

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



COMPTE RENDU DU TP 2 DE CRISTALLOGRAPHIE

Sous la supervision du professeur :

ABDERRAHIM JRIFI

Réalisé par :

Mohamed Sedki

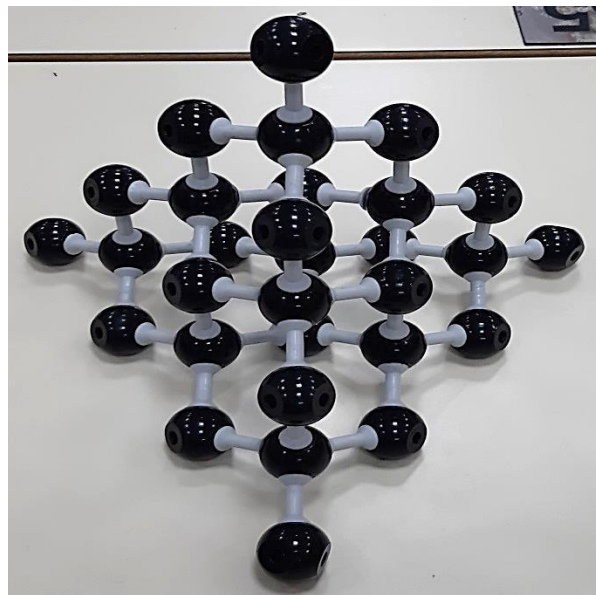
Elmehdi Nachit

Malika Zaim

Manal Mara

Rihab Matqal

Asia Ouair



Mouad Charba

SOMMAIRE

1

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

Objectifs du TP de la
Cristallographie4

La structure du
diamant.....5

Description de la
structure.....5

Nombre de motifs par
maille.....7

Coordinance d'un
atome
.7

Projection de la maille sur le plan (XOY) et coordonnées réduites des
atomes.....
.....8

Position des sites tétraédriques	1	9
Relation entre le rayon atomique R et le a	10	
Compacité et masse volumique		11
Conclusion.....		
.....	12	

INTRODUCTION

La cristallographie est la science qui se consacre à l'étude des substances cristallines à l'échelle atomique. Les propriétés physico-chimiques d'un cristal sont étroitement liées à l'arrangement spatial des atomes dans la matière. C'est le cas du diamant et du graphite qui sont tous deux constitués uniquement d'atomes de carbone mais d'arrangement spatial des atomes différents et donc de propriétés physico-chimiques différentes.

Le diamant est un cristal covalent fait uniquement de carbone.

Il est formé sous de fortes pressions et à des températures élevées.

Sa structure, quasi-compacte, lui offre notamment une dureté exceptionnelle, à laquelle il doit d'ailleurs son nom.

Le diamant est en effet le plus dur des matériaux naturels

(le diamant ne peut être coupé que par un diamant) .
De plus, c'est un matériau diélectrique transparent possédant un fort indice de réfraction et une bonne conductivité thermique.
1



Diamant brut



Diamant taillé

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: coordonnée réduite, nombre de motifs par maille ; coordonnées réduites des atomes...

-Observer la position des sites octaédriques et déterminer leurs coordonnées réduites.

-Argumenter et synthétiser sous la forme d'un compte rendu.

