

# La cristallographie

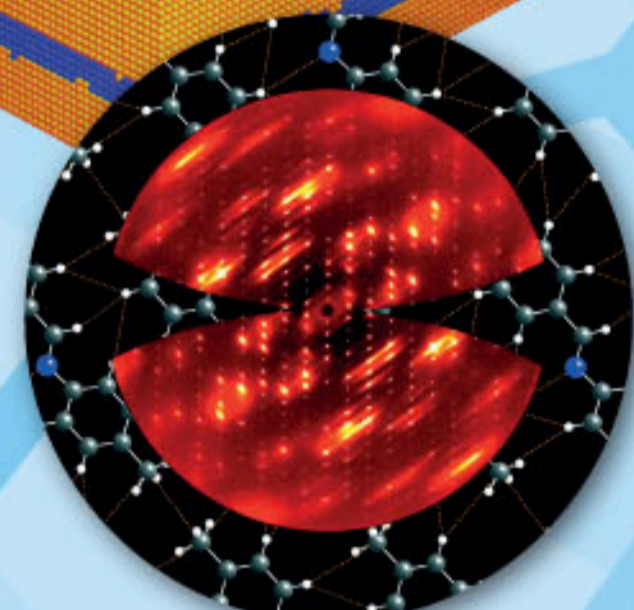
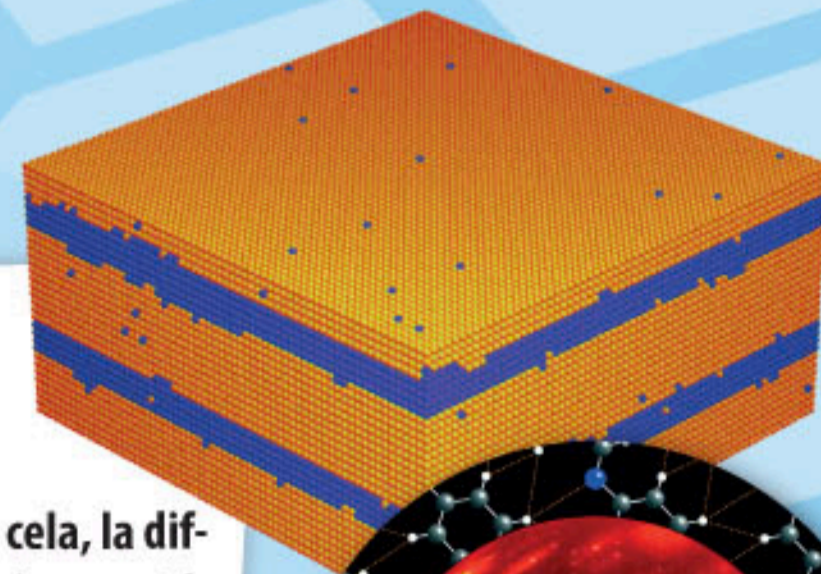
## Comment faire ?

### Voir « l'architecture » de la matière en utilisant des cristaux

« Cultiver » des cristaux de différents matériaux... pour les étudier

Afin de mieux comprendre les matériaux et leurs propriétés, les scientifiques cherchent à connaître leur structure. Pour cela, la diffraction est une technique extrêmement puissante. Elle présente toutefois une contrainte importante : c'est plus facile si ces matériaux sont sous forme de cristaux.

On arrive désormais à obtenir l'information de « l'architecture » de la matière avec des cristaux de plus en plus petits (des micro ou des nano-cristaux), mais aussi avec des matériaux désordonnés.

