

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



COMPTE RENDU DU TP 3 DE CRISTALLOGRAPHIE



Sous la supervision du professeur :

ABDERRAHIM JRIFI

Réalisé par : Elmehti Nachit Mouad Charba

Mohamed Sedki Malika Zaim

Asia Ouair Rihab Matqal

Manal Mara

SOMMAIRE

Introduction.....	
.....	2

Objectifs du TP de la Cristallographie	3
---	---

La structure Fluorine.....	4
-------------------------------	---

Description de la structure.....	4
-------------------------------------	---

Nombre de motifs par maille.....	6
-------------------------------------	---

Coordinance d'un atome	
.6	

Projection de la maille sur le plan (XOY)	7
--	---

Coordonnées réduites des atomes.....	7
---	---

Relation entre les rayons atomiques et le paramètre de maille

a.....8

Compacité et masse

volumique9

Conclusion.....

.....10

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...

Le fluorure de calcium est un composé inorganique de formule **CaF₂**.

Ce composé ionique constitué de calcium et de fluor est présent naturellement dans la nature sous la forme de fluorine (appelée aussi fluorite).

C'est la principale source mondiale en fluor.

C'est un solide insoluble dans l'eau, dont la structure est cubique où chaque atome de calcium est adjacent à

huit atomes de fluor, et chaque atome de fluor par quatre atomes de calcium.

Si les échantillons purs sans défauts sont transparents (et utilisé en verrerie optique pour leur transparence dans la gamme allant des ultraviolets aux infra-rouge moyens), le minéral naturel est souvent profondément coloré à cause de la présence de centres de couleur.

OBJECTIFS DU TP

DE LA CRISTALLOGRAPHIE

- Construire quelques structures cristallines en utilisant des modèles moléculaires (Boules sphériques, Tiges...).
- Observer quelques structures cristallines par une approche à grande échelle.
- Représenter une maille en perspective et tracer sa projection sur un plan.
- Déterminer 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...

- Observer la position des sites tétraédriques et octaédriques et déterminer leurs coordonnées réduites.
- Argumenter et synthétiser sous la forme d'un compte rendu.

STRUCTURE FLUORINE

La structure fluorine CaF_2 est un assemblage d'ions Calcium et Fluorure.

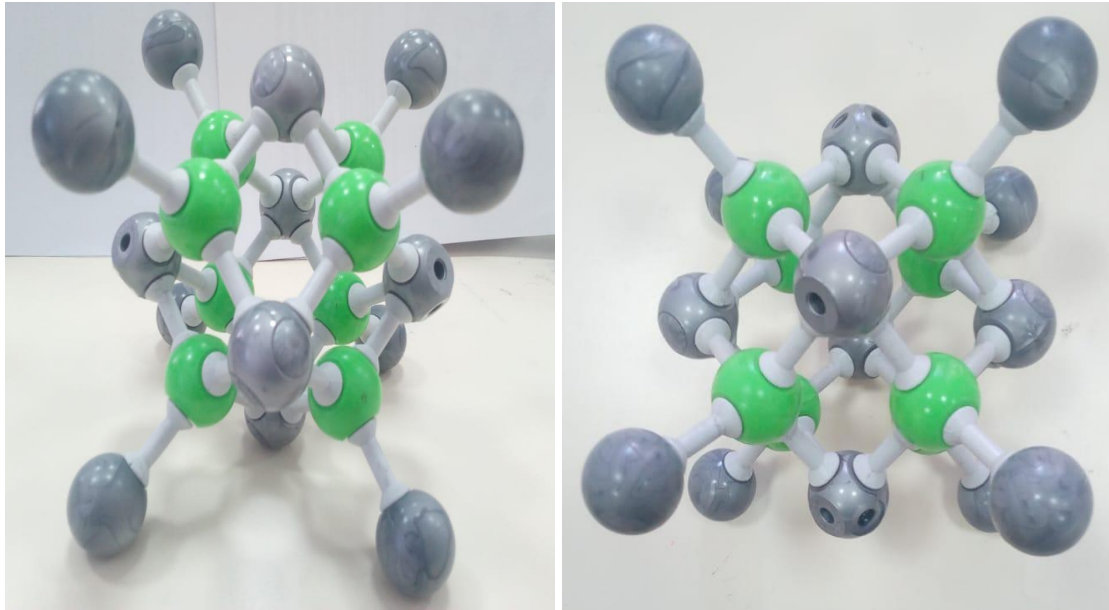
Les anions fluorure sont deux fois plus nombreux que les cations Calcium.

La fluorine cristallise dans le système cristallin cubique.

Description1 : Origine sur le cation.

Les ions calcium Ca^{2+} (représentés ci-dessous en gris) forment un **réseau CFC** (sommets+ centres des faces).