STRUCTURE DU DIAMANT

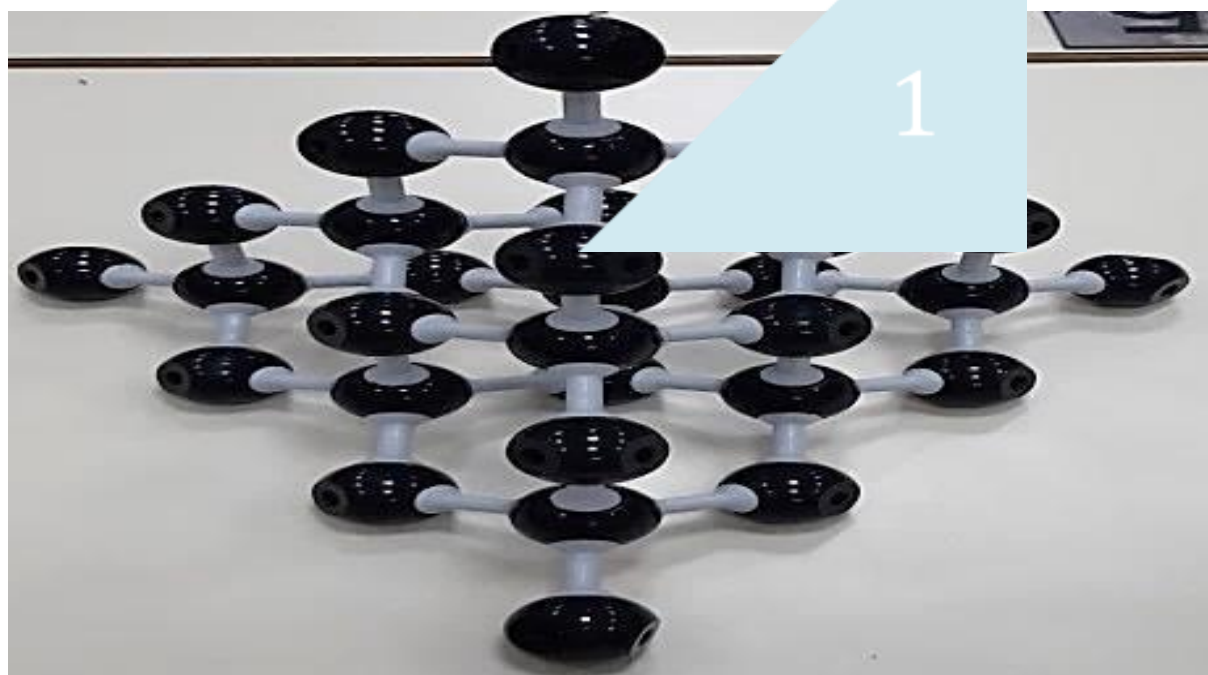
-Description de la structure :

Les atomes de **carbone** :

- *Constituent une structure **C.F.C**
(Sommets + Centre des faces).
- *Occupent **un site tétraédrique sur 2**
(Centre des petits cubes d'arête $a/2$).

Les **bâtons** utilisés lors de la séance du TP représentent les liaisons covalentes entre atomes de carbone.

Un atome de carbone est ainsi lié physiquement à **4** de ses voisins.

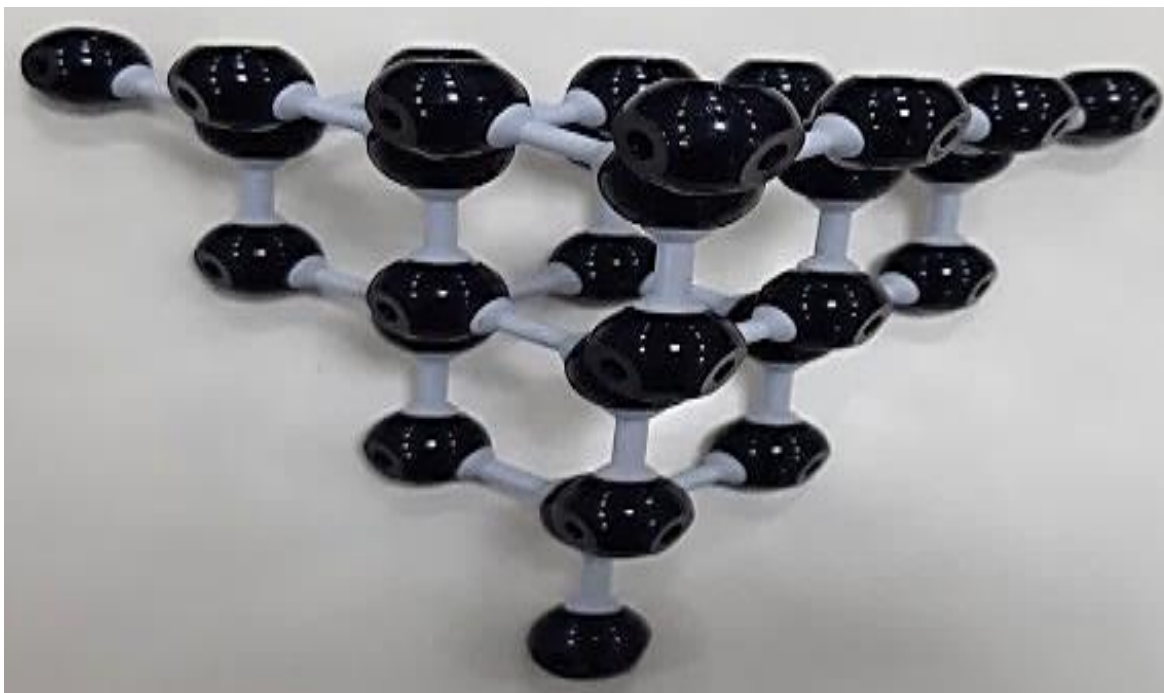
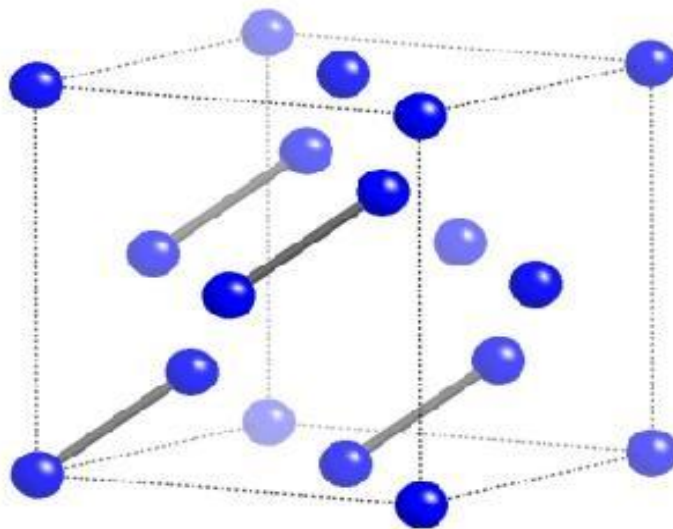


