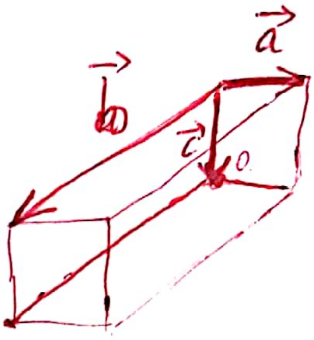
Cristallographie

→ Volume de la maille :

$$\boxed{V = \underbrace{(\vec{a} \wedge \vec{b})}_{\text{Aire du parallélogramme.}} \cdot \vec{c}}$$



→ Multiplicité d'une maille :

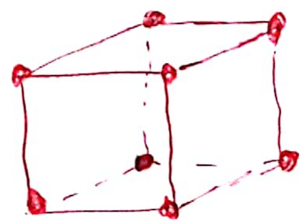
Le nombre de motifs que contient cette maille :

Règle : Un motif appartenant à n mailles se compte en $\frac{1}{n}$

Ex :

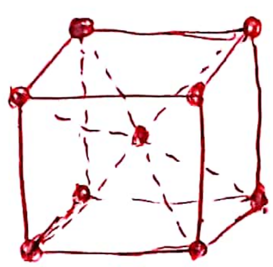
* Cubique : Chaque motif (8) appartient à 8 mailles donc la multiplicité

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



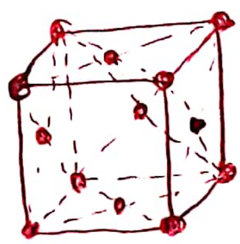
* Cubique centré : Les sommets (8) appartiennent à 8 mailles, le motif du centre ∈ à une maille donc

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



* Cubique faces centrées : Les sommets (8) ∈ à 8 mailles, les motifs sur les faces (6) ∈ à 2 mailles donc

$$N = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$$



→ **Compacité :**

$$\boxed{C = \frac{V_{occ}}{V_{maille}}}$$

$$\boxed{V_{occ} = N.v = N.\left(\frac{4}{3}\pi R^3\right)}$$

(En général dans le modèle des sphères dures.)

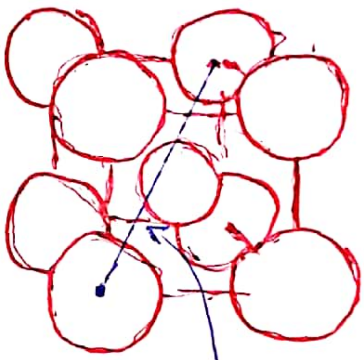
Exemple :

* Cubique centré :

$$C = \frac{V_{occ}}{V_{maille}} = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi R^3}{a^3}$$

$$= \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi R^3}{\left(\frac{4}{\sqrt{3}} R\right)^3}$$

$$\boxed{C \simeq 0,68}$$

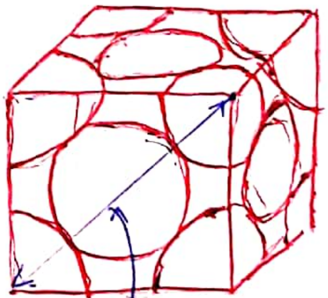


* CFC :

$$C = \frac{V_{occ}}{V_{maille}} = \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi R^3}{a^3}$$

$$= \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi R^3}{\left(\frac{4}{\sqrt{2}} R\right)^3}$$

$$\boxed{C \simeq 0,74}$$



→ **Masse volumique :**

$$\boxed{\rho = \frac{m_{maille}}{V_{maille}} = \frac{N \times m_{motif}}{V_{maille}} = \frac{N \times \frac{M}{N_A}}{V_{maille}} = \frac{N \cdot M}{N_A \cdot V_{maille}}}$$

M : masse molaire

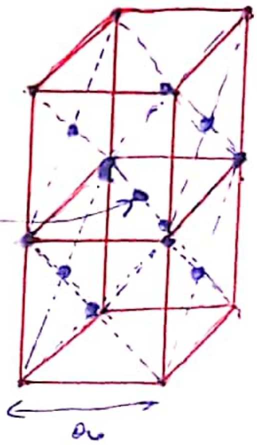
→ **Coordinance :** Nombre de voisins les plus proches de l'un atome.

Exemple :

* **Cubique centré :** 8 voisins les plus proches, ie : l'atome du centre a 8 voisins sur les sommets donc la coordinence est 8.