Les ions fluorure F^- (représentés ci-dessous en vert) occupent la **totalité des sites tétraédriques** (centres des petits cubes d'arête $a/2$).

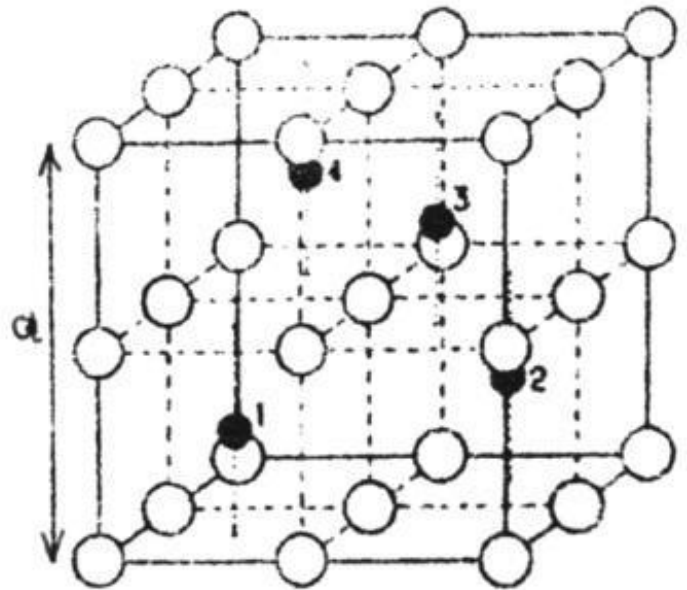
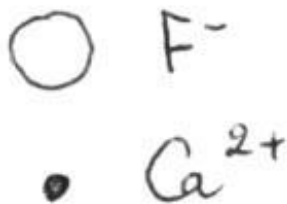


Description2 : Origine sur l'anion.

Les ions calcium Ca^{2+} occupent la **moitié des sites cubiques**.

Les ions fluorure F^- occupent les sommets, les centres des faces, les milieux des arêtes et le centre de la maille (**La structure NaCl**).

Structure CaF_2



Remarque :

Les deux descriptions se déduisent l'un de l'autre par une translation de type $(\frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4})$.

Dans ce cas, le motif est la molécule CaF_2 .

Pour calculer le nombre de motifs par maille, il faut donc calculer le nombre des ions Ca^{2+} et F^- par celle-ci.

Puisque les ions Ca^{2+} occupent le réseau CFC,
alors : $Z (\text{Ca}^{2+}) = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ ions Ca^{2+} par maille.

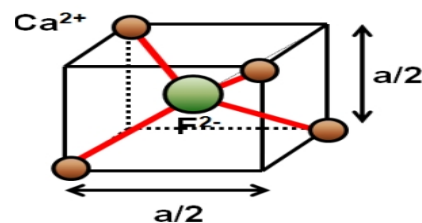
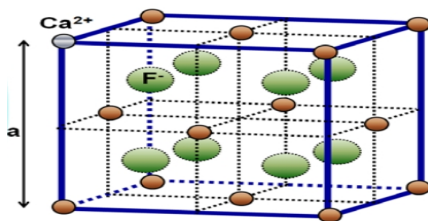
Et puisque les ions F^- occupent la **totalité des sites tétra**,
alors : $Z(\text{F}^-) = 8 \times 1/1 = 8$ ions F^- par maille.

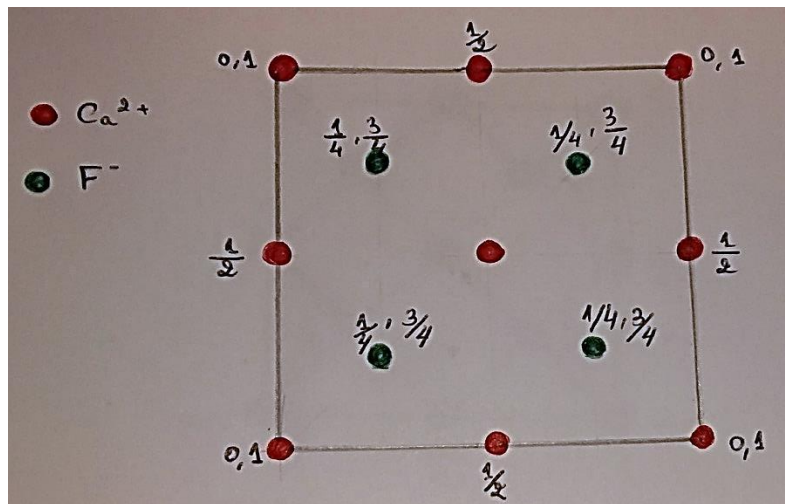
La maille comprend donc **4 cations Ca^{2+} et 8 anions F^-** .
Il y a donc **4 motifs ou groupements formulaires CaF_2** par maille.

