REPRÉSENTATION GRAPHIQUE DE LA CELLULE ÉLÉMENTAIRE DE LA CALCITE ET DE L'OCTAÈDRE DE COORDINATION

GABRIEL DIACONU

Notre note présente une image graphique en élévation, profil, sur plan et dans l'espace de la cellule élémentaire de la calcite. Elle comprend aussi l'image de l'octaèdre de coordination entre le calcium et les oxygènes.

Des quatre états polymorphes du carbonate de calcium (calcite, aragonite, vatérite ou μ calcite et élatolite ou α calcite) il est certain que la calcite est la plus fréquente dans la nature. C'est en même temps l'espèce la plus commune des espèces minérales des cavités (grotte ou aven) ce qui détermine la plupart des auteurs intéressés par les spéléothèmes de traiter, plus ou moins à fond, les hypostases (généralement morphologiques) sous lesquelles elle a été remarquée dans les cavités. Mais parfois des confusions se produisent soit entre les aspects géométriques de la cellule élémentaire de cristallisation de la calcite et les morphologies de ses individus cristallins, soit entre ces derniers (les morphologies des individus) et les morphologies qui résultent de leur association en agrégats (ici les confusions se produisent d'habitude à cause du mode d'interprétation de la genèse du spéléothème en question).

Ce travail désire offrir à ceux intéressés, autant une image graphique de la cellule élémentaire rhomboédrique de la calcite, que la géométrie octaédrique de l'espace délimité des 6 oxygènes coordinnés par un calcium.

Pour comprendre correctement les esquisses graphiques des représentations de la cellule élémentaire de la calcite, nous avons jugé utile de donner quelques explications préliminaires.

Initialement, la cellule rhomboédrique de calcite a été conçue par Bragg (1914) en partant du modèle connu de la cellule de halite (sel gemme) NaCl, un cube aux faces et volume centrés. En remplaçant les ions de Na^+, respectivement de Cl^- par ceux de Ca^{2+}, respectivement CO_3^{2-}, le cube subit une déformation et se comprime de telle manière qu'une des grandes diagonales se réduit à 77,66% de sa longueur originale, dont il résulte un espace géométrique en forme de rhomboèdre très semblable à celui morphologique, constitué par 4 $CaCO_3$ (Fig. 1, cellule d'en bas).

Compte tenu du fait que les oxygènes du groupe CO_3^{2-} sont disposés dans le même plan et symétriquement autour du carbone en position tridirectionnelle (aux angles d'un triangle équilatéral) et que l'orientation des triangles est différente, en alternant successivement d'un plan à l'autre, à la cellule élémentaire en question (pour pouvoir considérer correctement et complètement une période entière) toutes les dimensions linéaires devraient être doublées, en arrivant ainsi à une cellule de 32 $CaCO_3$. C'est une forme géométrique complexe assez lourde, dont il est difficile de s'en servir à l'interprétation de certains problèmes cristallographiques. C'est

Trav. Inst. Spéol. «Émile Racovitza», t. XXV, 53–59, Bucarest, 1986

la raison pour laquelle on préfère, dans la cristallographie moderne, la cellule aiguë à double diagonale, constituée seulement de 2 $CaCO_3$ (voir également Fig. 1).

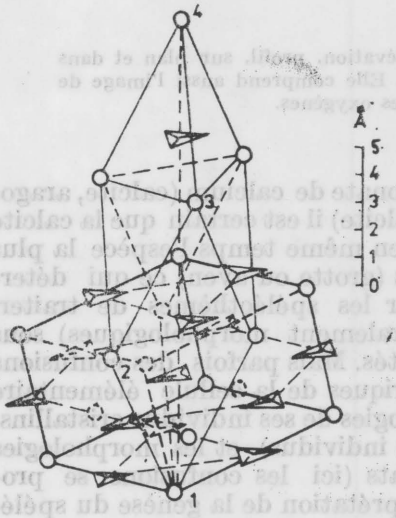


Fig. 1 — Cellules élémentaires de la calcite; la cellule constituée par 4 $CaCO_3$ conformément au rhomboèdre morphologique (partie d'en bas du dessin) et la cellule aiguë constituée par 2 $CaCO_3$ (selon Lippmann, 1973.)

