La multiplicité des mailles

La décomposition abstraite des ensembles atomiques cristallins réels en 2 éléments n'est pas unique. Pour un même cristal, il y a différentes façons de définir sa maille. La figure 10 de l'assemblage de carreaux en montre 4 (cadres rouges).

Par exemple, on aurait pu définir un carreau (maille) avec le rond bleu positionné à gauche. Ou bien un carreau qui soit non pas un rectangle, mais un parallélélogramme. Examinons cette question sur la figure 11 où chaque point représente un motif sur une surface en deux dimensions. Les mailles vertes sont des exemples possibles de mailles simples comportant un seul motif. On les appelle **mailles primitives**. On remarque qu'il n'y a pas un choix unique de maille primitive, mais des choix qui nous sont plus ou moins commodes, plus ou moins parlant par leur simplicité. Simplicité signifie peut-être que nous leur trouvons plus de symétrie.

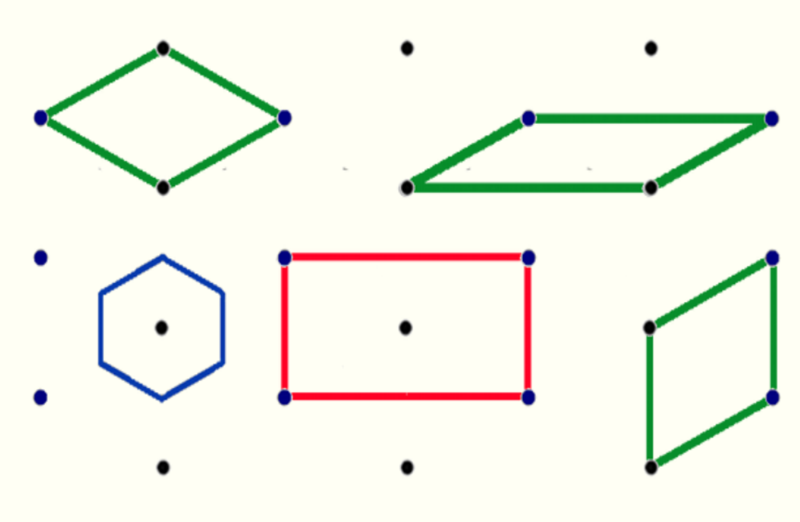


Fig.11- Différents types de mailles dans un réseau rectangulaire centré en 2 dimensions. La maille conventionnelle du réseau (en rouge dans la figure) possède des côtés parallèles aux axes de symétrie du réseau et englobe deux motifs. Les mailles vertes sont des exemples de mailles primitives. En bleu, la maille de Wigner-Seitz. © A. Boudet

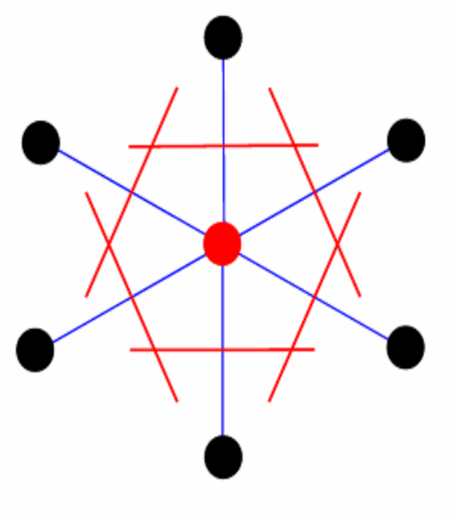


Fig.12- Méthode de détermination d'une cellule de Wigner-Seitz. Image Wikipedia

La maille rouge nous parle encore plus, car elle montre bien les éléments de symétrie. On la retient comme **maille conventionnelle**. Mais on remarque qu'elle comporte deux motifs identiques (l'un à un coin représenté en bleu, l'autre au centre représenté en noir). Les motifs des autres coins sont associées aux mailles contigües. C'est une **maille multiple**.

Il existe toutefois une maille primitive tout-à-fait particulière qui représente parfaitement les symétries internes, c'est la **maille de Wigner-Seitz**. On la construit autour d'un point du réseau (fig.12, point rouge) en traçant les lignes qui le joignent aux points voisins (lignes bleues). On les coupe en leur milieu par un plan perpendiculaire (lignes rouges). La maille ou cellule de Wigner-Seitz est la figure qui en résulte (en rouge). Si on effectue cette construction dans le cas de la maille rectangulaire centrée de la figure 11, on obtient un hexagone (en bleu).

Ces exemples à deux dimensions nous ont permis de comprendre ce que sont les mailles. Dans le cas des cristaux, il nous faut maintenant les imaginer en 3 dimensions. Nous ferons connaissance avec les différentes géométries des réseaux cristallins, puis nous observerons quelques belles cellules polyédriques de Wigner-Seitz dans l'espace.

