

LC 3: Le modèle du cristal parfait et ses limites.

Élément imposé: Alliages de substitution et d'insertion

Niveau: L1

Pré-requis: Les différents états de la matière (Lycée.)

Difficultés: - Liaisons fortes et faibles
- éviter les confusions entre les notions math (maille, réseau...) et les notions physiques (motif)
- comprendre les différences entre les types de maille.
- vision des l'espace
- relation de géométrie.

Applications: - TD calculer les paramètres de maille et les grandeurs caractéristiques d'une maille FCC, étude de la maille hex compacte.
- activité de recherche sur les limites du modèle (défauts).
- visualisation 3D

Biblio: Forest p 654

I) Introduction:

Cristalle depuis le XVII^e | Kepler: forme hexagonale d'un flocon \leftrightarrow croissance de molécules. ajd: DRX

Q^o: de quoi sont constitués les cristaux comment les décrire?

II) Le modèle du cristal parfait.

Le cristal parfait est un ensemble d'entités empilées régulièrement dans l'espace empilement sans défauts, de dimension infinie.

types de cristaux: molécules, ions, pas de limite en taille (protéine)

1) Le réseau et les noeuds.

Définition: ensemble triperiodique de points qui on appelle noeuds
On peut retrouver tous les noeuds avec une translation

$\vec{r} = u\vec{a}' + v\vec{b}' + w\vec{c}'$ ($u, v, w \in \mathbb{N}$ et $\vec{a}', \vec{b}', \vec{c}'$ non coplanaires les paramètres de la maille (sur schéma)

2) La maille:

Unité de pavage du réseau: c'est un parallélépipède défini soit par $\vec{a}', \vec{b}', \vec{c}'$ soit par $(a, b, c, \alpha, \beta, \gamma)$

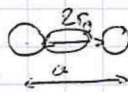
maille pas forcément unique dans le réseau (mailles des réseaux cubique ?)

3) Motif

: Entité qui se répète périodiquement dans le cristal (atome, ion, molécule)

2) Les sites interstitiels

sites octaédriques : milieu des arêtes + centre du cube : $N_0 = 1 + \frac{12}{4} = 4$ sites
 sites octaédriques : petits cubes $N_+ = 8$ sites
 tétraédriques

habitabilité : $r_0 = 0,414r$: sur arête 
 $r_1 = 0,225r$. $2R + 2r_0 = a = \frac{4R}{\sqrt{2}} \Rightarrow r_0 = (\sqrt{2}-1)r$

VI Un exemple : les alliages.

- substitution : acier (15% : $C_{0,15}A_{0,85}$ et X voisine
- insertion : dans les sites \uparrow et c : aciers (Fe + C)

Conclusion : Défauts : propriétés optiques : amorphisme.

Questions

Défaut quand on plus gros atomes et met dans le site.
 lacune anionique, lacune cationique \Rightarrow défauts de Schottky

Déplacement : Frenkel

centre F : piégeage d'un électron

- alliage : structure hôte existe sans l'alliage.
- Un cristal a des défauts : étude de DRX (plan de réticulation dans le réseau)
- Diché de DRX : + spectre pas d'extinction de longueur d'onde.
- Vision dans l'espace : - modèle moléculaire + logiciel 3D^{VE} tangence : calculer les prob.
- Logiciel VESTA : utilisation : montré en cours mais ~~non~~ faire un TD
- première fois pour le cristal en L1 ? nouveau programme de 1^{er} (I et II)
- Intro : Kepler comment a-t-il fait
- Différence entre un cristal parfait : trois hypothèses vérifiées
- réseau de Bravais : voir les 14 au détour du TP pour les sensibiliser
- Dans cubique, Primitive, centrée, face centrée, deux faces centrées. PCFI
- compacité : définition compact \rightarrow max à 0,74 pour la CFC
- réseau du sel NaCl ? : CFC compacte ? CFC pour le Cl⁻, Na⁺ dans $\frac{1}{2}a$ \Rightarrow compacité $> 0,74$ ionique non compact (Cl ne se touchent pas)
- Propriété physicochimiques des cristaux ? Liaison fortes \Rightarrow solides car + cohésion
 métallique : forte et non directionnelle \rightarrow ductile ~~non~~ bonne conductivité
- Cristaux ioniques (défauts) ? Oui PK ? Empilement compacts de charges opposées
 \Rightarrow difficulté pour les électrons à circuler : émis sur les arêtes
- Energies correspondantes des liaisons : 100 kJ.mol⁻¹ forte Val. 10 kJ.mol⁻¹
 Covalente dépend des atomes \Rightarrow C-C \rightarrow 100 kJ.mol⁻¹ métallique ionique basé sur l'interaction coulombienne.

ne pas écouter les diff et application \Rightarrow s'en en regard le tableau.

intro péda : bien 5 min \Rightarrow Difficultés, prérequis \Rightarrow logiciel

Phase de preuve d'égal à égal avec le jury pour justifier les choix drastiques \Rightarrow justifier de ne pas parler de limites - choisie la maille CFC limites à voir dans un autre cours.

élément imposé : déjà vu le cristal parfait \Rightarrow toute la leçon sur l'élément imposé - ~~et~~ exemple est classique : NaCl.

hypothèse du cristal parfait : monoatomique.

énergie de cohésion = énergie réticulaire. Cycle de Born-Haber.

ne pas dire ce que l'on veut pas être entendu dessous.