*) **Cubique face centré :**

La coordinence = 12 ⟸ Cet atome a 12 voisins les plus proches $d = \frac{\sqrt{2}}{2} a$



→ **Structure compacte :**

structure dont la compacité est maximale (Problème mathématique) Il en existe 2 :

* CFC
* hC

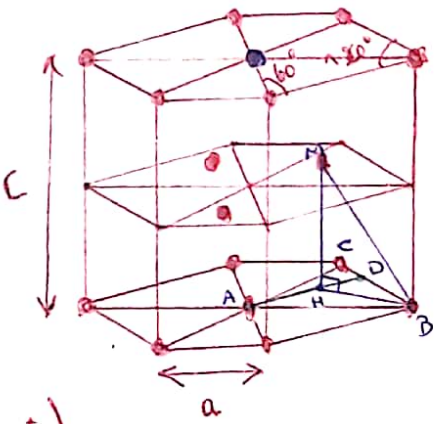
} → $C = 74\ \%$

Caractéristique : Coordinence = 12

→ **Hexagonale compacte :**

Multiplicité : $N = 12 \times \frac{1}{6} + 2 \times \frac{1}{2} + 3 \times 1.$

$$\boxed{N = 6}$$



Coordinance : L'atome en bleu a 12 voisins les plus proches ($d = 2R = a$)

Relation entre a et c : On $a = 2R$ (Evident)

Dans le triangle MBH : $BM = 2R = a$, $MH = \frac{c}{2}$, $BH = \frac{2}{3} AD = \frac{2}{3} \times \frac{\sqrt{3}}{2} a = \frac{a}{\sqrt{3}}$

On a $BM^2 = MH^2 + BH^2 \Longrightarrow c = 2\sqrt{\frac{2}{3}}\, a = 4\sqrt{\frac{2}{3}}\, R$

Volume de la maille :

$$V_{maille} = 3 \times \underbrace{\Big(\underbrace{(a \times a \times \sin 120)}_{\text{Volume du losange}} \times c \Big)}_{\text{Volume de la maille élementaire}}$$

Volume de la maille.

$$= 3 a^2 c \frac{\sqrt{3}}{2}$$

$$= 3 \times 4R^2 \times 4\sqrt{\frac{2}{3}}\, R \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}$$

$$V_{maille} = 24\sqrt{2}\, R^3$$

Compacité :

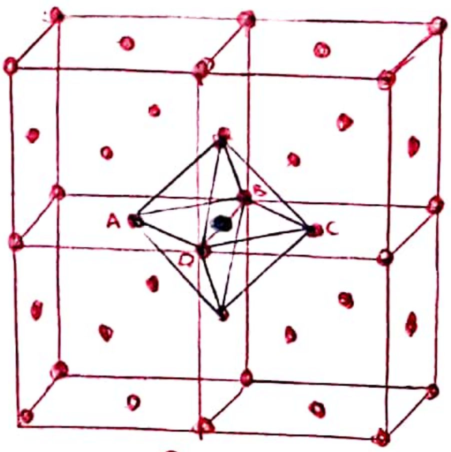
$$C = \frac{V_{occ}}{V_{maill}} = \frac{6 \times \frac{4}{3}\pi \cancel{R^3}}{24\sqrt{2}\,\cancel{R^3}} = 74\%$$

→ Sites octaédriques :

Espaces vides au centre d'un octaèdre régulier 

Pour CFC :

L'atome en noir rempli le site tétraédrique.



$\frac{\sqrt{2}}{2} a$ / $BC = a$.

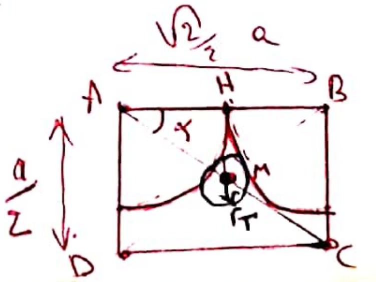
donc Habitabilité : $r_0 = \frac{BC - 2R}{2} = \frac{a - \frac{\sqrt{2}}{2} a}{2}$

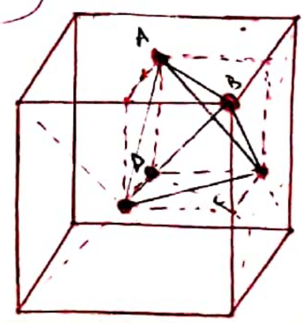
donc $\boxed{r_0 = \frac{a}{2}\left(1 - \frac{\sqrt{2}}{2}\right)}$

→ Site tétraédrique :

$$\cos\alpha = \frac{AH}{AM} = \frac{AB}{AC}$$

$$\Rightarrow \frac{\frac{\sqrt{2}}{4} a}{R + r_T} = \frac{\frac{\sqrt{2}}{2} a}{\sqrt{\frac{1}{2}a + \frac{1}{4}a}}$$





$$\Rightarrow \boxed{r_T = \frac{\sqrt{3}}{4}a - R = \left(\sqrt{\frac{3}{2}} - 1\right)R = \left(\sqrt{3} - \sqrt{2}\right)\frac{a}{4}}$$

Voir le reste dans le polycope (Bien résumé)