

TP n°18 : Cristallographie

Introduction :

La séance a pour but d'utiliser le logiciel ChimGéné pour visualiser des mailles cristallines, étudier des sites interstitiels, déterminer et modifier des paramètres géométriques...

Utilisation du logiciel ChimGéné :

- Lancer le logiciel et choisir Simulation_Cristallographie.

Dans la colonne de gauche (affichage), on utilisera deux modes alternativement :

- **Simulation** pour déterminer et modifier les propriétés de la maille étudiée ;
- **Graphe 3D** pour afficher une visualisation 3D de la maille.

Dans le mode « Simulation » :

- Le menu « Collection... » permet de sélectionner une maille déjà définie dans la bibliothèque du logiciel. En choisir une et cliquer sur « Utiliser la sélection en cours ».
- Le menu « Simulation étudiée... » permet d'agir sur tous les paramètres.
 - On peut modifier le type de cristal (métallique, ionique, covalent, moléculaire) : ceci permet d'avoir des suggestions adaptées quand on clique sur le menu déroulant « Système cristallin » de l'onglet réseau ;
 - Dans l'onglet « Réseau », on peut définir un à un les paramètres de la maille cristalline ;N.B. quand on choisit un système cristallin depuis la collection, **les paramètres expérimentaux** de la maille choisie sont introduits.
Notez que la masse volumique est recalculée en temps réel dès que l'on modifie un paramètre de maille.
 - Dans l'onglet « Motif » sont définies les positions des atomes dans la maille ;N.B. on peut modifier arbitrairement le rayon des sphères modélisant les atomes, mais cela n'a aucun effet sur les paramètres de l'onglet « Réseau ».
 - On utilise l'onglet « Éléments à ajouter » pour ajouter des atomes supplémentaires, par exemple dans des sites interstitiels.
 - Cliquer sur « Valider » quand on a terminé.
- Pour visualiser la simulation en cours, cliquez sur « Tracer ». L'affichage passe automatiquement dans le mode Graphe 3D.

Dans le mode « Graphe 3D » :

- Déplacer la maille avec la souris pour la visualiser comme on le souhaite. On peut appuyer simultanément sur la touche Ctrl pour faire des rotations autour d'axes horizontaux ou verticaux.
- Cliquer droit sur un atome pour déterminer tous ses voisins ainsi que leur distance. On peut à cette occasion modifier les couleurs pour distinguer certains atomes.
- Cliquer droit sur une zone vide de l'image pour modifier l'affichage, notamment le niveau de zoom, la réduction de la taille des sphères (pour visualiser l'intérieur des mailles et retrouver des modélisations ressemblant plus aux modèles cristallins classiques) ; on peut également, dans certains cas, visualiser les sites interstitiels de différentes façons.
- Cliquer sur « Sim » dans la colonne de gauche pour revenir au mode « Simulation ».

Plan d'étude suggéré :

a) Métaux : Fer et acier (cf. exercice 3)

- Charger le « fer alpha » depuis la collection. Vérifier les paramètres en comparant à l'exercice.
- Visualiser la maille, avec les sphères en tangence, puis avec les sphères réduites (25%). Revenir aux sphères en tangence.
- Placer un atome de carbone de rayon 77 pm au centre d'un interstice octaédrique déformé. Visualiser et conclure.
- Dans un autre interstice du même type, placer une sphère ayant le rayon théorique R' calculé dans l'exercice pour respecter l'habitabilité du site. Visualiser la différence avec le carbone.
- Charger le « fer gamma » depuis la collection et visualiser.

- Corriger éventuellement le rayon métallique pour obtenir la tangence des sphères et la compacité correcte.
- Visualiser la maille. Reconnaître les plans d'empilements compacts ABC. Visualiser les sites octaédriques et tétraédriques (ils doivent être cochés dans le mode « Simulation » pour pouvoir être affichés quand on clique droit en-dehors d'un atome dans le mode « Graphe 3D »).
- Retirer les interstices puis procéder avec le carbone et l'atome R' comme pour le « fer alpha » précédemment.

b) Métaux : Magnésium (cf. exercice 1)

- Charger la maille du magnésium et vérifier la valeur du rapport c/a que l'on a calculée dans l'exercice 1, ainsi que la compacité. Commenter.
- Visualiser la maille, ainsi que les positions des centres des sites tétraédriques et octaédriques. Faire le lien avec les plans d'empilement ABA.

c) Cristaux covalents : graphite et diamant (cf. exercice 5)

- Charger la maille du graphite et la visualiser, en fixant le rayon des atomes de carbone à leur rayon covalent ou bien à leur rayon de van der Waals.
- Charger la maille du diamant et la visualiser. Cliquer sur un atome intérieur, localiser les plus proches voisins et les colorer.
- Modifier le paramètre a en a' pour transformer la maille du carbone diamant en celle de silicium... visualiser et modifier le rayon des atomes pour retrouver la tangence.

d) Cristaux moléculaires : la glace I (cf. exercice 7)

- Charger la maille de glace I (hexagonale) et reprendre les questions de l'exercice en utilisant la visualisation.

e) Cristaux moléculaires : le diiode

- Charger la maille de diiode. Visualiser. Repérer les deux plus proches voisins d'un atome d'iode donné. Définir les rayons covalent et de van der Waals de l'iode et comparer les visualisations correspondantes.

f) Cristaux ioniques : NaCl et CsCl (cf. exercice 8)

- Charger le cristal NaCl : le visualiser, localiser les ions à partir de structures connues... déterminer les coordinences.
- Corriger les rayons pour s'adapter à l'exercice 8 : trouver tout d'abord, par tâtonnement, le bon paramètre a permettant d'obtenir la masse volumique expérimentale mentionnée. Corriger ensuite le rayon R_{Na^+} avec la valeur de l'énoncé. Calculer alors R_{Cl^-} , l'entrer et visualiser la tangence anion/cation et la non tangence des anions entre eux.
- Diminuer progressivement le rayon de cation et augmenter celui de l'anion, pour que le paramètre a soit inchangé. Que constate-t-on si le cation devient trop petit par rapport à l'anion ?
- Charger le cristal CsCl et procéder de même pour terminer l'exercice.

g) Continuer avec les autres exercices... et avec l'approche documentaire sur les défauts cristallins dans NaCl

Le lycée étant détenteur d'une licence, vous pouvez y utiliser le logiciel ChimGéné.

Page de téléchargement : <https://chimsoft.com/chimsoft/chimgene/telecharger-chimgene>

Grille d'évaluation TP n°18

Compétences générales		A	B	C	D
Réaliser	Utiliser un logiciel avec aide puis en autonomie				
Valider	Confronter un modèle à des résultats expérimentaux				

Capacités spécifiques
Utiliser un logiciel pour visualiser des mailles et des sites interstitiels et pour déterminer des paramètres géométriques