

Visualisation en cristallographie

Professeurs référents : M.Alban Ferrier

Polytech Sorbonne
Spécialité MTX

Rapport de projet pour le 27/10/2023

Simon THIBAUD

Table des matières

Introduction	1
Description	1
Propriétés et Applications	2
Annexes	3

Table des figures

1	Vue de la maille selon un plan	1
2	Occurence de chacun des atomes au centre de la maille	1
3	Vue 3D de la maille cristalline	2

Introduction

Bien que le modèle des sphères dures soit assez complet et permette de modéliser simplement la matière à l'échelle atomique, certaines mailles cristalline sont plus complexe que les modèles basiques vu en cours. Dans ce document, nous introduirons alors une maille cristalline un peu plus complexe, dans le but d'introduire à la visualisation en cristallographie.

Description

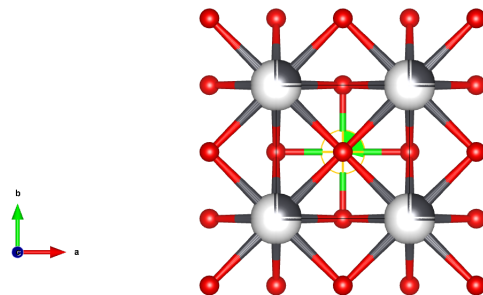


FIGURE 1 – Vue de la maille selon un plan

Notre maille est composé d'atomes d'oxygènes (en rouge) et d'atomes de plomb (en blanc et gris). Le centre de la maille est quant à lui constitué d'atomes de Titane et de Zirconium. En effet, cette maille comporte plusieurs atomes au même emplacement de maille, pour signifier que chacun des atomes a une occurrence plus ou moins importante sur cet emplacement de maille.

		Occ. = 0.300	Ueq = 0.00710	1b	4mm
Atom: 2	Zr1 Zr	0.50000	0.50000	0.56040	(0, 0, 0) + x, y, z
	(x, y, z):	1.98901	1.98901	2.32497	
		Occ. = 0.300	Ueq = 0.00710	1b	4mm
Atom: 3	Ti1 Ti	0.50000	0.50000	0.54680	(0, 0, 0) + x, y, z
	(x, y, z):	1.98901	1.98901	2.26855	
		Occ. = 0.700	Ueq = 0.00710	1b	4mm

FIGURE 2 – Occurrence de chacun des atomes au centre de la maille

Remarquons que la maille de ce solide est un CFC où les sommets sont occupés par les atomes de plomb et les faces sont occupés par les atomes d'oxygène. Le zirconium et le titane occupent quant à eux le centre de ce cube, avec chacun une occurrence distincte. Ainsi, on peut calculer le nombre de chacun des atomes :

$$Z_{\text{O}} = 6 \times \frac{1}{2} = 3 \quad Z_{\text{Pb}} = 8 \times \frac{1}{8} = 1 \quad Z_{\text{Ti}} = 0,7 \quad Z_{\text{Zr}} = 0,3$$

Ce cristal est donc de la forme $\text{PbTi}_{0,7}\text{Zr}_{0,3}\text{O}_3$.

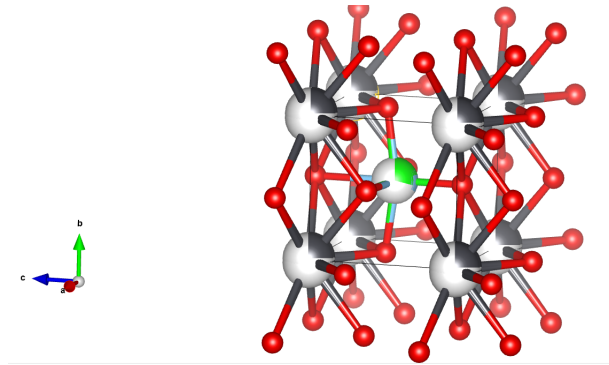


FIGURE 3 – Vue 3D de la maille cristalline

On rappelle la formule de la masse volumique :

$$\rho = \frac{Z \times M}{N_A \times V_{\text{maille}}}$$

Dans notre cas on a donc :

$$\rho = \frac{Z_{\text{O}}M_{\text{O}} + Z_{\text{Pb}}M_{\text{Pb}} + Z_{\text{Ti}}M_{\text{Ti}} + Z_{\text{Zr}}M_{\text{Zr}}}{N_A \times a^2c}$$

Application numérique. $\rho = \dots$

Grâce à la vue en 3D de la maille cristalline, il est simple de trouver la coordinence des atomes de cette maille : La coordinence du plomb est de 8 et la coordinence du Ti/Zr est de 6.

Propriétés et Applications

Dans l'industrie, ce matériaux se nomme le PZT (titano-zirconate de plomb). C'est un matériaux comportant plusieurs propriétés intéressantes, il est notamment *piézoélectrique*, c'est à dire qu'il génère une tension en réponse à une contrainte mécanique, c'est aussi un matériaux avec une permittivité relative extrêmement élevée ($\epsilon_r \approx 1000$), ce qui le rend très utile dans les domaines de l'électromagnétique. Egalement, le PZT est très stable thermiquement, ce qui lui permet de résister à un large spectre de températures. Par tout ces aspects, le PZT est principalement utilisé dans l'élaboration de composants électroniques, notamment des condensateurs céramiques ou il est présent dans une forme dopée en éléments accepteurs d'électrons.

Annexes

Bibliographie

- Siliconsensing : Fabrication de PZT (consulté le 24/10/2023)
- FuturaScience : Description du PZT (consulté le 24/10/2023)
- Wikipedia : Applications industrielles du PZT (consulté le 24/10/2023)
- Justia Patent : Semiconductor Devices (consulté le 24/10/2023)
- Cours de Cristallographie MTX3 2023 de M.Alban Ferrier (consulté le 24/10/2023)