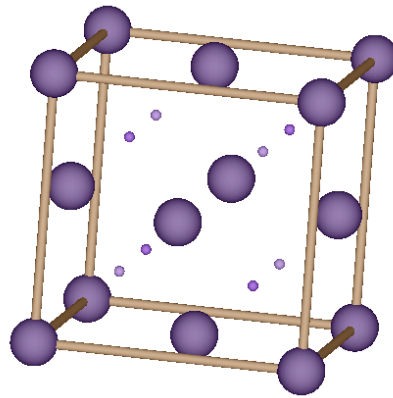


TP 2 Chimie : ChimGéné



Réalisé

par :

Barkache Chaimae N40

Ben Hssain Fatima Ezzahrae N48

Encadré par : Prof S. EL KHATTABI



Travaux pratiques

Modèles cristallins illustrés par le logiciel ChimGéné

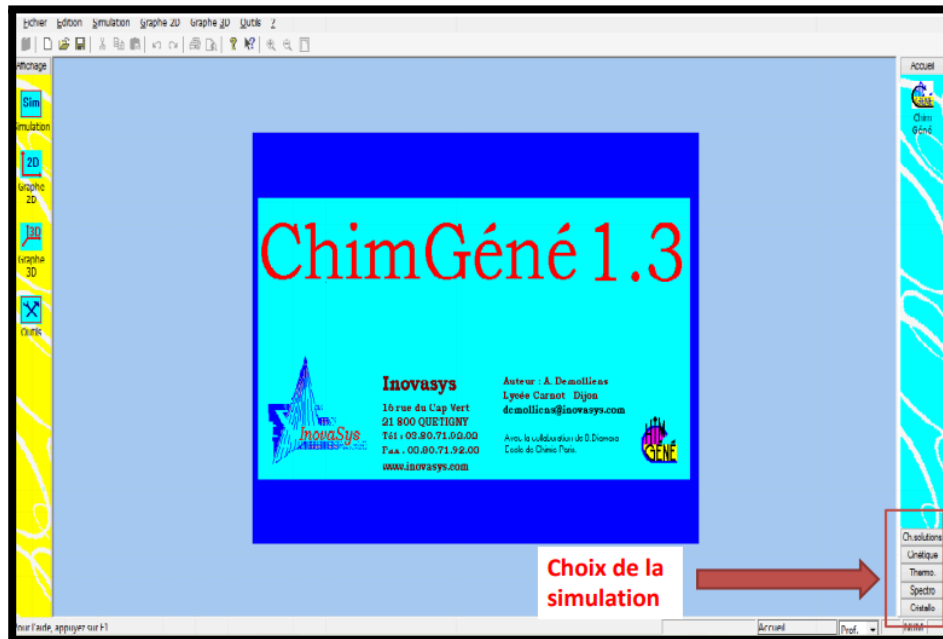
Objectif du TP :

Ce TP vise à visualiser les mailles cristallines, étudier les sites interstitiels, ainsi que déterminer les paramètres géométriques.

On outre, lors du travail, on souhaite maîtriser nos connaissances à propos des critères par lesquelles sont régies les solides cristallins (la coordinance, la compacité, la multiplicité...).

Méthodologie :

- ChimGéné, logiciel intégré dédié à la Chimie Générale, permet, sous une interface de saisie et de traitement la plus commune possible d'un module à l'autre, de nombreuses simulations en chimie générale.
- Lancer le logiciel ChimGéné (menu démarrer Chimgéné ou icône du bureau). Voici la fenêtre principale du logiciel.

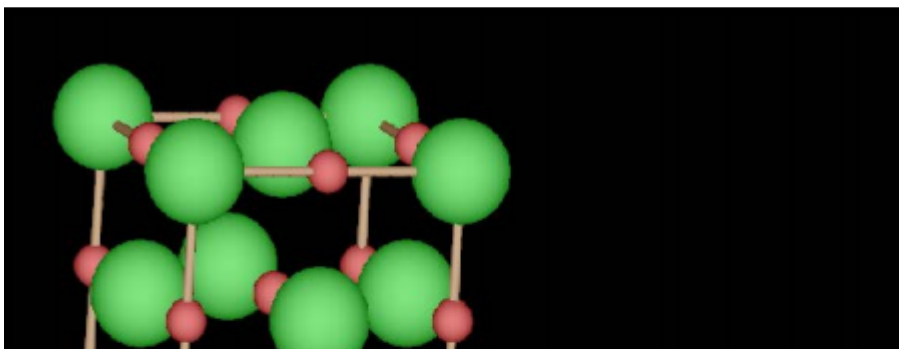


- Une fois cliqué sur « Cristallo » (Module cristallographique) dans le



choix de la simulation **Cristal**, on clique sur « simulation étudiée ».

