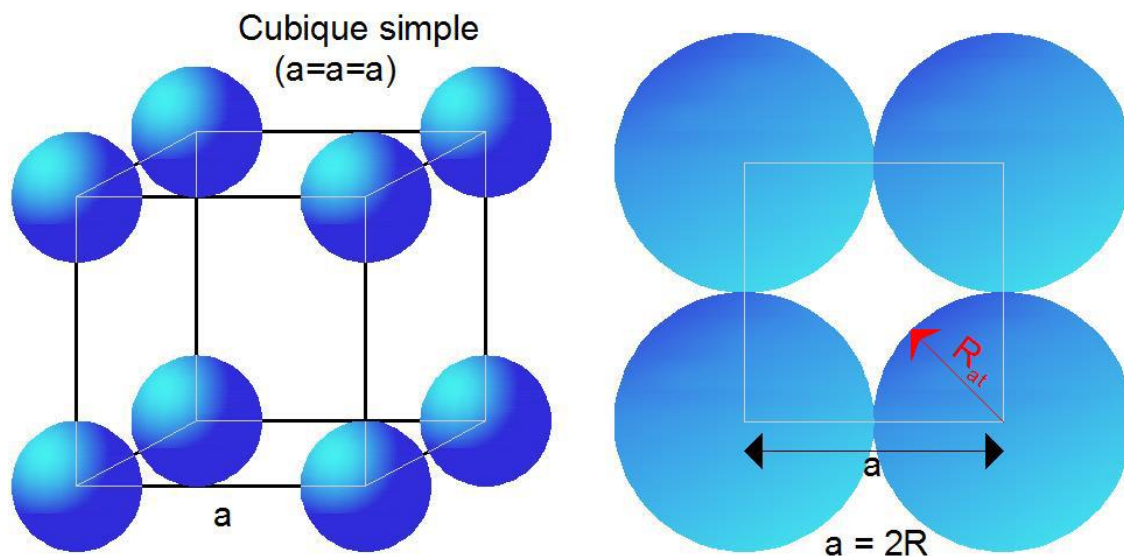
et le volume total de la maille :  $C = \frac{V_{\text{Atome}}}{V_{\text{Maille}}}$

Pour calculer la compacité, il est nécessaire de déterminer certains paramètres :

- La longueur de l'arête (a) de la maille,
- Le rayon atomique (R\_at),
- La multiplicité (M), qui correspond au nombre d'atomes contribuant effectivement au volume de la maille.

Prenons l'exemple d'une maille cubique simple. Cette maille est constituée de huit atomes situés aux sommets du cube. Chaque atome situé à un sommet est partagé entre huit mailles adjacentes, donc sa contribution au volume de la maille est de 1/8. La multiplicité totale est donc:

$$M = 8 \times \frac{1}{8} = 1$$



Cela signifie qu'un seul atome contribue pleinement au volume de la maille.

En calculant la compacité, on trouve que 52 % du volume de la maille est occupé par les atomes, tandis que les 48 % restants correspondent à des vides ou interstices. Ces espaces vides peuvent accueillir d'autres éléments, notamment dans les sites interstitiels.

Prenons un autre exemple de structure cristalline : une maille cubique centrée. À partir de cette maille, nous allons déterminer sa compacité. Cette maille est constituée de neuf atomes : huit atomes situés aux sommets du cube (un atome par sommet) et un atome au centre de la maille.

Pour calculer la compacité, nous devons d'abord déterminer plusieurs paramètres :

Le paramètre  $a$ , qui correspond à la longueur de l'arête de la maille,

La multiplicité ( $M$ ),

Le rayon atomique ( $R_{at}$ ),

Un paramètre supplémentaire  $L$ , qui représente la diagonale du cube.