Dû à la compatibilité entre la symétrie rhomboédrique et celle hexagonale, le réseau de la calcite peut être représenté aussi par une cellule élémentaire hexagonale contenant 6 $CaCO_3$ (Fig. 2). Les ions de calcium, numérotés de 1 à 4, appartiennent à la cellule rhomboédrique aiguë (2 $CaCO_3$) ce qui permet d'observer la correspondance entre les deux types de symétrie de même le fait que les deux possèdent l'axe «z» de la même valeur (17,06 Å).

Evidemment que ce que nous venons d'exposer jusqu'ici ne représente qu'une brève discussion en marge des modes de présentation de la cellule élémentaire de la calcite. N'importe quelle relation supplémentaire se trouve dans l'excellent livre de Lippmann, *Sedimentary carbonate minerals* (1973) dont nous avons extrait aussi une esquisse où l'on peut observer la coordination des 6 oxygènes par un calcium (Fig. 3).

En utilisant correctement les valeurs des coordonnés des éléments composants de la structure de la calcite (qui se trouvent aussi dans les Tableaux Internationaux I, no. 167) et présentant à l'échelle non seulement les paramètres de position spatiale mais aussi les rayons des ions du calcium, de l'oxygène et du carbone, nous avons trouvé nécessaire de donner une présentation graphique de la cellule élémentaire (aiguë) de la calcite.

Pour rendre plus clair le mode de disposition spatiale des éléments qui constituent la cellule, nous avons eu recours à la procédure que nous avons utilisée aussi pour la structure de l'aragonite (Diaconu, 1984) en présentant initialement les projections en élévation, profil et sur plan (Fig. 4, A, B, et C). Quant à la projection hexagonale (Fig. 5) réalisée conformément aux lois de la projection axonométrique orthogonale dimétrique, nous avons multiplié la cellule élémentaire de la Fig. 2 à la valeur complète

du prisme hexagonal, dans le but d'éclairer la corrélation entre les deux symétries (respectivement entre celle rhomboédrique et celle hexagonale) ainsi que d'obtenir une représentation correcte spatiale de la cellule rhom-

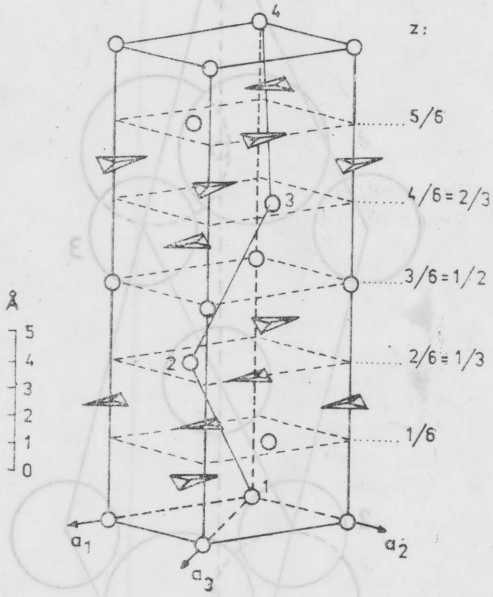


Fig. 2 — Cellule élémentaire hexagonale de la calcite constituée par 6 $CaCO_3$ (selon Lippmann, 1973).

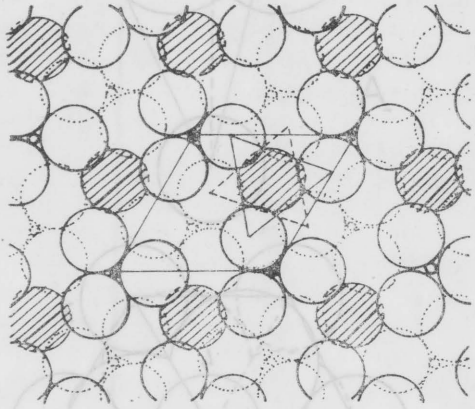


Fig. 3 — Section transversale dans l'axe „z". Le contour rhombique représente la section de la cellule élémentaire hexagonale et les triangles équilatéraux la coordination des oxygènes par le calcium (selon Lippmann, 1973).

boédrique aiguë, que nous avons reprise séparément dans la Fig. 6. De plus, cette procédure graphique a permis la présentation de l'octaèdre de coordination (l'espace géométrique déterminé au centre de la Fig. 5) que nous avons présenté, également, séparément (Fig. 7) pour pouvoir distinguer nettement la coordination des 6 oxygènes par le calcium central.

