J. Gaudé

Notions élémentaires de cristallographie

Un autre regard sur les empilements

Une nouvelle présentation illustrée des empilements, alliant rigueur et originalité visuelle, est proposée dans un but essentiellement didactique.

I. Introduction

Lorsque se présente le moment d'aborder, en cours ou en TD, les premières notions de cristallographie et, plus précisément, l'étude des empilements, l'enseignant se heurte immédiatement à l'aspect spatial du sujet et donc à l'aptitude de ses étudiants à percevoir ou à imaginer un agencement atomique précis dans les volumes décrits.

Cette première difficulté est rapidement suivie d'une seconde bien plus délicate : la vision des interstices ou sites de diverses natures que les atomes ordonnés cachent plus ou moins.

Bien entendu, l'aide de dessins ou schémas se révèle indispensable dans ce genre de découverte et beaucoup d'ouvrages ou de publications en fournissent.

L'enseignant peut s'en satisfaire ou être amené, pour diverses raisons, à en réaliser lui-même. Car, il faut bien le reconnaître, la littérature scientifique offre souvent des croquis stéréotypés et un peu figés.

C'est à ce propos que nous voudrions intervenir ici, en essayant de "regarder" autrement ces empilements.

Ces volumes géométriques se prêtent bien, en effet, à l'utilisation de la perspective qui présente, elle-même, l'intérêt de faire de l'observateur un spectateur actif.

C'est donc avec le double souci de privilégier l'information structurale et d'apporter un plus au niveau de la perception visuelle que nous proposons les quelques croquis qui suivent.

II. Étude des empilements

Lorsqu'on juxtapose, pour en faire une couche uniforme, une série de sphères toutes semblables, on peut partir sur deux bases : l'une réalisant tout contact possible entre les sphères, l'autre plus lâche. Selon le cas, le motif de la couche sera alors soit hexagonal (1er cas) soit carré (2e cas) (*figure 1*).

Aux creux (dans le premier cas, une fois sur deux étant donné le gabarit des sphères) de cette première couche, puis aux creux de la seconde, etc., l'addition des couches successives comportant le

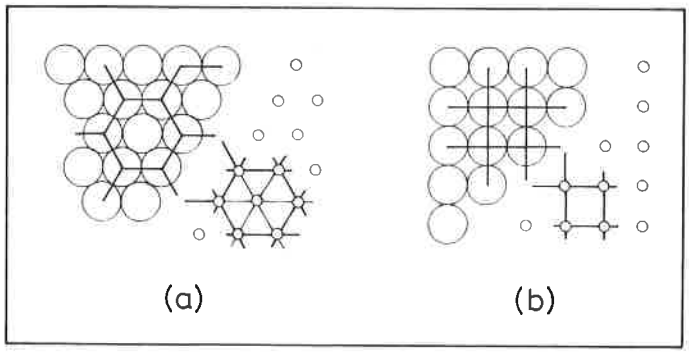

FIGURE 1. - *Arrangement des sphères de la couche initiale. Selon les contacts réalisés entre voisines, un motif hexagonal* (a) *ou carré* (b) *apparaît.*

Laboratoire de cristallochimie, URA n° 254, UER "SPM", campus de Beaulieu, 35042 Rennes Cedex.