La géométrie des réseaux cristallins

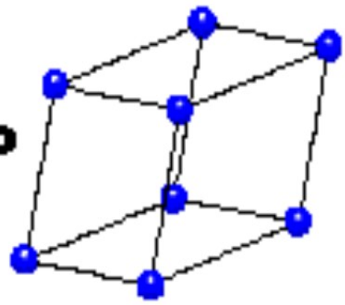
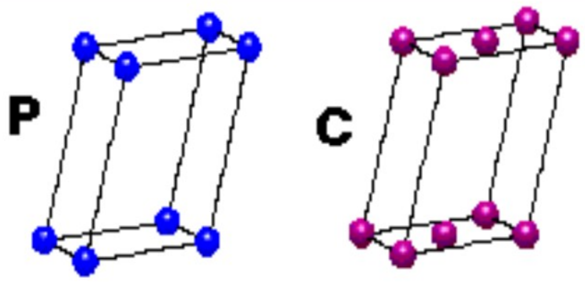
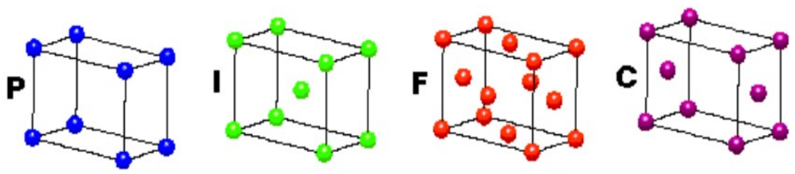
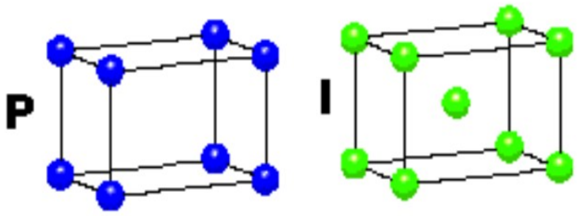
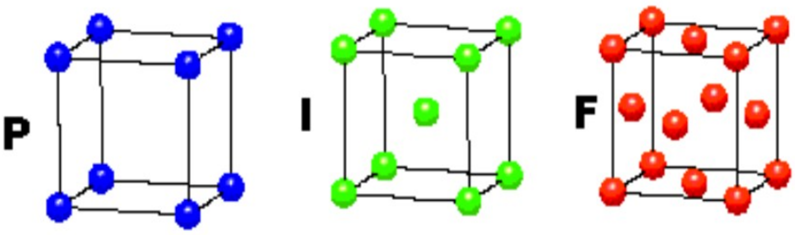
Nous laissons maintenant de côté les motifs de la maille primitive pour nous occuper uniquement des points où ils sont disposés, les réseaux. Quels types de réseaux pouvons-nous découvrir dans l'immense variété des cristaux connus. Mon but n'est pas de faire un catalogue, mais de comprendre comment et de nous émerveiller de la façon dont **la nature se construit sur des bases géométriques**.

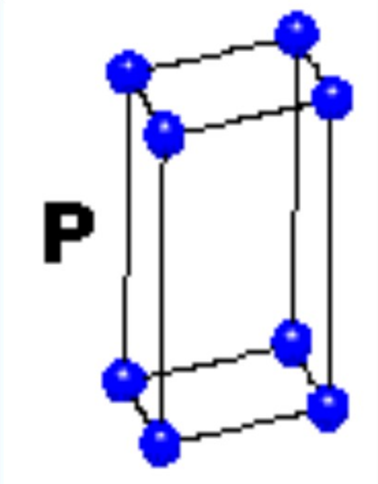
Bien avant la description atomique des cristaux, en recherchant mathématiquement les structures qui sont compatibles avec une périodicité dans les trois directions de l'espace, **Auguste Bravais** (1848) a montré que le nombre de systèmes cristallins possibles était très limité. Il a répertorié **14 types de réseaux** qui sont des variantes de seulement **7 systèmes cristallins**.

Ainsi dans la nature, seulement 7 formes polyédriques de base, **7 briques élémentaires, permettent de construire l'infinité structurale des minéraux**. Toutefois, si leurs formes sont semblables d'un minéral à l'autre, elles varient par leurs **dimensions**. Longueur, largeur, hauteur d'une maille sont spécifiques à chaque forme chimique cristalline.

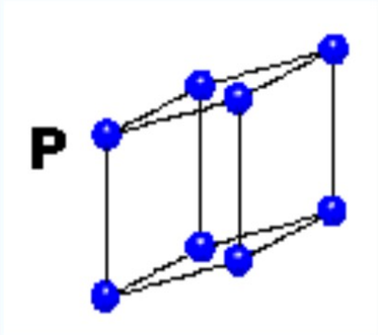
Voici ces 14 types de réseaux (fig.13). Leur maille est parfois primitive (P, en bleu) avec un seul site par maille. Si un deuxième site existe au centre de la maille, c'est une maille centrée (I, en vert). Lorsque chacune des 6 faces comportent un site (F, en rouge), ce site étant commun à deux mailles contigües, cela fait 4 sites par maille. On rencontre parfois aussi des mailles avec seulement deux faces centrées (C, en violet), soit 2 sites par maille.