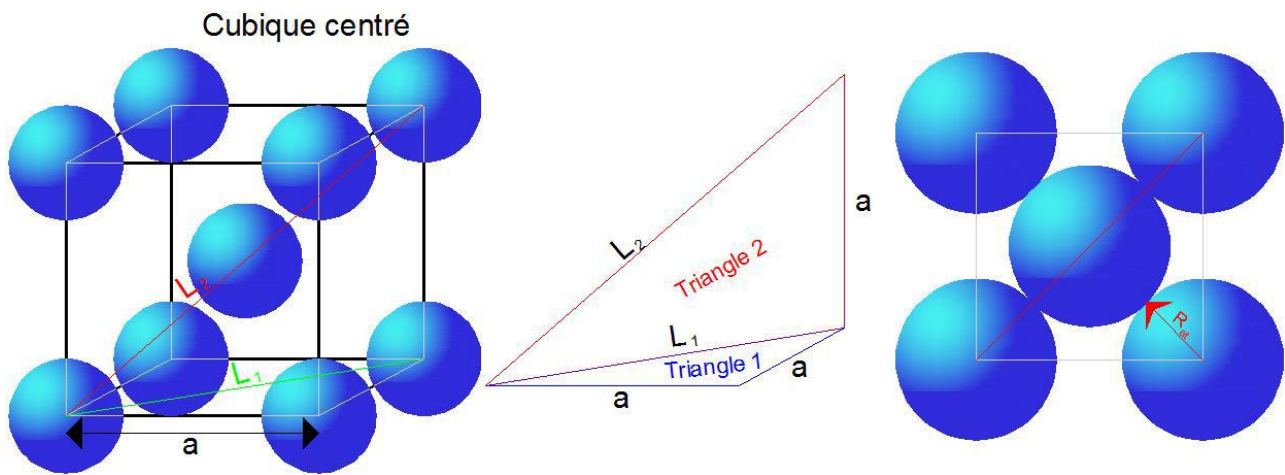
La compacité est calculée à l'aide de la formule :

$$C = \frac{V_{Atome}}{V_{Maille}}$$

La multiplicité ( $M$ ) pour une maille cubique centrée est :

$$M = 8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$$

Cela signifie que le volume de la maille contient l'équivalent de deux atomes.

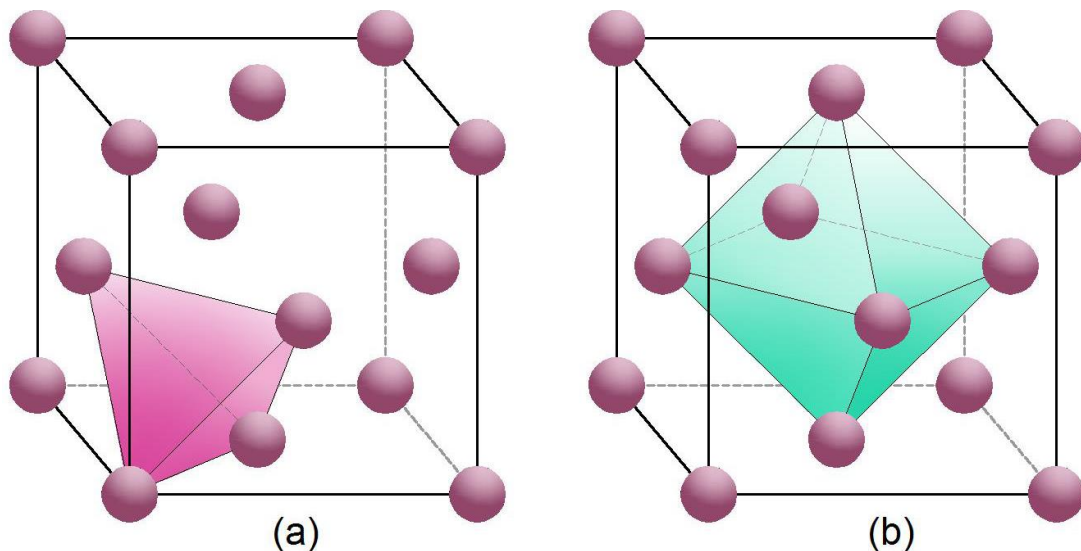


### I.9.2. Sites interstitiels

Comme mentionné précédemment, le volume d'une maille n'est jamais entièrement occupé par les atomes (moins de 100 %). Les espaces vides, appelés sites interstitiels ou interstices, peuvent être de deux types principaux : tétraédriques et octaédriques. Ces sites peuvent accueillir d'autres atomes.

✚ Un site tétraédrique (a) est formé par un atome central relié à trois autres atomes, créant ainsi une forme de tétraèdre.

✚ Un site octaédrique (b) est constitué de deux triangles de trois atomes chacun, superposés pour former une structure en octaèdre.



Le rayon d'un site interstitiel, noté  $R_I$ , correspond au rayon maximal que peut avoir un atome pour s'insérer dans ces sites sans déformer la maille cristalline. Cette capacité d'accueil est appelée habitabilité. Cependant, avant de déterminer cette habitabilité, il est essentiel de localiser les sites interstitiels, de les identifier et de compter leur nombre, c'est-à-dire d'évaluer leur population dans la maille.