

Prodrome n°1 - Réseau cubique simple

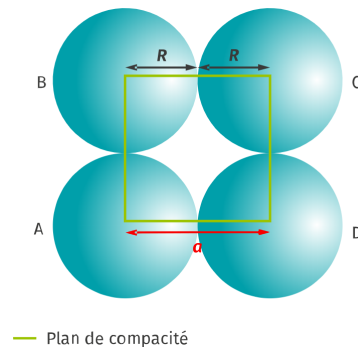
Mohamed NASSIRI

*Représenter la maille en perspective cavalière.
Calculer la compacité dans le cas d'entités chimiques sphériques tangentes.
Dénombrer les atomes par maille.*

Document 1 : La compacité

En cristallographie, la **compacité** (ou taux de remplissage) d'un édifice cristallin, dans le modèle des sphères dures, est le rapport du volume total des sphères d'une maille à celui de la maille qui les contient. C'est le taux d'occupation réel de l'espace. La compacité est donnée par

$$c = \frac{\text{volume occupé par les atomes}}{\text{volume du cube}}$$



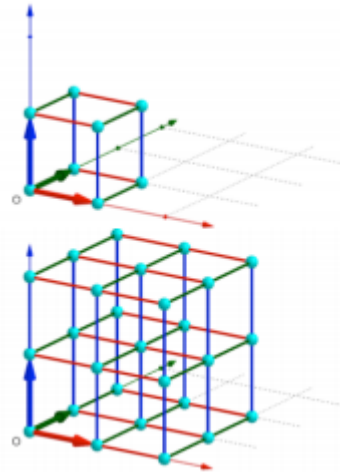
Document 2 : Maille et motif

L'utilisation de logiciel tel que GeoGebra permet de modéliser et de visualiser ce réseau.

Considérons un point origine O et les trois vecteurs unitaires \vec{i} , \vec{j} et \vec{k} de coordonnées respectives $(1; 0; 0)$, $(0; 1; 0)$, $(0; 0; 1)$, colorés respectivement en rouge, vert et bleu ci-contre.

La maille est cubique et est définie par son origine O et trois vecteurs de base.

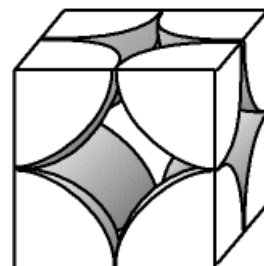
Pour que les sphères centrées aux nœuds du réseau soient tangentes, il faut que leur rayon soit égal à la moitié de la longueur d'une arête de la maille. On peut alors donner un motif qui, par translation selon les trois vecteurs, engendrera tout le cristal.



Document 3 : Nombre effectif d'une maille Z

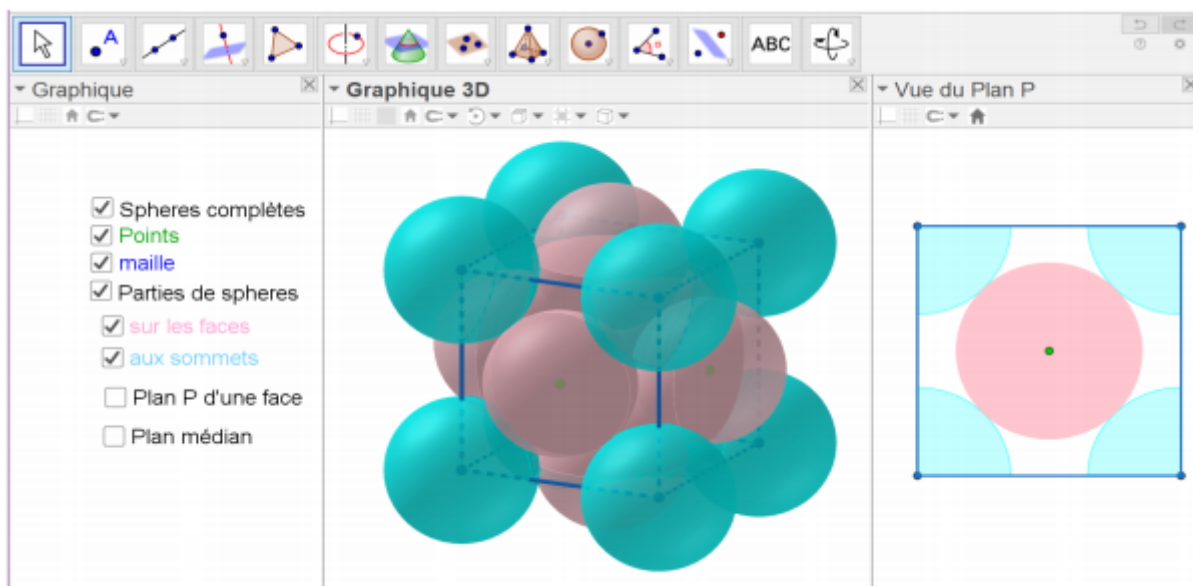
Pour le comptage des atomes par maille, chaque atome au sommet du cube ne compte que pour $\frac{1}{8}$ car il est partagé entre 8 cubes adjacents (ou mailles).

Bien que les atomes soient tangents, on les représente espacés par commodité de lecture.



Document 4 : Visualisation sur Geogebra

Télécharger l'animation Geogebra intitulée « [structure cristalline : cubique simple et à faces centrées](#) ». Cette animation permet à la fois de visualiser les structures cubique simple et cubique à faces centrées et d'obtenir une valeur approchée du rayon correspondant à des sphères tangentes dans les deux cas.



Quelques formules utiles

- Volume d'une sphère d'un cube (de côté a) :

$$V_{\text{cube}} = a^3$$

- Volume d'une sphère (de rayon R) et d'un cube (de côté a) :

$$V_{\text{sphère}} = \frac{4\pi R^3}{3}$$

Questions

1. Donner la relation entre le paramètre de mail a et le rayon d'un atome R .
2. Calculer le volume du cube en fonction de R .
3. Déterminer le nombre d'atomes Z effectivement présents dans la maille.
4. Calculer du volume occupé par les atomes.
5. Calculer la valeur de la compacité de cette maille.