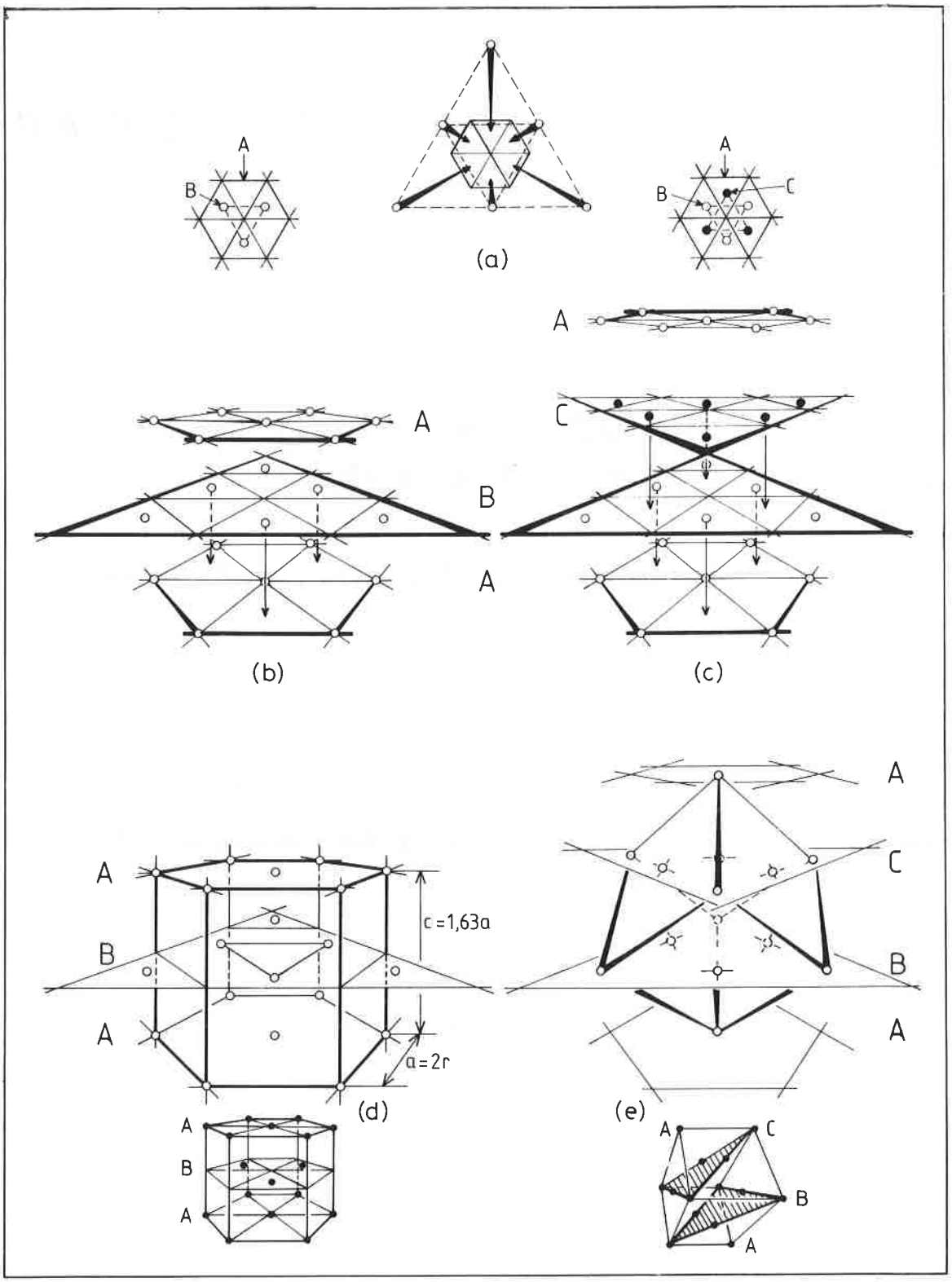

FIGURE 2. - *La deuxième couche peut être placée de deux manières différentes sur la première* (a). *La succession ABA...* (b) *ou ABCA...* (c) *amène respectivement la formation d'un prisme hexagonal compact HC* (d) *et celle d'un prisme cubique à faces centrées CFC* (e).

même motif que celle de base, va différencier plusieurs types d'empilements.

1. *Cas où la compacité est maximale (figure 2)*

Deux arrangements sont possibles comme l'indique la *figure 2a*. Si la première couche est identifiée par la lettre A, la seconde (cf. condition indiquée plus haut) sera identifiée B, car non superposable à A, et elle occupera l'une des deux séries de creux disponibles.

La troisième couche pourra alors être soit A (en superposition exacte avec A de base), soit C, car différente des deux autres, nécessitant dans ce cas l'adjonction d'une quatrième couche qui sera encore A.

