

Université HASSAN II de Casablanca
Ecole National Supérieure d'Arts et Métiers



COMPTE RENDU DU TP DE CRISTALLOGRAPHIE

Sous la supervision du professeur :

ABDERRAHIM JRIFI

Réalisé par :

Mohamed Sedki

Elmehdi Nachit

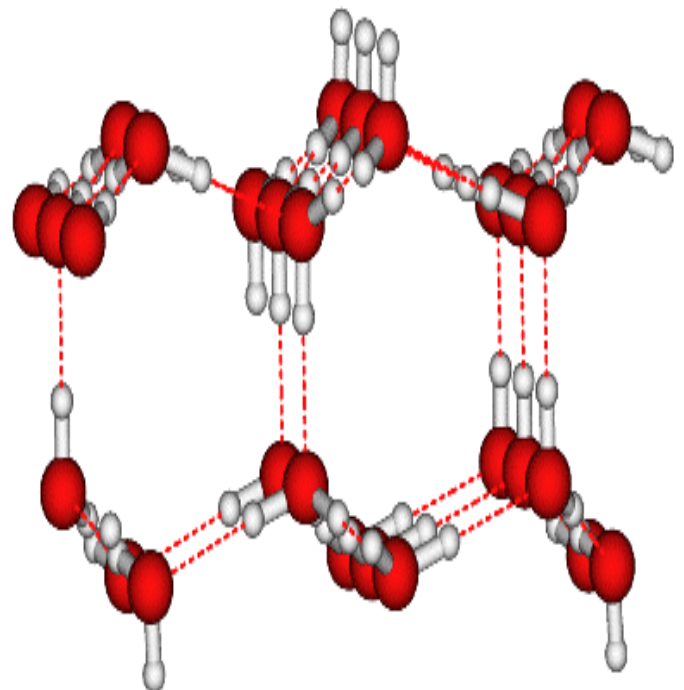
Malika Zaim

Manal Mara

Rihab Matqal

Asia ouair

Mouad Charba



Sommaire

Introduction.....	
.....	3

Objectifs du TP de la Cristallographie	4
---	---

1-La structure Cubique à Faces Centrées.....	5
---	---

2- La structure de la glace.....	9
-------------------------------------	---

Conclusion.....	
.....	14

Introduction

La cristallographie est une science en grande partie expérimentale mais qui est aussi basée sur des concepts mathématiques. Elle étudie l'organisation des atomes dans la matière pour en comprendre et en utiliser les propriétés. Dans les laboratoires et dans l'industrie, des milliers de chercheurs et d'ingénieurs la développent ou l'utilisent en physique, en chimie, en biologie, en géologie...

L'eau sous forme vapeur, liquide ou solide joue un rôle essentiel dans l'équilibre de notre planète.

L'eau solide se rencontre aussi bien au niveau terrestre qu'au niveau atmosphérique, ou encore interstellaire et **la glace** présente, en fonction de la température et de la pression, un polymorphisme remarquable.

A l'heure actuelle, pas moins de douze variétés cristallines et de trois formes amorphes sont connues.

Dans toutes ces espèces, un même motif se développe en un réseau 3D ordonné ou désordonné. Ce motif de base résulte de l'association d'une molécule d'eau avec quatre autres molécules. Un atome d'oxygène est au centre d'un tétraèdre dont les quatre sommets sont aussi occupés par des atomes d'oxygène.

La structure hexagonale compacte se présente de la manière suivante : au sein d'une maille hexagonale, composée de six sous-prismes droits dont la base est un triangle équilatéral, trois atomes occupent le centre de trois sous-prismes séparés d'un sous-prisme vide. On peut voir aussi cette structure comme deux structures hexagonales simples (P) décalées d'un vecteur $[1/2 \ 1/3 \ 1/2]$. De manière rigoureuse, la structure hexagonale

compacte est une structure hexagonale primaire dont le motif est composé de deux atomes ; c'est donc en fait une structure di-atomique.

