



MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITÉ «Abbes LAGHROUR» DE KHENCHELA
FACULTÉ DES SCIENCES ET TECHNOLOGIE



Département des Sciences de la Matière

N° de série :.....

Mémoire de fin d'études

Pour l'obtention du diplôme de Master (L.M.D)

Filière : Chimie

Spécialité : Chimie des matériaux

Intitulé :

**La spectroscopie Infrarouge FT-IR et les
minéraux de la région –Djelal et Batna-**

*Réalisé par : - MERAH Amira
- LOUNANSA Reyane*

Membres de jury :

NOM Prénom Pr. Président

NOM Prénom MAA Examineur

NOM Prénom MCB Examineur

Dirigé par : Pr. Boumaza Abdecharif

Présenté le 20 juin 2022.

Remerciements

En premier lieu, nous voudrions remercier nos DIEU, nos créateur de m'avoir donné le pouvoir pour accomplir ce travail.

Nous envoyons nos vifs remerciements à notre mentor Pr Abdecherif Boumaza pour m'avoir diligenté tout au long de ce travail, pour sa compréhension, sa patience, sa compétence, et ces remarques qui nous ont été précieuses.

Nous tenons également à remercier le président du jury et les membres du jury pour l'honneur qu'ils font pour nous en acceptant la décision et en évaluant notre travail.

Nous présentons nos chaleureux remerciements à tous ceux qui ont contribué au couronnement de ce travail de près ou loin.

Dédicace I

Avec l'expression de ma reconnaissance, je dédie ce modeste travail :

*À la femme qui souffert sans me laisser souffrir, qui n'a jamais dit mon âmes exigences et qui n'a épargné aucun effort pour me rendre heureuse, ma mère
« Rabiaa ».*

*À l'homme, mon précieux offre du dieu, qui doit ma vie, mon père
« Mahmoud MERAH ».*

*À mon fiancé « Anouar CHEKHAB » qui n'ont pas cessé de me conseiller, encourager
et soutenir tout au long de mes études.*

*À ma chère belle-mère qui m'a encouragé, m'a fait travailler patiemment et m'a
calmé à chaque instant de peur que j'avais « Nouara » et à mon cher beau-père
«Aissa».*

*Aux bougies que j'espère qu'elles garder toujours lumineuse, mes petites sœurs
«sirine, Nada et Ikram » et mes chères sœurs Samira et Mounira avec ses enfants.*

À mes chers frères « Nabil et Abd eldjalil » avec ses enfants.

*À mon binôme « Rayane LOUNANSA » pour son soutien moral, sa patience tout au long
de ce projet.*

À toutes mes amies qui j'éte connu.

Sans oublier tous mes amis de promotion de 2^{ème} année master chimie des matériaux.

Dédicace 2

Je tiens c'est avec grande plaisir que je dédie ce modeste travail :

Aux mes proches attendaient beaucoup de voir ce jour et je souhaitais voir leur joie pour moi, mais malheureusement la mort les emportés, a ma grande mère, ma mère et mon père.

À celui que j'aime beaucoup et qui m'a soutenue tout au long de ce projet, et qui doit ma réussite mon mari « Takiy Eddine ».

À mon joie de ma vie mon fils « Djoud ». Que dieu le donne une longue et joyeuse vie.

À mes chères sœurs Nawal et Kamilia et ses enfants. Que dieu leur procure bonne santé et longue vie.

À mes chers frères Anis, Abdel Ghafour et Abdel Raouf et ses enfants.

À ma belle mère qui prend la responsabilité de mon fils tandis que j'étudie.

À ma seule tante « Zohra » que Dieu la protège et donne une belle vie.

À ma deuxième sœur qui la vie me donne « Izdihar BOUZZIDI ».

À ma belle amie et mon binôme « Amira MERAH » qui ma donne des souvenirs inoubliables.

Sans oublier tous mes amis de promotion de 2^{ème} année master chimie des matériaux.

À toutes mes amies qui j'étais connu.

Table des matières

Table des matières	2
Tables d'illustrations	4
A- Les tableaux	4
B- Les figures	5
Introduction générale	7
Chapitre I Minéraux et roches	9
I. 1 Introduction	9
I. 2 Définitions	9
I. 2. 1 Roches	9
I. 2. 2 Minéral	10
I. 2. 3 Minéraux	11
I. 3 Classement des éléments sur la croûte terrestre	12
I. 3. 1 La croûte terrestre.....	12
I. 3. 2 Composition chimique de la croûte terrestre.....	13
I. 4 Dureté Mohs « Friable ou non »	14
I. 4. 1 Définition de l'échelle de Mohs	14
I. 4. 2 La friabilité	14
I. 4. 3 Les autres échelles de dureté	15
I. 5 Caractéristiques des minéraux	15
I. 5. 1 Les oxydes.....	15
I. 6 Propriétés physiques et chimiques des minéraux	15
I. 6. 1 Quartz « SiO ₂ »	15
I. 6. 2 Le gypse	18
I. 6. 3 Le Barytine.....	19
.....	21
I. 6. 4 Carbonates.....	21
Chapitre II Histoire de la spectroscopie	23
II. 1 Introduction	23
II. 2 Histoire de la spectroscopie	23
II. 2. 1 Isaac Newton	23
II. 2. 2 William Herschel.....	25
II. 2. 3 Joseph Fourier	29

II. 2. 4	Wilbur I.Kaye.....	30
II. 2. 5	Karl Norris.....	33
Chapitre III	Spectroscopie FT-IR	34
III. 1	Introduction.....	34
III. 2	Technique FT-IR.....	34
III. 2. 1	La spectroscopie IR	34
III. 2. 2	Technique FT-IR	35
III. 2. 3	La technique expérimentale FT-IR.....	35
III. 3	Spectre FT-IR de références	40
III. 3. 1	Spectre FT- IR des Alcanes CH ₂ et CH ₃	40
III. 4	Spectres FT-IR de roches naturelles	49
III. 4. 1	Roches de la région « Djalal » et « Batna » avec ses spectres	49
III. 4. 2	Roches des autres régions avec ses spectres FTIR	57
Chapitre IV	DRX des roches	59
IV. 1	Introduction.....	59
IV. 2	Les bases cristallographiques des minéraux	59
IV. 2. 1	La cristallographie	59
IV. 2. 2	La symétrie externe des minéraux	61
IV. 3	La diffraction des rayons X « DRX »	63
IV. 3. 1	Les rayons X « RX »	63
IV. 3. 2	La diffraction des rayons X	64
IV. 3. 3	Diffractogramme, identification des phases	67
Conclusion générale	89
Résumé	90
	Erreur ! Signet non défini.
Abstract.....	Erreur ! Signet non défini.

Tables d'illustrations

A- Les tableaux

Tableau I-1: Pourcentage des éléments dans la croûte terrestre.....	13
Tableau I-2: Composition chimique de la croûte terrestre.	13
Tableau I-3 : identification de Quartz.....	16
Tableau I-4: les propriétés du Quartz	17
Tableau I-5: les propriétés du Gypse	19
Tableau I-6: les propriétés de la barytine	20
Tableau I-7: Caractéristiques chimiques et minéralogiques des minéraux carbonatés les plus communs.....	22
Tableau II-1 : Températures en °F des thermomètres n°1 et n°2 dans les rayons rouges: .	26
Tableau II-2 Températures en °F des thermomètres n°1 et n°2 dans les rayons verts:	27
Tableau II-3 valeurs des thermomètres n°1 et n°2 dans les rayons violets:	27
Tableau II-4 valeurs des trois thermomètres utilisés par Herschel:.....	28
Tableau II-5 valeurs des trois thermomètres utilisés par Herschel:.....	28
Tableau III-1 : vibrations caractéristiques de la molécule d'eau « H ₂ O ».....	39
Tableau III-2: Les fréquences d'étirements et de déformations des différentes liaisons existantes dans le composé (minéral ou roche) et les éléments généralement existant dans la nature (CO ₂ , CH ₂ -CH ₃ , H ₂ O...).	47
Tableau III-3: les valeurs de le nombre d'onde des quelque composés	48
Tableau III-4: résultat d'analyse FTIR de la roche n° 01.....	49
Tableau III-5: résultat d'analyse FTIR de la roche n°2.....	50
Tableau III-6 : résultat d'analyse FTIR de la roche n°3.....	51
Tableau III-7: résultat d'analyse FTIR de la roche n°4.....	52
Tableau III-8: résultat d'analyse FTIR de la roche n°5.....	53
Tableau III-9 : résultat d'analyse FTIR de la roche n°6.....	54
Tableau III-10: résultat d'analyse FTIR de la roche n°7.....	55
Tableau III-11: résultat d'analyse FTIR de la roche n°8.....	56
Tableau IV-1 (a): les références et principale données cristallographique de Gypse.	72
Tableau IV-2 (b) : paramètres des plans de Quartz.....	77
Tableau IV-3 (a): les références et principale données cristallographique de la Calcite. ...	78
Tableau IV-4 (a) : les références et principale données cristallographique de dolomite. ...	80
Tableau IV-5 (a) : les références et principale données cristallographique de baryte.....	82

B- Les figures

Figure I.1 Exemple d'un Solide cristallin et d'amorphe	10
Figure I.2 Passage de l'état macroscopique, à la structure microscopique	11
Figure I.3 L'échelle de dureté de Mohs.....	14
Figure I.4 Différents états de Quartz.....	16
Figure I.5 <i>Mécanisme de formation du gypse en milieu marin lagunaire</i>	18
Figure I.6 Roches de Barytine	20
Figure II.1 Expérience du prisme de Newton (illustration du XIX ^{ème} siècle).....	23
Figure II.2 Schéma de la décomposition de la lumière blanche par un prisme.....	24
Figure II.3 Frederick William Herschel	25
Figure II.4 Partie du spectre électromagnétique entre l'UV et l'IR (le visible: du violet et jusqu'au rouge	25
Figure II.5 Joseph Fourier	Erreur ! Signet non défini.
Figure II.6 Courbe de TDF.....	Erreur ! Signet non défini.
Figure II.7 Wilbur J. Kaye	29
Figure II.8 Gamme NIR	30
Figure II.9 Configuration schématique du chemin optique.....	31
Figure II.10 Spectromètre NIR.....	31
Figure II.11 Karl Norris at Beltsville with his Cary 14 in the background, photographed in 1982.....	32
Figure III.1 accessoires pour préparation de pastille KBr.....	36
Figure III.2 accessoires pour pastillage	36
Figure III.3 Exemple de pastilles.....	37
Figure III.4 Le spectromètre « Placement de l'échantillon »	37
Figure III.5 Exemple de background enregistré préalablement à l'analyse FT-IR	38
Figure III.6 Major stretching and bending vibrational modes.....	39
Figure III.7 spectre FTIR d'un alcane	40
Figure III.8 spectre FTIR (a) et le minéral d'eau (b).....	41
Figure III.9 Spectre infrarouge de l'eau montrant les 3 modes fondamentaux	41
Figure III.10 Spectre FTIR de Barium sulfate (a) et son roche (b)	42
Figure III.11 spectre FTIR de Calcite (a) et son roche (b)	42
Figure III.12 spectre FTIR de Gypse (a) et son roche (b)	43
Figure III.13 spectre FTIR de quartz (a) et son roche (b).....	43
Figure III.14 spectre FTIR de nitrate de potassium (a) et ses grains (b)	44
Figure III.15 spectre FTIR de phosphate de potassium (a) et sa poudre (b)	44
Figure III.16 saturation dans spectre FTIR de BaSO ₄	45
Figure III.17 spectre FTIR de Goethite (a) et son roche (b).....	45
Figure III.18 spectre FTIR d'Hématite (a) et sa roche (b).....	46
Figure III.19 spectre de dioxyde de carbone CO ₂	46
Figure III.20 Vibration d'élongation et de déformation de la molécule CO ₂	Erreur ! Signet non défini.
Figure III.21 Interprétation générale d'un spectre FTIR (entre 400 et 4000 cm ⁻¹) ...	Erreur ! Signet non défini.
Figure III.22 Roche de Djelal n°1 avec spectre FTIR	49

Figure III.23 Roche de Djelal n°2 avec spectre FTIR	50
Figure III.24 Roche de Djelal n°3 avec spectre FTIR	51
Figure III.25 Roche de Djelal n°3 avec spectre FTIR	52
Figure III.26 Roche de Djelal n°5 avec spectre FTIR	53
Figure III.27 Roche de Djelal n° 06 avec spectre FTIR	54
Figure III.28 Roche de Batna n°7 avec spectre FTIR	55
Figure III.29 Roche de Djelal n°8 avec spectre FTIR	56
Figure III.30 Roches Baryte Mesloul Tebessa (b) et ses spectre (a)	57
Figure IV.1 Cristal de calcite rose de Tsumeb	60
Figure IV.2 Le plan de symétrie (A) et le centre de symétrie (B).	61
Figure IV.3 Les axes de symétrie.	62
Figure IV.4 Les axes d'inversion	62
Figure IV.5 W. Roentgen et leur 1ère radiographie	63
Figure IV.6 Transitions électroniques responsables de la production de RX	64
Figure IV.7 l'approche XRD unique d'Olympus utilisant la géométrie de transmission. ..	65
Figure IV.8 Diffractomètre sur poudre.....	66
Figure IV.9 Monocristal monté sur de la pâte à modeler sur le diffractomètre	66
Figure IV.10 Diffractogrammes sur poudre d'un $\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$	67
Figure IV.11 Diffractogramme sur poudre d'un BaCO_3	68
Figure IV.12 Diffractogrammes sur poudre d'un CaH_4SO_6	69
Figure IV.13 Diffractogrammes sur poudre d'un CaCO_3	69
Figure IV.14 Diffractogrammes sur poudre d'un BaSO_4	70
Figure IV.15 Diffractogrammes sur poudre d'un SiO_2	70
Figure IV.16 Diffractogrammes de goethite $\text{FeO}(\text{OH})$	71
Figure IV.17 Diffractogrammes d'alpha alimina (Al_2O_3).....	71

Introduction générale

La spectroscopie est l'ensemble des techniques qui permettent d'analyser: des échantillons à travers le principe physique de l'interaction lumière-matière. Selon le spectre électromagnétique il peut y avoir deux types d'interactions essentielles :

- Interaction ionisante (ex: RX-matière)
- Interaction non-ionisante (ex: spectroscopie FT-IR)

Notre travail expérimental se situe dans la catégorie de rayonnement non ionisante, ainsi notre rayonnement va provoquer dans la matière des vibrations essentiellement (des translations et rotations peuvent aussi avoir lieu).

Depuis la décomposition de la lumière blanche par Newton (1666), après la découverte de rayonnement IR par Herschel (1800) et ensuite l'exploitation de ces rayonnements en analyses (1956).

La spectroscopie FT-IR c'est un posé comme une technique expérimentale complémentaire aux analyses par DRX.

La spectrophotométrie est utilisée dans divers domaines: chimie, pharmacie, environnement, agroalimentaire, biologie etc ..., aussi bien au laboratoire que sur site industriel¹.

Par le mot « spectre » on veut parler d'un axe (OX) qui est en énergie, longueur d'onde ou nombre d'onde. Ex : l'infrarouge (IR) [entre 10 et 4000] cm^{-1} .

Dans notre mémoire, nous nous sommes intéressés en premier aux bases physiques de l'infrarouge pour introduire les éléments d'analyse utiles² ce qui permet de connaître la composition de quelques minéraux ou roches de la région de l'est algérien (Djalal-Chassera deux régions situées à Khenchela et Batna respectivement).

Ainsi notre travail sera articulé sur quatre chapitres complémentaires et qui sont: Les minéraux et leurs propriétés, l'histoire de la spectroscopie, la technique de spectroscopie FT-

¹ <https://studylibfr.com/doc/808028/chapitre-i-notions-de-base-de-la-spectroscopie>

² Dominique Genet, Christian Ley « Introduction à la spectroscopie Infrarouge (I.R.) » Culture Sciences Chimie, 07.01.04

IR appliquée aux minéraux et roches, et enfin nous avons clôturé par un chapitre réservés aux données cristallographique de nos roches.

Chapitre I Minéraux et roches

I. 1 Introduction

La plupart des minéraux appartiennent aux roches, et notre étude parle aujourd'hui d'une technique qui offre l'occasion pour connaître les types des minéraux dans certaines roches, et pour cela, notre premier chapitre a parlé des concepts des roches et minéraux avec ces classes trouvées dans la nature, ensuite nous avons cité quelques propriétés mécaniques; électriques; thermiques; chimique et physique.

D'ailleurs, une grande partie des éléments chimiques se retrouvent sur la croûte terrestre et nous donnons le classement par abondance dans le tableau (I-1), et en tête de classement nous avons l'oxygène; le silicium; et l'aluminium.

Une des caractéristiques principales des roches est la dureté, pour cela nous citons la classification réalisée par Mohs.

Enfin, nous avons choisi quelques minéraux comme les oxydes, quartz ... pour donner leurs propriétés.

I. 2 Définitions

I. 2. 1 Roches

Les roches sont un matériel solide composé d'un assemblage de minéraux. Une roche peut être composée de la répétition d'un seul type de minéral ou alors de l'assemblage de plusieurs espèces minérales différentes³.

I.2.1.1 Classes des roches

a. Les roches sédimentaires

- ⇒ Les roches sédimentaires détritiques
- ⇒ Les roches sédimentaires biochimiques
- ⇒ Les roches authigènes
- ⇒ Les roches d'origine biologique

a. 1 Quelques critères de détermination pour les roches sédimentaires

- ⇒ roches meubles et perméables : les sables
- ⇒ roches friables : les marnes

³ <https://souslemicroscope.com/roches-mineraux-et-cristaux/>

- ⇒ roches solubles : les gypses
- ⇒ roches réagissant à l'acide à froid : les roches carbonatées
- ⇒ roches combustibles : les hydrocarbures
- b. Les roches magmatiques
 - ⇒ Les granites et les rhyolites
 - ⇒ Les basaltes et les gabbros
 - ⇒ Les andésites
 - ⇒ Les roches volcaniques
 - ⇒ Les roches plutoniques
- c. Les roches métamorphiques
 - ⇒ Le métamorphisme général ou régional
 - ⇒ Le métamorphisme de contact⁴.

I. 2. 2 Minéral

Un minéral est une substance solide d'origine non biologique trouvée dans la nature (croûte de terre). Le minéral est caractérisé par sa nature chimique. Une grande partie des minéraux sont dits cristallisés (automorphes) car ils sont composés d'atomes formant une structure stable et ordonnée. Il y a aussi des minéraux dont les atomes ne forment pas de structure homogène. Ensuite, nous parlons de minéraux amorphes. Par exemple, l'état du verre s'est formé pendant le refroidissement rapide de la lave⁵.

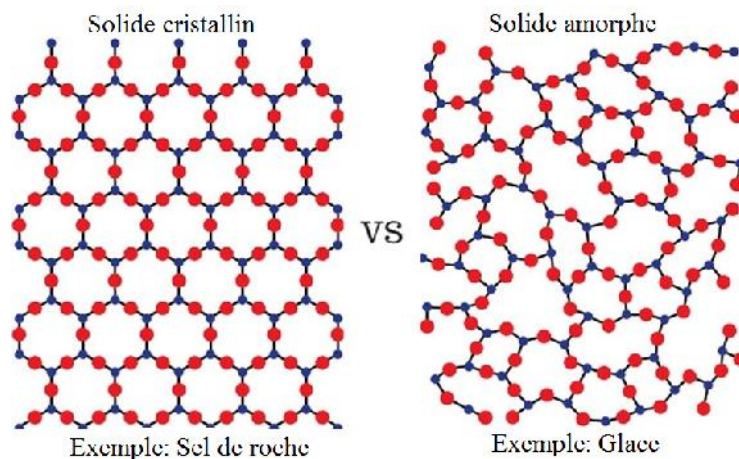


Figure I.1⁶

Exemple d'un Solide cristallin et d'amorphe

⁴ <https://sigessn.brgm.fr/spip.php?article428>

⁵ <https://souslemicroscope.com/roches-mineraux-et-cristaux/>

⁶ <https://trustmyscience.com/physiciens-comprennent-mieux-dynamique-interne-verre/>

I. 2. 3 Minéraux

Les minéraux sont constitués d'un groupement d'atomes défini par une formule chimique bien précise et que l'on retrouve répété dans un réseau cristallin as une périodicité et une symétrie bien définies. La chimie et la cristallographie sont par conséquent les sciences mobilisées pour l'étude des minéraux. À leur tour, les minéraux peuvent s'assembler pour former des roches. La minéralogie est donc d'une grande importance en géologie.