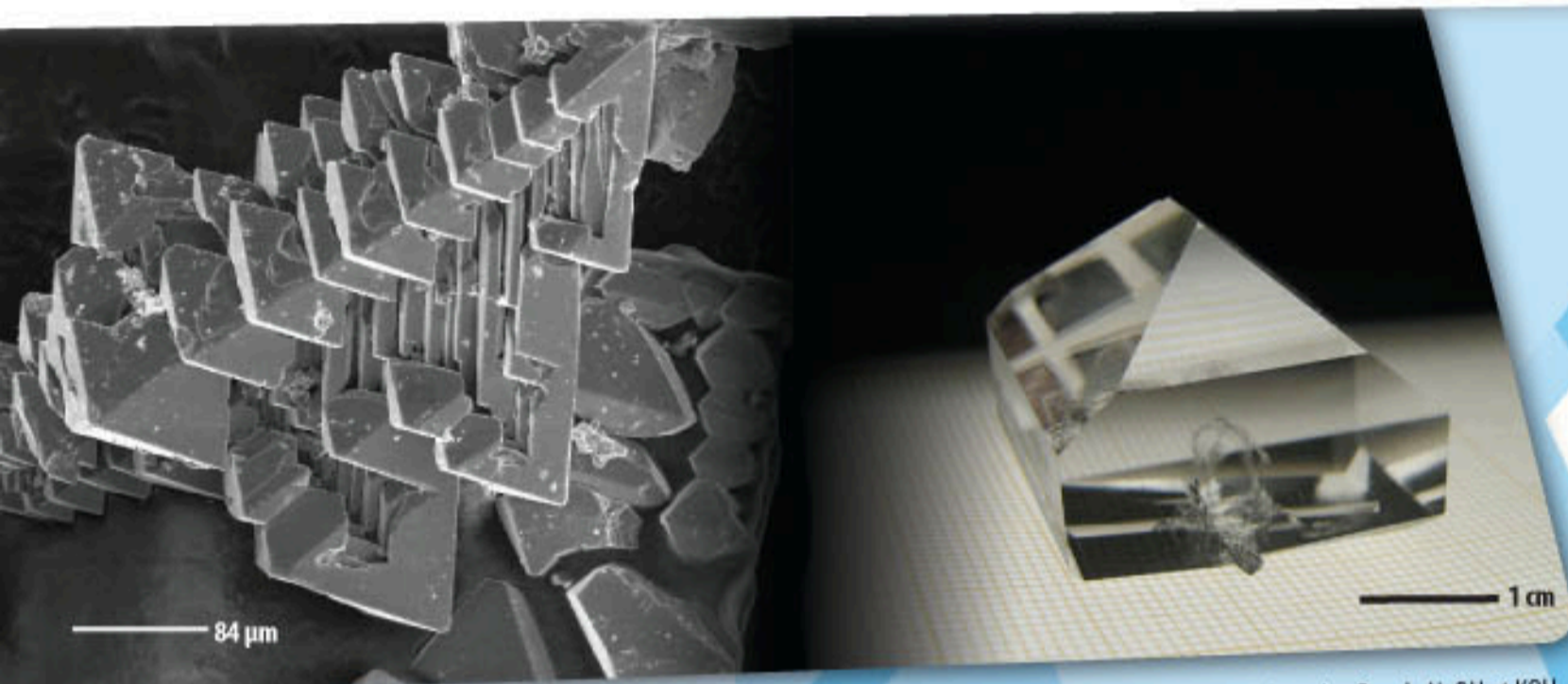


a) Cristal artificiel formé de multicouches de différents atomes  
b) Cliché de diffraction d'un cristal parfaitement désordonné

### La cristallogénèse

Les propriétés spécifiques des cristaux en font des matériaux clés dans de très nombreux domaines technologiques : électronique, communication, énergie, médical, défense... Pour tous ces domaines, il est primordial de disposer de cristaux avec des propriétés, une taille et une qualité appropriées. La croissance cristalline est donc devenue un enjeu technologique majeur : c'est la **cristallogénèse**.