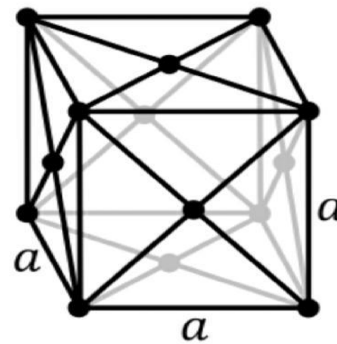
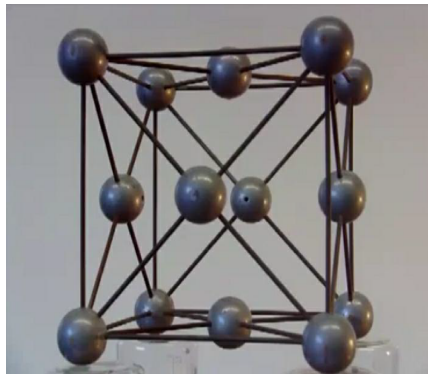
Objectifs du TP

de la Cristallographie

- C**onstruire quelques structures cristallines en utilisant des modèles moléculaires (Boules sphériques, Tiges...).
- O**bserver quelques structures cristallines par une approche à grande échelle.
- R**éprésenter une maille en perspective et tracer sa projection sur un plan.
- D**éterminer les différents paramètres de maille associés à quelques structures cristallines en se basant sur la géométrie cristalline: coordinence ; nombre de motifs par maille ; coordonnées réduites des atomes...
- O**bserver la position des sites tétraédriques et octaédriques et déterminer leurs coordonnées réduites.
- A**rgumenter et synthétiser sous la forme d'un compte rendu.

1-La structure Cubique à Faces Centrées :

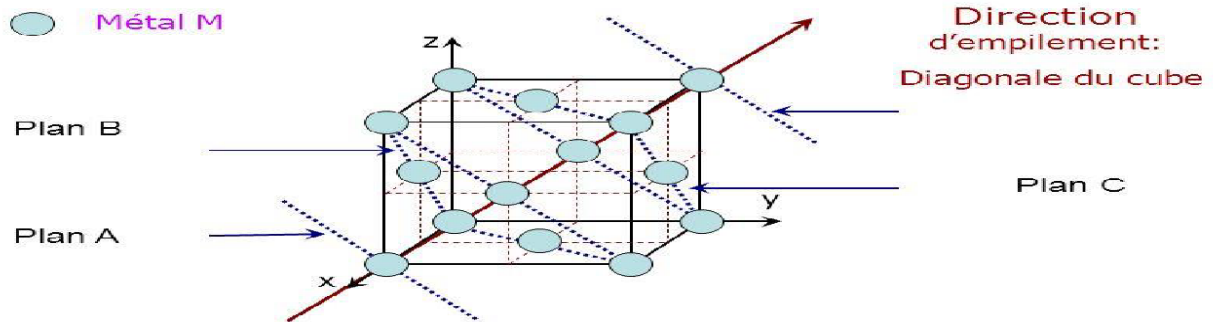
-Représentation d'une maille du réseau CFC en utilisant les boules et la projection en perspective :