À de rares exceptions comme les oxalates et citrates, les minéraux sont inorganiques. Les houilles et les hydrocarbures solides sont considérés comme des roches⁷.

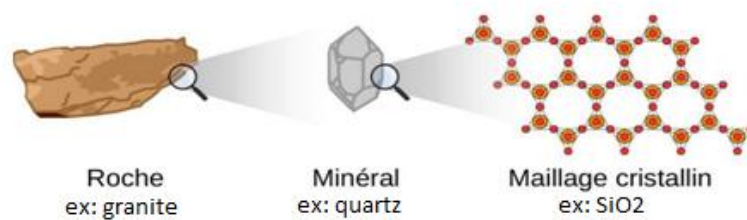


Figure I.2⁸

Passage de l'état macroscopique, à la structure microscopique.

I.2.3.1 Classification des minéraux

Le minéralogiste allemand Karl Hugo Strunz (1910-2006) Introduit la classification des minéraux, elle est basée sur leur composition chimique. Elle répartit les presque 4.000 minéraux connus en 10 classes :

- 1- les éléments natifs composés d'un seul élément chimique plus ou moins pur.
- 2- les sulfures.
- 3- les halogénures.
- 4- les oxydes et hydroxydes.
- 5- les carbonates et les nitrates.
- 6- les borates.

⁷ <https://www.futura-sciences.com/planete/definitions/geologie-mineral-1554/>

⁸ <https://souslemicroscope.com/roches-mineraux-et-cristaux/>

7- les sulfates, chromates, molybdates et tungstates.

8- les phosphates, arséniates, vanadates.

9- les silicates.

10- les minéraux organiques.

I.2.3.2 Identification des minéraux

Derrière la nomenclature, les minéralogistes disposent de plusieurs outils pour procéder à l'identification des minéraux comme:

- ⇒ ses propriétés mécaniques (densité, dureté).
- ⇒ ses propriétés optiques (couleur, transparence, indice de réfraction).
- ⇒ sa structure cristalline à l'état solide (à l'aide de la DRX).
- ⇒ sa composition et ses propriétés chimiques.
- ⇒ ses propriétés électriques et thermiques⁹.

I. 3 Classement des éléments sur la croûte terrestre

I. 3. 1 La croûte terrestre

C'est la partie supérieure de la planète terre. Elle se distingue en deux types :

a- Croûte continentale où l'on trouve des terrains vieux de 3.8 milliards d'années, elle est essentiellement composée de roches métamorphisées et de granites.

b- Croûte océanique des terrains de 200 millions d'années au maximum, qui est essentiellement composée de basaltes pauvres en SiO_2 ¹⁰.

⁹ <https://www.futura-sciences.com/planete/definitions/geologie-mineral-1554/>

¹⁰ <https://en.mineralogie.club/geologie-croûte-terrestre>

Tableau I-2: Pourcentage des éléments dans la croûte terrestre.

L'élément	Symbole	Pourcentage dans la croûte terrestre (%)	Somme
Oxygène	O	46.710	74.40%
Silicium	Si	27.690	
Aluminium	Al	08.070	99.909%
Fer	Fe	05.050	
Calcium	Ca	03.650	
Sodium	Na	02.750	
Potassium	K	02.580	
Magnésium	Mg	02.080	
Titane	Ti	00.620	
Hydrogène	H	00.140	
Phosphore	P	00.130	
Carbone	C	00.094	
Manganèse	Mn	00.090	
Soufre	S	00.052	
Baryum	Ba	00.050	
Chlore	Cl	00.045	
Chrome	Cr	00.035	
Fluor	F	00.029	
Autre éléments	00.091	

I. 3. 2 Composition chimique de la croûte terrestre

Tableau I-3: Composition chimique de la croûte terrestre.

Eléments	% en poids	% en volume
O	46.6	93.8
Si	27.7	0.8
Al	8.1	0.5
Fe	5.0	0.4
Ca	3.6	1.0
Na	2.8	1.3
K	2.6	1.8
Mg	2.1	0.3

- Quand le pourcentage est compris entre 0,1 et 1%, on appelle ces éléments des éléments mineurs : Ti, P, H.
- Quand le pourcentage est inférieur à 0,1%, on appelle ces éléments des éléments en traces : Cu, Zn, Pb, Ag, Au¹¹.

I. 4 Dureté Mohs « Friable ou non »

I. 4. 1 Définition de l'échelle de Mohs

L'échelle de Mohs, est la méthode la plus utilisée pour classer les pierres précieuses et autres minéraux ou matériaux selon leur dureté. Inventée par le minéralogiste allemand Friedrich MOHS en 1812. Les minéraux sont classés en catégories de 1 (pour le plus doux) à 10 (pour le plus dur)¹².

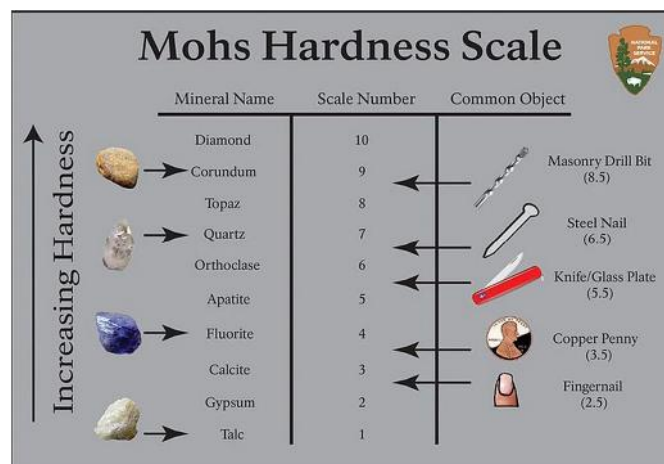


Figure I.3

L'échelle de dureté de Mohs¹³

I. 4. 2 La friabilité

On parle d'une matière qui se désagrège facilement en poudre, en poussière¹⁴. Pour une roche, facilité à se fragmenter¹⁵.

¹¹ <http://biodeug.com/cours/ste01/chap01.html>

¹² <http://www.surfanet.org/echelle-des-duretes-mohs/>

¹³ <https://www.gemsociety.org/article/select-gems-ordered-mohs-hardness/>

¹⁴ <https://www.cnrtl.fr/definition/friabilite>

I. 4. 3 Les autres échelles de dureté

Si l'échelle de Mohs est la plus connue, il existe plusieurs échelles pour découvrir la dureté des pierres. On pourra citer par exemple l'échelle de Rockwell, celle de Knoop ou bien celle de Brinell,... etc. qui s'adaptent aux matériaux étudiés¹⁶.

I. 5 Caractéristiques des minéraux

I. 5. 1 Les oxydes

Sont une famille de composés binaires où il y a des interactions entre l'élément et l'oxygène. Ainsi, un oxyde a une formule très générale du type EO, où E est un élément quelconque¹⁷.

I.5.1.1 Types d'oxydes

Les plus importants sont ceux liés à leur acidité ou à leur basicité.

- ⇒ Oxydes basiques
- ⇒ Oxydes acides
- ⇒ Oxydes neutres
- ⇒ Oxydes amphotères
- ⇒ Oxydes mixtes¹⁸.

I. 6 Propriétés physiques et chimiques des minéraux

I. 6. 1 Quartz « SiO₂ »

Est un minéral se présente sous forme de masse grenue ou de cristaux hexagonaux. Il peut être transparent à laiteux et aussi coloré dû à la présence d'impuretés.

Le quartz (SiO₂) est un minéral commun qui est présent dans la quasi-totalité des roches selon différentes proportions¹⁹. Le quartz peut se présenter dans certaines conditions sous la forme de cristaux bien formés. Le terme cristal de quartz réfère à l'organisation régulière des

¹⁵ <https://www.editions-eyrolles.com/Dico-BTP/definition.html?id=4518>

¹⁶ <https://www.breidal.com/blogs/journal/echelle-de-mohs>

¹⁷ <https://www.thpanorama.com/blog/ciencia/xidos-nomenclatura-tipos-propiedades-y-ejemplos.html>

¹⁸ <https://www.thpanorama.com/blog/ciencia/xidos-nomenclatura-tipos-propiedades-y-ejemplos.html>

¹⁹ [http://www.physique-et-matiere.com/quartz_\(mineral\).php](http://www.physique-et-matiere.com/quartz_(mineral).php)

atomes d'oxygène et de silice (SiO_2) formant des facettes cristallines. Le cristal de quartz peut être d'origine synthétique ou naturel²⁰.



Figure I.4
Différents états de Quartz²¹.

Tableau I-4 : identification de Quartz

Quartz	
Formule	SiO_2
Classe minéralogique	Tectosilicate
Couleur	Transparent, laiteux, fumé, mauve, citrine, tangerine, rose...
Dureté (Mohs)	7
Forme cristalline	Hexagonale, masse grenue, compacte

²⁰ <https://studylibfr.com/doc/2016249/quartz---carte-routi%C3%A8re-min%C3%A9rale>

²¹ https://etudiant.lefigaro.fr/article/des-edifices-ordonnes-les-cristaux_81f81fcc-5d2d-11ea-8a33ca35e4bd44df/

I.6.1.1 Propriétés physiques et chimiques du Quartz

Tableau I-5: les propriétés du Quartz

Les propriétés du « Quartz »	
Famille	Quartz
Groupe	Silicate
Formule chimique	SiO ₂
Composition	Dioxyde de silicium
Système cristallin	Hexagonal
Dureté (échelle de Mohs)	07
Transparence	Transparent à translucide
Couleur	Le quartz existe dans pratiquement toutes les couleurs. Les couleurs courantes sont claires, blanches, grises, violettes, jaunes, brunes, noires, roses, vertes, rouges.
Trait	Blanc
Eclat	Gras, vitreux, blanc
Fluorescence ultraviolet	En fonction des impuretés ²²
Densité	2.65 constante
Température de fusion	1650 (±75) °C
Fusibilité	Ne fond pas mais crépite point d'ébullition: 2230°C
Solubilité	Soluble dans HF
Masse formulaire	60.07 g/mol
Classe cristalline et groupe d'espace	Trigonale-trapézoédrique $\frac{6}{n} \frac{2}{n} \frac{1}{n}$ $P3121$ ou $P3221$ suivant le sens de l'enroulement des hélices de tétraèdres
	SiO ₄
Système cristallin	Trigonal
Réseau de Bravais	Hexagonal
Clivage	Hexagonal Rarement observable sur [10 $\bar{1}$ 1], [01 $\bar{1}$ 1], [10 $\bar{1}$ 0]

²² <https://esprit-lithotherapie.com/le-quartz/>

Habitus

Prisme hexagonal terminé par deux rhomboèdres
(quartz α)²³ ou par une bipyramide hexagonale
(quartz β)²³

I. 6. 2 Le gypse

Le gypse est une roche sédimentaire évaporitique. Il se forme au niveau des lagunes et parfois des lacs salés des régions semi-arides. Où l'eau va s'évaporer rapidement. Ceci entraîne le dépôt des sels (Ca⁺⁺, sulfates) qui étaient dissous dans l'eau. D'un point de vue chimique on le classe dans les sels.

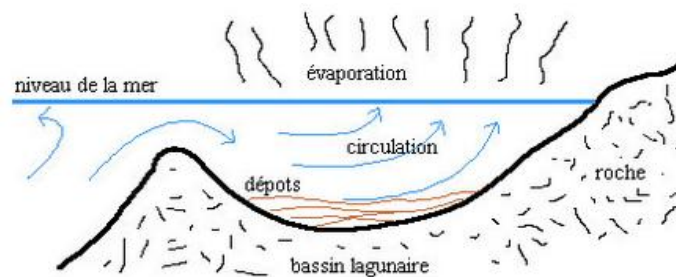


Figure I.5

Mécanisme de formation du gypse en milieu marin lagunaire²⁴.

I.6.2.1 Propriétés physique et chimique du gypse

La cristallisation de gypse s'est effectuée en masse grenue de façon grossière, visible à l'œil. Le gypse est soluble dans l'eau pure. Il se dissout très lentement. Un litre d'eau dissout 2,5g de gypse. La solution obtenue, autrefois appelée eau séléniteuse, est impropre à la cuisson des aliments et au savonnage du linge. Sous l'action de la chaleur, il se transforme en plâtre²⁵.

²³ [http://www.physique-et-matiere.com/quartz_\(mineral\).php](http://www.physique-et-matiere.com/quartz_(mineral).php)

²⁴ http://ruedeslumieres.morkitu.org/apprendre/gypse/composition/index_composition.html

²⁵ <https://fr-academic.com/dic.nsf/frwiki/1957111>

Tableau I-6: les propriétés du Gypse

Catégorie	Minéral
Formule brute	CaSO ₄ .2H ₂ O
Masse formulaire	172.17 g/mol
Couleur	De blanc à gris, parfois rosé
Classe cristalline et groupe d'espace	Prismatique ; A _{2/a} ou I _{2/a}
Système cristallin	Monoclinique
Réseau de Bravais	A ou I
Macles	Communes sur {100}, macles en queue d'aronde. Sur {-110}, macle en papillon ou fer de lance. Rare sur {209}
Clivage	Parfait à {010}, net à {100} et {011}
Echelle de Mohs	1.5 – 2
Eclat	Vitreux à soyeux, nacré
Densité	2.31 – 2.33
Température de fusion	Devient de l'hémi hydrate de 125 à 130°C; Devient anhydre à 163°C
Fusibilité	Des feuillets se détachent à la calcination et fondent en libérant de l'eau
Solubilité	Se dissout dans HCl chaud. 2g/l dans l'eau à 20°C
Masse molaire	172.171 ± 0.011 g/mol ²⁶

I. 6. 3 Le Barytine

La barytine est un minéral d'origine hydrothermale assez commun, qu'on découvre dans des artères minéralisés, en union avec des minéraux d'argent, de plomb, de cuivre, de cobalt, et de manganèse. La barytine peut aussi se trouver sous forme de filons blancs dans les roches calcaires, en groupe avec la calcite²⁷.

²⁶ <https://www.techno-science.net/glossaire-definition/Gypse.html>

²⁷ <https://cours.polymtl.ca/PBedard/glq1100/mineraux/barytine/barytine.html>



Agrégat de cristaux de barytine blanche



Cristal de barytine montrant deux plans de clivage



Barytine grise massive.



Barytine blanche à grain fin, massive

Figure I.6
Roches de Barytine²⁸.

Tableau I-7: les propriétés de la barytine

Propriété	Valeur-commentaire
Nombre d'oxydation	P_5^{-2}
Classe minéralogique	Sulfate
Système cristallin	Orthorhombique
Formule chimique	$BaSO_4$
Densité (gr. /cm ³)	4.5

²⁸ <https://cours.polymtl.ca/PBedard/glq1100/mineraux/barytine/barytine.html>

Eclat	Vitreux
Opacité	Transparent
Clivage – Fracture	2 bons clivages
Couleur du trait	Blanc
Forme cristalline	Plaquettes
Fluorescence, (onde), [activateur]	Parfois jaune pâle, orange, rose, rouge, vert, (longue ou courte), [variés]
Couleur naturelle	Incolore, blanc, gris, rougeâtre, jaune
Caractéristique diagnostique	2 clivages, densité élevée
Confusions possibles (distinction)	Quartz et feldspath (dureté plus élevé), gypse, calcite, Célestine et aragonite (sont plus léger) ²⁹
Dureté (Mohs)	de 3 à 3,5
Masse molaires	233.4 g/mol
Nom	Appelée barytine ou barytine, elle tire son nom de l'un des éléments chimiques qui la compose, le barium, qui lui même dérive du grec "barys" signifiant "lourd" ³⁰
Couleur	Incolore, blanc, nuances de bleu, jaune, gris, marron
Cassure	Irrégulière, inégale
Purification	Sel indirect, Encens 100 % naturel, Argile bio, Ondes de Formes (Coquille St Jacques, Fleur de Vie), Ondes de Sons (Bols chantants). Pas d'eau ³¹

I. 6. 4 Carbonates

Le terme "carbonate" peut désigner à la fois les minéraux carbonatés et des roches carbonatées, et les deux sont dominés par l'ion bicarbonate CO_3^{2-} . Les carbonates sont très variés et omniprésents dans les précipités chimiques de la roche sédimentaire.

²⁹ http://mineraux.uqac.ca/mineraux_detail/barytine.htm

³⁰ <https://webphysique.fr/barytine/>

³¹ <https://www.mineralenergy.be/boutique/pierres-brutes/mineraux-de-collection/quartz-et-barite-sur-roche.html>

La plupart des carbonates, à l'exception des carbonates des métaux alcalins, sont peu solubles dans l'eau. Le carbonate le plus abondant est le carbonate de calcium CaCO_3 , qui se trouve sous différentes formes minérales (calcite, aragonite), formant des roches sédimentaires (calcaire, marne) ou métamorphique (marbre) et constitue souvent le ciment naturel de certains grès. En substituant une partie du calcium au magnésium, on obtient la dolomite $\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$. Les minéraux tels que la calcite et la dolomite jouent un rôle important dans la fabrication du ciment et des pierres de construction³².

Tableau I-8: Caractéristiques chimiques et minéralogiques des minéraux carbonatés les plus communs³³.

Nom	Formule chimique (pure)	Système cristallin	Solubilité à 25°C	Éléments principales
Calcite	CaCO_3	Rhomboédrique	08.48	Mn, Fe, Mg
Dolomite	$\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$	''	17.09	Fe, Mn, Co, Zn, Pb
Maghnésite	MgCO_3	''	08.03	Fe, Ca, Mn
Rhodochrosite	MnCO_3	''	11.43	Fe, Ca, Mg, Zn
Sidérite	FeCO_3	''	10.89	Mn, Mg, Ca
Ankérite	$\text{Ca}(\text{Mg}, \text{Fe}^{+2}, \text{Mn})(\text{CO}_3)_2$	''		
Aragonite	CaCO_3	Orthorhombique	08.34	Sr, Pb, Zn
Withérite	BaCO_3	''	08.56	Sr, Ca

³² <https://www.aquaportail.com/definition-4501-carbonate.html>

³³ https://www.researchgate.net/figure/Caracteristiques-chimiques-et-mineralogiques-des-principaux-mineraux-carbonates_fig2_321420043

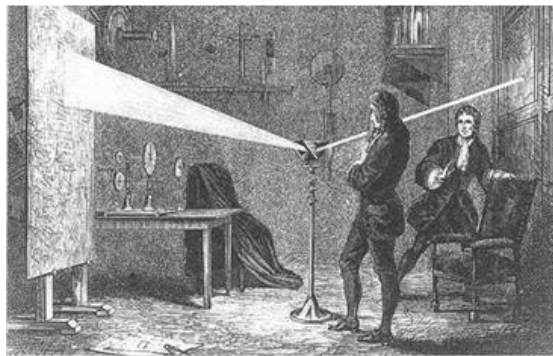
Chapitre II Histoire de la spectroscopie

II. 1 Introduction

D'une couleur blanche aux multi-couleurs des spectres à la spectroscopie en passant par divers domaines de rayonnement à de nombreuses techniques, c'est ce que l'histoire de la spectroscopie a connu, et certaines d'entre elles mentionnées dans ce chapitre. De plus, nous avons mentionné le rôle de certains chercheurs dans cette découverte et ce sont des développements d'Isaac Newton, puis Sir William Herschal, après eux Joseph Fourier, le propriétaire de la théorie de l'analyse thermique qui s'appelait son nom "transformée de Fourier" et nous avons terminé notre chapitre avec le rôle de Wilbur kaye et Karl Norris dans le développement de la science des spectres et l'utiliser en technologie.

II. 2 Histoire de la spectroscopie

II. 2. 1 Isaac Newton



Newton en train de réaliser l'expérience des couleurs (1666). (Gravure du XIX^e siècle.)