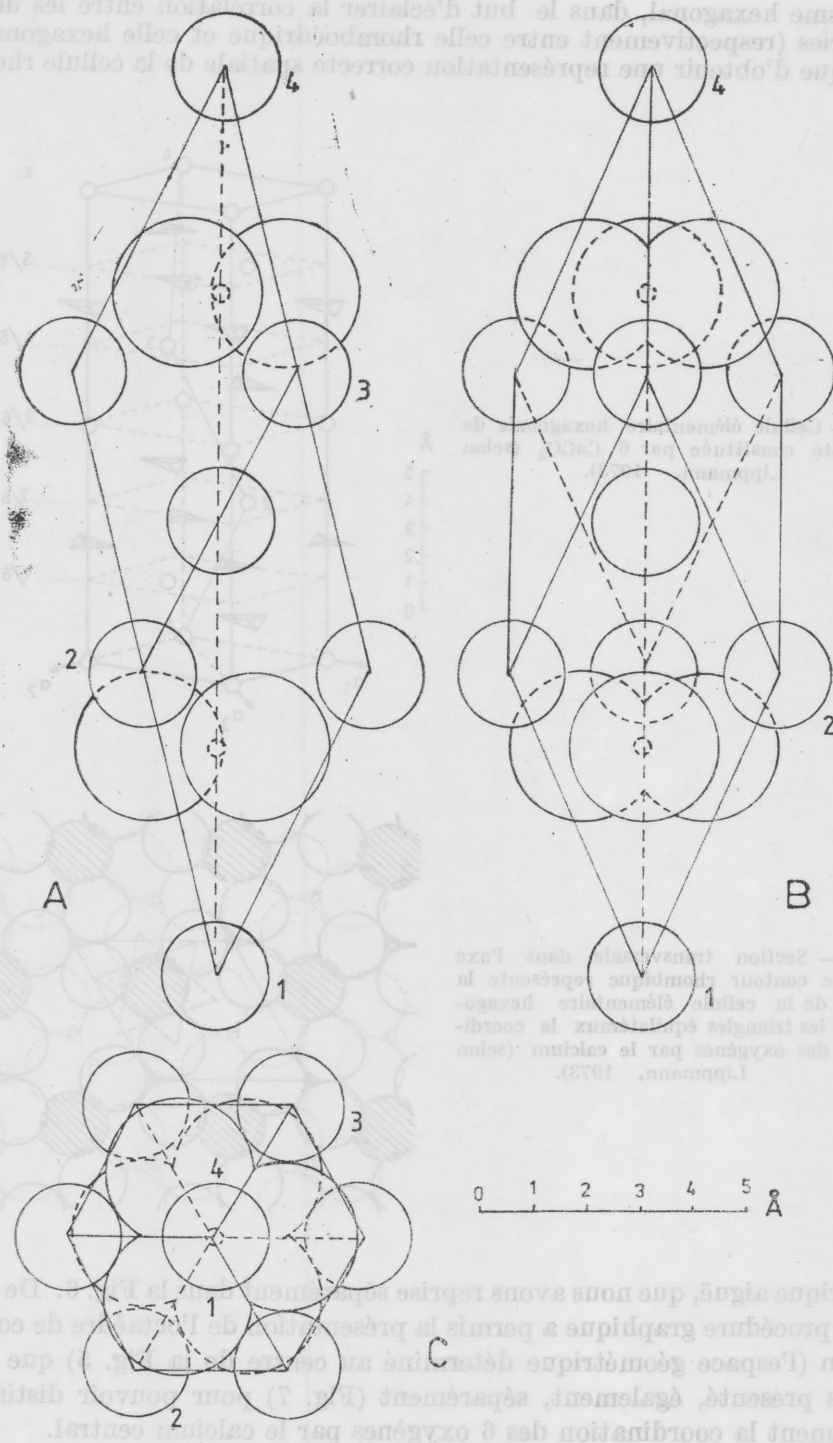


Fig. 4 — Représentation graphique de la cellule rhomboédrique aiguë (2 $CaCO_3$) de la calcite : A — en élévation ; B — en profil ; C — sur plan. Z = 17,06 Å.