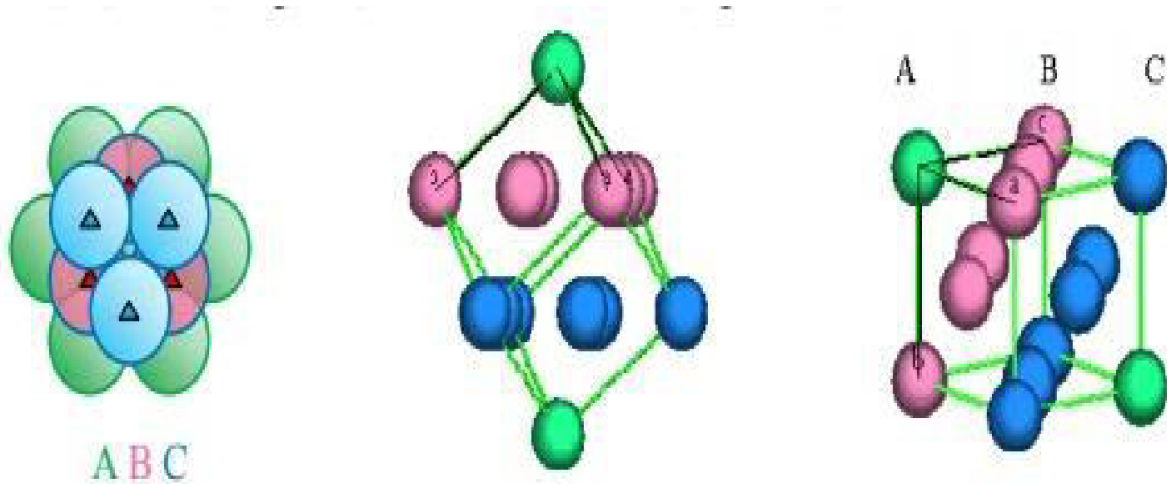
-La succession des couches compactes A-B-C et la direction par rapport à laquelle ils s'ordonnent :

C'est une structure qui dérive de l'empilement compact ...ABCABC..., les atomes appartiennent aux sommets et aux centres des faces.

Maille cubique à faces centrées



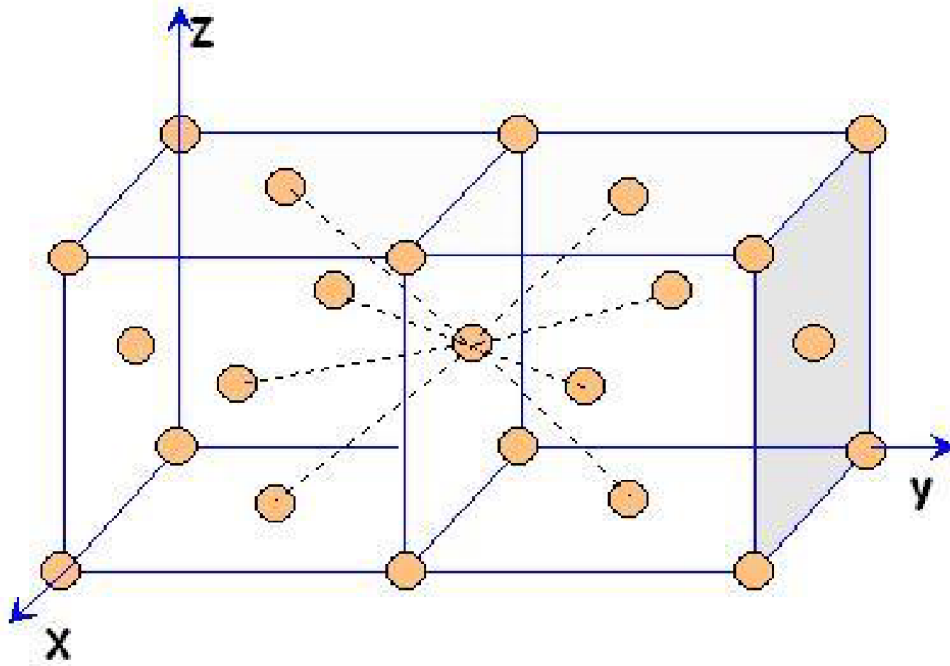
Représentation en perspective de la maille C.F.C



-Coordinance d'un atome :

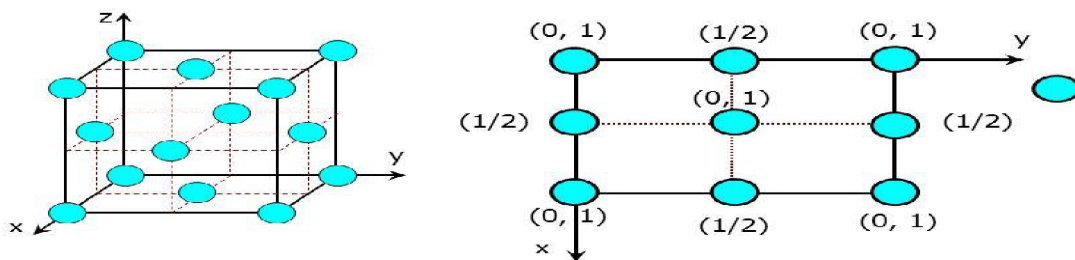
La coordinnence d'un atome est le nombre d'atomes voisins les plus proches dans les trois directions de l'espace.