Figure II.1

Expérience du prisme de Newton (illustration du XIX^eme siècle)³⁴

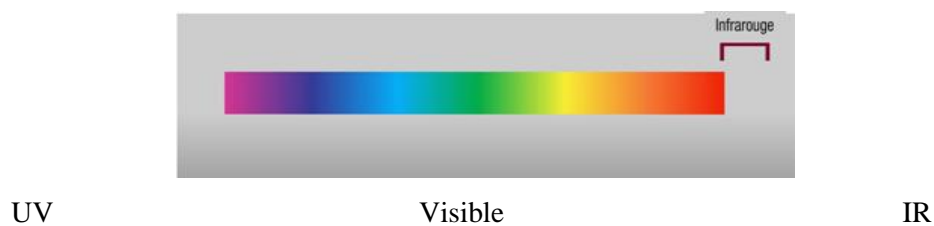
En 1666, Isaac Newton fait ses premières expériences sur la dispersion de la lumière. Pour se faire, il utilise un prisme en verre et la lumière du soleil. Ayant à cet effet obscurci sa chambre et fait un petit trou dans les volets, afin de laisser entrer une quantité convenable de rayons du soleil, il plaça le prisme contre ce trou, pour réfracter les rayons sur le mur opposé. Il observa alors que la lumière sortant du prisme s'étalait en une multitude de faisceaux

³⁴ <https://tpearcenciel.wordpress.com/2010/01/21/1-lexperience-de-newton/>

II. 2. 2 William Herschel**Figure II.3**Frederick William Herschel³⁸

William Herschel était un astronome britannique d'origine allemande. Il était un touche-à-tout. Dans un même temps, Herschel s'intéresse à l'astronomie. En 1776, Herschel construit son premier télescope. Le roi George III lui a attribué le titre « astronome du roi ».

Le 11 février 1800 l'astronome Herschel découvre la lumière infrarouge à l'aide d'un prisme de verre et d'un thermomètre, ce qui l'amène à la conclusion qu'il y a une forme de lumière invisible au-delà du spectre visible³⁹.

**Figure II.4**

Partie du spectre électromagnétique entre l'UV et l'IR (le visible: du violet et jusqu'au rouge)⁴⁰.

³⁸ <https://petiteshistoiresdessciences.com/2019/09/08/1800-herschel-decouvre-le-rayonnement-infrarouge/>

³⁹ <https://www.ff-99.top/products.aspx?cname=william+herschel+discovery&cid=6>

Il découvre ainsi que l'énergie reçue varie en fonction de la couleur, mais surprise ! William Herschel observe que de l'énergie est reçue au-delà du rouge⁴¹.

II.2.2.1 L'expérience d'Herschel

Herschel aimait l'observer à travers son télescope. Mais, pour éviter de se brûler ou de s'abîmer les yeux, il utilisa des filtres de différentes couleurs avec lesquels il put regarder le soleil. En les utilisant, il remarqua que les filtres produisaient un niveau de chaleur différent et que cette variation de température semblait être liée à la couleur du filtre. Voici ce qu'Herschel écrit dans son essai: « Dans une série d'expériences que j'ai parfois réalisées, touchant à la méthode d'observation du soleil avec de grands télescopes, au meilleur avantage, j'ai utilisé diverses combinaisons de verres d'obscurcissement différemment colorés. Ce qui a semblé remarquable était que, quand j'ai utilisé certains d'entre eux, j'ai ressenti une sensation de chaleur, même si je n'avais que peu de lumière; tandis que d'autres m'ont donné beaucoup de lumière avec peu de sensations de chaleur ». Ce constat amena Herschel à réaliser une expérience, basée sur celle effectuée par Isaac Newton. Herschel poussa plus loin cette expérience en 1800. Il fit passer la lumière du Soleil à travers un prisme, ce qui eut pour effet de projeter le spectre solaire sur une table. Le spectre solaire contient toutes les couleurs qui composent la lumière du Soleil c'est à dire le violet, le bleu, le vert, le jaune, l'orange et le rouge. Il fit sa première grande expérience le 27 mars 1800. Il prit trois thermomètres de mercure dont il noircit le bout et les plaça sur une pièce métallique pour ne pas qu'ils bougent. Il mit alors le thermomètre N°.1 dans la couleur du spectre choisie et les deux autres N°.2 et N°.3 à l'ombre. Ces derniers servaient de thermomètre standard. Il décida alors au début de ne prendre que les valeurs du N°.1 et du N°.2.

Tableau II-1 : Températures en °F des thermomètres n°1 et n°2 dans les rayons rouges:

N°. 1.				N°.2.
45	-	-	-	45
48	-	-	-	45
51	-	-	-	45
51	-	-	-	44 $\frac{1}{2}$
51	-	-	-	44

⁴⁰ <https://www.ff-99.top/products.aspx?cname=william+herschel+discovery&cid=6>

⁴¹ <https://www.youtube.com/watch?v=KcOPlqFetPE>

La première fois que nous avons vu ces valeurs, nous nous sommes alors rendu compte que la température mesurée était en Fahrenheit (°F). On peut convertir les Fahrenheit en Celsius: « $T (^{\circ}\text{C}) = (T (^{\circ}\text{F}) - 32) \times 5/9$ » Il trouva donc avec le N°.1: 10,5°C pour les rayons rouges et 6,66°C dans l'air ambiant, soit une différence d'environ 3,8°C.

→ Lors de la seconde expérience, il mit le N°.1 dans les rayons verts:

Tableau II-2 Températures en °F des thermomètres n°1 et n°2 dans les rayons verts:

N°. 1.				N°.2.			
43	-	-	-	43			
45 $\frac{1}{2}$	-	-	-	43			
46	-	-	-	43			
46	-	-	-	42 $\frac{3}{4}$			
46	-	-	-	42 $\frac{3}{4}$			

→ Ici, il trouva 7,77°C pour le N°.1 et 5,95°C pour le No.2 soit une différence d'environ 1,80°C. Enfin, pour une dernière expérience, il mit le No.1 dans les rayons violets :

Tableau II-3 valeurs des thermomètres n°1 et n°2 dans les rayons violets:

N°. 1.				N°.2.			
44	-	-	-	44			
44	-	-	-	44			
44 $\frac{3}{4}$	-	-	-	43 $\frac{1}{2}$			
45	-	-	-	43			

→ Il trouva donc 6,66°C pour le N°.1 et 6,10°C pour le N°.2 soit une différence d'environ 0,55°C.

Il fit plusieurs fois cette même expérience avec différents thermomètres et conclut ainsi: « Les expériences réalisées ont prouvé que la puissance thermique des couleurs du prisme est très loin d'être divisée également et que les rayons rouges sont principalement dominants dans ce domaine » Herschel découvrit alors que la température du rouge était plus élevée que celle

du vert et que la température du vert était plus élevée que celle du violet. Il réalisa sa grande découverte le 24 avril 1800. Ce jour-là, il prit les mêmes trois thermomètres qu'en mars. Il les plaça sur un petit support incliné, recouvert d'une feuille de papier blanc. Il plaça le support afin que le thermomètre N°.1 puisse prendre la valeur dans les rayons rouges et afin que les autres thermomètres servent de standard. De nouveau, il fit apparaître le spectre du soleil à l'aide d'un prisme : le rouge étant la couleur juste devant le support. Il mesura alors avec le thermomètre N°.1 la température dans ce qu'il appelle « la marge de disparition des rayons rouges »:

Tableau II-4 valeurs des trois thermomètres utilisés par Herschel:

No. 1.			No.2.			No.3.		
46	-	-	46	-	-	3.	45	$\frac{3}{4}$
50	-	-	46	-	-	,	46	
,	-	-	$\frac{1}{2}$	-	-	,		
$51\frac{1}{4}$	-	-	$46\frac{3}{4}$	-	-	,	$46\frac{1}{4}$	
$\frac{1}{4}$	-	-	47	-	-	$\frac{1}{4}$	$46\frac{1}{4}$	
$52\frac{1}{4}$	-	-		-	-	$\frac{1}{4}$	$46\frac{1}{4}$	

→ Il obtient alors une valeur de 11,4°C pour le N°.1 et à peu près 8,4°C pour les N°.2 et N°.3. Il réalisa cette expérience plusieurs fois, en s'éloignant de plus en plus de la couleur rouge et remarqua que la température augmentait de plus en plus mais très légèrement. Il décida alors de faire cette même expérience mais du côté de la couleur violette. Et là, il remarqua que rien ne se passait. La température du thermomètre N°.1 était la même que celle des thermomètres standards, soit d'environ 8,9°C.

Tableau II-5 valeurs des trois thermomètres utilisés par Herschel:

No. 1.			No.2.			No.3.		
48	-	-	48	-	-	3.	47	$\frac{3}{4}$
48	-	-	48	-	-	$\frac{1}{4}$	47	$\frac{3}{4}$
48	-	-	47	-	-	,	47	
,	-	-	$\frac{1}{2}$	-	-	,	47	
$48\frac{1}{2}$	-	-	$47\frac{1}{2}$	-	-	$\frac{1}{2}$		
48	-	-	48	-	-	$\frac{1}{4}$	47	$\frac{1}{4}$

Il conclut son expérience comme cela : « Les rayons invisibles du soleil dépassent en nombre probablement de loin ceux qui sont visibles ».

C'est ainsi qu'Herschel découvrit qu'il y avait un autre genre de lumière, invisible cette fois-ci. Les rayons qu'il découvrit au-delà du rouge sont dorénavant appelés les Infrarouges⁴².

II. 2. 3 Joseph Fourier



Figure II.5
Joseph Fourier⁴³

Joseph Fourier est bien connu pour ceux sur la diffusion de la chaleur. On parle de séries de Fourier, de coefficients de Fourier ... etc. Son œuvre probablement la plus connue est la « théorie analytique de la chaleur ».

II.2.3.1 Le mémoire de Fourier

Ce mémoire n'aurait qu'un intérêt limité si Fourier ne se servait de ces résultats pour en déduire que les phénomènes clés sont l'absorption du rayonnement solaire et les échanges par rayonnement IR avec « l'espace planétaire ». Le rayonnement IR avait été découvert par Sir William Herschel environ vingt-cinq ans auparavant. La présentation par Fourier des échanges radiatifs infrarouges est très qualitative, très courte⁴⁴.

⁴² Clémence DUFLOS et Anthony FORTIN / Herschel & les infrarouges

⁴³ Uga-accueil@univ-grenoble-alpes.fr

⁴⁴ Article in la Météorologie. December 2008 DOI: 10.4267/2042/20080. Source : OAI

Les travaux de Joseph Fourier les plus connus ont porté sur les équation de propagation de la chaleur dans les solides, ce qui l'a conduit à développer la théorie de la « transformée de Fourier » (TF) selon laquelle toute fonction périodique peut se décomposer en somme de sinus et de cosinus comme l'illustre le dessin ci-dessous (extrait de '*Comprendre l'IRM...*' de B Kastler , avec permission).

Selon ce principe, il est possible de passer d'un signal temporel $S(t)$ à sa représentation en fréquences et inversement :

$$S(t) = a_0 + a_1(\cos wt + \sin wt) + a_2(\cos 2wt + \sin 2wt) + \dots + a_n(\cos nwt + \sin nwt)$$

Avec : $a_0 \dots a_n \rightarrow$ les coefficients de Fourier.

$$w = 2\pi F \rightarrow F \text{ la fréquence}^{45}.$$

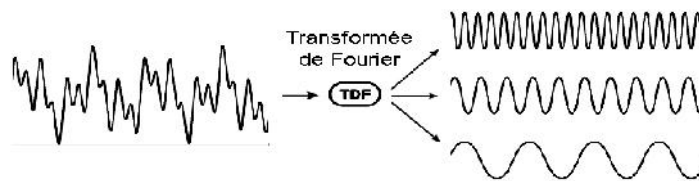


Figure II.6

Courbe de TDF⁴⁶

II. 2. 4 Wilbur I.Kaye

Wilbur Kaye a été embauché par Beckman Instruments en 1956 en tant que directeur de la recherche, Division des instruments scientifiques. Pendant de ça, il a modifié la conception du spectrophotomètre Beckman du, produisant le spectrophotomètre DK (élargissant la plage en proche infrarouge) et le DKU, qui combinait à la fois des caractéristiques infrarouges et ultraviolets⁴⁷.

⁴⁵ <http://irmcardiaque.com/index.php?title=Fourier2>

⁴⁶ Courbe_TDF_.jpg (684×240) (irmcardiaque.com)

⁴⁷ <https://digital.sciencehistory.org/works/z890rt28w>

La spectroscopie (NIR) presque infrarouge est la branche de spectroscopie vibrationnel rattachée à l'absorption moléculaire de lumière entre 750 à 2500 nm.



Figure II.7

Wilbur J. Kaye⁴⁸

II.2.4.1 Aperçu historique

Moins de 100 ans après la découverte de la lumière infrarouge, les scientifiques ont commencé à utiliser la spectroscopie NIR pour l'analyse chimique. Cependant, ce n'est que dans les années 1950 que les premiers spectrophotomètres NIR commerciaux sont devenus facilement disponibles.

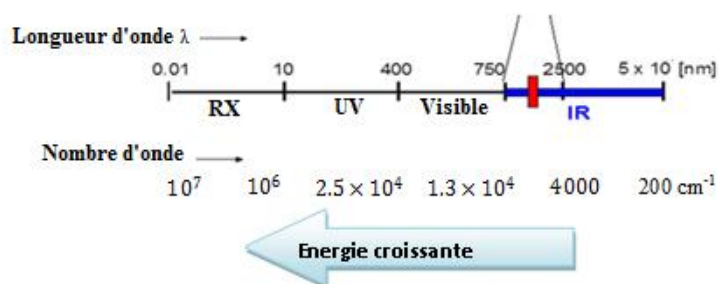


Figure II.8

Gamme NIR⁴⁹

⁴⁸ Photo de la Collection Historique Beckman. Courtoisie d'Institut d'Histoire de Photos/Science Frey

⁴⁹ <https://wiki.anton-paar.com/fr-fr/spectroscopie-dinfrarouge-proche-nir/>

Les années 1950 ont été suivies d'une autre décennie de progrès dans la technologie NIR; mais avec l'introduction de la chromatographie en phase gazeuse, la spectroscopie NIR est tombée en désuétude dans les années 1970. Rien n'illustre mieux cette période de dormance dans la spectroscopie NIR que la revue scientifique de David L. Wetzel de 1983 dans chimie analytique. Alors que la technologie informatique et électronique s'épanouissait à la fin des années 1980 et au début des années 1990, les spectrophotomètres NIR ont connu une seconde renaissance, comme le détaille la revue de 1998 de T. Davies, intitulée « L'histoire de l'analyse spectroscopique dans le proche infrarouge : passé, présent et futur » « De la technique du sommeil à l'étoile du matin de la spectroscopie ».

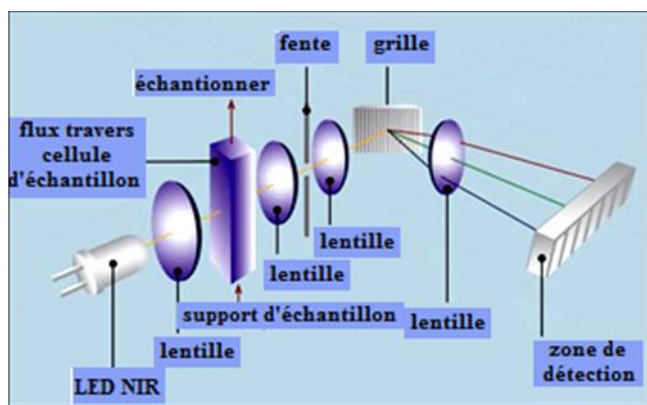


Figure II.9

Configuration schématique du chemin optique⁵⁰



Figure II.10

Spectromètre NIR⁵¹

⁵⁰ <https://www.google.com/amp/s/www.azom.com/amp/article.aspx%3fArticleID=14371>

⁵¹ <https://www.spectroscopyeurope.com/news/karl-norris-father-nri-spectroscopy>

II. 2. 5 Karl Norris**Figure II.11**

Karl Norris at Beltsville with his Cary 14 in the background, photographed in 1982⁵².

Nous sommes tristes d'annoncer que Karl Norris est décédé paisiblement le 17 juillet 2019 à l'âge de 98 ans. Karl est connu à juste titre comme le "père de la spectroscopie proche infrarouge". Il avait une compréhension profonde non seulement de l'instrumentation mais aussi de la relation entre les spectres et la chimie.

L'ensemble de la communauté de spectroscopie NIR ainsi que les milliards de personnes bénéficiant de ses applications doivent tellement à Karl⁵³.

⁵² <https://www.spectroscopyeurope.com/news/karl-norris-father-nir-spectroscopy>

⁵³ <https://www.spectroscopyeurope.com/news/karl-norris-father-nir-spectroscopy>

Chapitre III Spectroscopie FT-IR

III. 1 Introduction

La spectrométrie infrarouge est utilisée pour caractériser les composés organiques et inorganiques. Elle saisit seulement les mouvements (vibrations par exemple) des atomes les uns par rapport aux autres. Elle connaît un regain d'intérêt avec l'apparition des spectromètres à transformée de Fourier. L'analyse des produits inorganiques peut se faire de manière très efficace, sur de faibles quantités par micro-prélèvement (~30 mg), à condition d'avoir des produits soigneusement broyés. L'utilisation d'un support en bromure de césium (CsBr de l'ordre de 100mg) et d'un spectromètre allant dans l'infrarouge lointain jusqu'à 200cm^{-1} , un support de bromure de potassium (KBr) peut aller vers 400cm^{-1} . Ainsi on peut identifier la plupart des produits inorganiques, qu'ils soient amorphes, mal ou bien cristallisés. Le domaine de signature des matériaux (oxydes, carbonates, sulfates, ou autres) se situe entre 1500 et 200 cm^{-1} , cette partie du spectre FT-IR est nommée *finger-print*. Ce qui permet d'avoir des informations très utiles. Cette technique d'analyse complète ainsi les informations obtenues à partir des méthodes d'analyses dites classiques telles que la diffraction des rayons X ou la microscopie électronique à balayage. La conjugaison de tous les résultats expérimentaux permet de voir, d'analyser et d'affiner au mieux la structure des matériaux.

Le travail qui suit donne la démarche à suivre lors d'un travail expérimental de spectroscopie FT-IR, nous avons choisi des produits de biologie, des carbonates, des phosphates, des sulfates, des oxydes, des hydroxydes, etc.....

Les résultats et les interprétations des analyses seront résumés sur un spectre synthétique qui enveloppera ce chapitre...

III. 2 Technique FT-IR

III. 2. 1 La spectroscopie IR

La spectroscopie d'infrarouge permet de déterminer la présence de groupements fonctionnels dans les molécules organiques, et les structures dans certaines molécules simples⁵⁴.

⁵⁴https://fsnv.univ_setif.dz/images/telecharger/BIOCH/Pr.Charef.N_cours_1_Physicochimique_des_macromolécules.pdf

III. 2. 2 Technique FT-IR

Obtenir des spectres FT-IR non seulement plus rapidement que ceux accessibles à l'aide d'outils de diffusion habituels, mais les spectres montrent un signal beaucoup plus élevé, car la longueur d'onde est calibrée à l'aide d'un laser très précis, les spectres obtenus ont une précision de longueur d'onde beaucoup plus élevée⁵⁵.

III. 2. 3 La technique expérimentale FT-IR

La technique FT-IR a été utilisée dans les modes d'absorbance dans la gamme de 200-4000 cm^{-1} . Dans le cas des oxydes (par exemple) il est impératif d'avoir toutes les bandes de fréquences caractéristiques entre 200 et 1000 cm^{-1} . L'appareil est équipé d'un système permettant la réduction des cours d'optique dans l'air afin de minimiser les perturbations associées à l'air ambiant (vapeur d'eau et de CO_2). La spectroscopie utilisée pour obtenir le spectre d'absorption, ou de transmission d'un échantillon solide, liquide ou gazeux. Elle permet via la détection des vibrations caractéristiques des liaisons chimiques, d'effectuer l'analyse des fonctions présentes dans le matériau. Les spectres IR ont été obtenus en utilisant un spectromètre Perkin-Elmer (figure..) à une résolution de 8 cm^{-1} . Pour chaque échantillon, 120 scans ont été utilisés. L'incertitude sur la position des différents pics est égale à $\pm 2 \text{ cm}^{-1}$.