- On peut tout programmer dans la page ci-dessus : le type de Cristal, la formule, le nombre des nœuds, le rayon des atomes, leurs couleurs...
- En retournant à la page précédente, on clique sur **Tracer** qui permet de représenter le cristal en 3D.



On peut modifier la structure du Cristal en cliquant sur le bouton droit :
« Affichage » ou « Sites ».

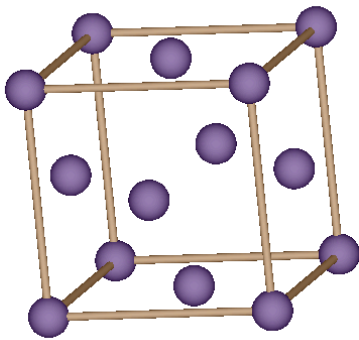
Questionnaire :

A l'aide du logiciel de simulation Chimgéné, étudier les structures cristallines suivantes :

A- Structures métalliques :

Les métaux Cu, Ca, Ag, Pd cristallisent dans un système cubique à faces centrées :

1- Construire la maille Cu :



C'est une maille cubique à faces centrées .

2- Nombre de motif :

$$Z = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4 \text{ motif/maille}$$

—	g/mol	Multiplicité :	4	Volume (maille) :	1.0	10 ⁻³⁰ .m3
☒ Covalent ☐ Moléculaire				Masse volumique :	—	kg/m3
				Compacité :	74.0	%

3- Les coordonnées réduites des atomes :

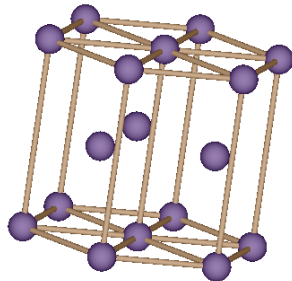
$$(0, 0, 0), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right), \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

4- La compacité du Cu:

$$C = \frac{Z \times V}{a^3} = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi R^3}{(2\sqrt{2}R)^3} = 74.7 \%$$

Les métaux Zn, Hg, Cd cristallisent dans un système hexagonal compact.

1- Construire la maille de Zn (base hexagonal) :



2- Le nombre d'atomes par maille :

$$Z = 12 \times \frac{1}{6} + 2 \times \frac{1}{2} + 3 \times 1 = 2 + 1 + 3 = 6$$

3- La coordinence de Zn :

Zn est entouré par 6 atomes dans le même plan, 3 atomes au-dessus et 3 atomes au-dessous, soit 12 atomes au total.

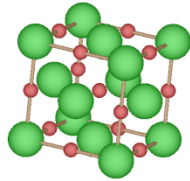
La coordinance est donc : **12**

B- Structures ioniques :

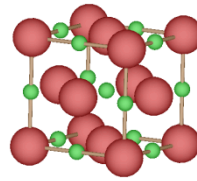
Pour toutes les structures ioniques suivantes : NaI, ZnS blende et CaF₂.

1- *La maille élémentaire des structures :*

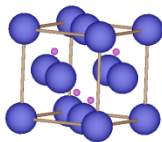
NaI l'anion a l'origine



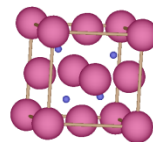
NaI cation a l'origine



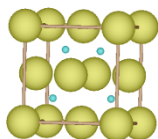
ZnS blend l'anion a l'origine:



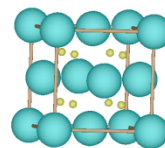
ZnS blend cation a l'origine:



CaF₂ l'anion a l'origine:



CaF₂ cation a l'origine



2- *Les coordonnées réduites de chaque ion :*

NaI I⁻ a l'origine

I⁻: (0, 0,0) ; (0,1/2,1/2) ; (1/2, 0,1/2) ; (1/2,1/2,0)