Chaque cation Ca^{2+} est au centre d'un **cube** ;
il est donc entouré de **8 anions F^-** situés à la même distance $a\sqrt{3}/4$.

Chaque anion F^- est au centre d'un **site tétraédrique** ;
il est donc entouré de **4 cations Ca^{2+}** situés à la même distance $a\sqrt{3}/4$.

Les indices de coordination sont donc **8 pour les cations Ca^{2+} et 4 pour les anions F^- : coordination 8-4**.





Origine sur l'anion:

F^- : (000) $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$ $(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2})$ $(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2})$
 $(\frac{1}{2} 0 0)$ $(0 \frac{1}{2} 0)$ $(0 0 \frac{1}{2})$ $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2})$

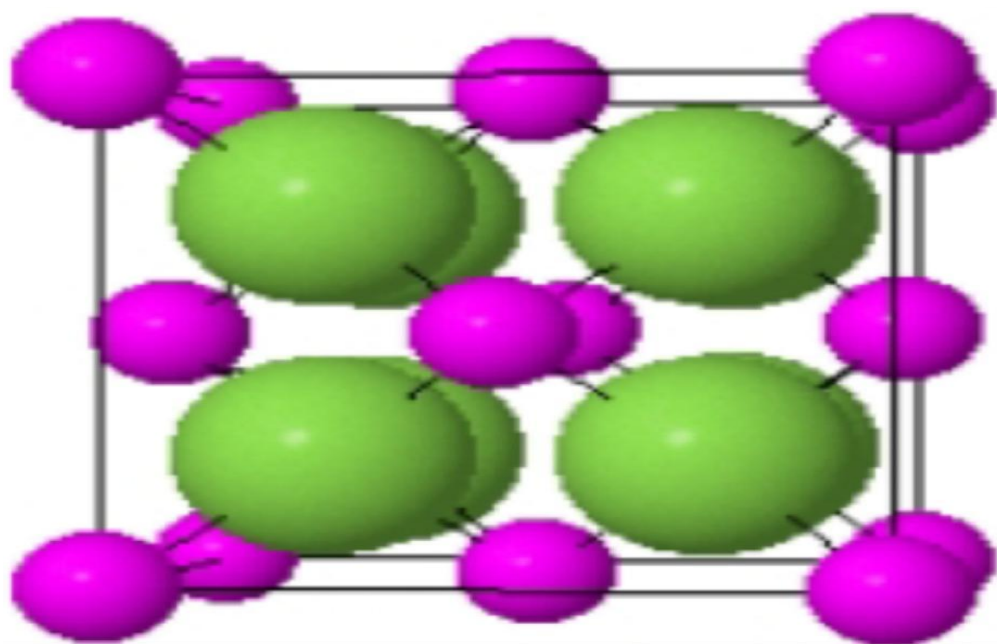
Ca^{2+} : $(\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4})$ $(\frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4})$ $(\frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4})$ $(\frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4})$

Si on fait une translation de type $(\frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4})$ on obtient les nouvelles coordonnées :

Origine sur le cation:

F^- : $(\frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4})$ $(\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4})$ $(\frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4})$ $(\frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4})$
 $(\frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4})$ $(\frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4})$ $(\frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4})$ $(\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4})$

Ca^{2+} : (000) $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$ $(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2})$ $(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2})$



→ Ca^{2+} et F^- sont tangents selon la grande diagonale du cube de côté $a/2$ ⇒ $r^- + r^+ = \frac{a}{2} \frac{\sqrt{3}}{2}$

$$\Rightarrow a = \frac{4}{\sqrt{3}} (r^- + r^+)$$

$$\Rightarrow \boxed{a = 0,536 \text{ nm}}$$

→ La distance entre 2 ions F^- est $a/2 = 0,268 \text{ nm}$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{a}{2} > 2r^- = 0,266 \text{ nm}}$$

⇒ Les ions F^- ne sont pas tangents.

*Compacité :

$$C = \frac{m V_{\text{motif}}}{V_{\text{maille}}} = 4 \frac{4\pi}{3} \frac{r_+^3 + 2 r_-^3}{a^3}$$

m : nombre de motifs par maille.

r_+ et r_- : rayons des ions Ca^{2+} et F^- .

Or : $a=536\text{pm}$; $r_+=112\text{pm}$ et $r_-=131\text{pm}$

Donc: **$C=0.641$**

*Masse volumique :

$$\rho = \frac{m M_{\text{motif}}}{N V_{\text{maille}}} = \frac{4 M_{\text{CaF}_2}}{N a^3}$$

M_{CaF_2} : la masse molaire du motif CaF_2

N : le nombre d'Avogadro

Donc: **$\rho = 3,36 \text{ g/cm}^3$**

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.