

CRYSTALLOGRAPHY

I. Introduction:

- Crystallography is a domain which studies in structures, characteristics and application of compounds in form of crystals
- A crystal is a material which represents a structure of chemical compound orderly and definably. It's a result of condensation of the gas, precipitation of dissolved solution and solidification of the solution of the compound

II. Different form of crystal:

- There are 4 types of crystal: covalent, ionic, metallic and molecular. Owing to the types of atoms and the arrangement of bonds, we can figure out the type of crystals
- Covalent crystals: formed by covalent bonds which is created by the sharing of the electrons. The crystals have high melting points due to the covalent bond
- Ionic crystals: formed by ionic bonds (negative charge attracts to positive one). The arrangement of the atoms in the crystal is in a pattern based on the charges. The crystals have high melting point and are usually a solid.
- Metallic crystals: made of metallic elements. They have lustrous sheen and good conductors
- Molecular crystals: formed by hydrogen bonds. They have lower melting points due to the fact that the bonds are too weak.

III. Structures of crystals:

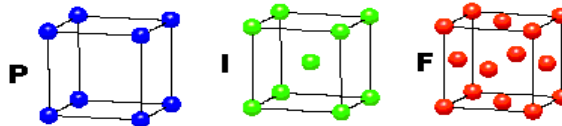
- Unit cell of crystal: It's a unit which is formed repetitive by the vectors spanning the points of a lattice
- We define the crystal in 6 factors: a, b, c in length and α , β , γ in degree
- Notion of the crystal:
 - The structure of crystals is the arrangement of atoms/ ions/ molecules orderly and logically in a 3D system
 - Once we identify well the crystal's structure, we can easily decide the unit cell of crystal which is soon built into real structure of crystals owing to the motive of crystals

- The motive of crystals is an entity which is repeated periodically by translation in space
- 7 types of Bravais lattice:

CUBIC

$$a = b = c$$

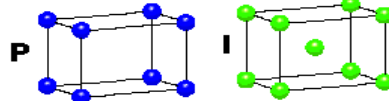
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



TETRAGONAL

$$a = b \neq c$$

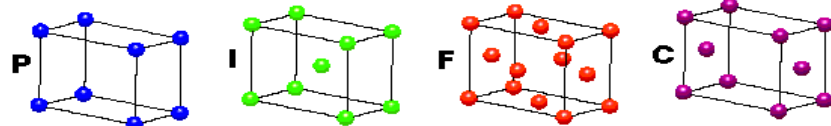
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



ORTHORHOMBIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

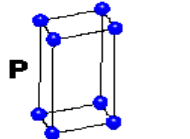


HEXAGONAL

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ$$

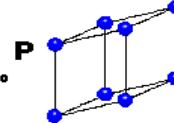
$$\gamma = 120^\circ$$



TRIGONAL

$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

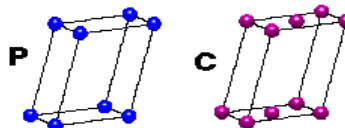


MONOCLINIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \gamma = 90^\circ$$

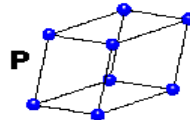
$$\beta \neq 120^\circ$$



TRICLINIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



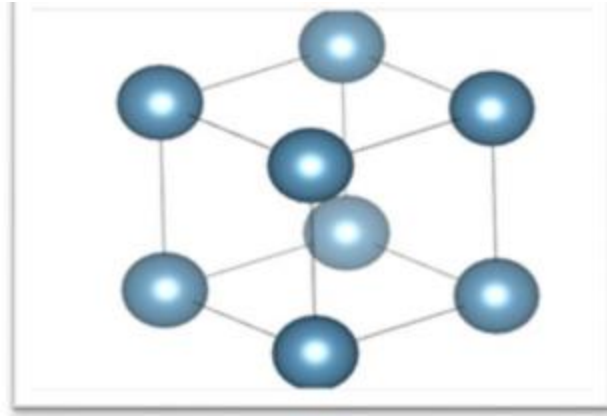
4 Types of Unit Cell
P = Primitive
I = Body-Centred
F = Face-Centred
C = Side-Centred
+
7 Crystal Classes
→ **14 Bravais Lattices**

