

# SOLIDES CRISTALLINS

## Exercices

### 1 Cristal de diiode

Le diiode  $I_2$  cristallise suivant un système orthorombique à faces centrées. Les paramètres de maille sont :  $a = 725 \text{ pm}$  ;  $b = 977 \text{ pm}$  ;  $c = 478 \text{ pm}$ . On donne également la constante d'AVOGADRO  $N_A = 6,022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$  et la masse molaire atomique  $M(I) = 126,9 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ .

1. Quelle est la nature du cristal de diiode ?
2. Quelle est la multiplicité de la maille conventionnelle du diiode ?
3. Quelle est la densité du diiode solide ?

### 2 Structure cristallographique du niobium

Le niobium Nb ( $Z=41$ ) cristallise à température ambiante dans une structure cubique centrée, de paramètre de maille  $a = 330 \text{ pm}$ . On donne également la constante d'AVOGADRO  $N_A = 6,022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$  et la masse molaire atomique  $M(\text{Nb}) = 92,0 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ .

1. Représenter la structure du niobium.
2. Déterminer la multiplicité  $Z$  de la maille.
3. Calculer la masse volumique  $\rho$  du niobium.
4. Déterminer le rayon atomique  $R$  du niobium (le contact entre sphères dures est selon la grande diagonale du cube).
5. Calculer la compacité  $C$  de la structure.

### 3 Structure d'un alliage du titane $\text{Al}_x\text{Ni}_y\text{Ti}_z$

L'alliage le plus utilisé dans l'industrie aéronautique a pour formule brute  $\text{Al}_x\text{Ni}_y\text{Ti}_z$ . Le titane (Ti) est y présent sous forme  $\beta$  : il cristallise sous la forme cubique faces centrées. Les atomes d'aluminium (Al) occupent la totalité des sites octaédriques, et les atomes de nickel (Ni) occupent les sites tétraédriques. Le paramètre de maille de la structure vaut  $a = 589 \text{ pm}$ . On donne également la constante d'AVOGADRO  $N_A = 6,022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ , et les informations suivantes :

Atome	Rayon atomique (pm)	Masse molaire atomique ( $\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$ )
Ti	147	47,90
Al	143	26,98
Ni	124	58,70

1. Représenter la maille de cet alliage.
2. Déterminer la formule de l'alliage.
3. Calculer l'habitabilité des sites tétraédriques et octaédriques. L'inversion d'occupation est-elle possible ?
4. Calculer la compacité de cet alliage.
5. Calculer la masse volumique de cet alliage.
6. En moyenne, un acier a une masse volumique  $\rho = 7800 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$  et une compacité  $C = 0,70$ . Pour des propriétés mécaniques équivalentes, pourquoi l'alliage de titane est-il plus intéressant ?

## 4 Sulfure de plomb : la galène

Le procédé d'élaboration du plomb repose sur l'extraction et la transformation du minerai  $\text{PbS}$ , appelé galène, qui possède une structure de type chlorure de sodium ( $\text{CsCl}$ ). On donne la masse volumique de la galène  $\rho = 7400 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ , la constante d'AVOGADRO  $N_A = 6,022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$  et la masse molaire de  $\text{PbS}$   $M = 114 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$

1. Représenter la maille de la galène.
2. Donner la coordinence des ions dans cette structure.
3. Exprimer et calculer le paramètre de maille  $a$  de la galène.
4. Peut-on prévoir une structure de type  $\text{CsCl}$  pour la galène, connaissant les valeurs des rayons ioniques :  $r_{\text{Pb}^{2+}} = 118 \text{ pm}$  ;  $r_{\text{S}^{2-}} = 184 \text{ pm}$  ?

## 5 Structure cristalline de l'arséniure de gallium

L'arséniure de gallium cristallise selon une structure de type sphalérite ( $\text{ZnS}$ ) dans laquelle les atomes d'arsenic ( $\text{As}$ ) forment un réseau cubique faces centrées, les atomes de gallium ( $\text{Ga}$ ) occupant certains sites tétraédriques. On donne également la constante d'AVOGADRO  $N_A = 6,022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ , et les informations suivantes :

Atome	Rayon atomique (pm)	Masse molaire atomique ( $\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$ )
Ga	126	69,7
As	119	74,9

1. Représenter la maille de l'arséniure de gallium. Combien y a-t-il d'atomes d'arsenic par maille ?
2. Représenter un site tétraédrique. Combien la maille possède-t-elle de sites tétraédriques ? Quelle est la proportion de ces sites occupée par des atomes de gallium ?
3. On donne le paramètre de maille  $a = 566 \text{ pm}$ , calculer la masse volumique de l'arséniure de gallium.
4. Déterminer l'habitabilité  $r_t$  des sites tétraédriques en fonction de  $a$  et du rayon atomique de l'arsenic  $r_{\text{As}}$ . Comparer  $r_t$  au rayon atomique de gallium  $r_{\text{Ga}}$  et conclure.