

LC.3 Le modèle du cristal parfait et ses limites

Lise

| **Élément imposé** – Alliage de substitution et d'insertion

Niveau : L1

Pré-requis :

- Les différents états de la matière (Lycée)
- Liaisons fortes et faibles

Difficultés :

- Eviter les confusions entre les notions mathématiques (maille réseau noeuds) et les notions physiques (motif)
- Comprendre les différences entre les types de maille
- La vision dans l'espace
- Les relations de géométrie

Applications :

- TD paramètres de maille à calculer
- Activité doc sur les limites du modèle (défauts)
- Visualisation 3D

Biblio :

- Fosset

Plan proposé

1	Le modèle du cristal parfait	2
1.1	Le réseau et les noeuds	2
1.2	La maille	2
1.3	Le motif	2
2	Les différents types de maille	2
2.1	Maille simple ou multiple	2
2.2	Mailles caractéristiques du réseau	2
2.3	La classification des cristaux	3
3	Les systèmes cristallins	3
3.1	La maille cubique faces centrées (CFC)	3
3.2	Les sites interstitiels	3
4	Un exemple : les alliages	3

Intro pédagogique

Prérequis du lycée, difficultés et applications

Leçon

Intro

Cristallographie depuis Kepler (flocon de neige). Très utilisé ajd en détermination de structure. Comprendre de quoi sont constitués les cristaux et comment les représenter

1 Le modèle du cristal parfait

Le cristal parfait est un ensemble d'entité empilés *régulièrement* dans l'espace idéalement *sans défauts* et de *dimension infinie*.

1.1 Le réseau et les noeuds

Définition : Le réseau est un ensemble tripériodique de points qu'on appelle noeuds. On peut retrouver tous les noeuds grâce à une translation \vec{T}

$$\vec{T} = u \times \vec{a} + v \times \vec{b} + w \times \vec{c} \quad (1)$$

avec u, v, w appartenant à \mathbb{N} ($\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$) sont non coplanaires

1.2 La maille

La maille est une unité de pavage d'un réseau. C'est un parallélépipède défini soit par ($\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$) soit par (a,b,c) et 3 angles (α, β, γ)

Maille pas unique dans un réseau

1.3 Le motif

Entité qui se répète périodiquement dans le cristal

2 Les différents types de maille

2.1 Maille simple ou multiple

Maille simple : ne contient qu'un noeud

Maille multiple : contient plusieurs noeuds

2.2 Mailles caractéristiques du réseau

Maille conventionnelle (avec maille multiple)

Maille primitive (avec maille simple)

2.3 La classification des cristaux

Dépend des interactions (fortes ou faibles).

Prochain cours : Réseaux de Bravais

Ici on considère la maille cubique faces centrées (maille hexagonale en td)

3 Les systèmes cristallins

3.1 La maille cubique faces centrées (CFC)

La population : Le nombre d'atomes par maille

La coordinance : Le nombre d'atomes voisins car plus proches d'un atome au sein de la maille

La compacité : le volume de la maille occupée en propre par des atomes

La masse volumique : $\rho = \frac{m_{\text{atomes}}}{V_{\text{mailles}}}$

Calculs :

— Population 8 atomes au sommets de 8 mailles + 6 atomes au centres de 2 mailles :

$$N = 8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4$$

— Coordinance : Dessin & $8 \times 3/2 = 12$

— Compacité Calcul du V_{atomes} avec l'empilement selon la diagonale d'une face : $C=0.74$

— Masse volumique $\rho = \frac{4 \times M}{N_a \times a^3}$ (ce sera étudié en TD)

3.2 Les sites interstitiels

Sites octaédriques : $N_O = 1 + 12/4 = 4$ sites O

Sites tétraédriques : $N_T = 8$ sites

Habitabilité : Rayon maximal que peut faire un atome pour occuper un site interstitiel sans déformer le réseau. $r_O = 0.414 \times R$ et $r_T = 0.227 \times R$

4 Un exemple : les alliages

— substitution : (<15%)

— insertion

Conclusion

Defs + exemples

Importance des défauts (approche doc) + réseaux de Bravais

Questions/Réponses

Questions	Réponses
<i>Conditions du cristal parfait</i>	Sphères dures ponctuelles sans interactions (à vérifier)
<i>Energies de liaisons</i>	covalente 400 kJ/mol pour CC
<i>Qu'est ce qu'il existe comme défauts ?</i>	Noms bizarres
<i>Comment on peut voir les défauts</i>	Diffraction par rayon X et explications
<i>Comment voir mieux dans l'espace</i>	modèle ou logiciel (exemple de logiciel) en TD
<i>Élèves de L1 ? Première fois en cristallographie ?</i>	Probablement
<i>Comment a fait Kepler</i>	Ne sais pas
<i>Différence entre cristal parfait et imparfait ?</i>	Dimension infinie impossible, idem pour défauts
<i>Réseaux de Bravais</i>	14 sont à voir au moins une fois
<i>Quelles sont les mailles conventionnelles</i>	Primitive P, centrée I, 2 faces centrées C, toutes faces centrées F
<i>Compacité, compact ?</i>	0.74 max en compacité ?
<i>Sel compact ?</i>	CFC
<i>Cristal covalent ou ionique ?</i>	depend des forces
<i>Cristal ionique conducteur ou isolant ?</i>	Isolant
<i>Énergie de cohésion à calculer</i>	... (énergie réticulaire)

Debrief

Ne pas écrire difficultés et explications, et il ne faut pas regarder le tableau quand on parle d'égal à égal avec le jury. Intro pédagogique TRES IMPORTANTE
Justifier le fil conducteur de la leçon.

El peut être toute la leçon, pas besoin de repartir de base (cours précédent)

Dérouler tout un exemple : bonne idée

Ne pas regarder ses feuilles pour écrire les définitions

Quatre parties, c'est trop

Nom des défauts 2D et 3D

Cycle de Born Haber

Cristaux métalliques, danger !

Eviter domaine de question où l'on est instable

Parler des paramètres de maille

L. *Titre*

Un spectre : graph en fonction de qq chose qui se rapproche à l'énergie (par ex spectro de masse, pas un spectre). En Rayon X : diffractogramme) Cristal ionique pas compact. Cristal ionique à l'état solide isolant (pas liquide!!) car charge centrées sur les anions. Et si anions durs, plus e centrés sur l'anion, donc pas de gaz diffus
Attention graphite par resistant car liaisons fortes et faibles
Cristallo au programme du lycée.

VESTA