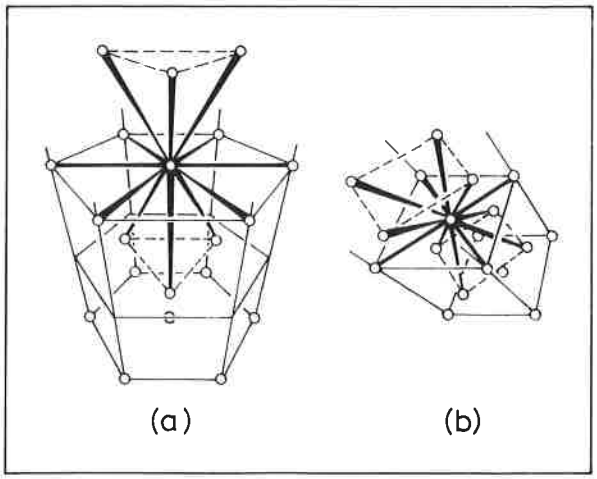

FIGURE 3. - *Chaque sphère est en contact avec douze voisines* (a) : *HC*, (b) : *CFC*.

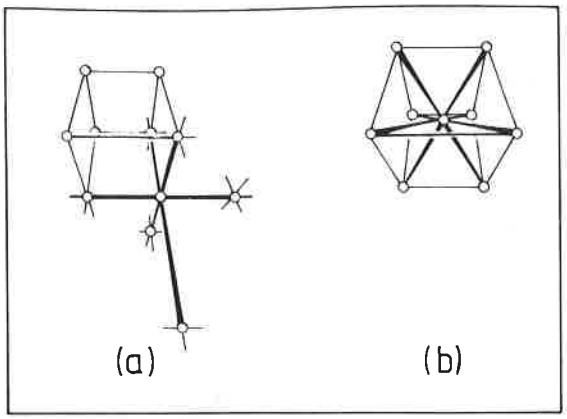

FIGURE 5. - *Les deux empilements à compacité moindre ont des contacts entre sphères voisines limités à 6 pour CS* (a) *et 8 pour CC* (b).

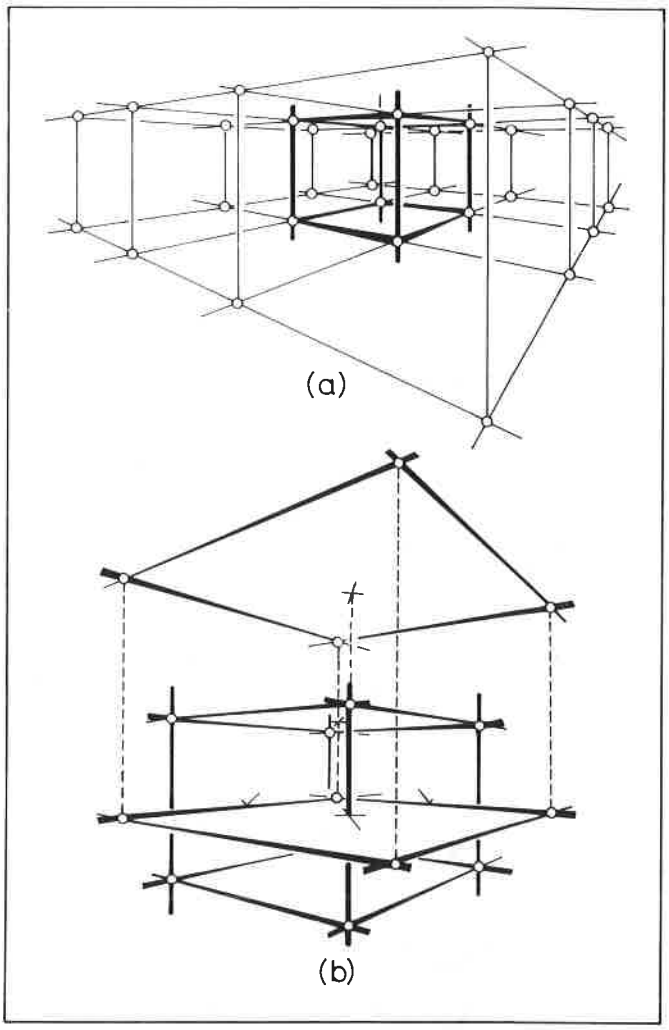

FIGURE 4. - *Deux couches à motif carré superposable forment le cubique simple ou primitif CS* (a) ; *l'intercalation d'une autre couche aux creux des deux premières et la rupture des contacts entre sphères des plans horizontaux amènent le cubique* (corps) *centré C(C)C* (b).