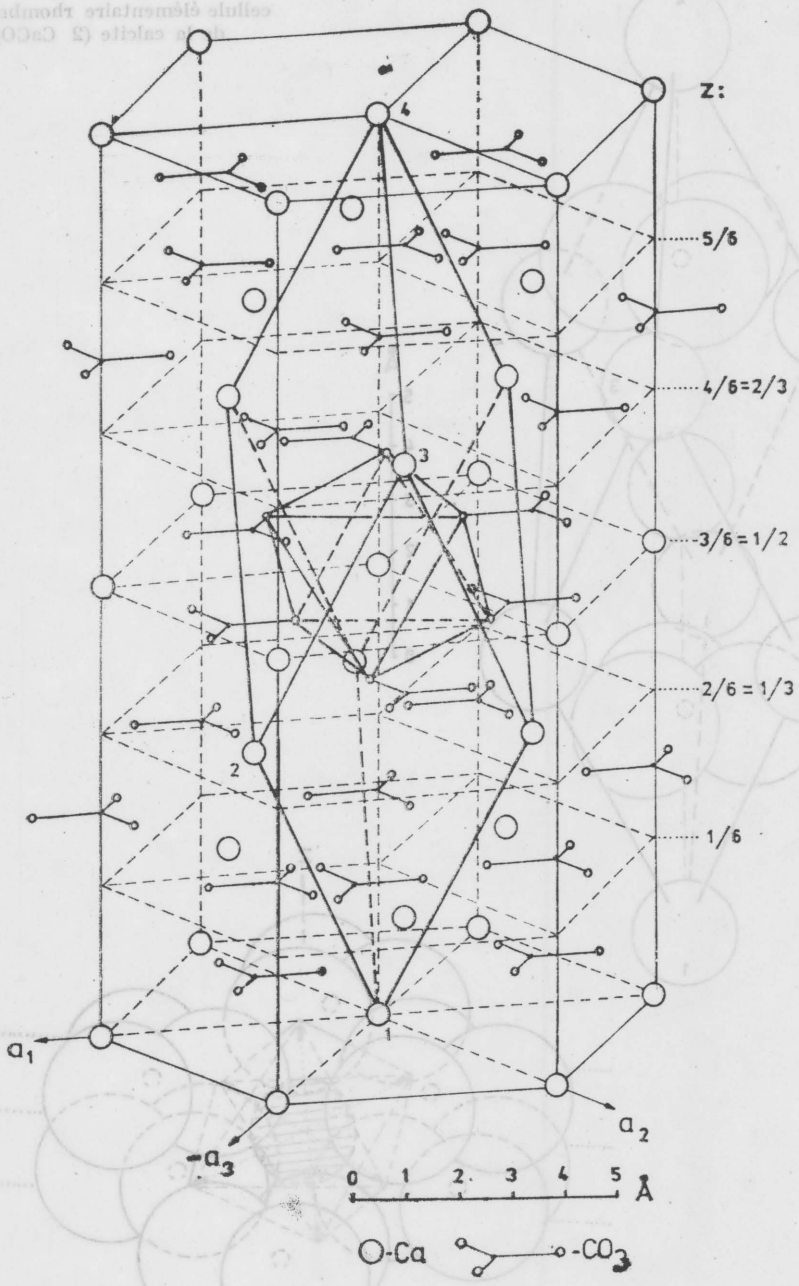
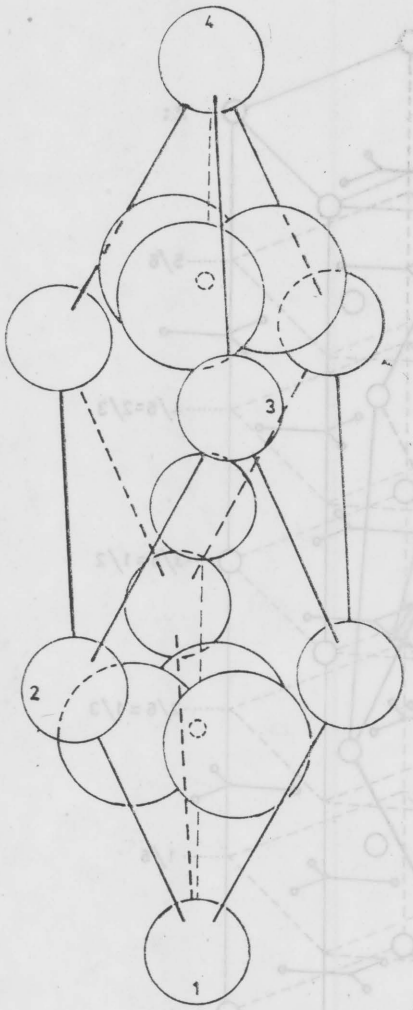
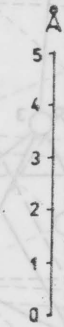