Pour un cubique à faces centrées CFC chaque atome a 12 voisins plus proches situés à la même distance.



**-Projection de la maille sur le plan (XOY)
et coordonnées réduites des atomes :**

***Projection de la maille Sur le plan (XOY) :**



**Projection d'une maille
C.F.C sur le plan (xoy)**

***Coordonnées réduites des atomes :**

Sommets	Centre	Faces de la maille

$(0, 0, 0)$	$(1/2, 1/2, 1/2)$	$(1/2, 1/2, 0),$ $(1/2, 0, 1/2),$ $(0, 1/2, 1/2)$
-------------	-------------------	---

-Relation entre le rayon atomique R et le paramètre de maille a :

Dans la maille CFC Le contact entre deux atomes se fait selon la petite diagonale d'où :

$$4R = \sqrt{2}a$$

-Position et coordonnées réduites des sites octaédriques et tétraédriques :

•Les sites tétraédriques:

Une maille cubique à faces centrées comporte huit sites tétraédriques correspondants aux centres des huit petits cubes d'arêtes $a/2$.

Les coordonnées réduites de ces sites sont :

$(1/4, 1/4, 1/4)$ $(3/4, 1/4, 1/4)$ $(1/4, 3/4, 1/4)$ $(3/4, 3/4, 1/4)$

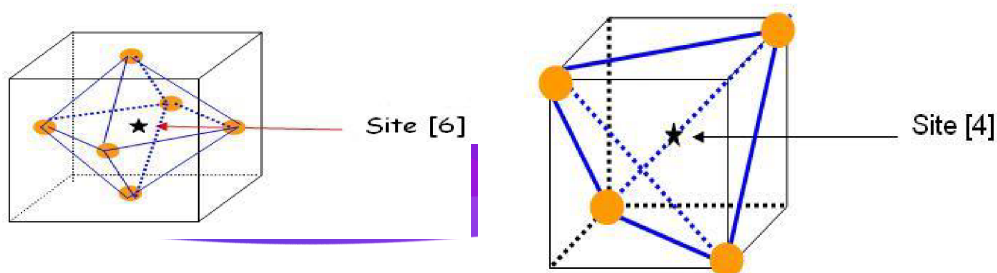
$(1/4, 1/4, 3/4)$ $(3/4, 1/4, 3/4)$ $(1/4, 3/4, 3/4)$ $(3/4, 3/4, 3/4)$

•Les sites octaédriques:

Une maille cubique à faces centrées comporte quatre sites octaédriques: un au centre du cube et trois aux milieux des arêtes.

Les coordonnées réduites de ces sites sont :

$(1/2, 0, 0)$ $(0, 1/2, 0)$ $(0, 0, 1/2)$ $(1/2, 1/2, 1/2)$



2-Structure de la glace :