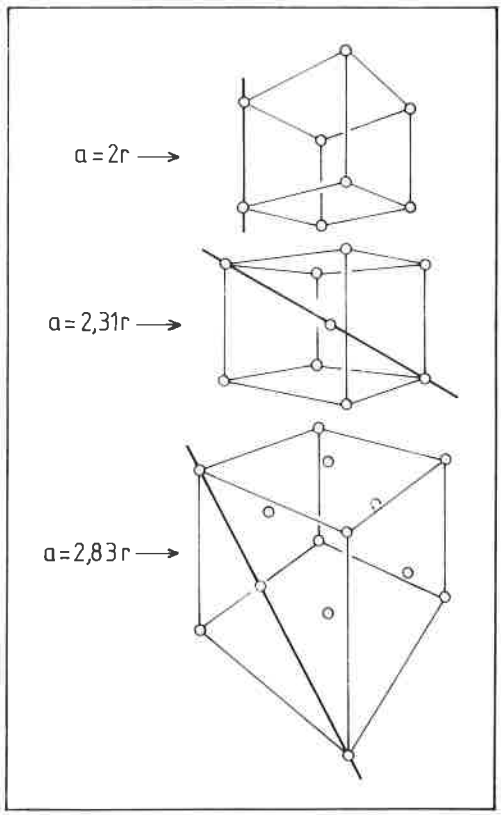

FIGURE 6. - *Volume comparé des trois empilements cubiques. De bas en haut CFC, CC, CS. La flèche indique l'arête référence. Une direction de contacts entre sphères de rayon r est indiquée.*

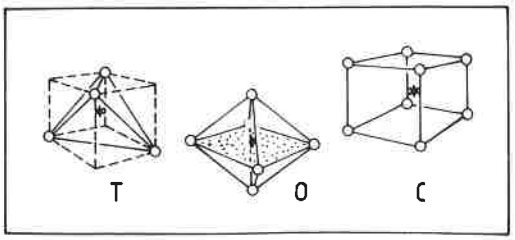

FIGURE 7. - *Les sites ou interstices laissés vacants par l'arrangement des atomes peuvent être géométriquement définis : T* (tétraédrique, 4 atomes), *O* (octaédrique, 6 atomes), *et C* (cubique, 8 atomes). *En grisé le plan de l'octaèdre qui servira de repère dans les dessins qui suivent.*

Deux prismes différents prendront naissance comme le montrent les *figures 2b-2d* et 2c-2e : le premier est dit hexagonal compact (HC), le second cubique à faces centrées (CFC).

L'espace étant rempli de prismes tous identiques, les sphères les

plus externes se partagent avec les volumes voisins et, par conséquent, le nombre réel de sphères dans les deux prisme modèles n'est respectivement que de 6 (HC) et 4 (CFC).

Comme, par ailleurs, l'ordonnancement des sphères est, du point de vue des contacts, le même dans les deux cas, chaque sphère sera entourée de douze voisines (*figures 3a et 3b*). Ce nombre est dit nombre de coordination ou nombre de premiers voisins (ou de voisins immédiats).

Enfin, la compacité (rapport du volume occupé par les sphères, sur le volume du prisme) sera la même pour ces deux empilements (74 %).

2. Cas où la compacité est moindre

Deux prismes cubiques seront formés ici ; l'un en superposant deux couches identiques : c'est le type cubique simple (CS) ou primitif (*figure 4a*), l'autre en intercalant aux centres des cubes précédents une couche semblable aux deux premières, mais en obligeant les prismes ainsi obtenus (quadratiques) à se déformer par rupture des contacts entre toutes les sphères des plans horizontaux : c'est le type cubique (corps) centré (C(C)C) (*figure 4b*).

Ces deux cubes ne contiennent respectivement que 1 et 2 sphères et le nombre de coordination de chacune est égal à 6 ou 8 comme le montre la *figure 5* (a et b).