Fig.13- Les 7 systèmes cristallins et les 14 réseaux. Merci à F. Mompiou pour ces figures

	Le système **triclinique** est le système le plus général car il englobe tous les autres comme des cas particuliers. Les côtés de la maille (appelés *axes*) sont obliques. Leurs dimensions (largeur, longueur et hauteur) sont toutes inégales. On peut le décrire comme un prisme incliné dont les 6 faces sont des parallélogrammes.
	Si nous prenons deux de ces axes (ici ceux du plan horizontal) et que nous les écartons pour ajuster l'angle à 90°, nous obtenons le système **monoclinique**. C'est un parallélépipède incliné avec 4 faces rectangulaires. Les 2 autres sont des parallélogrammes.
	Redressons le 3e axe à la verticale afin qu'il soit à angle droit avec les deux autres et nous obtenons le système **orthorhombique**. C'est un prisme droit avec 6 faces rectangulaires.
	Continuons nos ajustements en modifiant la longueur des axes. Lorsque deux de ces axes ont une longueur égale, une face devient carrée. Nous obtenons le système **quadratique** ou **tétragonal** avec 2 faces carrées et 4 faces rectangulaires.
	Enfin, si le troisième axe a la même longueur que les deux autres, cela devient un cube. C'est le système **cubique**.



Le système **hexagonal** dérive du système orthorhombique en ajustant l'angle de deux axes à 120°. On obtient un prisme droit dont la base est un losange.



Dans le système **rhomboédrique**, les trois axes sont de même longueur et les trois angles sont égaux, mais non droits. Les faces sont toutes des losanges (des rhombes).

Il existe un lien entre la géométrie de ces réseaux à l'échelle atomique et la géométrie des cristaux visibles à l'œil nu. En effet, lorsqu'on le clive, le cristal se fractionne le long des plans atomiques qui contiennent les atomes en plus grande quantité, autrement dit les plans simples de la maille (fig.14). **Les facettes extérieures sont donc la manifestation macroscopique des plans atomiques microscopiques**.

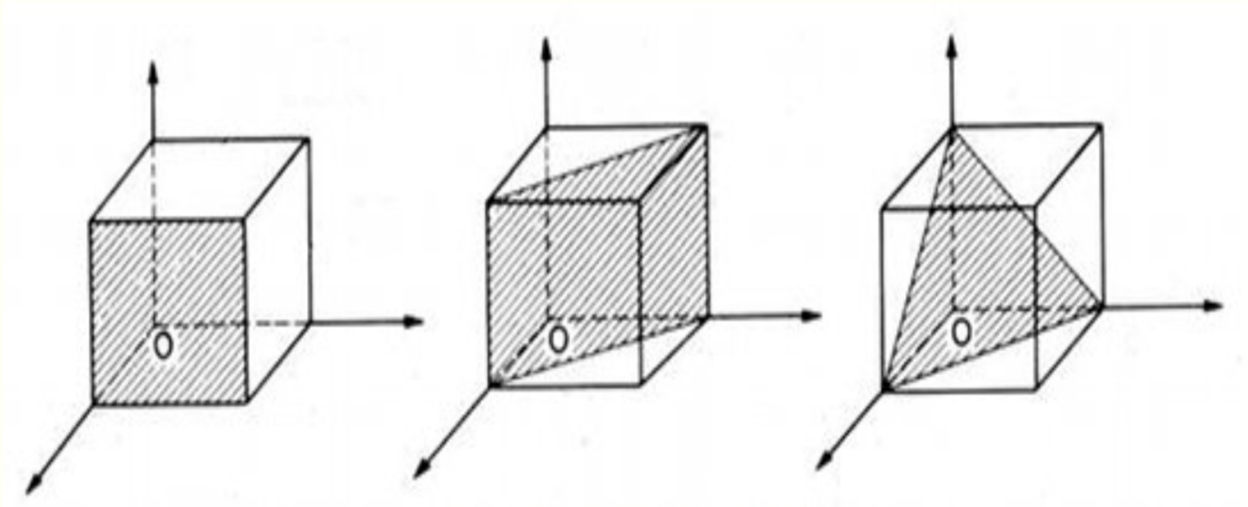


Fig.14- Plans de clivage (hachurés) du système cubique

La cellule polyédrique symétrique de Wigner-Seitz

La maille de Wigner-Seitz (WS) est découpée dans l'espace à trois dimensions selon le procédé exposé plus haut en deux dimensions. Elle est très intéressante du point de vue géométrique.