Fig. 5 — Projection spatiale de la cellule élémentaire hexagonale (6 $CaCO_3$) multipliée à un prisme hexagonal complet. Les plans de disposition de la Ca et respectivement des groupes CO_3, alternent sur la verticale à une distance égale à 1/12 de l'axe z = 17,06 Å, étant parallèles entre eux et perpendiculaires à l'axe z. Le trait souligné représente la cellule rhomboédrique aiguë de la calcite et dans le centre du dessin est représente l'octaèdre de coordination.

Fig. 6 — Projection spatiale de la cellule élémentaire rhomboédrique de la calcite (2 $CaCO_3$).





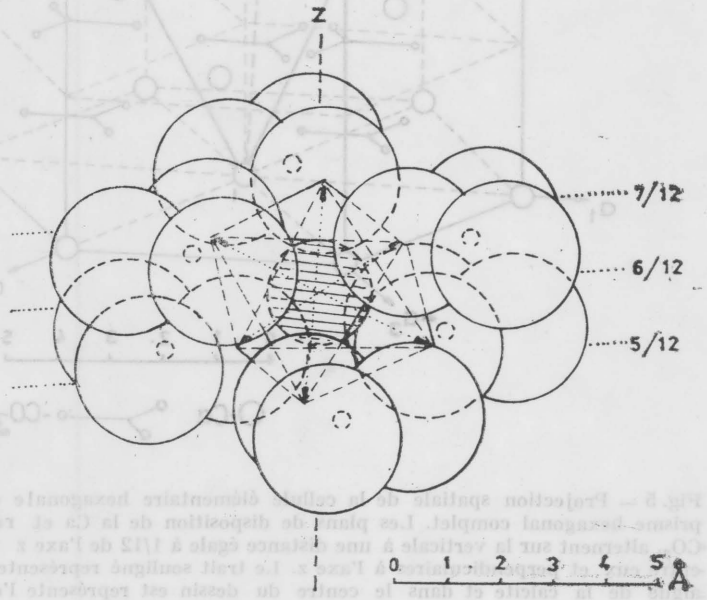


Fig. 7 — Projection spatiale de l'octaèdre de coordination.

BIBLIOGRAPHIE

1914 BRAGG W. L., *The refractive indices of calcite and aragonite.* Proc. Roy. Soc. London, A 105, p. 370—386.

1984 DIACONU G., *Précisions graphiques concernant le polyèdre de coordination de la structure cristalline de l'aragonite.* Trav. Inst. Spéol. «Emile Racovitza», t. XXIII, p. 57—65.

1973 LIPPMANN F., *Sedimentary carbonate minerals.* Springer Verlag Berlin — Heidelberg — New York, 228 p., 54 fig.

Institut de Spéologie «Emile Racovitza»
Bucarest

Reçu le 12 février 1986