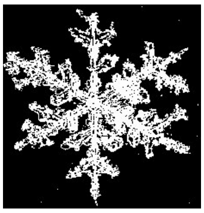
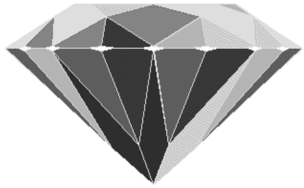
TP – Cristallographie - Introduction

Qu'est-ce qu'un cristal ?

Assemblage régulier sur de larges échelles d'atomes ou de molécules

Quelques exemples : La neige, le Sucre, le Sel, les Silicates, les métaux et les pierres précieuses (gemmes, …)



Pourquoi étudier les cristaux ? → Car presque tous les corps chimiques s'organisent sous la forme de cristaux lorsqu'ils sont à l'état solide (forme rigide, organisée, et très compacte)

Utilité de la cristallographie ? **→ Décrire l'état solide de la matière**

Etats physiques de la matière :

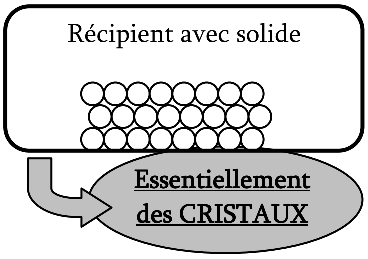
Un corps pur peut se trouver sous 3 états

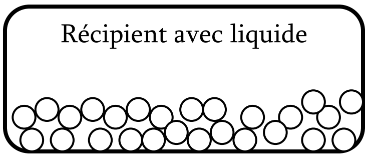
SOLIDE	LIQUIDE	GAZ
→ Possède son VOLUME PROPRE → Possède sa FORME PROPRE, (Indépendante du récipient qui le contient - rigide)	→ Possède son VOLUME PROPRE → PAS DE FORME PROPRE (Prend la forme du récipient qui le contient)	→ NI VOLUME PROPRE → NI FORME PROPRE (Un gaz occupe tout l'espace du récipient qui le contient)

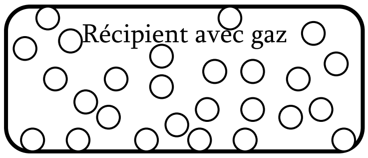
Plus compact – Plus dense ← Moins compact – Moins Dense

→ Etat la majorité du tps ordonné → Molécules au contact → Ne peuvent plus bouger → Forte interaction	→ Etat désordonné → Molécules très proches → Peuvent bouger les unes par rapport aux autres	→ Etat désordonné →Molécules très éloignées → Très agitées – Bougent librement → Peu d'interaction

Illustration :







Etude des gaz
(Voir Cours Thermodynamique)

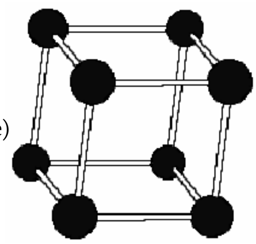
Quels éléments, sous quels états ?

→ Tous les éléments peuvent se trouver dans les 3 états, selon les conditions extérieures (pression, température)
→ Par exemple, sous P = 1bar, l'eau pure est à l'état solide si T<0°C, liquide si 0°C<T<100°C et gazeuse si T>100°C.

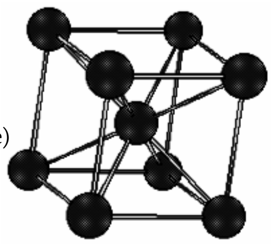
Quelques Organisations Possibles :

(chaque atome est modélisé par une sphère dure indéformable)

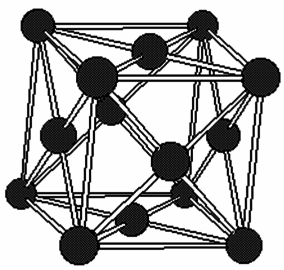
Cubique Simple : (Vue éclatée)



Cubique Centré : (Vue éclatée)



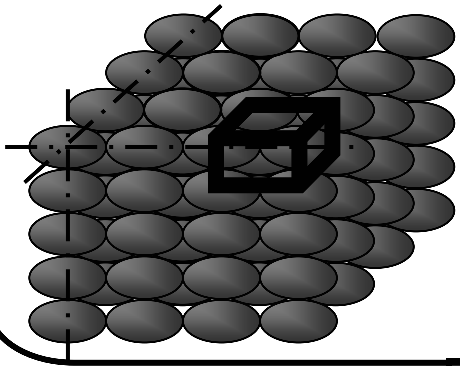
Cubique Faces Centrées : (Vue éclatée)



