

TP N° 01: Séance d'Introduction (Structure Cristalline-1)

Introduction

Un cristal est un solide à structure régulière et périodique, formé d'un ensemble ordonné d'un grand nombre d'atomes, de molécules ou d'ions. Il est constitué d'un assemblage périodique de particules. Il peut être décrit par translation suivant les trois directions de référence d'une entité de base qu'on appelle la maille. La description du cristal nécessite la connaissance du réseau et celle du motif. Si un atome étranger occupe un nœud du réseau, on parle alors de « solution solide de substitution ».

Les matériaux solides peuvent exister sous deux états différents :

- l'état désordonné caractérisé par une structure non ordonnée c'est le cas des systèmes amorphes, par exemple les verres.
- l'état ordonné caractérisé par une structure ordonnée (structure cristalline) correspond aux solides cristallins.

Objectifs:

- ✓ Donner un aperçu théorique et pratique sur les différentes structures cristallines
- ✓ Décrire les structures cristallines compactes, CFC et HCP
- ✓ Initiation sur le logiciel "CARINE Crystallography"
- ✓ Construire les différentes structures cristallines à l'aide du logiciel "CARINE"
- ✓ Produire une solution solide de substitution
- ✓ Avoir une idée sur quelques défauts cristallins (défauts ponctuels)

I) Partie théorique

A trois directions de l'espace, *Auguste Bravais* (1848) a montré que le nombre de systèmes cristallins possibles était très limité. Il a répertorié 14 types de réseaux qui sont des variantes de seulement 7 systèmes cristallins. (Voir figure1).

System	Axial lengths and angles	Bravais lattice	Lattice symbol
Cubic	Three equal axes at right angles $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Simple	P
		Body-centered	I
		Face-centered	F
Tetragonal	Three axes at right angles, two equal $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Simple	P
		Body-centered	I
Orthorhombic	Three unequal axes at right angles $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Simple	P
		Body-centered	I
		Base-centered	C
		Face-centered	F
Rhombohedral*	Three equal axes, equally inclined $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	Simple	R
Hexagonal	Two equal coplanar axes at 120° , third axis at right angles $a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ (\gamma = 120^\circ)$	Simple	P
Monoclinic	Three unequal axes, one pair not at right angles $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	Simple	P
		Base-centered	C
Triclinic	Three unequal axes, unequally inclined and none at right angles $a \neq b \neq c, (\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ)$	Simple	P

Figure 1: Les 14 réseaux de Bravais

Les structures les plus rencontrées dans le domaine physique des matériaux métalliques et non métalliques sont: cubique centrée (CC), cubique à faces centrées (CFC) et hexagonale compacte (HCP). Les descriptions géométriques de celles-ci sont données comme suivantes:

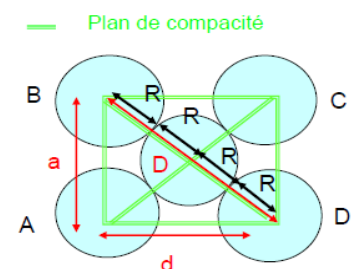
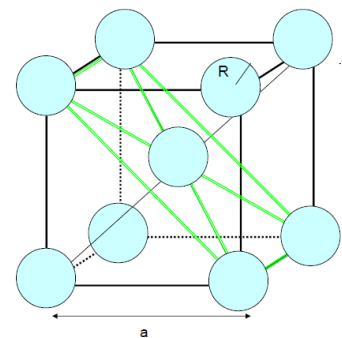
Cubique Centrée (CC):

Les couches des atomes se superposent l'une sur l'autre comme: A-B-A, A-B-A ...

* *Nombre d'atomes:* $8 \times (1/8) + 1 = 2$ atomes/maille
 On a: $D^2 = a^2 + d^2 = a^2 + 2a^2 = 3a^2$ alors, $D = a\sqrt{3} = 4R$,
 donc $R = (a\sqrt{3})/4$.

* *Coordinance:* 8 atomes à $(a\sqrt{3})/2$.

* *Compacité (C):* $C = (\text{Volume de tous les atomes}) / (\text{Volume de la maille}) = 0.68 = 68\%$. (Soit 32% vide).



Cubique à Faces Centrées (CFC):

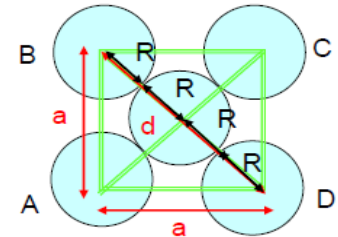
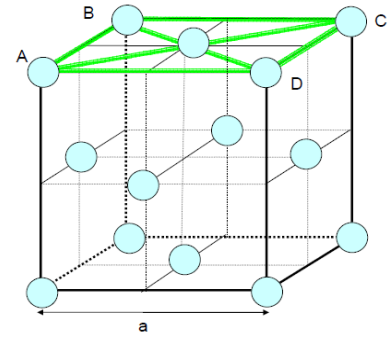
Les couches des atomes se superposent l'une sur l'autre comme: A-B-C, A-B-C ...