III.2.3.1 Mode opératoire et accessoires de spectroscopie FT-IR

- 10-100 mg d'oxydes, hydroxyde, sulfure ou carbonate sont prélevés (poudre, ou oxyde grattée).
- La poudre est mélangée (pendant au moins une minute) dans un mortier en Agathe avec 100 mg de KBr.
- Le mélange est introduit dans le moule avant pastillage, il a été ensuite comprimé pastillé dans presse hydraulique (à une pression de 10 Tonnes).
- La pastille est ensuite extraite du moule pour être placée dans un porte échantillon.
- L'appareillage analyse préalablement un spectre background relatif à l'atmosphère qui règne dans la salle d'analyse.
- Une fois l'échantillon placé dans l'appareil.
- Les spectres de transmission ont été obtenus, après une 20 de secondes.
- Tous les spectres infrarouges sont des rapports d'absorbance ($A = -\log \frac{I}{I_0}$) en fonction des nombres d'ondes incidentes.

⁵⁵ <https://www.bruker.com/fr/products-and-solutions/infrared-and-raman/ft-ir-routine-spectrometer/what-is-ft-ir-spectroscopy.html>

III.2.3.2 Les principaux accessoires utilisés lors de la réalisation de pastilles KBr, et jusqu'à l'analyse



Moule pour pastillage



Mortier en Agathe



Spatule



Porte échantillon

Figure III.1

accessoires pour préparation de pastille KBr.



Presse pour pastillage

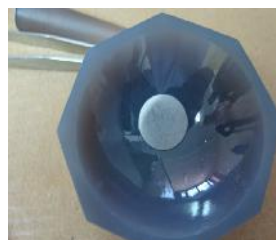


Figure III.2

accessoires pour pastillage



Pastille KBr sur le moule



Pastille KBr sur le mortier



Figure III.3
Exemple de pastilles



Figure III.4
Le spectromètre « Placement de l'échantillon »

Remarque : En photographie, la densité optique D est équivalente à l'absorbance A en spectrométrie, mais toujours mesurée dans le domaine visible, soit sur l'ensemble du spectre, soit d'une longueur d'onde donnée. Elle est plus souvent définie à partir de la transmittance: $A = -\log_{10} T$. Elle est utilisée pour caractériser les filtres colorés, correcteurs de température de couleur ou les filtres à densité neutre mais aussi la transparence d'une pellicule photographique développée.

Enregistrement du spectre Background

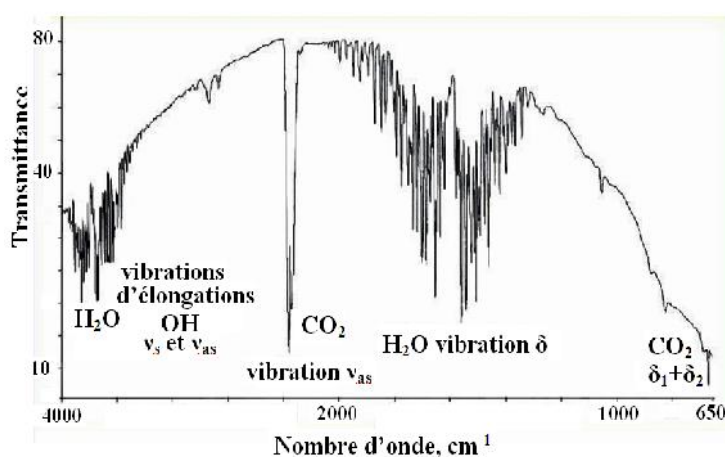


Figure III.5

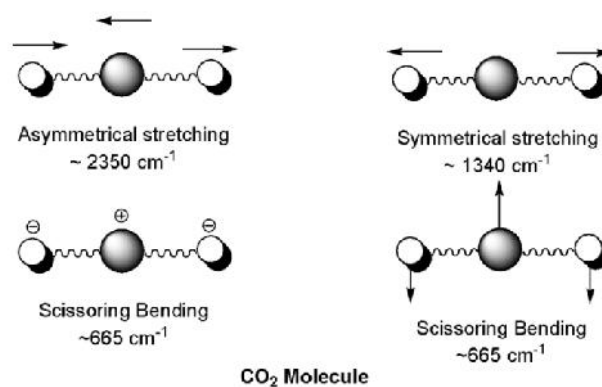
Exemple de background enregistré préalablement à l'analyse FT-IR

Sur le spectre enregistré, on repère trois bandes d'absorption significatives qui correspondent aux vibrations actives dans l'IR de la vapeur d'eau et du dioxyde de carbone.

Tableau III-1 : vibrations caractéristiques de la molécule d'eau « H₂O »

Mode de vibration prévu	Nombre d'onde (cm ⁻¹)	Vibration active ou inactive en IR
s : vibration d'élongation symétrique (longueurs des liaisons OH variant en phase)	3652	Active
as : vibration d'élongation asymétrique (longueurs des liaisons variant en opposition de phase)	3756	Active
: vibration de déformation (faisant varier l'angle H-OH)	1595	Active

Elles comprennent de nombreuses raies qui seront ici attribuées à des transitions vibrationnelles (enregistrées seulement en phase gazeuse). La bande située près de 2400 cm⁻¹ est due à la vibration d'élongation asymétrique de la molécule de CO₂, une meilleure résolution montrerait également une structure fine avec raies.

**Figure III.6**

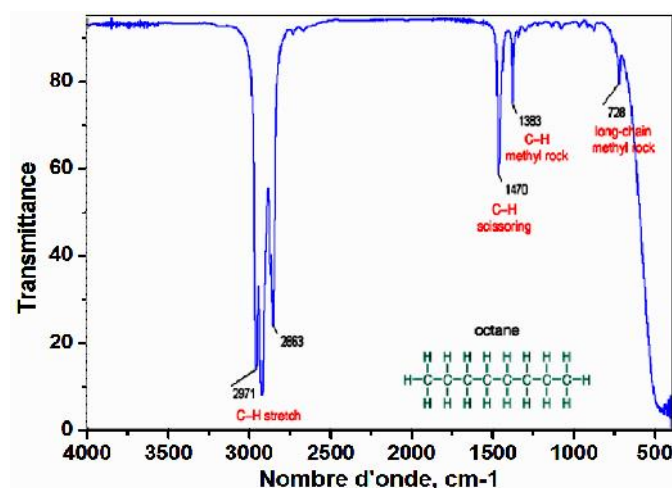
Major stretching and bending vibrational modes of CO₂⁵⁶.

⁵⁶ <https://alevelchemistry.co.uk/notes/infra-red-spectroscopy/>

III. 3 Spectre FT-IR de références

III. 3. 1 Spectre FT- IR des Alcanes CH₂ et CH₃

Les spectres des alcanes simples sont caractérisés par des absorptions dues à l'étirement et à la flexion C-H (les bandes d'étirement et de flexion C-C sont soit trop faibles, soit de fréquence trop basse pour être détectées en spectroscopie IR). Dans les alcanes simples, qui ont très peu de bandes.



- C–H stretch from 3000–2850 cm⁻¹
- C–H bend or scissoring from 1470-1450 cm⁻¹
- C–H rock, methyl from 1370-1350 cm⁻¹
- C–H rock, methyl, seen only in long chain alkanes, from 725-720 cm⁻¹

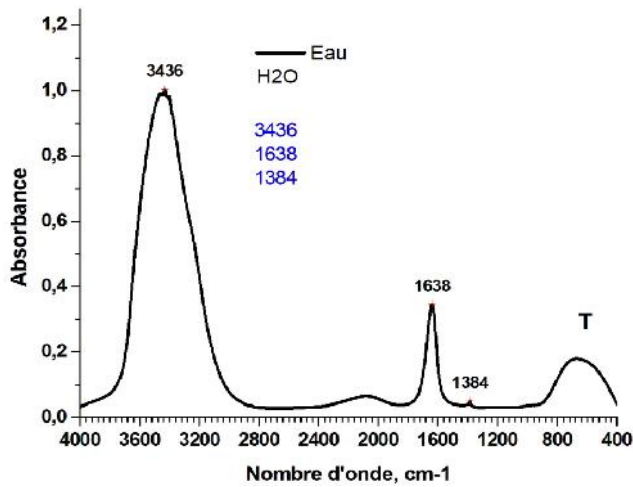
Figure III.7

spectre FTIR d'un alcane⁵⁷

La région d'environ 1300-900 cm⁻¹ est nommée la région de l'empreinte digitale. Les bandes dans cette région proviennent de modes vibrationnels en interaction résultant en un modèle d'absorption complexe. Habituellement, cette région est assez complexe et souvent difficile à interpréter; cependant, chaque composé organique a son propre modèle d'absorption (ou empreinte digitale) unique dans cette région et donc un spectre IR peut être utilisé pour

⁵⁷ <https://orgchemboulder.com/Spectroscopy/irtutor/alkanesir.shtml>

identifier un composé en le faisant correspondre avec un échantillon d'un composé connu.



(a)

(b)

Figure III.8

spectre FTIR (a) et le minéral d'eau (b)⁵⁸

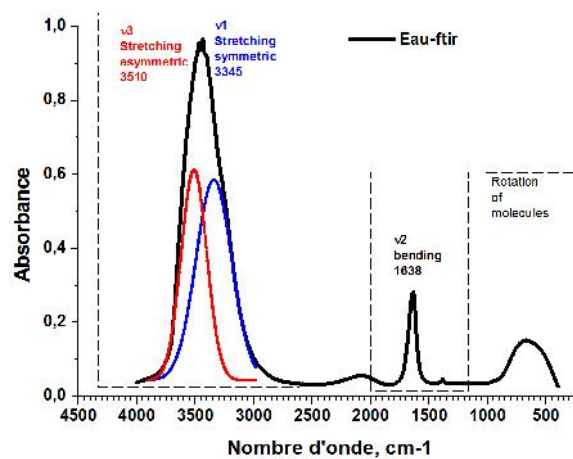
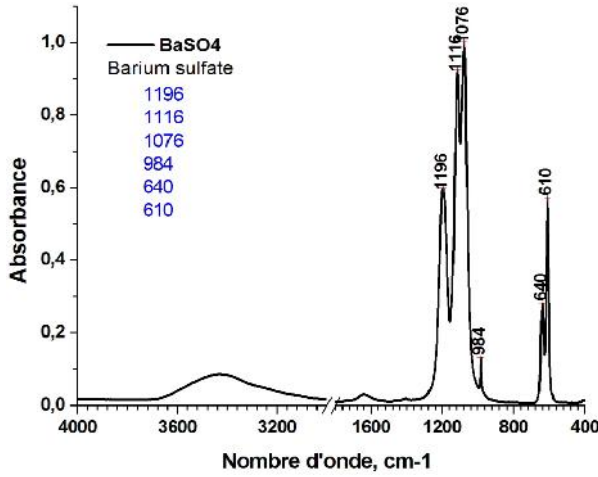


Figure III.9

Spectre infrarouge de l'eau montrant les 3 modes fondamentaux⁵⁹.

⁵⁸ <https://eaurenaissance.com/quest-ce-quune-eau-pure/>

⁵⁹ <https://www.specac.com/en/news/calendar/2019/03/molecular-vibrations>



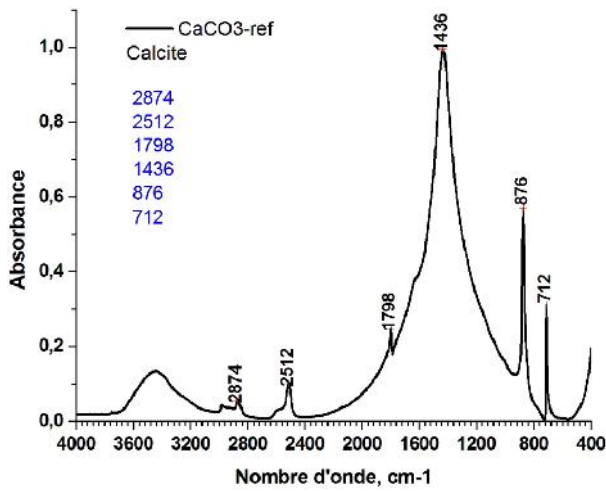
(a)



(b)

Figure III.10

Spectre FTIR de Barium sulfate (a) et son roche (b)⁶⁰



(a)



(b)

Figure III.11

spectre FTIR de Calcite (a) et son roche (b)⁶¹

⁶⁰ <https://www.alamyimages.fr/photo-image-la-prise-de-vue-macro-d-echantillon-de-roche-naturelle-baryte-barytine-pierre-mineral-isole-sur-fond-blanc-93279535.html>

⁶¹ <https://coeurdepierres.fr/produit/extraordinaire-prisme-de-cristal-de-roche-avec-calcite-de-6300kg/>

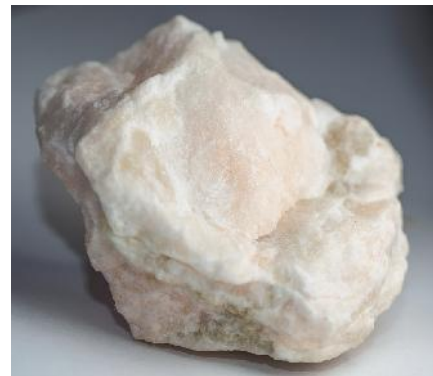
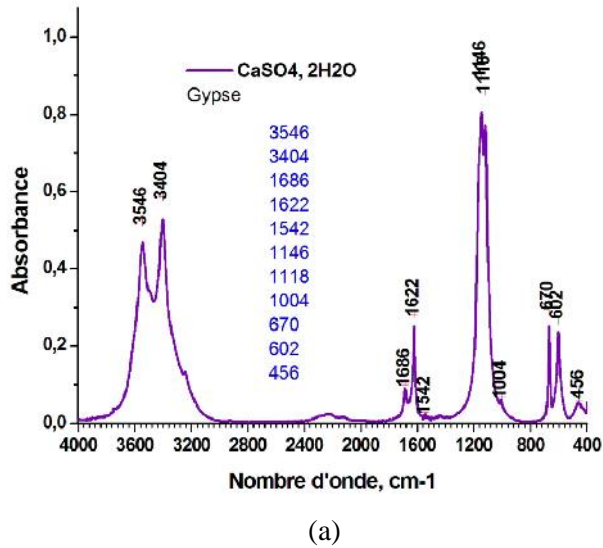


Figure III.12
spectre FTIR de Gypse (a) et son roche (b)⁶².

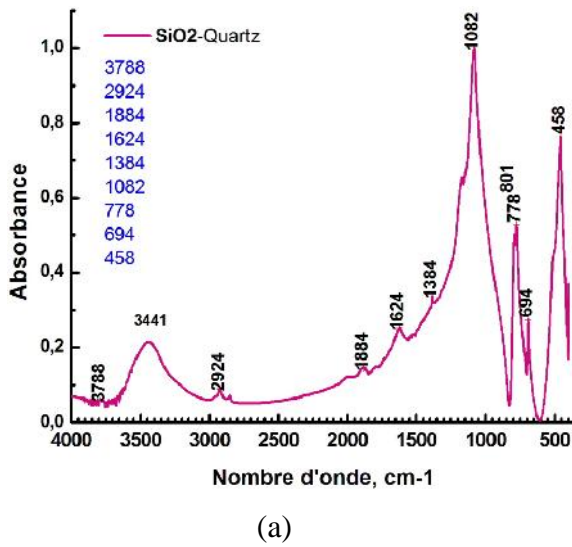
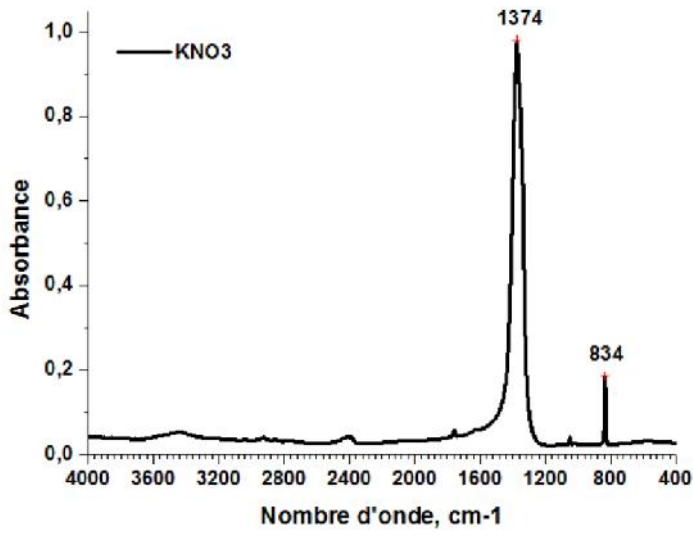


Figure III.13
spectre FTIR de quartz (a) et son roche (b)⁶³.

⁶² [https://fr.wikipedia.org/wiki/Gypse_\(roche\)#/media/Fichier:Gypsum_\(12249949575\).jpg](https://fr.wikipedia.org/wiki/Gypse_(roche)#/media/Fichier:Gypsum_(12249949575).jpg)

⁶³ <https://www.mineralmike.com/collections/quartz>

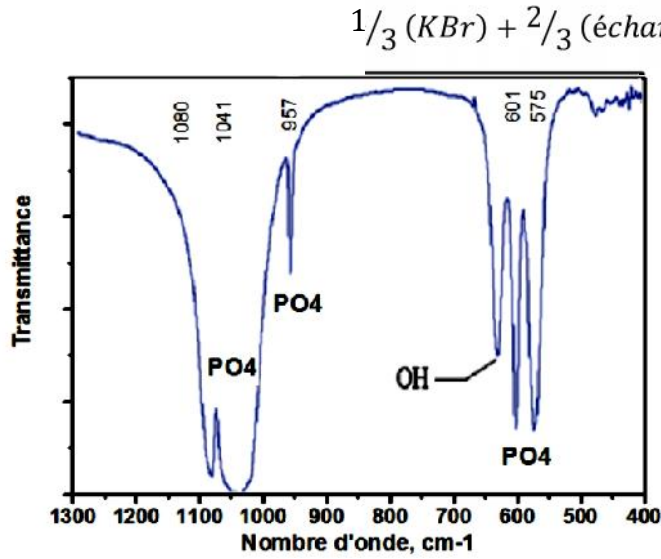


(a)

(b)

Figure III.14

spectre FTIR de nitrate de potassium (a) et ses grains (b)⁶⁴.



(a)

(b)

Figure III.15

spectre FTIR de phosphate de potassium (a) et sa poudre (b)⁶⁵.

⁶⁴ https://en.wikipedia.org/wiki/Potassium_nitrate

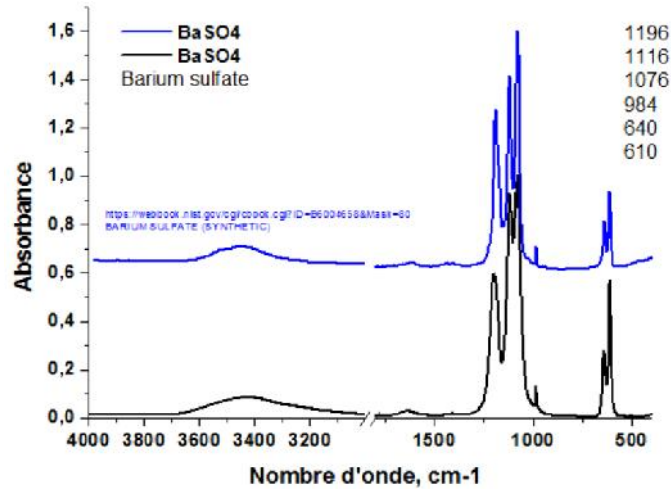
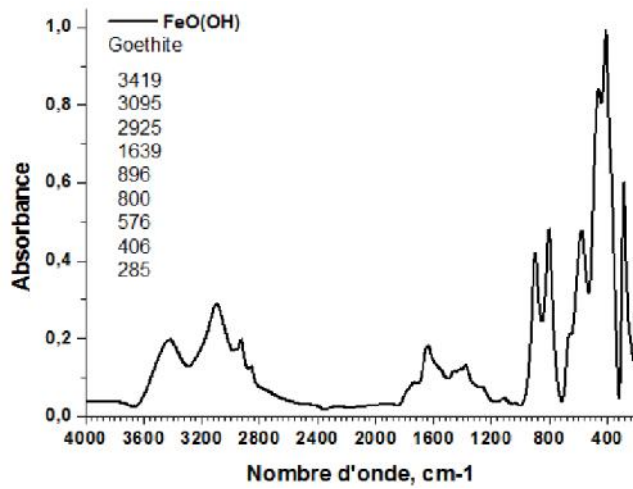


Figure III.16
saturation dans spectre FTIR de BaSO₄.