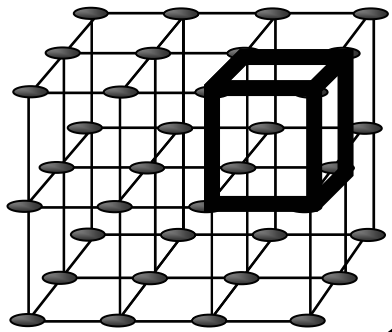
Exemple : Etude du Réseau Cubique Simple

Organisation des sphères – Maille élémentaire :

Représentation compacte :

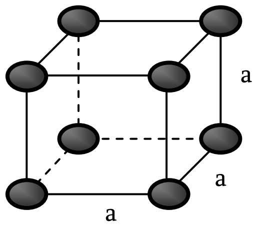


Représentation éclatée :



Maille élémentaire :

a = coté de la maille
(Paramètre de maille)



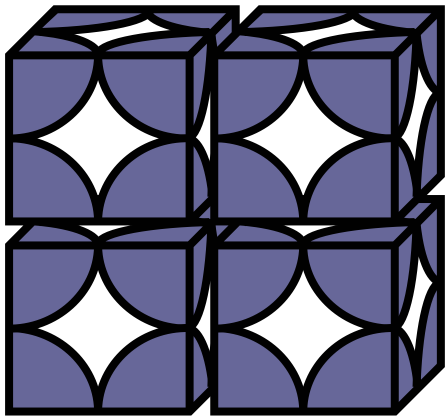
Population (ou multiplicité) de la maille :

Combien de sphères y a-t-il dans chaque maille élémentaire ?

8 sphères dans la maille

Mais chacune est en fait partagée entre 8 mailles
→ Ne compte que pour $1/8$

Multiplicité = Population =
Nb de sphères par maille = N = $8 \times 1/8 = 1$



Compacité de structure cubique simple :

Définition : Compacité = Rapport du volume réellement occupé sur le volume total = $C = \dfrac{V_{occupé\ par\ les\ sphères}}{V_{total\ de\ la\ maille}}$

Ici : $\begin{cases} V_{occupé\ par\ les\ sphères} = N \times \dfrac{4}{3}\pi R^3 \\ V_{de\ la\ maille} = a^3 = (2R)^3 \end{cases}$

$$\boxed{\Rightarrow C = \frac{V_{occupé\ par\ les\ sphères}}{V_{total\ de\ la\ maille}} = \frac{N \times \frac{4}{3}\pi R^3}{(2R)^3} = \frac{\pi}{6} = 52\%}$$

Point clé : trouver la relation entre R et a

Calcul de la Multiplicité (ou Population) d'une maille

La multiplicité ? (aussi appelée population)

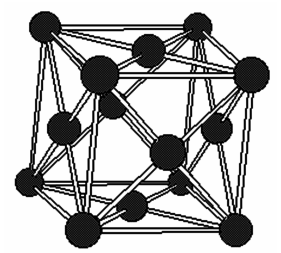
Qu'est-ce que la multiplicité ? → Nombre de sphères appartenant à la maille élémentaire

Pourquoi la calculer ? On a besoin de savoir combien de sphères appartiennent réellement à chaque maille pour pouvoir les dénombrer exactement, et faire les calculs de masse, de densité…

Quelle est la difficulté ? On ne doit pas compter directement les sphères représentées sur la maille élémentaire, car certaines sont partagées entre plusieurs mailles, comme illustré sur le schéma suivant :

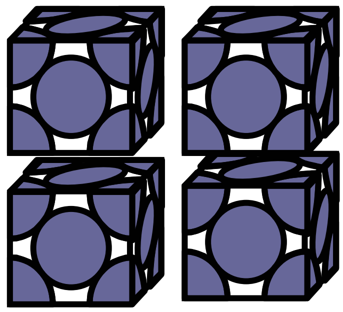
Maille élémentaire :
Cubique Faces Centrées