En effet, puisque pour le dessiner on trace un plan entre deux sites du réseau, cela délimite le territoire de chacun des sites. La cellule étant limitée par des plans, c'est par définition un polyèdre. **On a ainsi découpé l'espace en polyèdres identiques**. Ces polyèdres se touchent et leur empilement remplit donc complètement l'espace, sans aucun vide *(voir en annexe Remplir l'espace)*.

Puisqu'on construit le polyèdre autour d'un site et qu'on tient compte de tous les sites voisins, **il reflète parfaitement les symétries du réseau**.

Illustrons cette géométrie dans le cas du système cubique.

Le cube du réseau cubique simple

La maille WS du réseau cubique simple est un **cube** qui reflète le cube de la maille conventionnelle (fig.15). Les cubes s'empilent parfaitement les uns avec les autres.

L'octaèdre tronqué du réseau cubique centré

Pour dessiner la maille WS du réseau cubique centré (fig.16), partons du site central (en rouge), et imaginons la ligne (en rouge) qui le relie au site central du cube voisin. Le plan qui les sépare à mi-distance est la face du cube (en vert). Les 6 faces du cube conventionnel appartiennent donc à ce polyèdre. Elles sont tronquées par les plans qui séparent le site central des sommets, soit 8 autres faces (en bleu).

Au total, on a un cube à 6 faces carrées tronqué par 8 faces hexagonales, soit 14 faces au total (fig. 16). Il peut être considéré comme un octaèdre (les 8 faces bleues - voir fig.4) dont les sommets sont tronqués par les 6 autres (vertes) (fig.17).

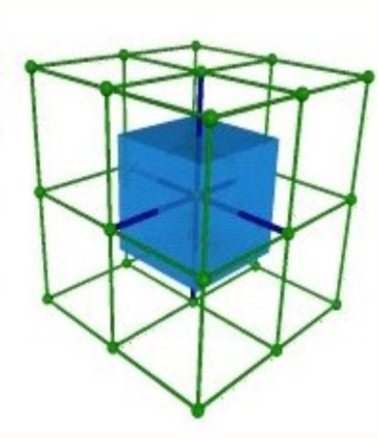


*Fig.15- Maille de Wigner-Seitz du réseau cubique simple: un **cube***
Merci à Laura Malcolm

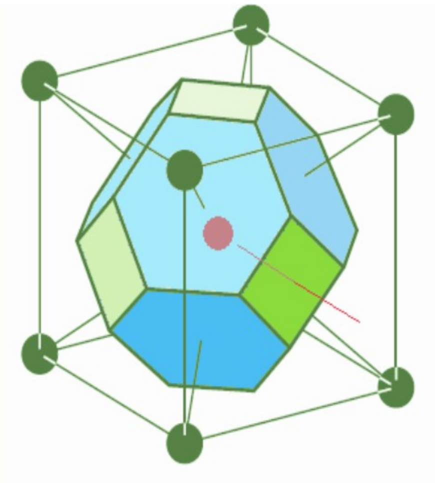


*Fig.16- Maille de Wigner-Seitz du réseau cubique centré: un **octaèdre tronqué**. © A. Boudet*

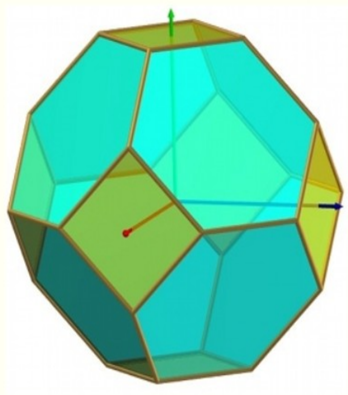


Fig.17- Belle représentation d'un octaèdre tronqué. Merci à Mathcurve

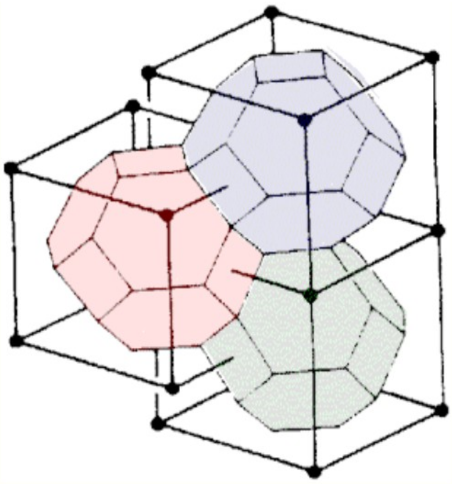


Fig.18- Empilement d'octaèdres tronqués dans le réseau cubique centré. Merci à Laura Malcolm

Comme prévu, lorsqu'on les empilent, ils s'ajustent parfaitement pour remplir l'espace sans vide (fig. 18).