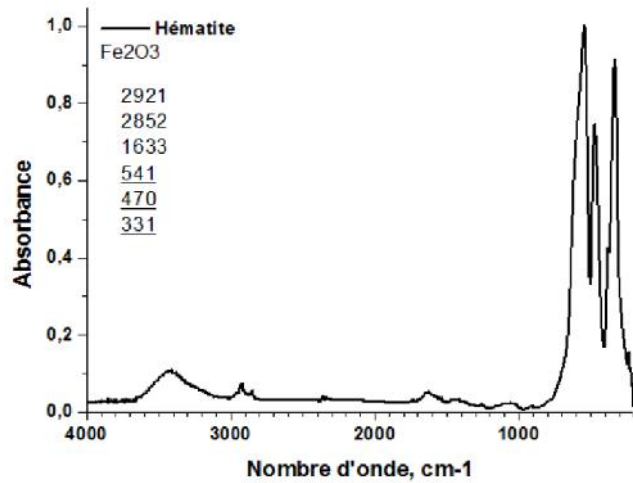


(a) (b)

Figure III.17
spectre FTIR de Goethite (a) et son roche (b)⁶⁶.

⁶⁵ https://fr.made-in-china.com/co_qdsalus/image_Manufacturer-Supply-Mono-Potassium-Phosphate-Fertilizer-MKP-_erssryng_2f1j00ROCQNtqhHoT.html

⁶⁶ <https://cours.polymtl.ca/PBedard/glq1100/mineraux/goethite/goethite.html>



(a)



(b)

Figure III.18

spectre FTIR d'Hématite (a) et sa roche (b)⁶⁷.

Spectre FTIR de CO₂

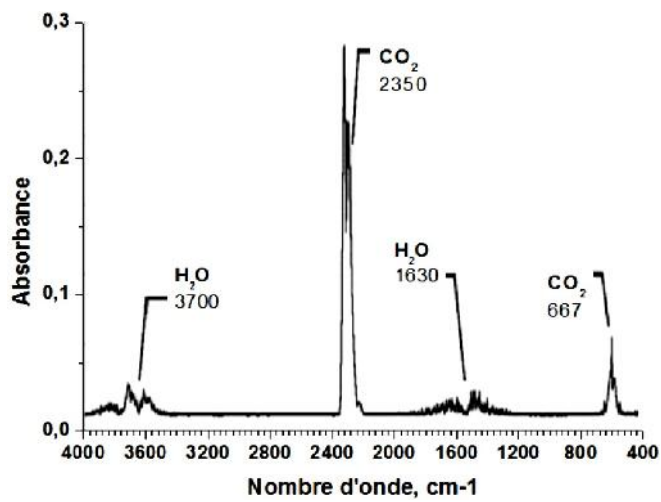


Figure III.19

spectre de dioxyde de carbone CO₂.

⁶⁷ <https://tinyrituals.co/blogs/tiny-rituals/hematite-meaning-healing-properties-stone-guide>

Dans la spectroscopie infrarouge moyen, nous nous intéressons à l'énergie vibrationnelle (et rotationnelle) de la molécule. Il existe deux types de vibrations moléculaires, l'étirement et la flexion. Une vibration d'étirement est un mouvement rythmique avec des changements de distance interatomique le long de l'axe de la liaison tandis que le mouvement de flexion implique un changement d'angle de liaison. La flexion peut être une torsion, un balancement, un cisaillement et un remue-ménage. Dans une molécule simple comme le dioxyde de carbone, ces vibrations peuvent être présentées comme :

Tableau III-2: Les fréquences d'étirements et de déformations des différentes liaisons existantes dans le composé (minéral ou roche) et les éléments généralement existant dans la nature (CO₂, CH₂-CH₃, H₂O...).







	les vibrations		Symboles	Zone
(Ia)	- les vibrations de déformation d'angle	   	1 3	Finger print
(Ib)	- les vibrations d'élongation symétriques : les atomes liés s'approchent ou s'éloignent de façon symétrique. - les vibrations d'élongation antisymétriques : de même mais cette fois-ci lorsqu'une liaison est comprimée, l'autre est étirée.	 	2 4	
(II)	-Bending ; CH ₂ -CH ₃			
(IIIa)	-Bending ; H ₂ O			
(IIIb)	-Stertching ; H ₂ O			
(IIIc)				
(VI)	-Stretching ; CO ₂			
(V)	-Sterctching ; CH ₂ -CH ₃			

Tableau III-3: les valeurs de le nombre d'onde des quelque composés

Composés	Nombre d'onde (cm ⁻¹)
<i>Eau</i>	3432, 1630
<i>CH₂-CH₃</i>	2954, 2920, 2860, 1377, 729, 720 ⁶⁸
<i>CO₂</i>	2345, 546 ⁶⁹
<i>Calcite</i>	3460, 2872, 2512, 1798, <u>1436</u> , 876, 712
<i>Gypse</i>	3546, 3406, 1686, 1622, 1542, <u>1146</u> , <u>1118</u> , 1004, 670, 602, 456
<i>Sable</i>	3546, 3406, 1798, 1686, 1622, <u>1428</u> , 1142, 1116, 874, 796, 778, 712, 692, 670, 602, 460
<i>Quartz</i>	3465, 2924, 2854, 1624, 1384, 1168, <u>1082</u> , 796, 778, 694, 458
<i>Baryte</i>	3430, 1630, <u>1196</u> , <u>1116</u> , <u>1076</u> , 984, 640, 610

⁶⁸ <https://docbrown.info/page06/spectra/octane-ir.htm>

⁶⁹ http://klimat.czn.uj.edu.pl/enid/1__Oxidants__Observation/-_observational_spectroscopy_250.html

III. 4 Spectres FT-IR de roches naturelles

III. 4. 1 Roches de la région « Djalal » et « Batna » avec ses spectres

Roche n° 01

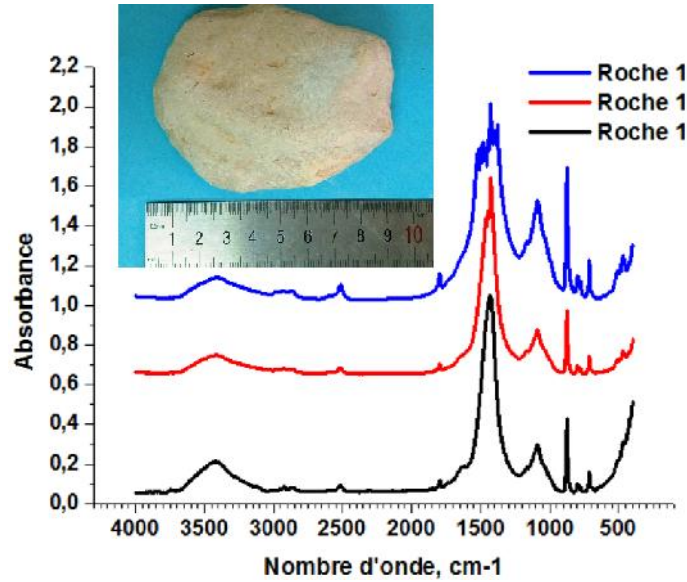
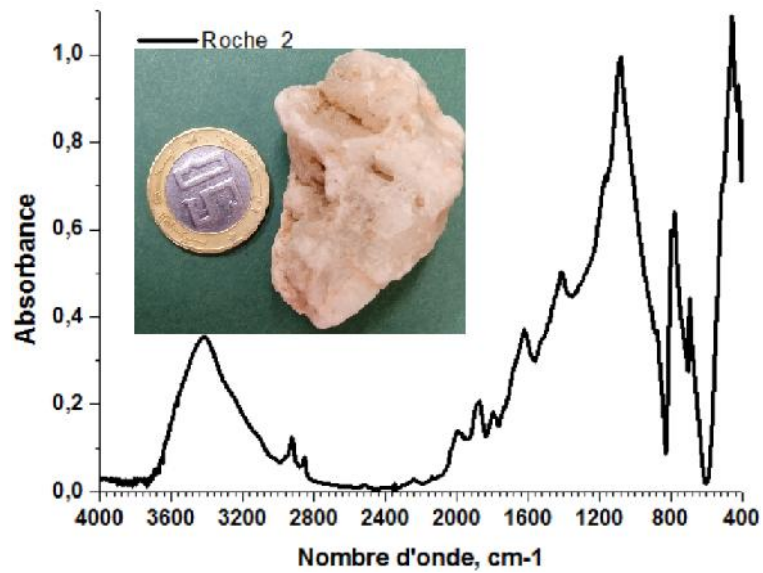


Figure III.20

Roche de Djalal n°1 avec spectre FTIR

Tableau III-4: résultat d'analyse FTIR de la roche n° 01.

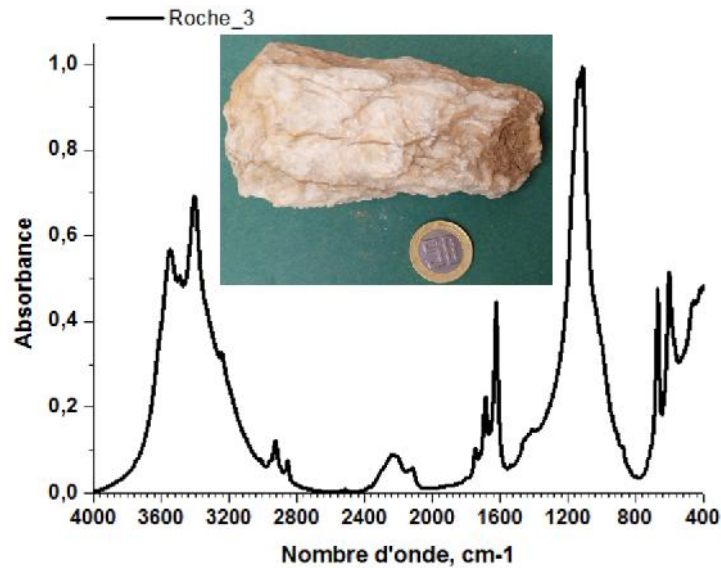
Nombre d'onde	2922, 2854, 2514, 2384, 1796, 1734, 1432, 1166, 1090, 876, 798, 778, 712, 466, 3431
Composition	Calcite (CaCO ₃) + Quartz (SiO ₂) + sable + dioxyde de carbone (CO ₂) + eau (H ₂ O)

Roche n° 02**Figure III.21**

Roche de Djalal n°2 avec spectre FTIR

Tableau III-5: résultat d'analyse FTIR de la roche n°2.

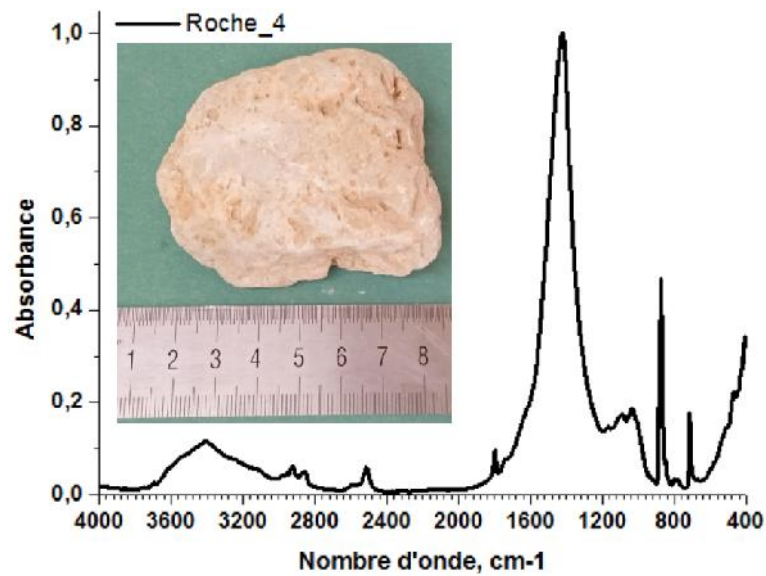
Nombre d'onde	3424, 2924, 2854, 2346, 1994, 1870, 1794, 1620, 1410, 1164, 1080, 878, 796, 778, 694, 456, 420
Composition	Quartz + Calcite + Baryte + gypse + oxyde (CaO) + sable

Roche n° 03**Figure III.22**

Roche de Djalal n°3 avec spectre FTIR

Tableau III-6 : résultat d'analyse FTIR de la roche n°3.

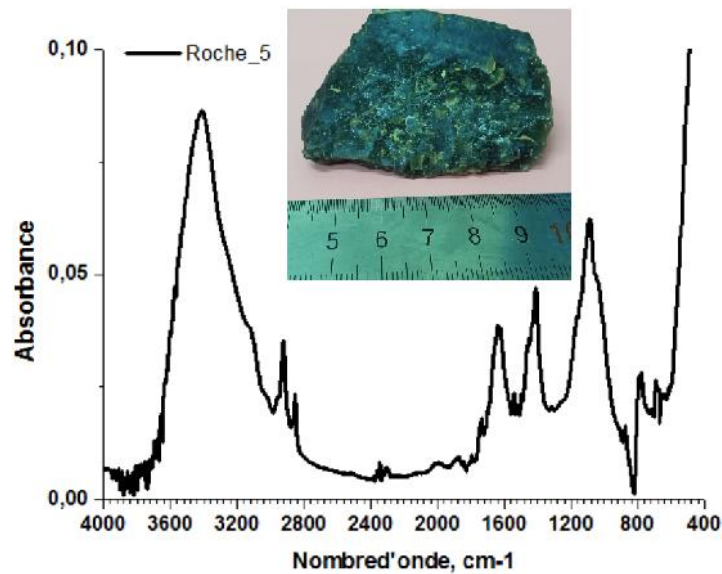
Nombre d'onde	3546, 3492, 3404, 3244, 2926, 2854, 1746, 1686, 1622, 1140, 1116, 670, 600, 458, 420
Composition	Gypse + Quartz + sable + H ₂ O

Roche n° 04**Figure III.23**

Roche de Djalal n°4 avec spectre FTIR

Tableau III-7: résultat d'analyse FTIR de la roche n°4.

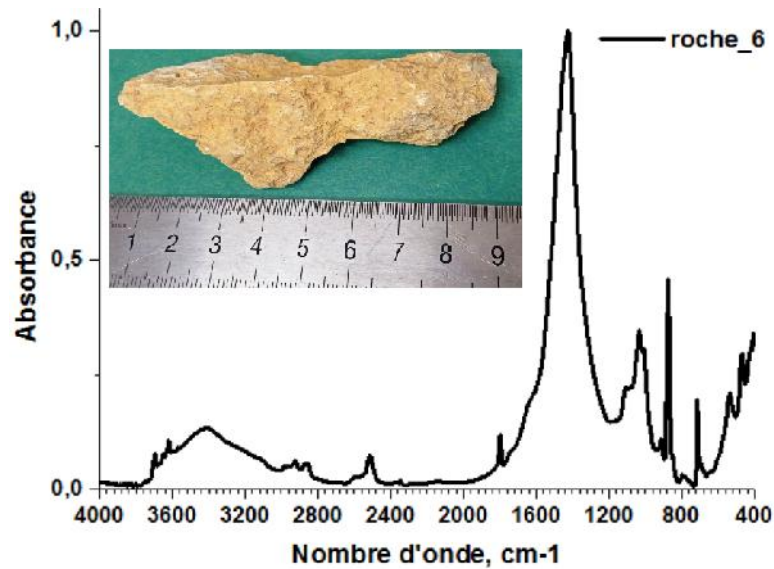
Nombre d'onde	3620, 3540, 3395, 2924, 2854, 2512, 1798, <u>1420</u> , 1165, <u>1086</u> , <u>1036</u> , 874, 798, 778, 712, 462
Composition	Calcite + Quartz + Oxyde + sable + Baryte

Roche n° 05**Figure III.24**

Roche de Djalal n°5 avec spectre FTIR

Tableau III-8: résultat d'analyse FTIR de la roche n°5.

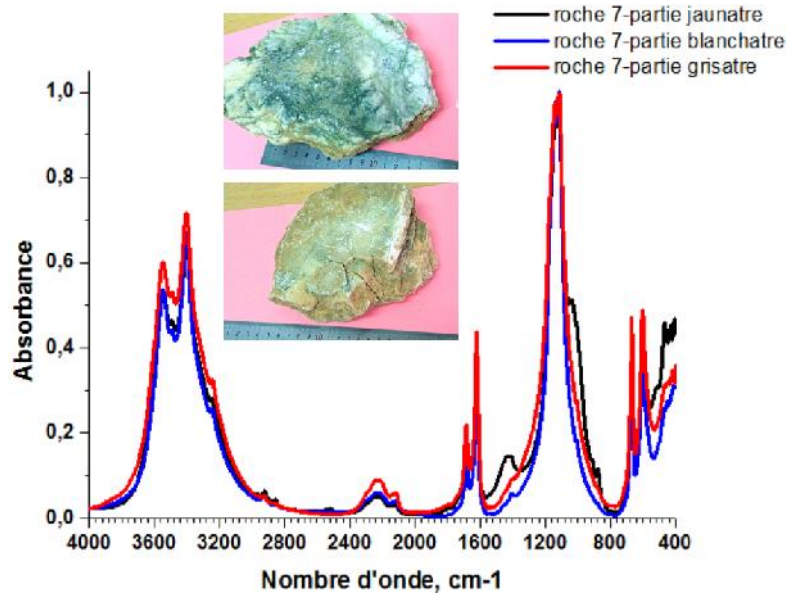
Nombre d'onde	3656, 3572, 3411, 2924, 2852, 2358, 2344, 1794, 1734, 1638, 1542, 1524, 1498, 1456, 1410, 1090, 876, 796, 778, 694
Composition	Quartz + Oxyde + Calcite + Baryte + eau + sable + gypse + dioxyde de carbone

Roche n° 06**Figure III.25**

Roche de Djalal n° 06 avec spectre FTIR

Tableau III-9 : résultat d'analyse FTIR de la roche n°6.

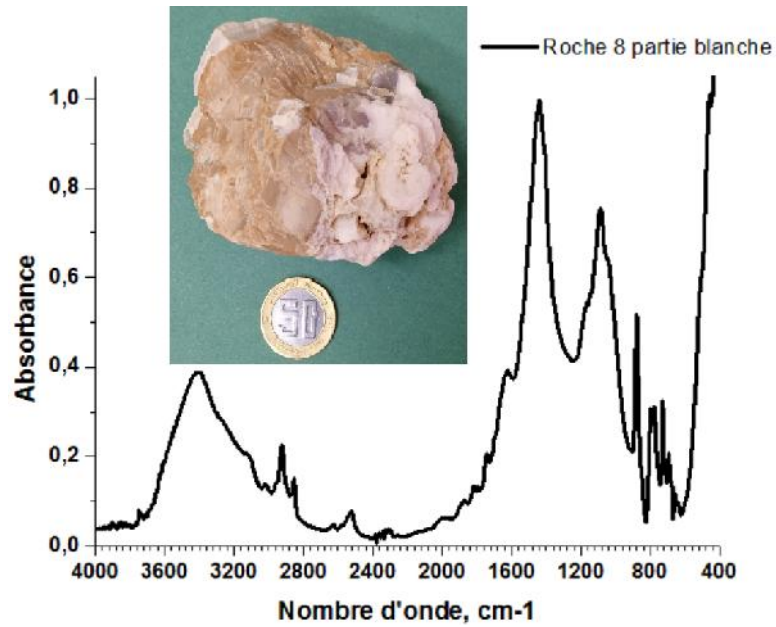
Nombre d'onde	3696, 3650, 3620, 3404, 2924, 2512, 2348, 1798, 1424, 1032, 1008, 914, 874, 798, 712, 536, 470
Composition	Calcite + Quartz + Baryte + Gypse + Dioxyde de carbone + Oxyde + eau

Roche n° 07**Figure III.26**

Roche de Batna n°7 avec spectre FTIR

Tableau III-10: résultat d'analyse FTIR de la roche n°7.