(En vue éclatée)
14 sphères apparaissent
Ce n'est pas la multiplicité

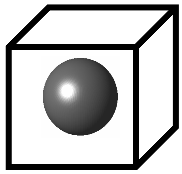
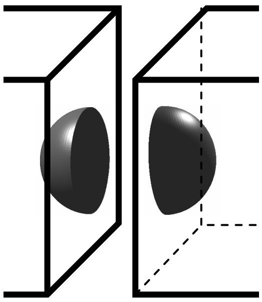
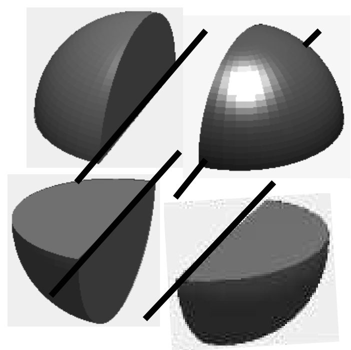
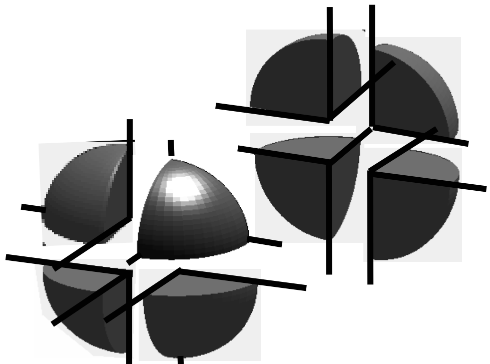


Mais la majorité des sphères sont partagées entre plusieurs mailles :

→ Il ne faut en compter qu'une partie



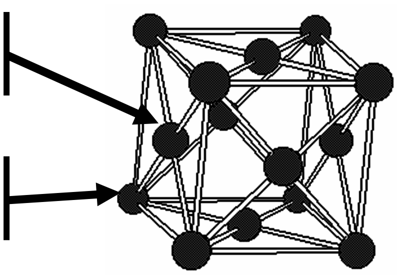
Comment faire le calcul de la multiplicité ?

QUATRE CAS POSSIBLES	**Sphère au centre de la maille** 	→ Elle appartient entièrement à la maille ➔ Compte pour 1 entier
Sphère sur une face de la maille  → Elle appartient à 2 mailles voisines ➔ Compte pour 1/2	**Sphère sur une arête de la maille**  → Elle appartient à 4 mailles voisines ➔ Compte pour 1/4	**Sphère sur une coin de la maille**  → Elle appartient à 8 mailles voisines ➔ Compte pour 1/8

Application à la structure Cubique Faces Centrées :

Chaque sphère sur une face compte pour 1/2
→ $6\times \frac{1}{2}=3$

Chaque sphère en coin compte pour 1/8
→ $8\times \frac{1}{8}=1$



Multiplicité totale du CFC :

$$N_{CFC} = 8\times \frac{1}{8} + 6\times \frac{1}{2} = 4$$

Application – TP – Mesure de Compacité

Définition de la compacité :

Elle caractérise la densité de la structure cristallographique

Compacité : $$C = \frac{V_{occupé\ par\ les\ sphères}}{V_{total\ de\ la\ maille}}$$ (sans unité, en général en %)

Manipulations : (à appliquer à chaque structure)

Recherche du volume occupé par les sphères :

1. Mesurer le volume d'une sphère
2. Trouver la multiplicité de la structure
3. En déduire le volume occupé par les sphères d'une maille dans cette structure

Recherche du volume de la maille :

4. Réaliser la structure à l'aide des boules. Attention à bien garder une structure cubique (3 cotés de même longueur)
5. Mesurer le volume de la maille.

Calcul de la compacité :

6. En déduire la compacité de la structure $C = \frac{V_{occupé\ par\ les\ sphères}}{V_{total\ de\ la\ maille}}$ – Compléter le tableau suivant :
7. Classer les structures de la moins compacte à la plus compacte.

Structure	Cubique Simple	Cubique Centrée	Cubique Faces Centrées
Multiplicité			
$V_{occupé\ par\ les\ sphères}$			
Paramètre de maille a			
$V_{total\ de\ la\ maille}$			
Compacité C (en %)			

Relation entre le paramètre de maille et le rayon des sphères : (à appliquer à chaque structure)

8. Observer les assemblages et trouver quelles sont les sphères qui sont en contact.
9. En déduire la relation entre le paramètre de maille a et le rayon r (différente pour chaque structure)
10. En déduire l'expression théorique de la compacité et vérifier la valeur trouvée expérimentalement.