* *Nombre d'atomes:* $8 \times (1/8) + 6 \times (1/2) = 4$ atomes/maille

On a: $d = a\sqrt{2} = 4R$, donc $R = (a\sqrt{2})/4$.

* *Coordinance:* 12 atomes à $(a\sqrt{2})/2$.

* *Compacité (C):* $C = 0.74 = 74\%$. (Soit 26% vide).



Hexagonale Compacte (HCP):

Les couches des atomes se superposent l'une sur l'autre comme: A-B-A, A-B-A ...

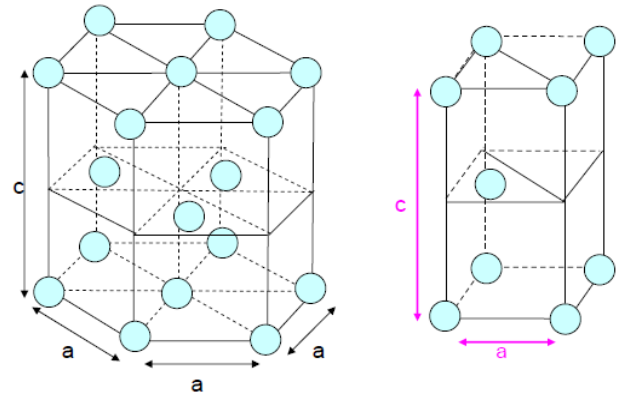
* *Nombre d'atomes:* $12 \times (1/6) + 2 \times (1/2) + 3 \times 1 = 6$ atomes/maille hexagonale

$8 \times (1/8) + 1 = 2$ atomes /maille élémentaire.

On a: $a = 2.R$ et $c = 2.a. \sqrt{2/3}$

* *Coordinance:* 12 atomes à $(a\sqrt{2})/2$.

* *Compacité (C):* $C = 0.74 = 74\%$. (Soit 26% vide).



II) Partie pratique

1- Construire à l'aide du logiciel CARINE les 14 réseaux de Bravais l'un après l'autre. (mettre toujours, $a, b, c \geq 4A^\circ$).

2- On prend à titre exemple un élément A de structure CFC, si on détache l'un de ses atomes et le remplacer par un autre de nature différente (B comme exemple). Qui s'appelle ce type solution solide?

3- L'Aluminium (Al) se cristallise dans une structure cubique à faces centrées. Son paramètre de maille est $a = 5.00A^\circ$. En utilisant le logiciel CARINE:

- Dessiner la maille de cet élément.
- Extraire les positions atomiques de tous les atomes de la maille.
- Mesurer la distance entre chaque deux atomes dont les positions suivantes:

$(0,0,0)$ et $(1,0,0)$... $(0,0,0)$ et $(1/2,1/2,0)$... $(0,0,0)$ et $(1/2,1/2,1)$. Vérifier les en se basant sur le paramètre "a" !.

Module: Travaux Pratiques: Physique des Solides-L3-Physique Fondamentale

- Mesurer l'angle α entre chaque deux directions suivantes: $[1,0,0]$ et $[0,1,0]$... $[1,0,0]$ et $[1,0,1]$.
- Indiquer sur la maille les plans suivants: $(1,0,0)$, $(0,1,0)$ et $(1,1,1)$. Confirmer les en utilisant la souris.
- 4- Refaire les mêmes étapes précédentes pour le Tungstène (W) qui se cristallise dans une structure CC.
- 5- Refaire les mêmes étapes précédentes pour le Magnésium (Mg) qui se cristallise dans une structure HCP

Annexe

Comment travailler sur le logiciel CARINE

Le logiciel CARINE est un outil pour l'enseignement et la recherche scientifique. Il nous permet de faire des Calculs et de Représentation de structures cristallines à trois dimensions. Il nous permet aussi de calculer leurs réseaux réciproques et leurs diagrammes de diffraction des rayons X, ...