Nombre d'onde	3546, 3492, 3404, 3244, 2924, 2854, 1686, 1620, 1140, 1116, 1036, 880, 728, 670, 602, 470, 424, 416
Composition	Gypse + faible que calcite + sable + quartz

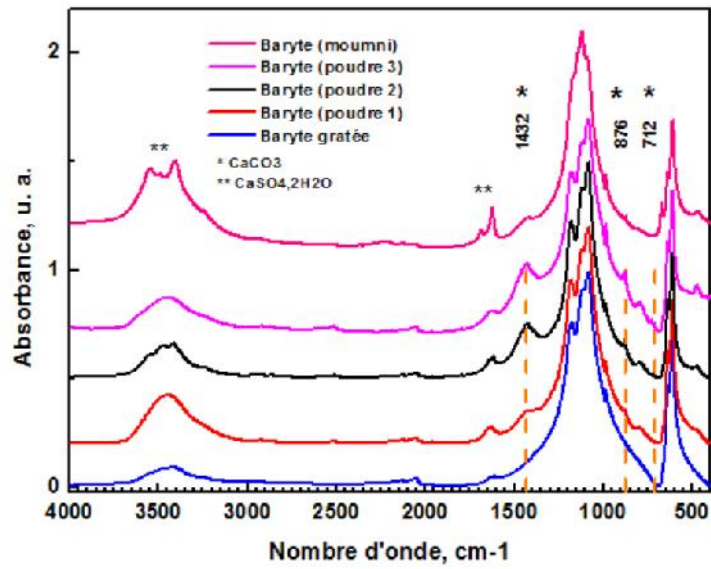
Roche n° 08**Figure III.27**

Roche de Djalal n°8 avec spectre FTIR

Tableau III-11: résultat d'analyse FTIR de la roche n°8.

Nombre d'onde	3748, 3726, 3710, 3408, 2924, 2854, 2522, 2384, 2342, 1820, 1794, 1740, 1624, 1438, 1164, 1088, 880, 796, 778, 728, 694, 660, 454
Composition	Calcite + Quartz + Gypse + Sable + Dioxyde de carbone + Oxyde + eau + CH ₂ -CH ₃

III. 4. 2 Roches des autres régions avec ses spectres FTIR



(a)



(b)

Figure III.28

Roches Baryte Mesloul Tebessa (b) et ses spectre (a)



Baryte⁷⁰



Ample⁷¹



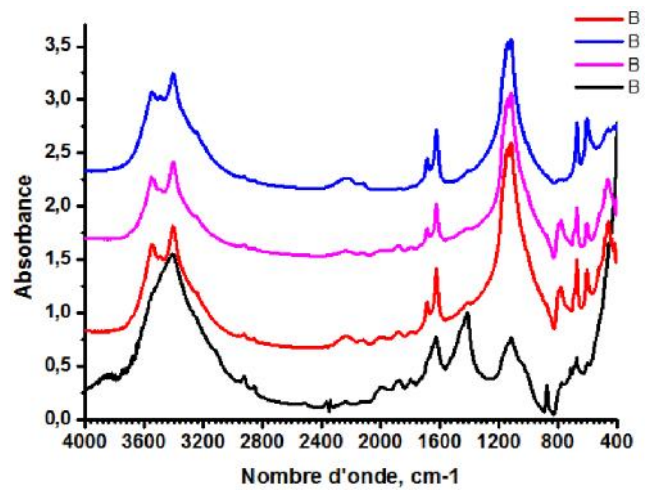
Massive⁷²



Rosette⁷³

Figure III.29

Baryte des différentes régions



⁷⁰ <http://www.pearlminechem.com/p/barytes.html>

⁷¹ <https://www.indiamart.com/proddetail/white-baryte-21662034012.html>

⁷² <https://supremechoiceminerals.com/en/products/barite-grezza-2>

⁷³ <https://geology.com/minerals/barite.shtml>

Chapitre IV DRX des roches

IV. 1 Introduction

Ce chapitre présente la symétrie des minéraux à l'échelle macroscopique, où ils peuvent être classés en 7 systèmes cristallins, divisés eux-mêmes en 32 classes cristallines. Alors que certains éléments de symétrie sont communs, des différences significatives apparaissent selon les techniques considérées: la diffraction des RX permet de découvrir plans de glissement et axes hélicoïdaux, alors que l'examen morphologique nous informe sur la présence d'un centre de symétrie. La symétrie optique comporte des axes de symétrie d'ordre infini, alors que les cristaux macroscopiques et les structures cristallines ne possèdent que des axes d'ordre 6 au maximum. Ces différences soulignent que l'étude détaillée des minéraux et de leur symétrie ne peut s'envisager qu'à partir d'une démarche transdisciplinaire⁷⁴.

Ensuite il illustre des Bases théoriques de l'interaction des rayons X avec des structures solides et mises en œuvre d'exemples d'applications: résolution de structure cristalline sur monocristaux et reconnaissance de phases dans des solides cristallisés.

Et enfin le chapitre nous donne des techniques permet de voir les diffractogrammes des quelques composés chimiques.

IV. 2 Les bases cristallographiques des minéraux

IV. 2. 1 La cristallographie

La cristallographie est la science des cristaux, au sens large, elle étudie la formation, la croissance, la forme extérieure, la structure interne, et les propriétés physiques de la matière cristallisée. Le mot « cristal » est d'origine grecque, et provient de *kruos* (froid) et *stellesoai* (solidifier). **La minéralogie** étudie la description des espèces constituant les roches naturelles et comme la plupart des minéraux sont cristallins, les deux se recoupent souvent.

La cristallographie est devenue, depuis la fin du XIX^e siècle, une science indépendante apte à pouvoir mener l'étude de la morphologie, de la texture et de la structure des cristaux :

- **La morphologie** est la description complète de la forme extérieure (macroscopique) d'un monocristal au moyen de la mesure des angles des facettes (dièdres).

⁷⁴ <https://popups.uliege.be/0037-9565/index.php?id=4470&file=1>

- **La texture** est la description de la forme, des dimensions et de l'orientation mutuelle des monocristaux dans un matériau polycristallin tel qu'un métal ou une poudre, un sol, une céramique, etc... .
- **La structure** est la description complète de l'empilement des individus (atomes, ions, ou molécules) constituant le cristal lui-même (phase homogène)⁷⁵.

IV.2.1.1 La relation entre la cristallographie et la minéralogie

La minéralogie et la cristallographie sont deux sciences profondément liées, en élaborant une théorie capable d'expliquer la forme externe des minéraux. Les concepts créés par Haüy ont été améliorés par Auguste Bravais, qui a inventé le réseau cristallin. Le réseau a été affiché expérimentalement, et de manière magistrale, par les premiers clichés de diffraction de rayons X, obtenus sur le cristal de sphalérite par Max Von Laue en 1912⁷⁶.



Figure IV.1

Cristal de calcite rose de Tsumeb⁷⁷.

⁷⁵ <https://www.futura-sciences.com/sciences/dossiers/chimie-cristallographie-chimie-calcite-586/page/3/>

⁷⁶ <https://popups.uliege.be/0037-9565/index.php?id=4470&file=1>

⁷⁷ <https://www.futura-sciences.com/sciences/dossiers/chimie-cristallographie-chimie-calcite-586/page/3/>

IV. 2. 2 La symétrie externe des minéraux

IV.2.2.1 Éléments et opérations de symétrie

Afin de caractériser la symétrie externe des minéraux, il est nécessaire d'identifier les différents éléments de symétrie qui les parcourent. Ces éléments de symétrie sont des entités géométriques: plan, rangée, nœud. Leur identification s'effectue grâce à une opération de symétrie, qui est un déplacement appliqué au cristal de manière le positionner dans une configuration équivalente à sa position de départ. L'opération de symétrie qui correspond au plan de symétrie est la réflexion; celle qui correspond au centre de symétrie est l'inversion. Les axes de symétrie sont caractérisés par leur ordre, qui indique l'angle de la rotation qu'il faut appliquer pour restituer une configuration équivalente. Ainsi, les axes de symétrie d'ordre $n = \{1; 2; 3; 4; 6\}$ expriment une configuration équivalente après une rotation de $\frac{2\pi}{n}$. Les axes de symétrie d'ordre 5 sont absents dans les minéraux, sauf dans l'icosahédrite, quasi-cristal naturel décrit nouvellement⁷⁸.

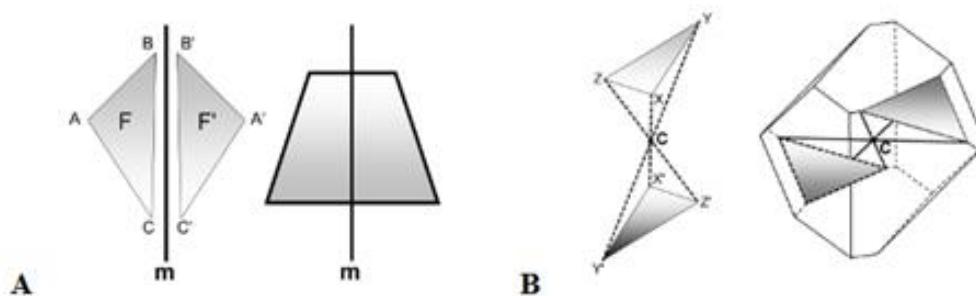


Figure IV.2

Le plan de symétrie (A) et le centre de symétrie (B).

⁷⁸ <https://popups.uliege.be/0037-9565/index.php?id=4470&file=1>

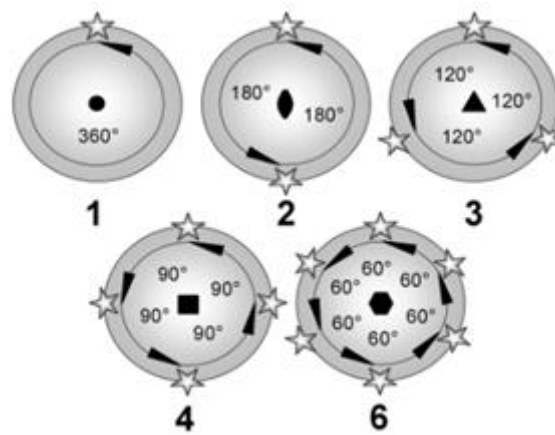


Figure IV.3

Les axes de symétrie.

D'autres éléments de symétrie plus complexes sont également présents dans les minéraux; il s'agit des axes d'inversion. Ces axes restituent une position équivalente après une rotation suivie d'une inversion. Toutefois, seul l'axe $\bar{4}$ est un élément de symétrie réellement nouveau: l'axe $\bar{1}$ → centre de symétrie, $\bar{2}$ → plan miroir, $\bar{3}$ → axe d'ordre 3 + centre de symétrie, et $\bar{6}$ → axe d'ordre 3 + plan miroir perpendiculaire (Fig 04).

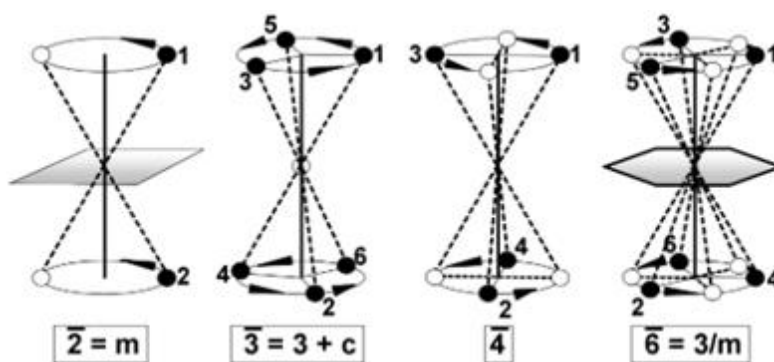


Figure IV.4

Les axes d'inversion⁷⁹.

⁷⁹ <https://popups.uliege.be/0037-9565/index.php?id=4470&file=1>

IV. 3 La diffraction des rayons X « DRX »

IV. 3. 1 Les rayons X « RX »

Découverts en 1895 par le physicien allemand W. Röntgen, les rayons X sont à la base de différentes techniques d'analyse comme la radiographie, la spectroscopie et la diffractométrie. Ces radiations électromagnétiques ont une longueur d'onde de l'ordre de l'Ångström ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$)⁸⁰.



Figure IV.5

W. Roentgen et leur 1ère radiographie⁸¹.

Les rayons X sont une forme de rayonnement électromagnétique, au même titre que la lumière visible, l'ultra-violet, l'infrarouge, les micro-ondes, les ondes radio ou les rayons gamma.

Une onde électromagnétique est due à un champ électrique et un champ magnétique perpendiculaires oscillants en phase. Elle se propage dans le vide à la vitesse de la lumière ($c = 299792458 \text{ m/s}$). Dans le cas d'une onde sinusoïdale ou monochromatique, elle a une fréquence définie et une période $T = 1/f$. La longueur d'onde λ est la distance parcourue par l'onde en une période, soit $\lambda = c T = c/f$ ⁸².

⁸⁰ <http://culturesciencesphysique.ens-lyon.fr/ressource/Diffraction-rayons-X-techniques-determination-structure.xml>

⁸¹ Cours-de-Radiocristal/Master-1-chimie-des-matériaux/Dr.Cherif-Ben-ali

⁸² Cours-de-Radiocristal/Master-1-chimie-des-matériaux/Dr.Cherif-Ben-ali

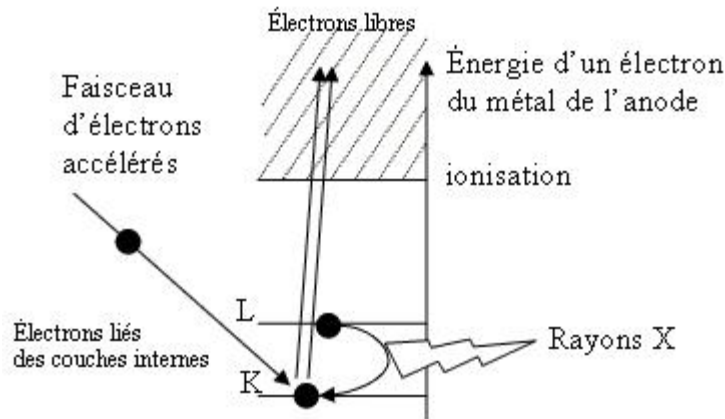


Figure IV.6

Transitions électroniques responsables de la production de RX⁸³.

IV. 3. 2 La diffraction des rayons X

La diffraction des rayons X, ou DRX, est une technique analytique qui offre des informations sur la structure et l'identification des phases des matériaux cristallins.

Les géologues la trouvent particulièrement utile, car elle peut servir à identifier les cristaux présents dans un mélange, comme les minéraux dans une roche. La DRX constitue la meilleure méthode pour identifier et déterminer dans un échantillon, la proportion des minéraux dont la formule et la structure varient, tels que les argiles.

⁸³ <http://culturesciencesphysique.ens-lyon.fr/ressource/Diffraction-rayons-X-techniques-determination-structure.xml>

Technologie olympus DRX

1. Tube à rayons X microfocus
2. Faisceau de Rayons X
3. Collimateur
4. échantillon
5. Détecteur CCD

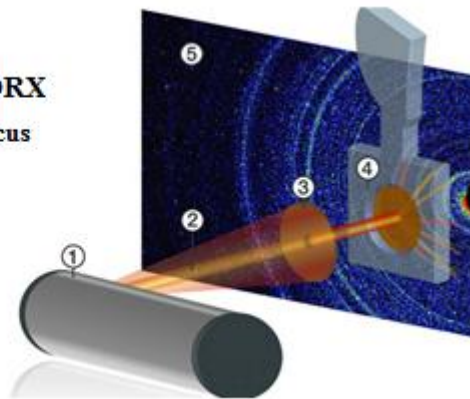


Figure IV.7

l'approche XRD unique d'Olympus utilisant la géométrie de transmission.

IV.3.2.1 Comment obtenir une minéralogie quantitative

- ⇒ Préparez l'échantillon.
- ⇒ Lancez l'analyse; l'analyseur émet des rayons X au travers de la fenêtre, lesquels traversent l'échantillon de convection.
- ⇒ Les rayons X frappent l'échantillon et se diffractent selon une étendue d'angles de 2θ .
- ⇒ Le détecteur CCD mesure la diffraction.
- ⇒ le logiciel d'identification de phases et de minéralogie quantitative automatisées fournit des données en temps réel directement sur l'analyseur DRX ou dans l'interface utilisateur intuitive⁸⁴.

⁸⁴ Lauren Dos Santos «Qu'est-ce que la diffraction des rayons X (XRD) et comment fonctionne-t-elle? » Blogue InSight. OLYMPUS. 29 juillet, 2020

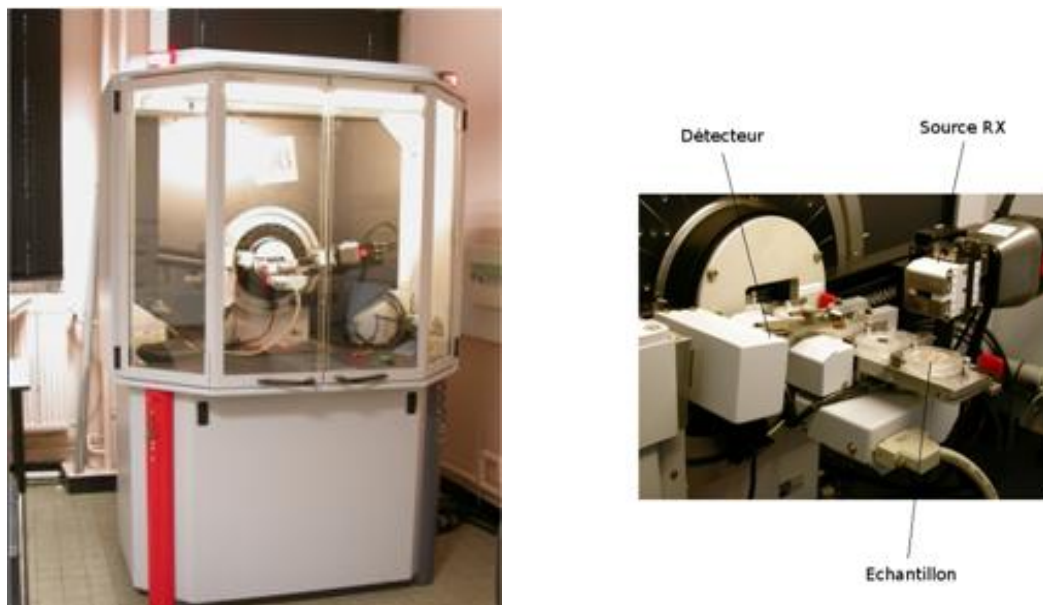


Figure IV.8
Diffractomètre sur poudre⁸⁵.

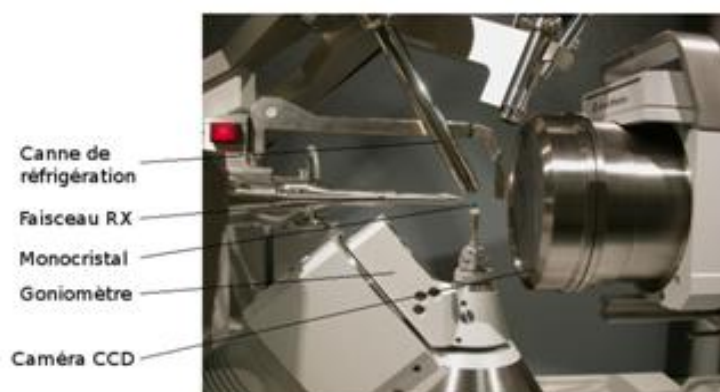


Figure IV.9
Monocristal monté sur de la pâte à modeler sur le diffractomètre.

⁸⁵ <http://culturesciencesphysique.ens-lyon.fr/ressource/Diffraction-rayons-X-techniques-determination-structure.xml>

IV. 3. 3 Diffractogramme, identification des phases

C'est l'application la plus courante de la diffraction des rayons X sur poudre. Une fois le diagramme obtenu, on compare les positions et les intensités des pics observés avec ceux de la base de données PDF (Powder Diffraction File) de l'ICDD (International Centre for Diffraction Data) qui contient plus de 600.000 diagrammes de référence. On peut ainsi rapidement vérifier un résultat de synthèse (bonne phase cristalline, l'impureté,...) ou confirmer que l'on a obtenu un nouveau composé.