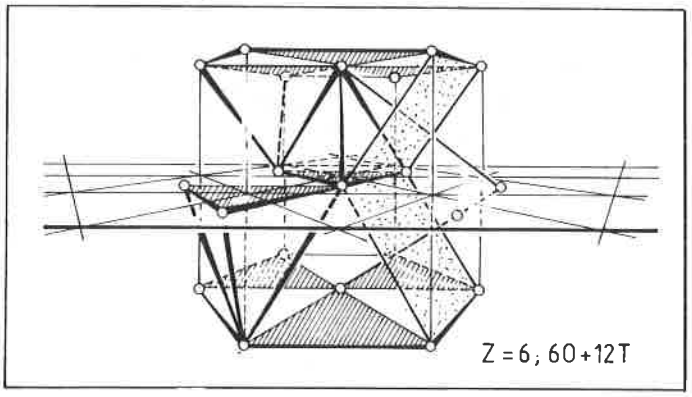

FIGURE 8. - *Sites tétraédriques et octaédriques de l'empilement HC. Toutes les bases des tétraèdres internes sont précisées ; de plus, le long de chaque arête il existe deux tétraèdres accolés par une base. Tous les sites octaèdriques prennent appui, deux par deux, sur les trois atomes du plan B comme indiqué.*

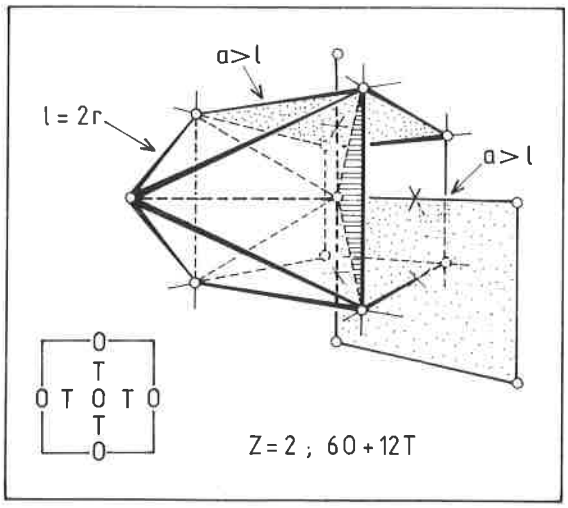

FIGURE 10. - *La face de l'empilement CC est le siège de plusieurs sites comme indiqué en rapport avec le dessin du cube.*

3. Comparaison des trois empilements cubiques

Si r est le rayon d'une sphère, l'agencement des contacts dans l'espace et le nombre de sphères dans l'empilement imposent à ces prismes des volumes différents ainsi que l'explique, de bas en haut, la *figure 6* où on aura, le long des directions indiquées :

$$\text{CFC} : \frac{a\sqrt{2}}{2} = 2r \qquad \text{CC} : \frac{a\sqrt{3}}{2} = 2r \qquad \text{CS} : a = 2r$$

III. Étude des interstices

Les édifices précédemment décrits sont assimilés à des empilements atomiques à présent.

Il existe trois types de "vides", encore appelés sites, dans lequels peuvent se placer des atomes, en général de taille plus petite que ceux qui forment les prismes.

Ces sites sont définis chacun par un certain nombre d'atomes occupant l'espace selon une géométrie particulière (*figure 7*) : tétraédrique (4 atomes), octaédrique (6 atomes) et cubique (8 atomes). Il faut noter que ces sites sont parfaitement réguliers, car chacune de leur arête vaut deux fois le rayon de l'atome.

Pour, d'une part, limiter le nombre de dessins et, d'autre part, ne pas les encombrer, seuls quelques sites ont été représentés dans les illustrations qui suivent. Offrant une perception visuelle satisfaisante, ils permettent d'imaginer les autres du même type

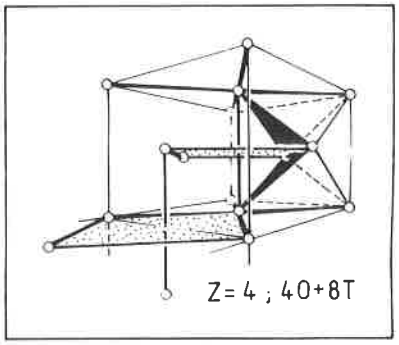

FIGURE 9. - *Dans l'empilement CFC, les sites tétraédriques prennent appui sur les huit faces de l'octaèdre central. Leurs arêtes dans les plans horizontaux sont tracées. Chaque milieu d'arête du cube est une position octaédrique.*

