

TP N° 02: Structure Cristalline-2 (Composés ioniques)

Introduction:

Généralement, les matériaux cristallins et les cristaux ioniques (Ex: NaCl, CsCl ...) sont des solutions solides constituées par un mélange homogène de deux éléments différents (au minimum). L'élément de base A, appelé solvant et l'élément B, appelé soluté, passe dans le réseau. Ce dernier peut occuper des sites substitutionnels ou interstitiels.

On appelle sites interstitiels, les espaces vides situés entre les atomes du réseau cristallin. Ces sites servent de locaux pour les atomes de petit diamètre. Il existe deux types de sites interstitiels : les sites tétraédriques et les sites octaédriques.

Les sites octaédriques sont formés par six sphères disposées suivant les sommets d'un octaèdre. Par contre les sites tétraédriques sont formés par empilement compact de quatre sphères formant un tétraèdre.

Objectifs:

- ✓ Avoir une idée théorique sur la solution solide d'insertion
- ✓ Connaître les différents types d'interstices dans les structures cristallines les plus connues
- ✓ Connaître quelques cristaux ioniques tels que, NaCl et ZnS et le diamant
- ✓ Construire des différents composés ioniques à l'aide du logiciel "CARINE"

Partie théorique:

La description géométrique des sites tétraédriques et octaédriques dans les structures, cubique centré (CC) et cubique à faces centrées (cfc) est présentée dans la figure 1.

La définition géométrique de quelques composés ioniques (NaCl, CsCl et ZnS) est illustrée dans la figure 2. On peut remarquer que les atomes Na, Zn et Cs prennent des positions interstitielles bien définies dans la maille (soit octaédriques ou tétraédriques).

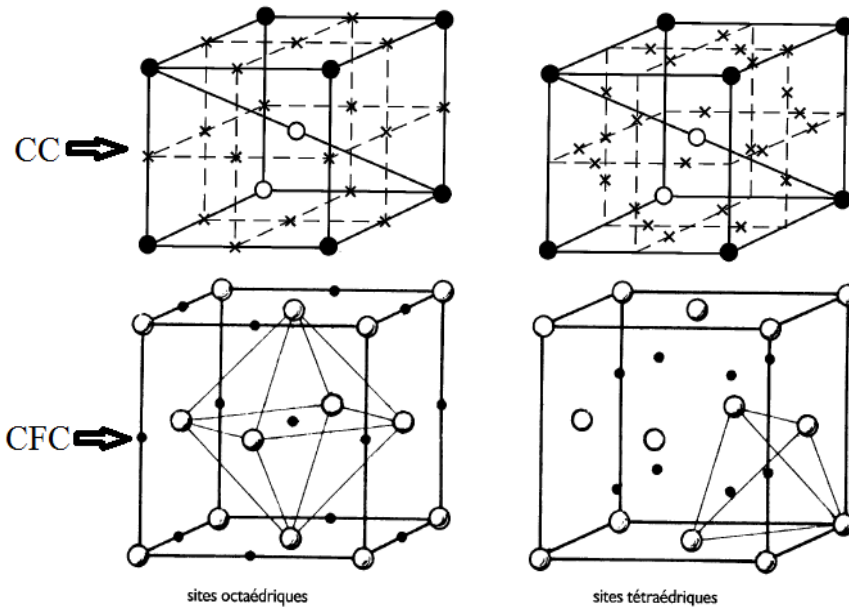


Figure 1: Sites interstitiels (Octaédrique et tétraédrique) dans les structures CC et CFC

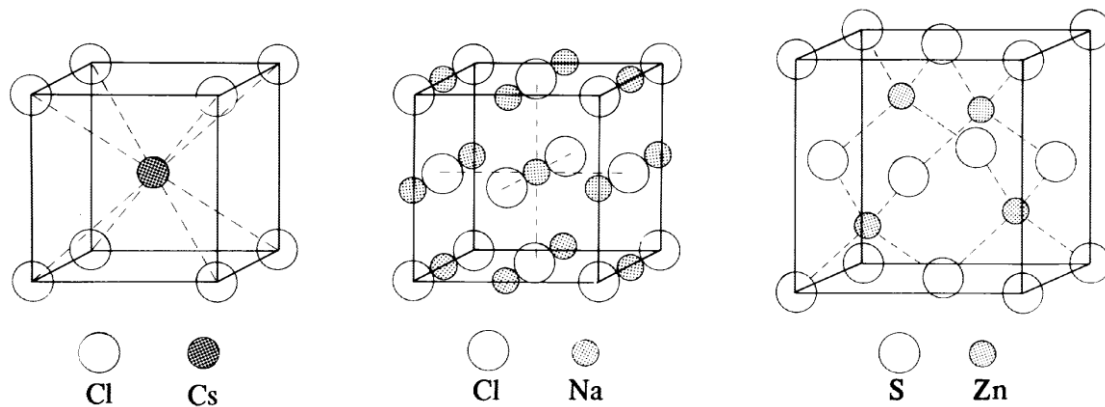


Figure 2: Structure cristalline des trois composés ioniques CsCl, NaCl et ZnS

Partie expérimentale:

3- Soit l'élément Ba (Barium) de structure cubique à faces centrées (mettre $a = 8\text{Å}$), on essaye d'insérer l'élément O (Oxygène) dans tous les interstices octaédriques dans la structure du Ba.

* Les positions de l'éléments Ba (A) sont: $(0,0,0)$, $(0,1/2,1/2)$, $(1/2,0,1/2)$ et $(1/2,1/2,0)$.

* Les positions de l'éléments O (i) sont: $(1/2,1/2,1/2)$, $(1/2,0,0)$, $(0,1/2,0)$ et $(0,0,1/2)$.

- Charger les positions atomiques de Ba et O et visualiser cette structure en utilisant CARINE.

- Déterminer le nombre de coordination et la distance correspondante du premier proches voisins de A/i et i/A.

- Calculer le rapport R_i / R_A . A qui ressemble cette structure?

4- Le diamant se cristallise se forme de structure cubique à faces centrées ($a = 3.58 \text{ \AA}$) dans des conditions très spéciales (à haute pression et à température très élevée). Les positions atomiques du carbone dans cette maille sont: $(0,0,0)$, $(1/2,1/2,0)$, $(1/2,0,1/2)$, $(0,1/2,1/2)$ et $(1/4,1/4,1/4)$, $(3/4,3/4,1/4)$, $(3/4,1/4,3/4)$, $(1/4,3/4,3/4)$.

- Etablir cette maille à partir les positions atomiques.
- Quel est le type interstitiel occupé par certains atomes dans cette maille? Préciser leurs positions?
- Calculer le rapport R_i / R_A
- Déterminer le coordination et la distance correspondante du premier proches voisins pour l'atome situé à $(0,0,0)$.

Annexe

En utilisant CARINE, on peut établir une maille quelconque à partir leur positions atomiques comme suivant:

- Cell
- Création / list