Une autre façon de décrire la structure cubique est de considérer un réseau cubique F décoré en chaque nœud du réseau

1

- un atome en $0, 0, 0$
- un atome en $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$

Cette représentation est illustrée sur la figure suivante :



-Nombre de motifs par maille:

Les atomes au sommet du cube appartiennent à huit mailles; au centre des faces entre deux mailles; aux centres des tétraèdres, ils appartiennent uniquement à la maille.

$$\text{D'où : } Z = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} + 4 \times 1 = 8$$

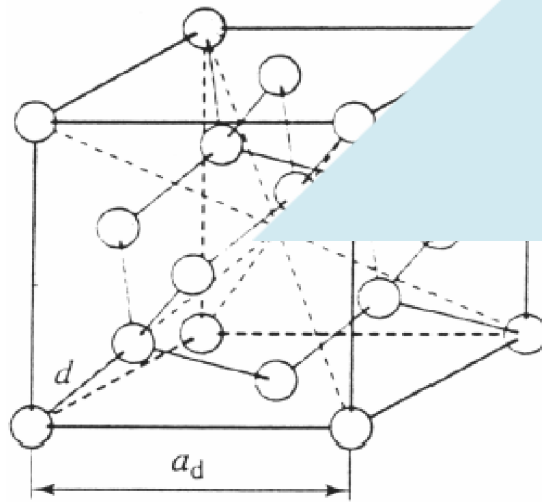
On a donc **8 atomes par maille**.

-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.

