

TD informatique de cristallographie

I Utilisation du logiciel ChimGéné (mode d'emploi simplifié)

Lancer le logiciel et choisir Simulation puis Cristallographie. Dans la colonne de gauche ou les onglets du haut, 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.

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» dès que possible. Choisir en premier exemple une structure cfc de l'argent. Les paramètres du dessin sont alors indiqués.
 - Noter qu'on peut choisir de faire visualiser plusieurs mailles (par exemple on en affiche 8 en augmentant à 2 le nombre de translations selon x, y et z).
 - Noter qu'on peut choisir de faire visualiser les sites interstitiels. Choisir par exemple de faire visualiser les sites octaédriques dans un premier temps pour la structure cfc de l'argent
 - Noter que l'on peut choisir de ne pas faire visualiser certains atomes ou ions en décochant la case correspondante.
- 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 observer et 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. Les observer pour l'argent.
Notez que la masse volumique est recalculée en temps réel dès que l'on modifie un paramètre de maille. La noter pour l'argent.
 - 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, cliquer sur «Tracer». L'affichage passe automatiquement dans le mode Graphe 3D.

Mode «Graphe 3D» :

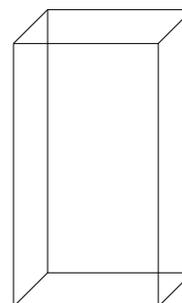
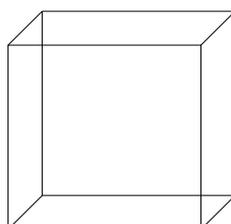
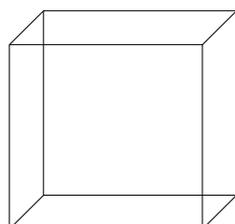
- Déplacer la maille avec la souris pour la visualiser comme on le souhaite. On peut appuyer simultanément sur la touche Ctrl pour faire des rotations autour d'axes horizontaux ou verticaux.
- Cliquer droit sur un atome pour déterminer tous ses voisins ainsi que leur distance. On peut ainsi s'assurer de la coordinence d'un élément vis-à-vis d'un autre. On peut à cette occasion modifier les couleurs pour distinguer certains atomes (voir sujet)
- 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, utiliser « affichage » avec un rayon de 50 ou 25%, le faire pour la structure cfc de l'argent) ;
- Cliquer sur «Sim» dans la colonne de gauche pour revenir au mode «Simulation»

II Travail à affectuer

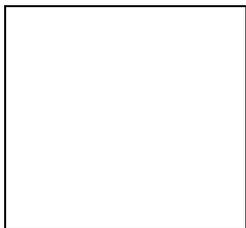
1) Etude des structures cc, cfc et hc

* Représenter à l'écran les mailles élémentaires pour le fer α (cc), l'argent (cfc) et le magnésium (hc).

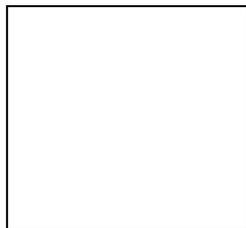
* Positionner les nœuds dans la maille et préciser combien de nœuds contient chaque maille



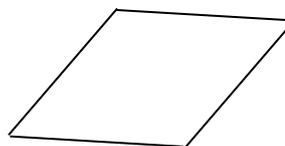
* Représenter par ces trois structures la projection vue de dessus d'un modèle éclaté en utilisant des couleurs différentes pour les différents plans occupés. On précisera l'altitude de chacun des plans en fonction du paramètre de maille ainsi que les angles dans la structure hexagonale compacte (à aller chercher grâce au logiciel). Vous pouvez, en utilisant le clic droit sur un atome, faire disparaître un atome qui vous empêche de voir ce qu'il y a derrière.



Cubique centré



Cubique faces centrées

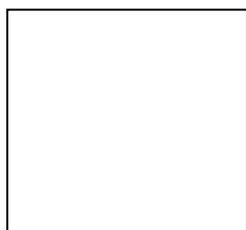


Hexagonal compact

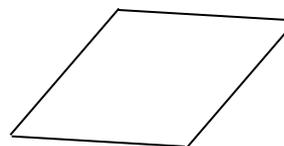
* Recommencer avec un modèle compact (on ne représentera que le plan supérieur cette fois-ci).



Cubique centré



Cubique faces centrées



Hexagonal compact

2) Plan de compacité maximum

* Afficher 8 mailles de la structure hc. L'empilement des plans compacts se fait-il de façon ABABABABA ou ABCABCABC ? Faites visualiser en couleur ces plans en cliquant droit sur un sommet de la structure et en choisissant option. Les plans à colorier sont spécifiés par leur équation. Par exemple, le plan horizontal le plus inférieur est le plan d'équation $z = 0$ soit $0x + 0y + 1z = 0$

* Afficher 8 mailles de la structure cfc. L'empilement des plans compacts se fait-il de façon ABABABABA ou ABCABCABC ? Faites visualiser en couleur ces plans en cliquant droit sur un sommet de la structure et en choisissant option. Les plans à colorier sont spécifiés par leur équation.

- Choisir un 1^{er} plan : $x + y + z = 1$
- Choisir un 2^{ème} plan : $x + y + z = 2$
- Choisir un 3^{ème} plan : $x + y + z = 3$
- Puis étêter

Montrer que ce sont les plans de compacité maximum ; comparer ces plans avec les plans correspondant aux faces du cube.

Montrer aux professeurs vos conclusions écrites de cette partie et la structure cfc avec ses plans colorés de compacité maximale.

3) Sites interstitiels

Pour la structure hc, on parle de « colonnes de sites octaédriques » et de « colonnes de sites tétraédriques ».

Utiliser le logiciel pour mettre en évidence la justesse de ces affirmations. Appeler le professeur pour lui montrer les résultats.

Qu'en est-il de la structure cfc ? Faire le même travail de visualisation.

4) Cristal Cu₂AlMn

Dans la bibliothèque, utiliser une structure type NaCl et dérivées et choisir l'alliage Cu₂AlMn. Grâce au logiciel (notamment en supprimant la visualisation de certains atomes) :

- Trouver la structure cristalline adoptée par les 3 éléments pris séparément ; on pourra utiliser la représentation de deux mailles simplement.
- Trouver alors les sites interstitiels occupés par les éléments vis-à-vis des deux autres pris séparément.
- Retrouver la coordinence de chacun des éléments vis-à-vis de lui-même et vis-à-vis des deux autres séparément.
- Par le calcul, retrouver la masse volumique et la compacité de cet alliage fournies par le logiciel.

Si le temps le permet, reprendre les exemples des exercices vus ensemble notamment la fluorine CaF₂ présente dans la collection.