II.1. Construction d'une nouvelle maille élémentaire

La création d'une nouvelle maille se fait par l'une des 2 fonctions:

a) Fonction "Maille" du Menu

Cette fonction permet de construire une maille élémentaire d'un élément à partir de sa structure. Après la sélection de la structure, une boîte de dialogue est ouverte afin d'entrer les paramètres de la maille et les positions des atomes (voir figure 1). Les étapes se fait comme suivants:

- (*Maille*--- puis on sélectionne la structure, Ex: Cubique, Face centrée F).
- Sélectionner l'atome (élément) à partir le tableau Mendeleïev.
- Introduire les paramètres de la maille puis on clique Ok.

b) Fonction "Création/list" du Menu Maille

Cette fonction permet de construire une maille élémentaire en entrant leur, paramètres, positions des atomes ainsi que les angles (Voir figure 2 au dessous). Il est possible d'utiliser le tableau de Mendeleïev (en cliquant sur le bouton Mendeleïev) pour donner séparément les caractéristiques des atomes (symbole chimique, degré d'oxydation, rayon, couleur et occupation). Les étapes sont comme suivant:

- (Nouveau cristal sur la menu) pour créer un nouveau cristal
- (*Maille*---*Création/liste*) pour introduire les atomes, leurs positions et le paramètre de la maille ainsi que les angles de celles-ci.

Une fois on termine d'introduire les informations du premier atome on clique sur *Ajouter*, ensuite on peut passer au deuxième atome et ainsi de suite. A la fin on clique sur Ok.

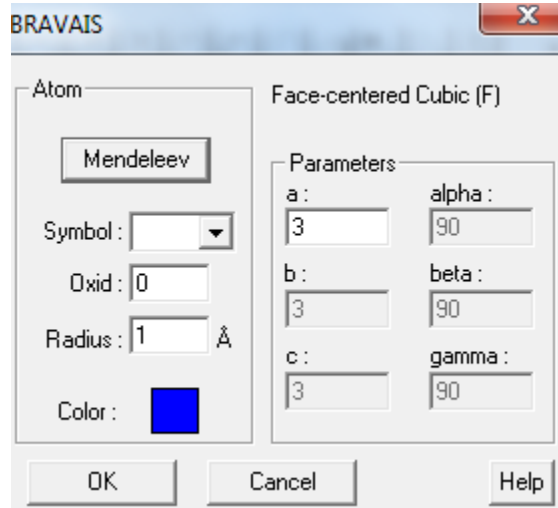


Figure 1: Boite de sélection d'un élément

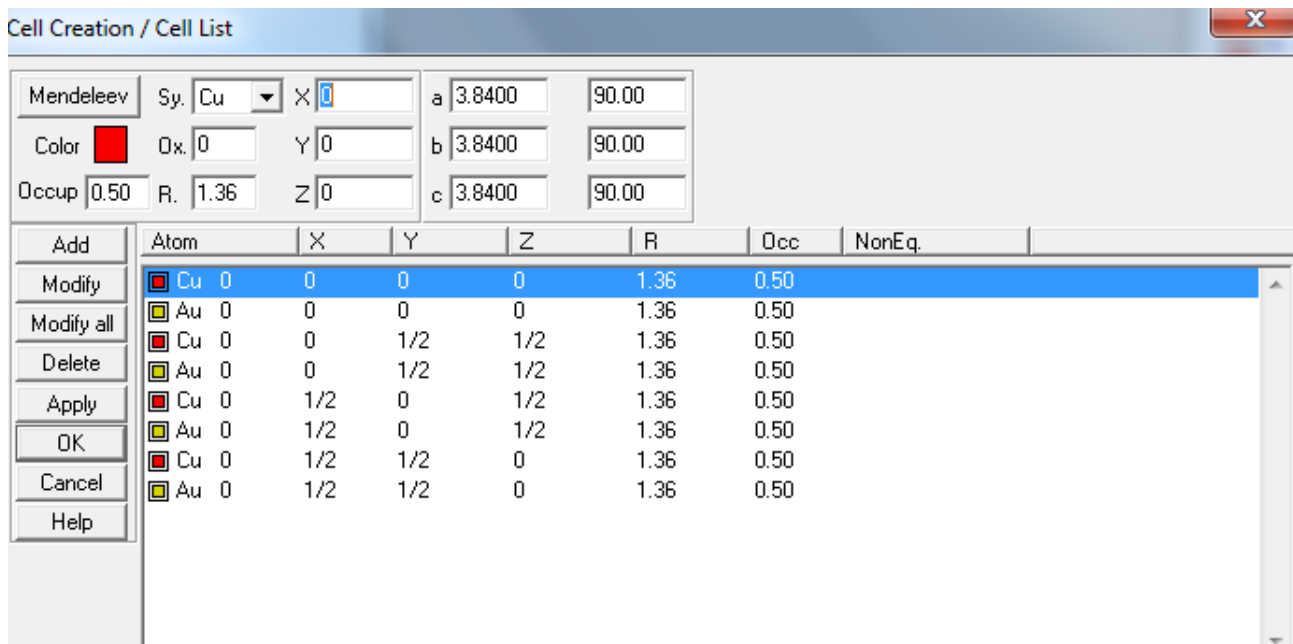


Figure 2: Boite de saisie