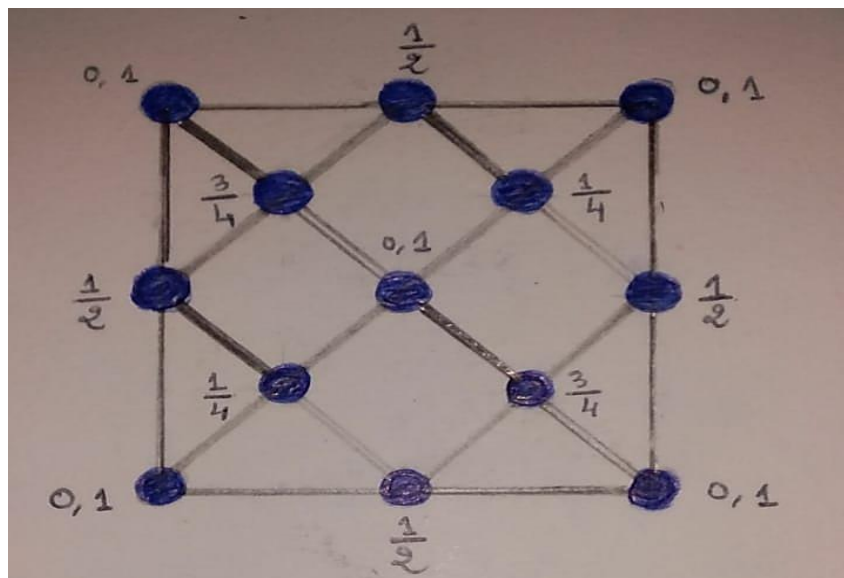
Dans le cas du **diamant**, chaque atome de carbone est au centre d'un **tétraèdre** formé par quatre autres carbones. Il est donc entouré par **quatre plus proches voisins**.

D'où **la coordinnence vaut 4**.



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

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



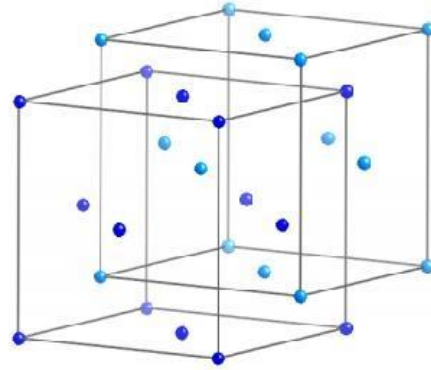
***Coordonnées réduites des atomes :**

On recense donc 8 atomes dans une maille :

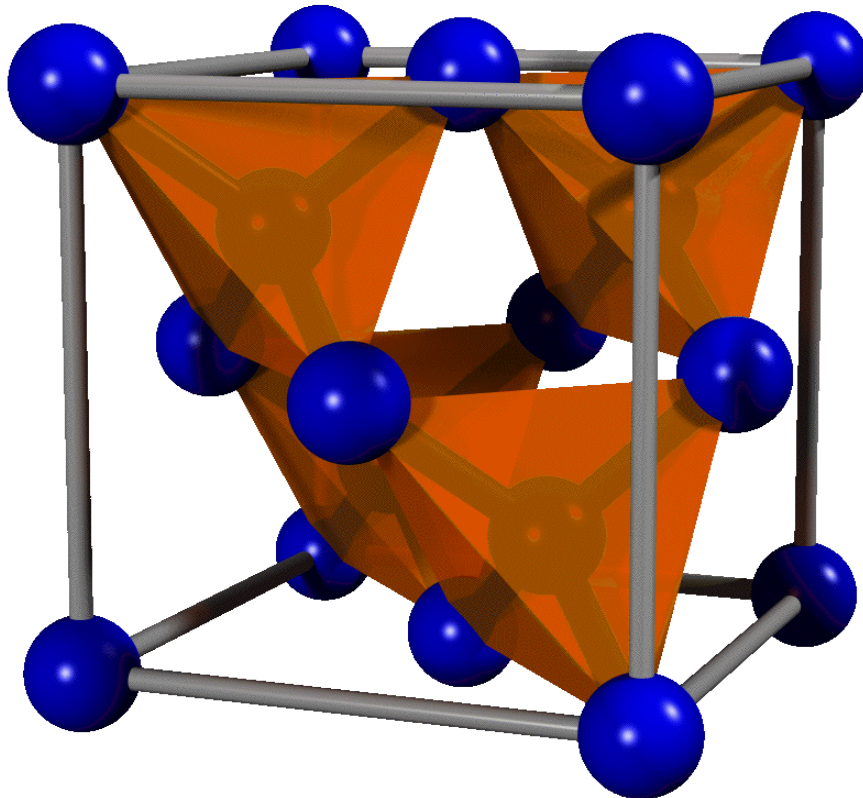
$0, 0, 0$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$
$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}$	$\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$	$\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}$

1

le fait de les lister dans cet ordre met en évidence qu'il s'agit d'un réseau cubique face centré (FCC) peut-être décrite comme deux réseaux cubiques face centrés décalés de $\frac{1}{4}$ (en unités de a).