Na⁺: (0, 0,1/2) ; (0,1/2,0) ; (0, 0,1/2) ; (1/2,1/2,1/2)

Na⁺ a l'origine

$\text{Na}^+:(0, 0,0) ; (0,1/2,1/2) ; (1/2, 0,1/2) ; (1/2,1/2,0)$

$\text{I}^-:(0, 0,1/2) ; (0,1/2,0) ; (0, 0,1/2) ; (1/2,1/2,1/2)$

ZnS blend S^{2-} à l'origine

$\text{S}^{2-}:(0,0,0) ; (0,1/2,1/2) ; (1/2,0,1/2) ; (1/2,1/2,0)$

$\text{Zn}^{2+}:(1/4,1/4,1/4) ; (3/4,3/4,1/4) ; (1/4,3/4,3/4) ; (3/4,1/4,3/4)$

Zn^{2+} à l'origine

$\text{Zn}^{2+}:(0, 0,0) ; (0,1/2,1/2) ; (1/2, 0,1/2) ; (1/2,1/2,0)$

$\text{S}^{2-}:(1/4,1/4,1/4) ; (3/4,3/4,1/4) ; (1/4,3/4,3/4) ; (3/4,1/4,3/4)$

CaF_2 F^- à l'origine

$\text{F}^-:(0, 0,0) ; (1/2,1/2,0) ; (1/2, 0,1/2) ; (0,1/2,1/2) ; (1/2, 0,0) ; (0,1/2,0) ; (0, 0,1/2)$

$\text{Ca}^{2+}:(1/4,1/4,1/4) ; (1/4,3/4,3/4) ; (3/4,1/4,3/4) ; (3/4,3/4,1/4)$

Ca^{2+} à l'origine

$\text{Ca}^{2+}:(0, 0,0) ; (0,1/2,1/2) ; (1/2, 0,1/2) ; (1/2,1/2,0)$

$\text{F}^-:(1/4,1/4,1/4) ; (3/4,3/4,1/4) ; (1/4,3/4,3/4) ; (3/4,1/4,3/4) ; (1/4,1/4,1/4) ; (1/4,3/4,3/4) ; (3/4,1/4,3/4) ; (3/4,3/4,1/4)$

3- Les plus courtes distances entre ions :

Pour NaI

$\text{Dis}(\text{Na}^+; \text{I}^-)=a/2$

Et on a : **$\text{dis}(\text{I}^-; \text{I}^-)=a\sqrt{2}/2$ et $\text{dis}(\text{Na}^+; \text{Na}^+)=a/2$**

Pour ZnS blend

$\text{Dis}(\text{Zn}^{2+}; \text{S}^{2-})=a\sqrt{3}/4$

Et on a : $\text{dis}(\text{S}^{2-}; \text{S}^{2-})=a\sqrt{2}/2$ et $\text{dis}(\text{Zn}^{2+}; \text{Zn}^{2+})=a\sqrt{2}/2$

Pour CaF_2

$\text{dis}(\text{Ca}^{2+}; \text{F}^-)=a\sqrt{3}/4$

Et on a : $\text{dis}(\text{Ca}^{2+}; \text{Ca}^{2+}) = a\sqrt{2}/2$ et $\text{dis}(\text{F}^-; \text{F}^-) = a/2$

4- La coordinance de chacun des ions par rapport aux ions de charge opposée :

Pour NaI

Chaque I^- est entouré de 6 Na

Chaque Na^+ est entouré de 6 I

Alors la coordinance est 6-6

Pour ZnS blend

Chaque Zn^{2+} est entouré par 4 S

Chaque S^{2-} est entouré par 4 Zn

Alors la coordinance est 4-4

Pour CaF_2

Chaque Ca^{2+} est entouré de 8 F^-

Chaque F^- est entouré de 4 Ca^{2+}

Alors la coordinance est 8-4

Conclusion :

Pour conclure, on peut dire que la manipulation a été bien faite ; le logiciel nous a permis de nous approfondir dans le domaine de la cristallographie et nous a facilité la tâche de trouver les grandeurs suivantes : la multiplicité, la compacité... Etc.