<http://www.chm.bris.ac.uk/webprojects2003/cook/latticetypes.htm>

- When define well the type of crystal, we jump on calculation of **atomic packing factor** in order to know more how tightly-packed the atoms are. That is:

$$APF = \frac{N_{atom} * V_{atom}}{V_{unit\ cell}}$$

- Example in simple cubic crystal with the length a:



Source: VESTA

At first, we must calculate the number of atoms in a unit cell. We can see that there are 8 atoms in the unit cell and each of these atoms will share between 8 unit cells. Thus we have $N_{atom} = 8 \cdot \frac{1}{8} = 1$

This is elementary unit cell. So we can calculate the radii of atom in cubic cell:
 $a = 2R \rightarrow V_{unit\ cell} = a^3 = 8R^3$

Knowing that $V_{atom} = \frac{4}{3} \cdot R^3 \cdot \pi \rightarrow AFC = \frac{N_{atom} \cdot V_{atom}}{V_{unit\ cell}} = \frac{\frac{4}{3} \cdot R^3 \cdot \pi \cdot 1}{8R^3} = \pi/6 = 0.524$

IV. Reference:

1. <https://study.com/academy/lesson/crystal-definition-types-structure-properties.html>
2. https://en.wikipedia.org/wiki/Unit_cell#Primitive_cell
3. <http://www.chm.bris.ac.uk/webprojects2003/cook/latticetypes.htm>
4. <https://mstudent.com/atomic-packing-factor/>

I. Introduction:

- Cristallographie est un domaine qui recherche les caractéristiques, les structures et les applications à partir des cristaux
- Le cristal représente la structure d'un composé chimique dans un arrangement ordonné. Nous pouvons obtenir le cristal suite à la condensation du gaz, la précipitation de la solution dissoute et la solidification de la solution du composé

II. Les différentes formes de cristaux :

- Il y a 4 formes de cristaux : covalent, ionique, métallique et moléculaire. Grâce aux les types des atomes et aux arrangements des liaisons, nous pouvons trouver les types de cristaux :
- Cristal covalente : formé par la liaison covalente qui est créé par partager les électrons. Grâce à la liaison covalente, le cristal a le point de fusion très haut.
- Cristal ionique : formé par la liaison ionique, c'est-à-dire l'attraction entre la charge négative et la charge positive. L'arrangement des atomes dans les cristaux est dans la modèle basé sur les charge. Il a le point de fusion très haut et souvent dans la forme de solide
- Cristal métallique : formé par les éléments métalliques. Il a caractère d'un éclat brillant et de bon conducteur
- Cristal moléculaire : formé par les liaisons d'hydrogènes. Il a le point de fusion très bas à cause des liaisons faibles

III. Structures de cristal :

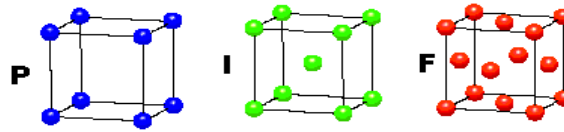
- Maille élémentaire : formé répétitive par les vecteurs couvrant les points d'un réseau
- Le cristal peut définie par a, b, c en longueur et α , β , γ en degré
- La notion de cristal :
- Nous savons que le cristal arrange des atomes/ molécules/ ions très ordonné et rationnel dans le système de 3D
- Quand nous avons trouvé bien le type de structure de cristal, nous pouvons trouver la maille élémentaire qui est bientôt intégré dans la structure réelle des cristaux en raison du motif des cristaux
- Le motif des cristaux est une entité qui se répète périodiquement par translation dans l'espace

- 7 type de réseau de Bravais :

CUBIC

$$a = b = c$$

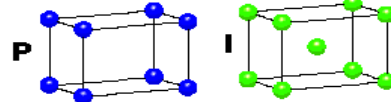
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