-Position des sites tétraédriques :



Représentation de la maille du cristal de silicium (en tenant
mettant en évidence les sites tétraédriques (les sites oranges).

On a donc l'occupation d'un site tétraédrique sur 2.

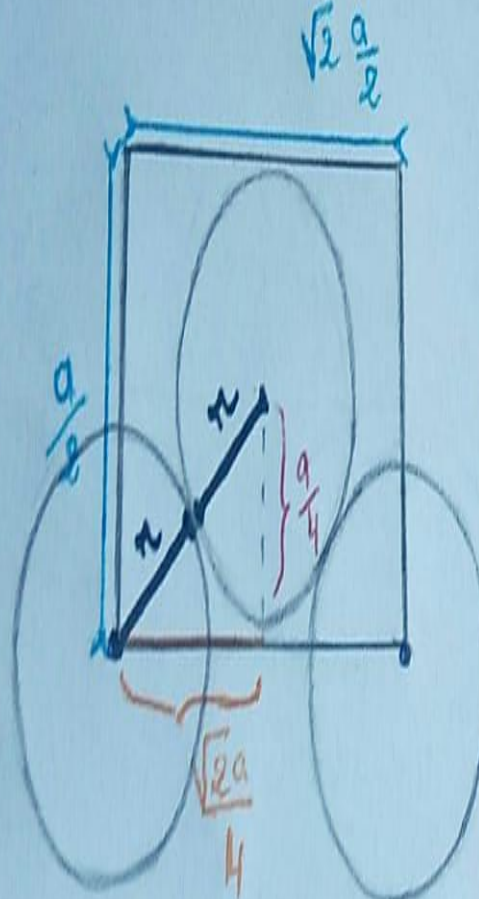
Coordonnées réduites des sites tétraédriques :

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

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

On a **contact** entre deux atomes de carbone suivant **le quart de la grande diagonale du petit cube**, donc :

1



$\Rightarrow 4\pi^2 = \frac{2a^2}{16} + \frac{a^2}{16}$

$\Rightarrow 4\pi^2 = \frac{3a^2}{16}$

$\Rightarrow 2\pi = \frac{\sqrt{3}a}{4}$

$\Rightarrow \left[\pi = \frac{\sqrt{3}}{8}a \right]$

A.N.: $\pi = \frac{1,7357}{8} \approx 80 \text{ pm}$

-Compacité et masse volumique :

*Compacité :

Par maille, il y a **8 atomes de carbone**, soit un volume occupé :

$$V_{\text{occupé}} = 8 \times \frac{4}{3} \pi R^3 = \frac{\pi \sqrt{3}}{16} a^3$$

$$C = \frac{V_{\text{occupé}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{\frac{\pi \sqrt{3}}{16} a^3}{a^3} = \frac{\pi \sqrt{3}}{16} = 0,34$$

On déduit donc que dans le modèle cristal « **diamant** », seulement **34 %** de l'espace est occupé par des atomes de la matière, c'est donc une structure **peu compacte**.

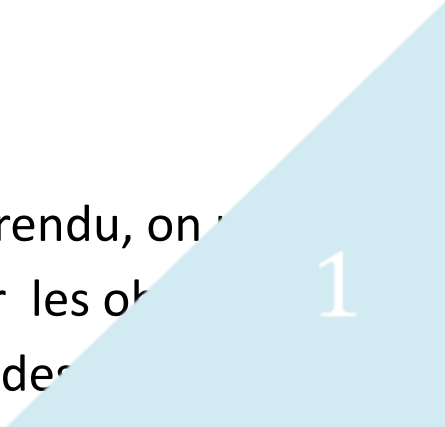
*Masse volumique :

Par maille, il y a **8 atomes de carbone**, soit une masse de matière :

$$m_{\text{matière}} = 8 \times \frac{M_C}{N_A}$$

$$\rho = \frac{m_{\text{matière}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{8 \times \frac{M_C}{N_A}}{a^3} = 3,55 \cdot 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$$

CONCLUSION

- 
- Pour clore ce compte rendu, on peut dire que nous avons réussi à achever les objectifs du TP en ce qui concerne le calcul des paramètres de la 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.