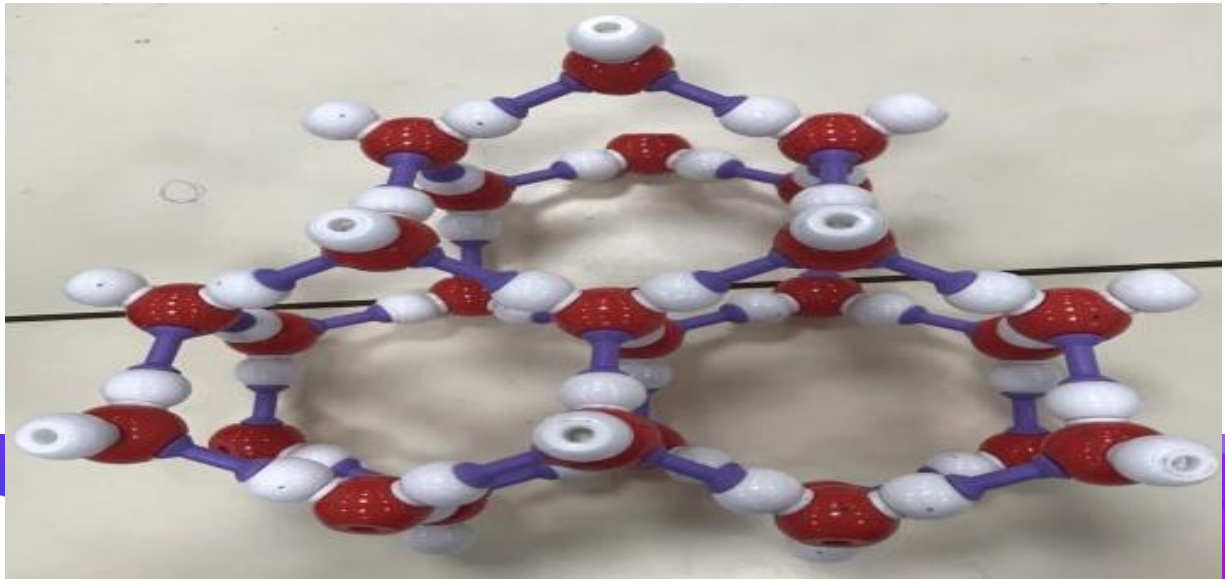
-Description de la structure :

*Les oxygènes forment un hexagonal compact.

*Chaque oxygène est entouré de 4 autres situés aux sommets d'un tétraèdre, ainsi qu'il possède 2 hydrogènes formant ainsi une molécule d'eau.

*L'orientation des molécules d'eau adjacentes se font de façon à ce qu'il n'y ait qu'un seul hydrogène entre 2 oxygènes.

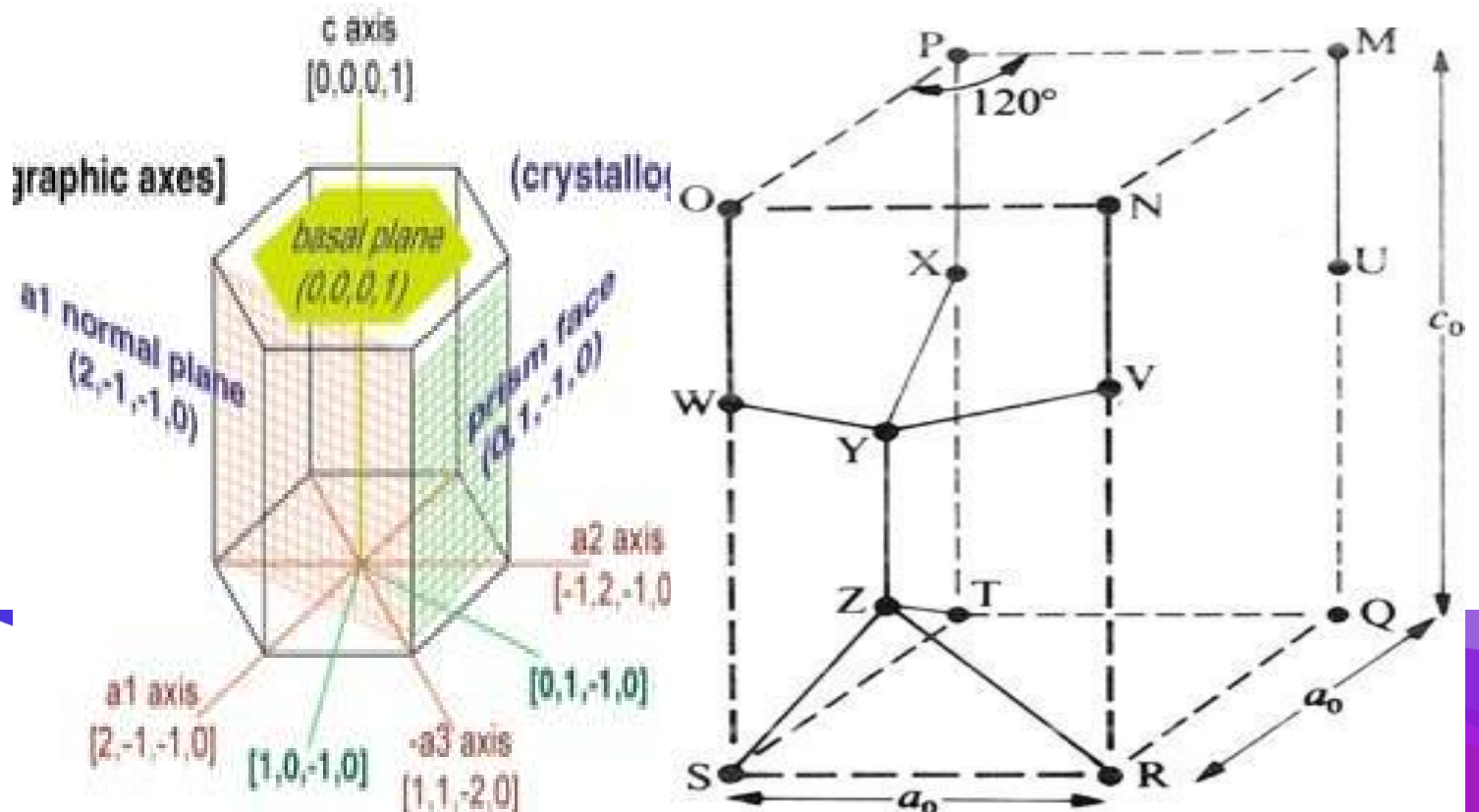
*La cohésion de l'édifice est assurée par des liaisons hydrogène.