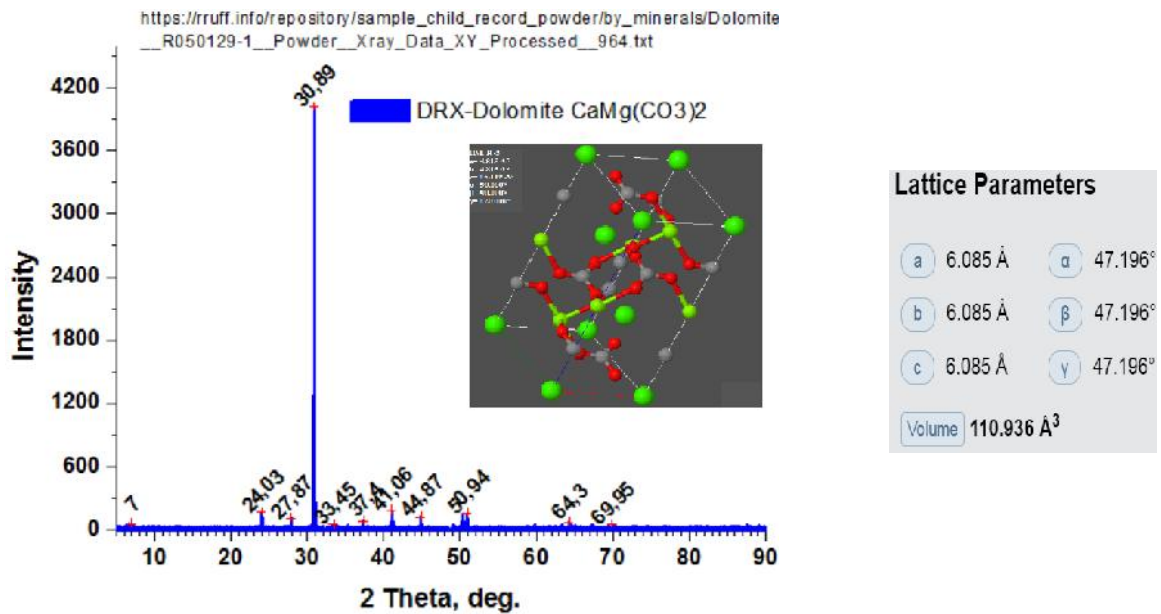


Figure IV.10

Diffractogramme sur poudre d'un $\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$ ⁸⁶.

⁸⁶ <https://materialsproject.org/materials/mp-6459/>

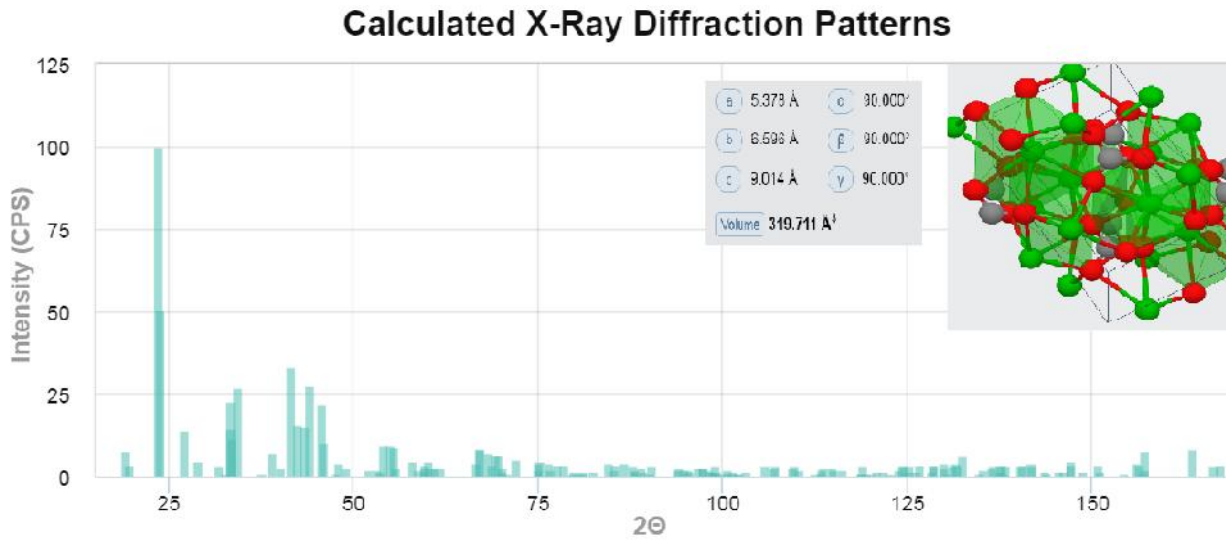
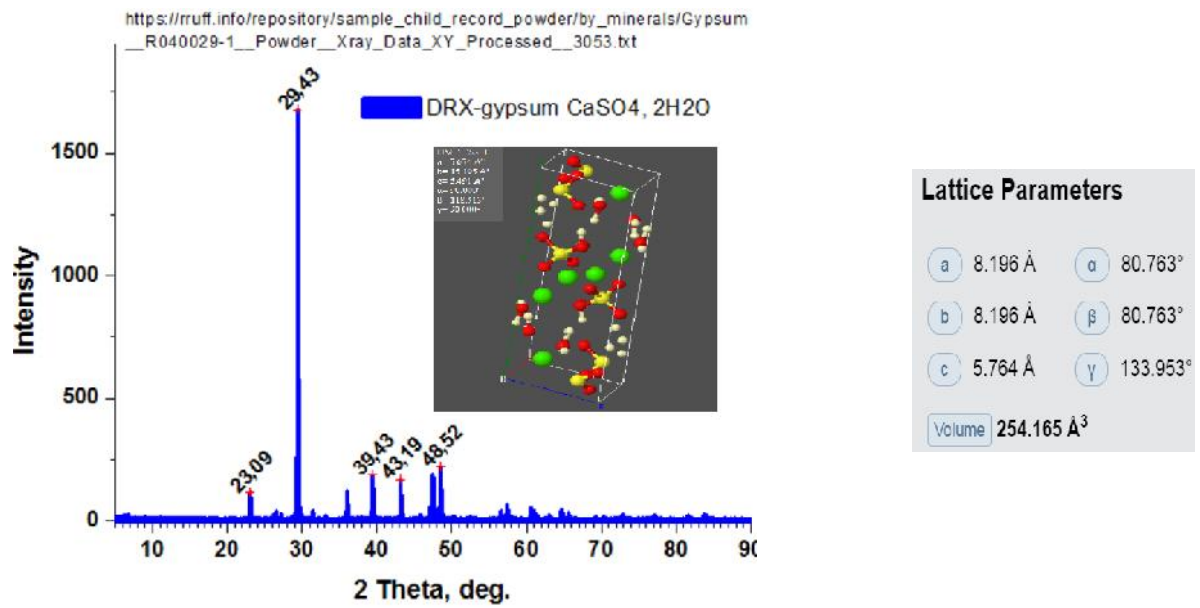


Figure IV.11

Diffractogramme sur poudre d'un BaCO₃⁸⁷



⁸⁷ <https://materialsproject.org/materials/mp-5504/>

Figure IV.12

Diffractogrammes sur poudre d'un CaH_4SO_6 ⁸⁸

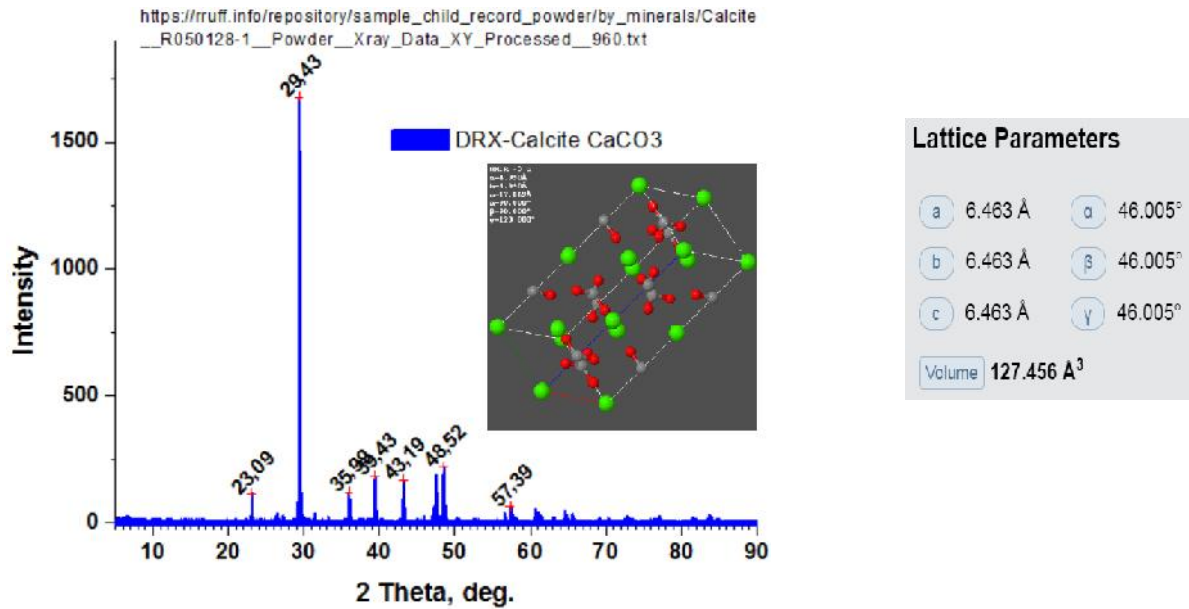


Figure IV.13

Diffractogrammes sur poudre d'un CaCO_3 ⁸⁹

⁸⁸ <https://materialsproject.org/materials/mp-23690/>

⁸⁹ <https://materialsproject.org/materials/mp-3953/>

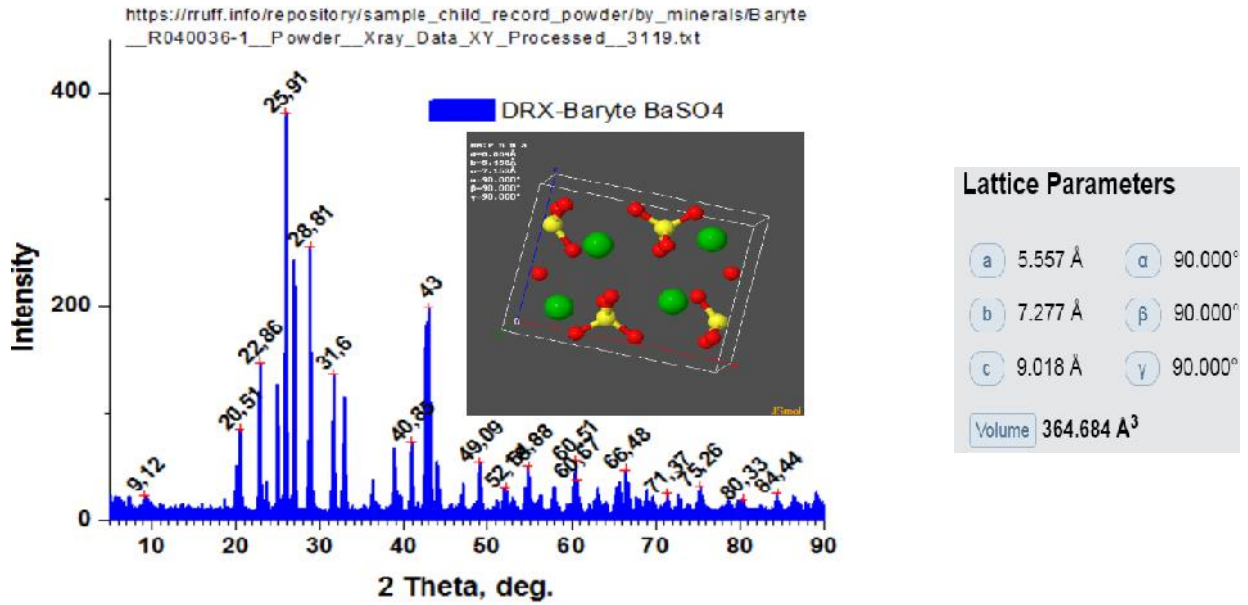


Figure IV.14

Diffractogrammes sur poudre d'un BaSO₄⁹⁰

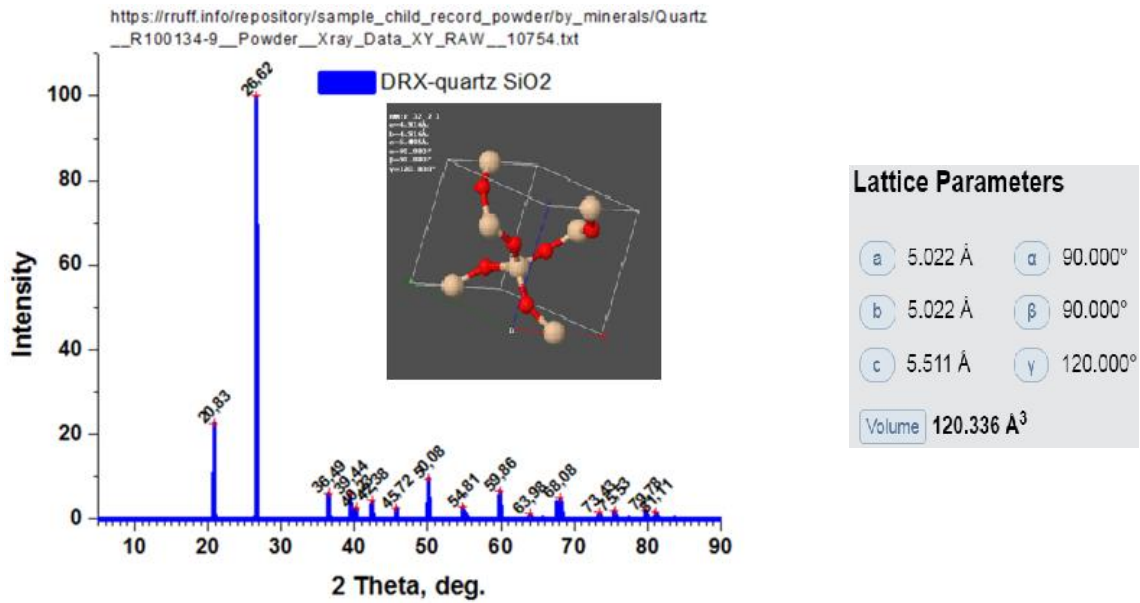


Figure IV.15

Diffractogrammes sur poudre d'un SiO₂⁹¹.

⁹⁰ <https://materialsproject.org/materials/mp-3164/>

⁹¹ <https://materialsproject.org/materials/mp-7000/>

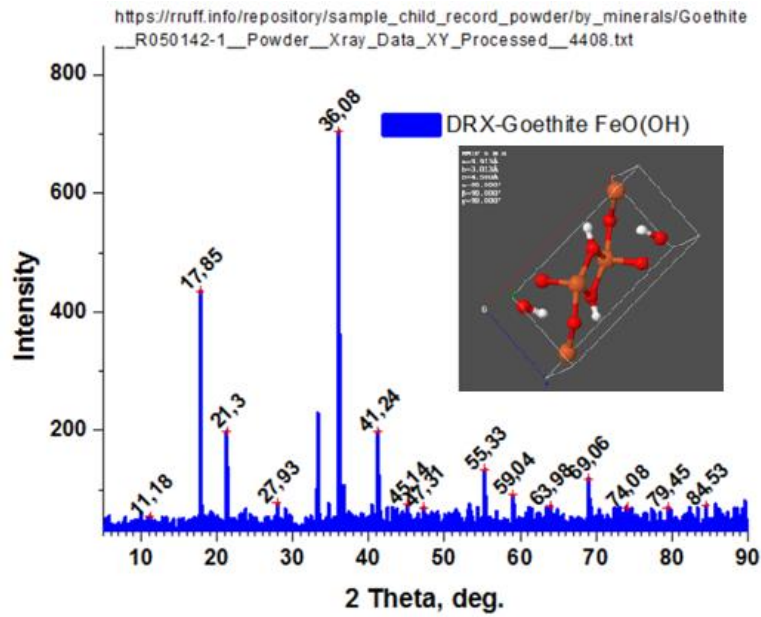


Figure IV.16

Diffractogrammes de goethite FeO (OH).

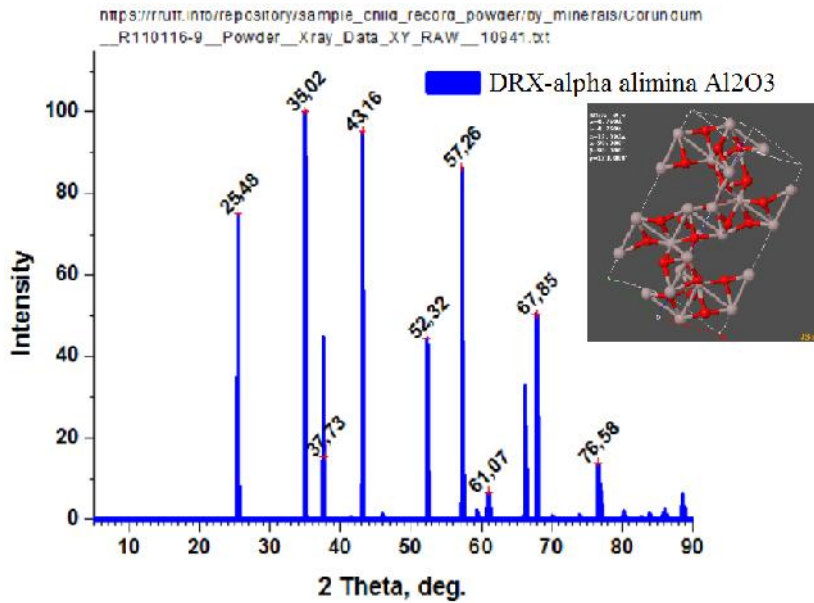


Figure IV.17

Diffractogrammes d'alpha alimina (Al₂O₃).

Tableau IV-1 (a): les références et principale données cristallographique de Gypse⁹².

Gypse	http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/minerals/Gypsum
	Schofield P F, Knight K S, Stretton I C, American Mineralogist 81 (1996) 847-851
	Extension thermique du gypse étudié par diffraction de la poudre à neutrons T = 4.2 K, _database_code_amcsd 0001807
Paramètres de cellule	5.6740 15.1049 6.4909 90.000 118.513 90.000
G roupe d'espace	I2/a
Langueur d'onde aux RX	1.541838
Volume cellulaire	488.829
Densité (g/cm ³)	2.339
MAX. ABS. Intensité / Volume ²	12.04710374
RIR	1.677

Tableau IV-1 (b) : paramètres des plans de gypse.

2-THETA	INTENSITY	D-SPACING	H	K	L	Multiplicity
11.72	88.21	7.5525	0	2	0	2
20.82	100.00	4.2669	-1	2	1	4
23.56	15.37	3.7762	0	4	0	2
23.57	1.90	3.7746	0	3	1	4
28.28	5.23	3.1556	-1	1	2	4
29.29	73.30	3.0497	-1	4	1	4
31.25	52.99	2.8621	1	2	1	4
31.37	2.72	2.8518	0	0	2	2
32.13	9.88	2.7854	-2	1	1	4

⁹² RIR based on corundum from Acta Crystallographica A38 (1982) 733-739

32.97	1.25	2.7168	-1	3	2	4
33.59	36.27	2.6679	0	2	2	4
34.69	2.29	2.5856	-2	0	2	2
34.72	2.49	2.5837	1	5	0	4
36.03	12.46	2.4929	2	0	0	2
36.74	7.16	2.4462	-2	2	2	4
37.59	4.35	2.3927	1	4	1	4
39.60	1.18	2.2758	0	4	2	4
40.92	12.45	2.2053	-1	5	2	4
42.37	1.22	2.1334	-2	4	2	4
43.50	17.65	2.0804	2	4	0	4
43.76	4.95	2.0686	-1	2	3	4
43.80	8.56	2.0669	-2	5	1	4
43.86	5.99	2.0641	1	1	2	4
44.43	5.50	2.0391	-2	1	3	4
45.82	1.97	1.9803	1	7	0	4
46.59	3.49	1.9493	2	1	1	4
48.22	17.29	1.8873	0	6	2	4
48.72	13.69	1.8689	-1	4	3	4
48.87	3.38	1.8635	-3	1	2	4
50.61	15.27	1.8037	-2	6	2	4
50.80	5.69	1.7972	-3	2	1	4

51.37	1.11	1.7786	0	3	3	4
51.53	2.87	1.7736	-1	8	1	4
51.60	10.60	1.7714	2	6	0	4
53.91	1.80	1.7008	-2	5	3	4
54.61	2.83	1.6805	-3	2	3	4
55.29	7.09	1.6616	-3	4	1	4
56.25	3.96	1.6353	-1	6	3	4
57.09	6.66	1.6134	-2	0	4	2
57.16	2.35	1.6115	1	8	1	4
57.22	2.07	1.6101	0	9	1	4
58.48	1.29	1.5782	3	3	0	4
58.50	1.93	1.5778	-2	2	4	4
58.64	2.31	1.5743	0	8	2	4
58.90	1.14	1.5681	-3	4	3	4
60.74	2.93	1.5248	-2	8	2	4
61.29	1.80	1.5123	-1	3	4	4
61.62	1.43	1.5051	2	8	0	4
62.70	1.15	1.4819	-3	1	4	4
65.15	4.75	1.4319	1	4	3	4
65.46	2.44	1.4259	0	0	4	2
65.92	3.37	1.4170	-4	0	2	2
66.89	2.95	1.3988	3	2	1	4

67.68	1.15	1.3843	-4	1	3	4
69.16	1.02	1.3584	-2	6	4	4
69.22	6.07	1.3573	1	10	1	4
70.61	1.52	1.3340	0	4	4	4
70.73	1.93	1.3320	3	4	1	4
71.23	1.31	1.3239	1	11	0	4
71.37	2.85	1.3215	-3	8	1	4
71.61	3.19	1.3177	2	6	2	4
74.54	2.13	1.2730	-3	8	3	4
75.53	1.07	1.2587	0	12	0	2
76.41	1.70	1.2464	4	0	0	2
76.47	1.63	1.2456	-3	2	5	4
76.83	1.81	1.2407	0	6	4	4
77.17	1.93	1.2361	-1	10	3	4
77.26	1.06	1.2348	-4	6	2	4
77.44	3.76	1.2324	-1	2	5	4
77.64	2.33	1.2298	4	2	0	4
77.88	1.54	1.2266	-2	8	4	4
80.13	2.29	1.1977	-3	4	5	4
80.20	3.51	1.1968	1	8	3	4
80.24	2.73	1.1964	2	8	2	4
81.09	1.26	1.1860	-1	4	5	4

82.12	1.22	1.1737	3	3	2	4
84.05	1.31	1.1516	0	12	2	4
84.19	2.98	1.1500	-4	6	4	4
85.30	1.14	1.1379	0	8	4	4
85.47	5.93	1.1360	-3	10	3	4
85.87	1.41	1.1318	-2	12	2	4
87.28	1.65	1.1170	4	6	0	4

Tableau IV-2 (a): les références et principale données cristallographique de Quartz⁹³.