TETRAGONAL

$$a = b \neq c$$

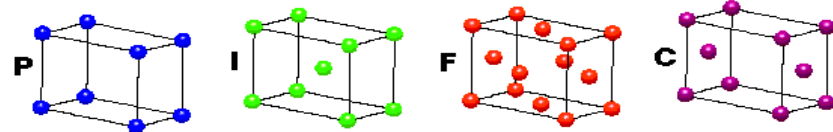
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



ORTHORHOMBIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

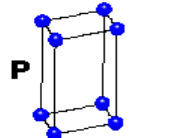


HEXAGONAL

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ$$

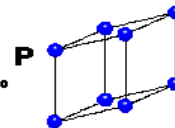
$$\gamma = 120^\circ$$



TRIGONAL

$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

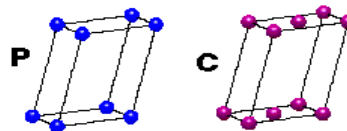


MONOCLINIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \gamma = 90^\circ$$

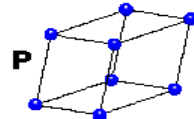
$$\beta \neq 120^\circ$$



TRICLINIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



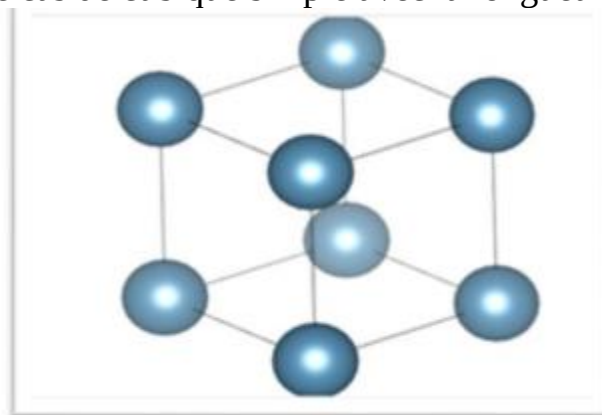
4 Types of Unit Cell
P = Primitive
I = Body-Centred
F = Face-Centred
C = Side-Centred
 +
7 Crystal Classes
 → **14 Bravais Lattices**

<http://www.chm.bris.ac.uk/webprojects2003/cook/latticetypes.htm>

- Puis, nous pouvons calculer **la compacité** de cristal avec le but de savoir la densité des atomes dans le cristal

$$\text{Compacité} = \frac{N_{\text{atome}} * V_{\text{atome}}}{V_{\text{maille elementaire}}}$$

- Exemple : Dans le cas de cubique simple avec la longueur a :



Source : VESTA

D'abord, nous devons calculer le nombre d'atomes dans la maille élémentaire. Nous savons qu'il y a 8 atomes dans la maille et chaque atome partagera entre 8 mailles. Alors, nous pouvons trouver le nombre d'atome dans la maille : $N_{atome} = 8 \cdot 1/8 = 1$

Nous savons que c'est la maille élémentaire. Donc, nous pouvons calculer le rayon d'atome dans la maille cubique : $a = 2R \rightarrow V_{maille\ elementaire} = a^3 = 8R^3$

Pour la volume d'une atome, c'est $V_{atome} = \frac{4}{3} \cdot R^3 \cdot \pi$

$$\rightarrow \text{Compacité} = \frac{N_{atome} \cdot V_{atome}}{V_{maille\ elementaire}} = \frac{\frac{4}{3} \cdot R^3 \cdot \pi \cdot 1}{8R^3} = \pi/6 = 0.524$$

IV. Référence :

1. <https://study.com/academy/lesson/crystal-definition-types-structure-properties.html>
2. https://en.wikipedia.org/wiki/Unit_cell#Primitive_cell
3. <http://www.chm.bris.ac.uk/webprojects2003/cook/latticetypes.htm>
4. <https://mstudent.com/atomic-packing-factor/>