-La maille de la glace en perspective :

La glace d'une structure hexagonale est nommée : la glace Ih, elle est formée d'un empilement régulier des tétraèdres.

De façon plus générale, le cristal est obtenu par la reproduction périodique d'un motif, ou maille élémentaire, dans lequel on retrouve la coordination tétraédrique des molécules. En représentant quelques-unes de ces mailles, une structure hexagonale apparaît dans le plan normal à l'axe c.

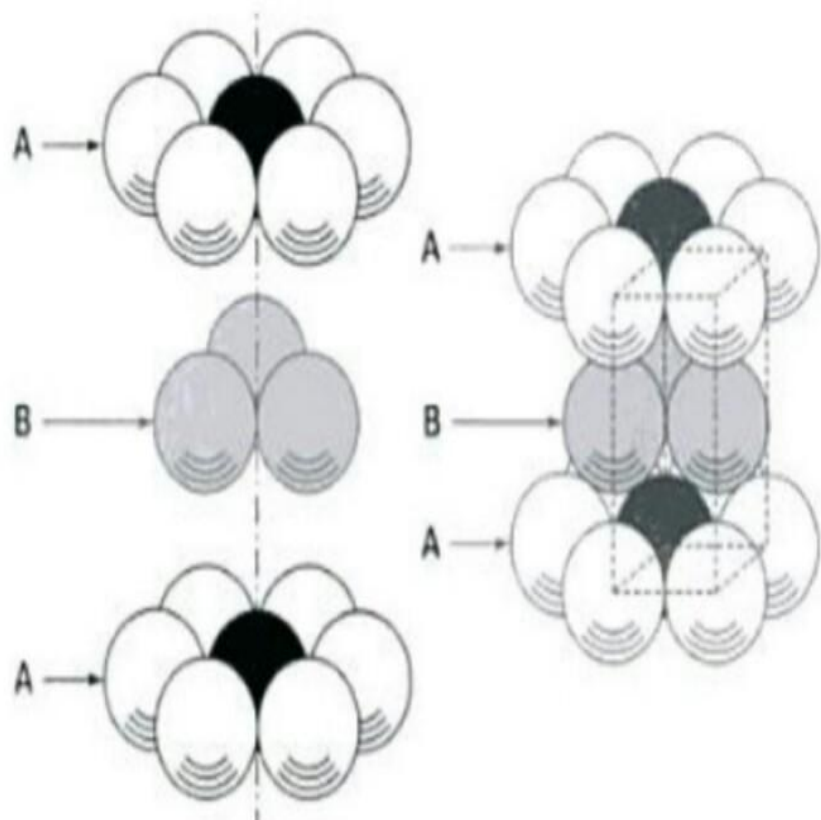
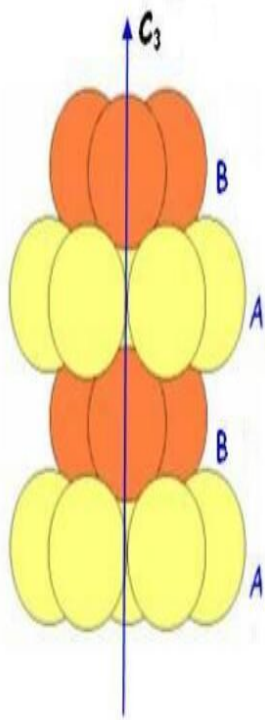