Quartz	http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/minerals/Quartz
	XPOW Copyright 1993 Bob Downs, Ranjini Swaminathan and Kurt Bartelmehs
	For reference, see Downs et al. (1993) American Mineralogist 78, 1104-1107. Levien L, Prewitt C T, Weidner D J- American Mineralogist 65 (1980) 920-930
	Structure et propriétés élastique du Quartz à la pression P = 1 atm- _database_code_amcsd 0000789
Paramètres de cellule	4.9160 4.9160 5.4054 90.000 90.000 120.000
Groupe d'espace	P3_221
Longueur d'onde aux RX	1.541838
Volume cellulaire	113.131
Densité (g/cm ³)	2.645
MAX. ABS. Intensité /	35.16956101

⁹³ RIR based on corundum from Acta Crystallographica A38 (1982) 733-739

Volume ²	
RIR	4.329

Tableau IV-2 (b) : paramètres des plans de Quartz.

2-THETA	INTENSITY	D-SPACING	H	K	L	Multiplicity
20.87	19.93	4.2574	1	0	0	6
26.65	69.90	3.3446	0	1	1	6
26.65	30.10	3.3446	1	0	1	6
36.56	7.13	2.4580	1	1	0	3
39.49	1.01	2.2818	0	1	2	6
39.49	6.18	2.2818	1	0	2	6
40.31	3.19	2.2375	1	1	1	6
42.47	5.25	2.1287	2	0	0	6
45.81	1.00	1.9806	0	2	1	6
45.81	2.09	1.9806	2	0	1	6
50.17	12.58	1.8184	1	1	2	6
54.90	3.09	1.6723	0	2	2	6
55.37	1.61	1.6593	0	1	3	6
59.98	4.11	1.5423	2	1	1	6
59.98	4.94	1.5423	1	2	1	6
64.08	1.72	1.4532	1	1	3	6
67.78	1.38	1.3826	2	1	2	6

67.78	4.18	1.3826	1	2	2	6
68.19	1.36	1.3753	0	2	3	6
68.19	5.31	1.3753	2	0	3	6
68.34	4.13	1.3726	0	3	1	6
73.53	1.73	1.2880	1	0	4	6
75.70	1.91	1.2565	3	0	2	6
79.93	2.30	1.2002	2	1	3	6
81.24	2.41	1.1842	1	1	4	6

Tableau IV-3 (a): les références et principale données cristallographique de la Calcite⁹⁴.

Calcite	http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/minerals/Calcite					
	POW Copyright 1993 Bob Downs, Ranjini Swaminathan and Kurt Bartelmehs					
	For reference, see Downs et al. (1993) American Mineralogist 78, 1104-1107. Graf D L- American Mineralogist 46 (1961) 1283-1316- Crystallographic tables for the rhombohedral carbonates _database_code_amcsd 0000098					
Paramètres de cellule	4.9900	4.9900	17.0615	90.000	90.000	120.000
Groupe d'espace	R-3c					
Longueur d'onde aux RX	1.541838					
Volume cellulaire	367.916					
Densité (g/cm ³)	2.710					
MAX. ABS. Intensité /	26.50717622					

⁹⁴ RIR based on corundum from Acta Crystallographica A38 (1982) 733-739

Volume²

RIR

3.185

Tableau IV-3(b) : paramètres des plans de la Calcite.

2-THETA	INTENSITY	D-SPACING	H	K	L	Multiplicity
23.07	8.10	3.8550	0	1	2	6
29.42	100.00	3.0357	1	0	4	6
31.46	2.43	2.8436	0	0	6	2
36.00	13.71	2.4950	1	1	0	6
39.44	20.16	2.2848	1	1	3	12
43.19	14.26	2.0946	2	0	2	6
47.15	6.16	1.9275	0	2	4	6
47.54	19.67	1.9125	0	1	8	6
48.54	20.02	1.8754	1	1	6	12
56.61	3.73	1.6259	2	1	1	12
57.44	9.18	1.6042	1	2	2	12
60.72	5.28	1.5253	2	1	4	12
61.05	2.41	1.5179	2	0	8	6
61.43	3.18	1.5094	1	1	9	12
63.10	2.29	1.4733	1	2	5	12
64.71	6.84	1.4405	3	0	0	6
65.67	3.91	1.4218	0	0	12	2

69.24	1.51	1.3569	2	1	7	12
70.30	2.13	1.3390	0	2	10	6
72.95	2.69	1.2967	1	2	8	12
77.23	1.93	1.2353	1	1	12	12
81.60	2.24	1.1799	2	1	10	12
83.84	1.57	1.1539	1	3	4	12

Tableau IV-4 (a) : les références et principale données cristallographique de dolomite⁹⁵.

Dolomite	http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/minerals/Dolomite
	XPOW Copyright 1993 Bob Downs, Ranjini Swaminathan and Kurt Bartelmehs
	For reference, see Downs et al. (1993) American Mineralogist 78, 1104-1107. Steinfink H, Sans F J- American Mineralogist 44 (1959) 679-682- Refinement of the crystal structure of dolomite- _database_code_amcsd 0000086
Paramètres de cellule	4.8150 4.8150 16.1190 90.000 90.000 120.000
Groupe d'espace	R-3
Langueur d'onde aux RX	1.541838
Volume cellulaire	323.639
Densité (g/cm ³)	2.838
MAX. ABS. Intensité / Volume ²	24.14536753
RIR	2.770

⁹⁵ RIR based on corundum from Acta Crystallographica A38 (1982) 733-739

Tableau IV-4 (b) : paramètres des plans de dolomite.

2-THETA	INTENSITY	D-SPACING	H	K	L	Multiplicity
22.02	2.05	4.0370	1	0	1	6
24.03	2.21	3.7036	0	1	2	6
30.86	100.00	2.8977	1	0	4	6
33.35	4.60	2.6865	0	0	6	2
35.19	5.19	2.5505	0	1	5	6
37.35	11.44	2.4075	1	1	0	6
41.08	17.99	2.1970	1	1	3	6
41.08	5.68	2.1970	2	-1	3	6
43.78	4.13	2.0677	0	2	1	6
44.91	13.87	2.0185	2	0	2	6
49.20	4.36	1.8518	0	2	4	6
50.29	18.07	1.8142	0	1	8	6
50.93	6.78	1.7929	1	1	6	6
50.93	12.85	1.7929	2	-1	6	6
50.99	1.24	1.7910	0	0	9	2
58.87	2.51	1.5686	3	-1	1	6
58.87	1.93	1.5686	2	1	1	6
59.79	3.00	1.5468	1	2	2	6

59.79	6.96	1.5468	-1	3	2	6
63.37	3.19	1.4678	3	-1	4	6
63.37	2.44	1.4678	2	1	4	6
64.29	2.68	1.4489	2	0	8	6
64.89	2.24	1.4370	2	-1	9	6
65.98	2.73	1.4159	-1	3	5	6
67.37	6.67	1.3900	3	0	0	6
70.05	3.72	1.3432	0	0	12	2
72.70	2.17	1.3006	2	1	7	6
74.39	2.92	1.2752	0	2	10	6
76.78	2.53	1.2414	1	2	8	6
82.17	1.87	1.1730	1	1	12	6
86.33	1.01	1.1269	2	1	10	6
86.33	1.43	1.1269	3	-1	10	6
87.81	1.52	1.1116	1	3	4	6

Tableau IV-5 (a) : les références et principale données cristallographique de baryte⁹⁶.

Baryte	http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/minerals/Barite
	XPOW Copyright 1993 Bob Downs, Ranjini Swaminathan and Kurt Bartelmehs For reference, see Downs et al. (1993) American Mineralogist 78, 1104-1107. Colville A A, Staudhammer K-

⁹⁶ RIR based on corundum from Acta Crystallographica A38 (1982) 733-739

	American Mineralogist 52 (1967) 1877-1880					
	A refinement of the structure of barite-					Locality: Cow
	Green mine, Teesdale, Durham,					
	England_database_code_amcsd 0000163					
Paramètres de cellule	8.8840	5.4580	7.1530	90.000	90.000	90.000
Groupe d'espace	Pnma					
Longueur d'onde aux RX	1.541838					
Volume cellulaire	346.841					
Densité (g/cm ³)	4.469					
MAX. ABS. Intensité /	40.55288951					
Volume ²						
RIR	2.955					

Tableau IV-5 (b) : paramètres des plans de baryte⁹⁷.

2-THETA	INTENSITY	D-SPACING	H	K	L	Multiplicity
15.91	2.15	5.5715	1	0	1	4
19.99	14.04	4.4420	2	0	0	2
20.47	32.02	4.3391	0	1	1	4
22.81	51.07	3.8989	1	1	1	8
23.58	9.61	3.7736	2	0	1	4
24.90	24.75	3.5765	0	0	2	2

⁹⁷ XPOW Copyright 1993 Bob Downs, Ranjini Swaminathan and Kurt Bartelmehs

For reference, see Downs et al. (1993) American Mineralogist 78, 1104-1107.

25.86	98.44	3.4452	2	1	0	4
26.87	65.42	3.3177	1	0	2	4
28.76	100.00	3.1039	2	1	1	8
31.56	51.59	2.8351	1	1	2	8
32.73	10.49	2.7361	3	0	1	4
32.82	46.83	2.7290	0	2	0	2
36.20	14.58	2.4813	2	1	2	8
36.74	1.24	2.4460	3	1	1	8
38.73	15.22	2.3252	2	2	0	4
39.12	5.09	2.3028	1	0	3	4
39.51	7.43	2.2809	3	0	2	4
40.62	1.18	2.2210	4	0	0	2
40.81	26.97	2.2113	2	2	1	8
41.63	3.11	2.1695	0	2	2	4
42.61	46.59	2.1217	1	1	3	8
42.62	36.95	2.1211	4	0	1	4
42.91	52.19	2.1076	1	2	2	8
42.98	40.95	2.1045	3	1	2	8
43.06	1.94	2.1008	2	0	3	4
44.02	20.62	2.0572	4	1	0	4
46.59	1.28	1.9495	2	2	2	8
47.03	8.00	1.9322	3	2	1	8

49.05	19.71	1.8572	3	0	3	4
51.08	4.34	1.7882	0	0	4	2
51.85	5.69	1.7632	0	3	1	4
52.01	6.22	1.7582	3	1	3	8
52.18	5.25	1.7531	1	0	4	4
52.94	4.39	1.7295	1	3	1	8
53.11	2.62	1.7244	5	0	1	4
54.50	7.93	1.6836	2	3	0	4
54.82	16.69	1.6747	4	2	1	8
55.02	4.00	1.6691	1	1	4	8
55.38	1.92	1.6589	2	0	4	4
55.92	1.37	1.6443	5	1	1	8
56.12	10.64	1.6388	2	3	1	8
57.80	9.82	1.5952	1	3	2	8
57.96	1.89	1.5913	5	0	2	4
58.12	3.04	1.5872	2	1	4	8
60.28	20.41	1.5354	3	2	3	8
60.62	9.46	1.5277	5	1	2	8
60.81	1.89	1.5233	2	3	2	8
62.05	3.74	1.4957	0	2	4	4
63.02	9.98	1.4750	1	2	4	8
63.07	4.25	1.4739	3	1	4	8

63.85	4.95	1.4578	5	2	1	8
65.30	5.05	1.4290	6	1	0	4
65.37	9.67	1.4276	1	3	3	8
65.52	5.31	1.4247	5	0	3	4
65.64	9.99	1.4223	3	3	2	8
65.89	2.61	1.4175	2	2	4	8
66.43	6.52	1.4074	4	3	0	4
66.75	9.90	1.4013	6	1	1	8
67.71	5.57	1.3839	0	1	5	4
68.01	5.17	1.3785	5	1	3	8
68.80	6.96	1.3645	0	4	0	2
68.96	2.47	1.3617	2	0	5	4
69.67	5.95	1.3496	4	1	4	8
71.03	1.24	1.3270	6	1	2	8
71.39	6.21	1.3212	2	1	5	8
72.46	1.04	1.3043	2	4	0	4
72.65	2.84	1.3014	6	2	0	4
72.77	3.51	1.2996	3	3	3	8
73.85	1.33	1.2832	2	4	1	8
74.04	1.18	1.2804	6	2	1	8
74.42	1.58	1.2749	0	4	2	4
75.24	11.83	1.2630	5	2	3	8

75.28	2.55	1.2624	1	3	4	8
75.31	6.47	1.2619	1	4	2	8
75.89	1.06	1.2537	3	1	5	8
77.77	2.48	1.2281	5	1	4	8
77.94	1.20	1.2258	2	3	4	8
78.30	1.76	1.2211	3	4	1	8
78.50	5.10	1.2185	2	2	5	8
78.53	1.12	1.2181	7	1	1	8
79.73	5.16	1.2027	4	0	5	4
80.13	3.18	1.1978	5	3	2	8
80.26	4.34	1.1961	7	0	2	4
80.58	2.45	1.1922	0	0	6	2
82.32	1.94	1.1713	3	3	4	8
82.58	1.25	1.1683	7	1	2	8
84.33	2.26	1.1484	6	3	0	4
84.41	7.83	1.1476	4	4	1	8
85.67	3.62	1.1339	6	3	1	8
86.36	4.31	1.1266	2	1	6	8
86.55	3.05	1.1246	0	3	5	4
86.83	3.09	1.1217	5	3	3	8
87.93	2.91	1.1105	8	0	0	2
88.38	3.14	1.1060	4	3	4	8

88.93	5.82	1.1006	4	2	5	8
89.03	6.17	1.0996	3	4	3	8
89.25	4.34	1.0974	7	1	3	8
89.45	5.37	1.0955	7	2	2	8
89.77	2.26	1.0925	0	2	6	4

Conclusion générale

Depuis les années 1950, la spectroscopie IR a eu des utilisations différentes et très nombreuses, en imagerie, en médecine, analyses, etc... Elle joue un rôle très important dans la caractérisation des minéraux par exemple. La spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier (FTIR) est une technique analytique efficace pour identifier rapidement la «famille chimique» d'une substance, organique ou inorganique.

Sur cette dernière décennie, les sauts en précision et en rapport signal/bruit notamment ont permis d'appliquer cette technique à tout un champ d'échantillons qui apparaissaient impossibles à être explorés (en milieu aqueux notamment) ou trop complexes (produits industriels, échantillons biologiques ou environnementaux). Il devient maintenant possible de disposer en laboratoire, en environnement industriel, et de recherche de dispositifs optiques en moyen infrarouge mais, surtout en proche infrarouge, robustes et fiables. Ces procédés couplés à des techniques de traitement des signaux et d'analyse en plein développement sont souvent d'utilisation simple. Il est clair qu'aujourd'hui et dans un futur proche les applications de spectroscopie infrarouge vont dépasser le simple champ de l'analyse « moléculaire » pour s'étendre à des capteurs ou des dispositifs de mesure d'autres paramètres physiques de systèmes complexes (en biologie, en environnement, en industrie...) ou encore à de l'imagerie hyper spectrale (pour plus de détails, consulter la référence⁹⁸).

Dans cette optique nous avons exploité cette technique pour caractériser des échantillons (roches et minéraux) de notre région (Khenchela et Batna). Nous somme situé géographiquement à l'est algérien, zone semi-aride montagneuse, et des températures qui fluctuent entre 5°C et 40°C.

Les roches analysées comportent de la calcite (CaCO_3), de la dolomite ($\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$), du quartz (SiO_2), du gypse ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$), de la baryte (BaSO_4), avec différentes colorés, lesquelles couleurs peuvent être liées à la présence d'oxydes : Hématite (Fe_2O_3), Chromite (Cr_2O_3), Zincite (ZnO), Alumine (Al_2O_3) etc... . A noter que toutes ces roches, comportent des quantités plus ou moins importantes de composés organiques.

⁹⁸ <https://www.techniques-ingenieur.fr/base-documentaire/mesures-analyses-th1/spectrometries-42390210/spectrometrie-d-absorption-dans-l-infrarouge-p2850/conclusion-p2850niv10005.html>

Résumé

Les minéraux et les roches de notre région ont été étudiés par spectroscopie FTIR, notre étude comporte aussi des informations cristallographiques de tous les minéraux rencontrés tels que la dolomite, le gypse, Des différentes roches rencontrées sont composés principalement de : Calcite, Dolomite, Quartz, Gypse, et aussi Baryte, ce qui signifie que chaque roche est un ensemble ou combinaison de : (C+Q+G, G+Q+B, etc....), chaque roche comprend une quantité plus ou moins grande de minéral ce qui signifie par exemple : 80% de gypse+20% de dolomite.

Nous confirmons l'efficacité de cette technique pour l'analyse des roches des régions Djelal (Khenchela) et Ghassira (Batna) et nous avons aussi constaté qu'elle est très sensible même au moindre grain (quantité infinitésimale) pour lesquelles le signal infrarouge se traduit par une petite déformation du pic, un épaulement, etc. Nous avons aussi constaté la présence de produits organiques qui peuvent être expliqués par le vécu de ces roches on cite la cire par exemple.

تمت دراسة المعادن والصخور في منطقتنا بواسطة التحليل الطيفي FTIR
العثور عليها الدولوميت ، الجبس ...
معلومات بلورية من جميع المعادن : الكالسيت، الكوارتز، الباريوم ...
نؤكد فعالية هذه التقنية لتحليل صخور منطقة
يد من الصخرة وذلك قد يظهر في طفيف
منطقة غسيرة بياتنة، نا أيضاً حساسة للغاية
أيضاً وجود منتجات عضوية يمكن تفسيرها بتزامنها مع تواجد كائنات حية على مر حياة هته الصخور، على سبيل المثال الشمع.

Abstract

Minerals and rocks in our region were studied by FTIR spectrum analysis, and our study includes crystallographic information from all minerals encountered such as barium, dolomite, ... Different rocks encountered mainly composed of: calcite, quartz, gypsum, barium,

We confirm the effectiveness of this technique for the analysis of the rocks of our region: « Djelal in Khenchela, Ghassira in Batna », and we have also found that it is very sensitive even to the slightest grain (infinitesimal quantity) for which the infrared signal is Translated by a small deformation of the peak, a shoulder, etc. We have also noted the presence of organic products which can be explained by the experience of these rocks we cite wax for example.