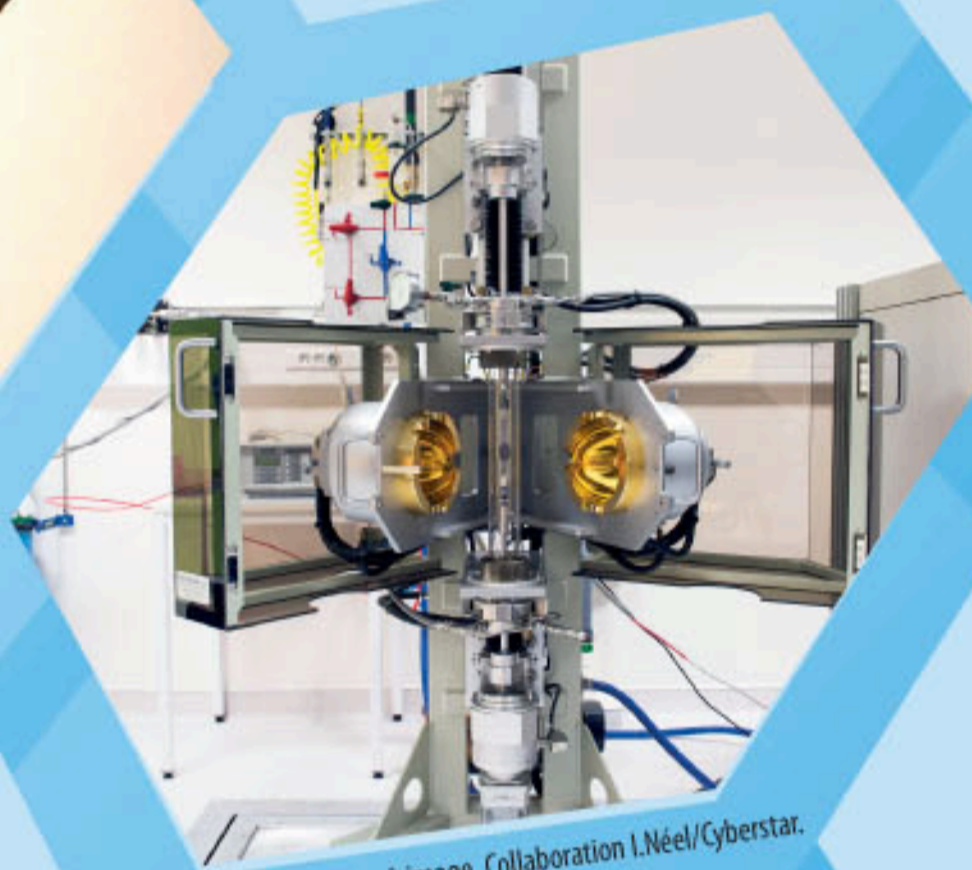
Elle s'appuie sur un principe simple : former un objet solide, organisé régulièrement à l'échelle atomique. Cette organisation est spontanée, mais il faut lui laisser le temps de s'instaurer et celui-ci est variable selon les composés. Elle s'effectue aussi à des températures et à des pressions particulières.



Les modes de croissance peuvent être très différents suivant la nature des cristaux : LiNiO2 se fait à haute température dans des flux de NaOH et KOH, KH2PO4 croît à partir de solutions aqueuses à des températures proches de l'ambiante.



Monocristal de langasite.  
Oui, un cristal peut ne pas avoir de face !



Four haute température à image. Collaboration I.Néel/Cyberstar.  
© CNRS Photothèque - PRESILLON Cyril

### Voyager à l'intérieur du cristal

Pour cela, il faut...

#### Utiliser une onde : rayons X, électrons ou neutrons

Il faut que cette lumière ait une longueur d'onde (correspondant à son énergie) qui soit proche des distances entre les plans atomiques.

#### Déterminer la maille et la symétrie du matériau

En analysant de façon détaillée les résultats de Laue, en 1912, le fils Bragg, William Lawrence, âgé de 22 ans, a formulé la loi de Bragg  $\lambda = 2d \sin \theta$  qui permet de déterminer la maille de répétition du matériau.