-Succession des couches compactes A-B-C

et la direction par rapport à laquelle ils s'ordonnent :

Les sphères de la 3^{ème} couche sont placées d'aplomb à celles de la 1^{ère} couche.

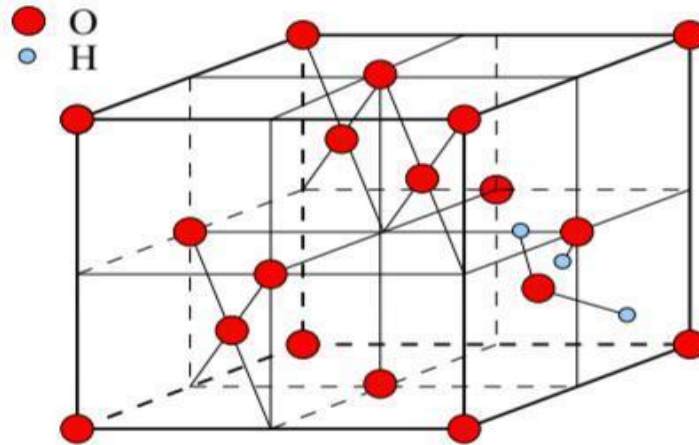
Puis les sphères de la 4^{ème} couche sont l'aplomb de celles de la 2^{ème} couche.



- Coordinance d'un atome :

*Chaque atome d'oxygène est entouré par **2 atomes d'hydrogène**.

*Chaque atome d'oxygène est entouré par **3 atomes d'oxygène**.

