



Professeurs référents : M.Alban Ferrier

Polytech Sorbonne : Spécialité MTX

Rapport de projet pour le 27/10/2023

Sofya MKHITARYAN-DONNAT

VISUALISATION EN CRISTALLOGRAPHIE AVEC LOGICIEL VESTA

Table des matières

Introduction.....	1
Description.....	1
Application.....	2
Annexes.....	2

Introduction

Les structures cristallines peuvent être représentées avec le modèle de sphères dures. Ce modèle peut être difficile à exploiter quand les structures étudiées deviennent complexes avec un grand nombre d'atomes. Dans ce cas il est intéressant d'utiliser le logiciel comme Vesta qui nous permet d'étudier et de visualiser le réseau.

Description

Le système cristallin ici peut être décrit comme une maille cubique F de paramètres : $a=b=c=8,48212 \text{ \AA}$.

On a 3 atomes différents dans la mailles présentant pour certain une occurrence. Cela représente la probabilité de trouver un atome sur une position donné, cela va jouer un rôle dans le comptage de Z, le nombre d'atomes par maille :

$$Z(\text{O}) = 32$$

$$Z(\text{Li}) = 16 \cdot 0,833 + 32 \cdot 0,034 = 14,368$$

$$Z(\text{Ti}) = (8 \cdot 1/8 + 6/2 + 4) \cdot 0,860 = 6,88$$

$$Z_{\text{maille}} = 53,248$$

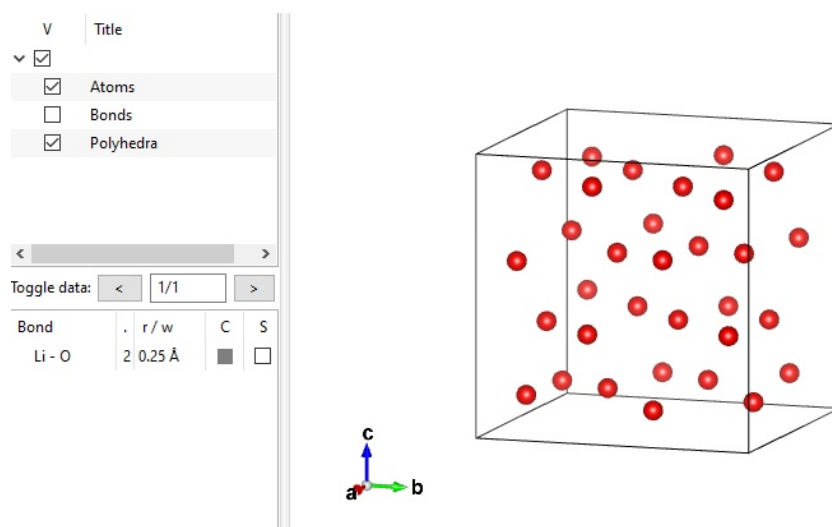


Figure 1 : Exemple de la visualisation utilisée pour compter de Z(O)

Ainsi il est possible de donner la formule simplifiée du composé en s'appuyant sur le mode de réseau et les sites tétraédriques occupés. $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$

Le calcul de densité nécessite de calculer tout d'abord la masse volumique ρ :

$$\rho = \frac{Z \cdot M}{N_A \cdot V(\text{maille})} = (512 + 100,576 + 330,24) / (6,022 \cdot 10^{23} \cdot 610,258 \cdot 10^{-30}) = 2,56 \text{ g.cm}^{-3}$$

$$d = \frac{\rho}{\rho(\text{eau})} = 2,56$$

La valence et coordinance pour :

O : Valence = 2 , Coord.= 4

Li : Valence = 1 , Coord.= 4

Ti : Valence = 4 , Coord.= 4

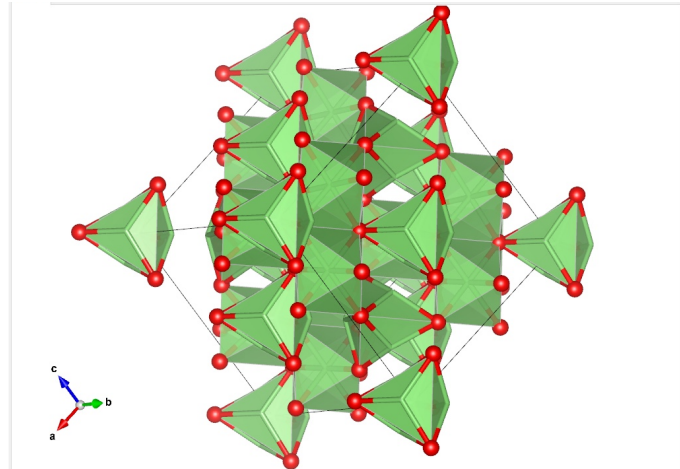


figure 2 : Empilement de polyèdres

On en déduit la valence en écrivant la configuration électronique des atomes. La coordinance est le nombre de premiers voisins qu'on retrouve visuellement sur Vesta.

Propriétés et Applications :

L'alliage titanate de lithium est un matériau utilisé dans les accumulateurs avec une durée de vie moyenne de 10 ans et avec plus de 6000 cycles de recharge, ce qui est 10x supérieur aux nombre de cycles des accumulateurs standards.

Annexes

Bibliographie :

- [Thèse de Claire JAMIN 2013/2014 : Synthèse et étude du composé Li4Ti5O12](#)
- [Lithium titanate Wikipedia](#)