#### Mesurer les intensités des raies de diffraction

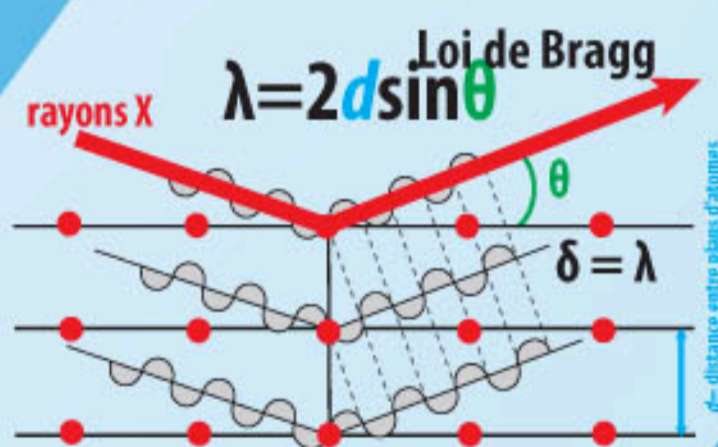
Chaque point des clichés de diffraction correspond à la superposition d'ondes diffusées par les atomes. Ce sont les intensités et les phases de cette diffraction qui donnent une information pour déterminer la position des atomes (le motif) dans la maille du cristal ; cela se fait grâce à l'utilisation de la transformée de Fourier.

#### Retrouver la phase des raies de diffraction

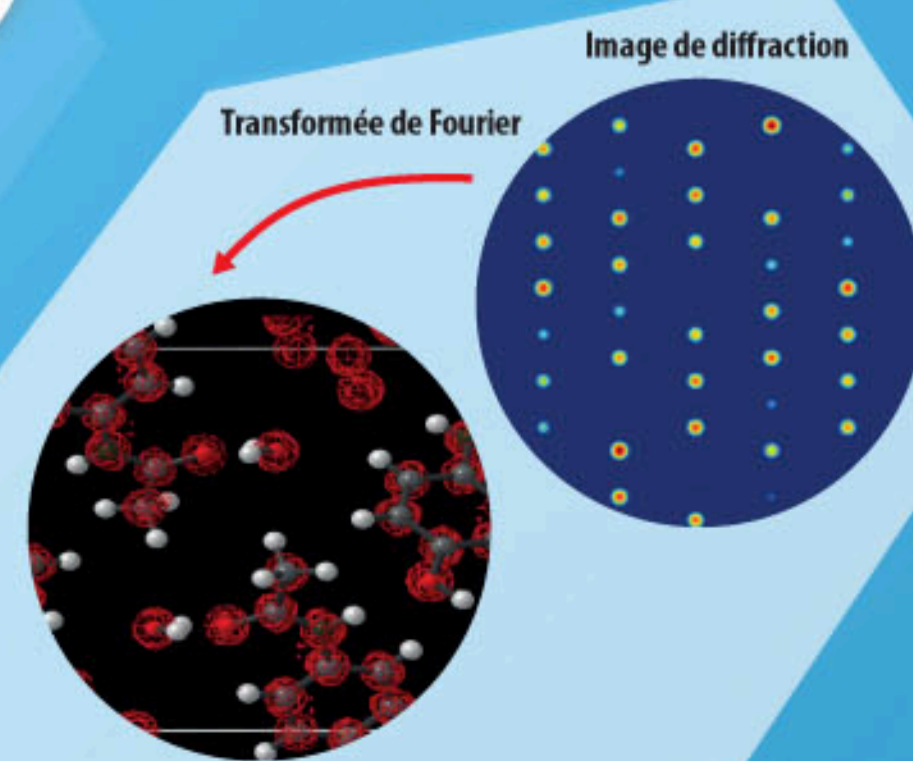
Cette détermination par la Transformée de Fourier n'est pas directe car les expériences de diffraction perdent une information essentielle : la phase des raies de diffraction. Les chercheurs retrouvent cette phase par différents moyens mathématiques ou instrumentaux.

#### Combiner diverses sondes structurales

Les cristallographes ont besoin des points forts de plusieurs outils pour déterminer les structures des matériaux : rayons X - structures haute résolution ; électrons - structure désordonnées ; neutrons - structure magnétiques ; spectroscopie X - état électronique ; spectroscopie Raman... De fait cette séparation est trop schématique, souvent les chercheurs ont besoin de l'apport de tous ces différents feux.



Lors d'une expérience de diffraction des rayons X, chaque atome diffuse une onde sinusoïdale. La somme de ces sinusoïdes est une transformée de Fourier.



Il suffit de calculer la transformée de Fourier de la diffraction... pour retrouver les positions des atomes !