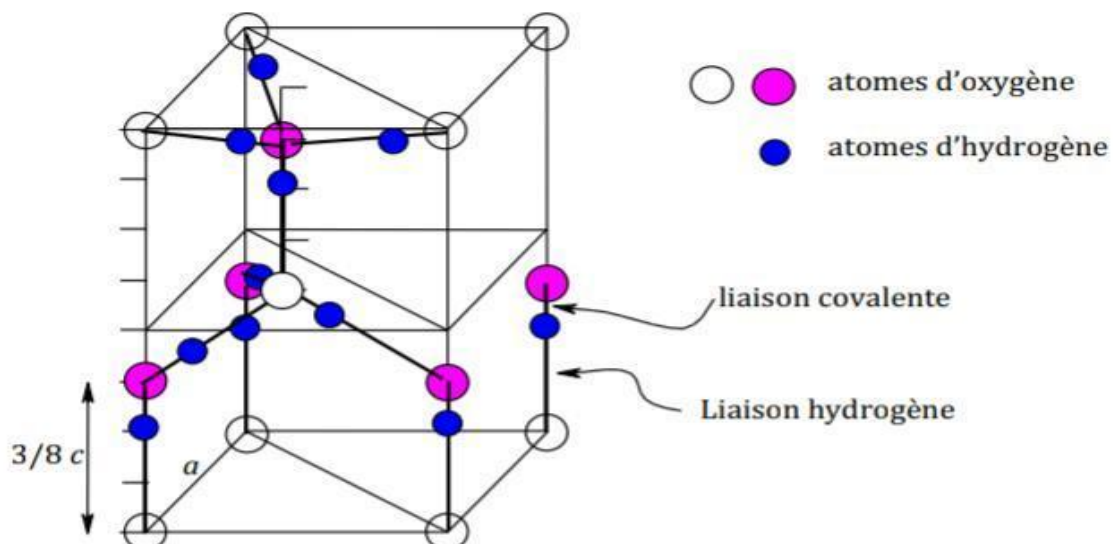


-Nombre de motifs par maille:

On décompte : $8 \times 1/8 + 1 + 1/4 \times 4 + 1 = 4$ atomes d'oxygène par maille.

Et : $7 + 4 \times 1/4 = 8$ atomes d'hydrogène par maille.

Donc : **4 molécules H₂O** par maille.

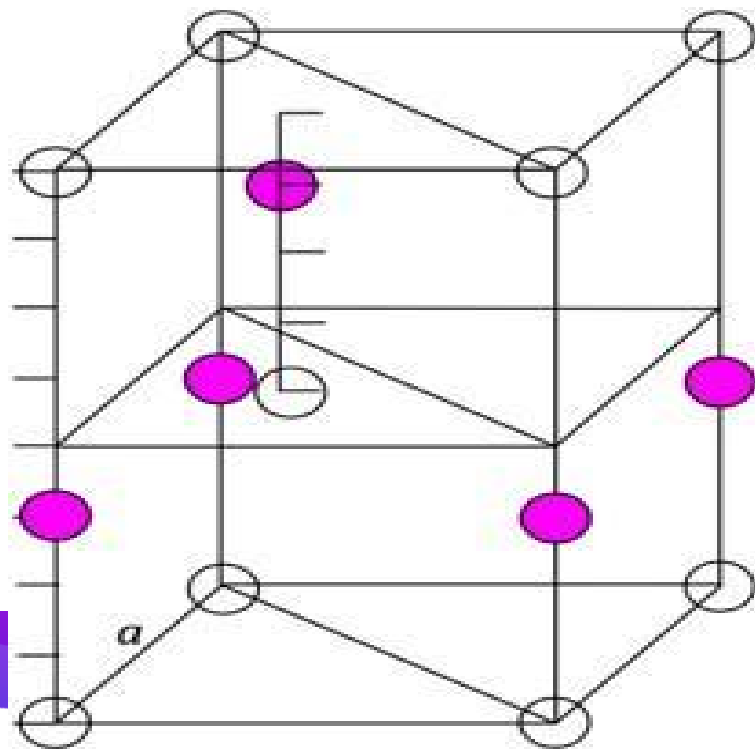


-Position des sites tétraédriques :

On se souvient que les plans de base du prisme ainsi que le plan intermédiaire (contenant les atomes blancs sur le schéma) constituent les plans d'empilement compacts du réseau HC (plans ABA).

Les atomes translattés (en rose) étant situés entre ces plans, ils occupent les positions correspondantes à des sites interstitiels du réseau HC.

Comme les atomes translattés sont situés à l'aplomb d'un atome blanc, ils occupent des emplacements correspondant aux sites tétraédriques.



Conclusion

- Pour clore ce compte rendu, on peut dire que nous avons réussi à achever les objectifs de ce TP en ce qui concerne le calcul des paramètres de maille associés à quelques structures cristallines tout en se basant sur l'observation et la concrétisation .
- Ainsi, grâce aux éclaircissements, explications et à la supervision du prof **ABDERRAHIM JRIFI**, nous avons pu surmonter les difficultés rencontrées et approfondir nos connaissances en découvrant de nouvelles structures cristallines.
- En addition, nous avons appris comment travailler en groupe et organiser le travail lors du TP afin d'obtenir une bonne structure de la maille.