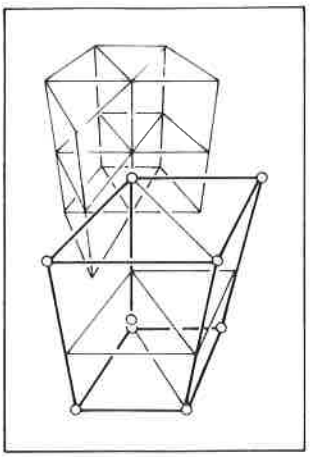

FIGURE 11. - *Maille élémentaire de la structure hexagonale dérivée de l'empilement compact.*

en se basant sur des repères équivalents distribués à l'entour dans les empilements.

Les *figures 8, 9 et 10* regroupent donc tous les sites disponibles et rappellent leur nombre réel total dans les trois principaux empilements. Les prismes voisins (dont il faut tenir compte dans le partage des sites comme des sphères) qui apportent des atomes complémentaires pour obtenir la géométrie voulue ont été négligés, seuls leurs atomes ont été conservés.

Deux remarques sont nécessaires ici :

1. le site cubique correspond au cube simple (cf. *figure 4a* ou *7c*),
2. dans le cubique centré, les tétraèdres et les octaèdres sont déformés, car deux types de distances séparent les atomes comme indiqué sur la *figure 10*.

IV. Conclusion

Les illustrations que nous avons réalisées l'ont été avec le souci d'expliciter le plus simplement possible toutes les caractéristiques des empilements. Si nous n'avons pas respecté, pour diverses raisons, toutes les proportions des prismes originaux, nous avons utilisé la perspective de la façon la plus rigoureuse.

Pour conclure, cf. la *figure 11*. Elle représente, dérivée de l'empilement correspondant, la maille cristallographique caractérisant la structure hexagonale.

Structure(s), un autre regard ?...

Remerciements : Je remercie vivement Monsieur L. Hubert pour ses conseils techniques et la qualité de son patient travail de transcription des illustrations.

COMMUNIQUE

En 1985, deux milliards de photocopies ont privé la Presse Française d'un milliard de francs de chiffre d'affaires (d'après les études INFRATEST et BIPE). Et depuis le phénomène n'a fait que s'accentuer avec la progresssion du parc de machines, augmentant d'autant le préjudice causé.

De toute évidence, les publications destinées aux entreprises et aux professionnels - qui constituent essentiellement un véhicule d'information "utile" - sont parmi les principales victimes du "photocopillage".

Il faut donc bien savoir que l'abus de la photocopie risque, à terme, de condamner une forme de presse qui demeure le principal moyen de formation permanente des acteurs de la vie économique et sociale.

Il faut aussi considérer que distribuer des photocopies c'est communiquer une information appauvrie dans la mesure où elle est privée de l'enrichissement apporté par le contenu rédactionnel et publicitaire de la revue dont elle est extraite.

Il ne faut pas oublier enfin que, aux termes de la loi du 11 mars 1957, toute reproduction ou représentation intégrale ou partielle par quelque procédé que ce soit, des pages publiées dans la présente publication faite sans l'autorisation de l'éditeur est illicite et constitue une contrefaçon.

AVANT DE PHOTOCOPIER
PENSEZ A TOUT CELA

SPEP

technisciences

LIBRAIRIE INTERNATIONALE

103, rue La Fayette 75010 PARIS
TÉL. : (1) 42.85.50.44

CHIMIE
•
INDUSTRIES CHIMIQUES
•
BIOLOGIE
•
PHARMACIE
•
INFORMATIQUE

Tous ouvrages français et étrangers

Abonnements aux périodiques de tous pays

Guides Dictionnaires Annuaires

Sur simple demande, service gratuit de nos catalogues

Conditions spéciales aux abonnés de l'actualité chimique