

Solides cristallins

/11 [1] **Dessiner** la maille cubique faces centrées et donner le lieu de tangence. Réaliser sa caractérisation complète (population, coordinence, rayon atomique, compacité, masse volumique : **définition** puis formule).

◇ **Population** : 8 atomes sur les sommets et 6 sur les faces, soit

$$N = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$$

◇ **Coordinence** : chaque atome voit les voisins sur les **petites diagonales des faces**. On a donc une coordinence de **12**.

◇ **Rayon atomique** : on a tangence sur les **petites diagonales**, soit

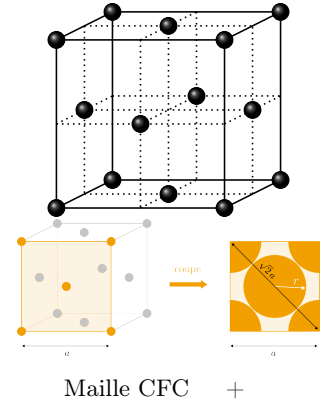
$$r + 2r + r = a\sqrt{2} \Leftrightarrow 2r\sqrt{2} = a$$

◇ **Compacité** :

$$C = \frac{NV_1}{V} = \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{16\sqrt{2}r^3} \Leftrightarrow C = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0,74$$

◇ **Masse volumique** :

$$\rho = \frac{\text{masse des motifs}}{\text{volume de la maille}} \Leftrightarrow \rho = \frac{4M}{N_A \times a^3}$$



/11 [2] Justifier alors l'existence des sites interstitiels. Donner **sans schéma** les positions et la population des sites T et O de la structure CFC, et déterminer leurs habitabilités en fonction de r le rayon des sphères principales.

◇ **Justification** : Même dans les mailles compactes, il reste du vide et toutes les sphères ne se touchent pas : on peut insérer de **plus petites entités** entre les entités principales d'une CFC.

Sites tétraédriques

◇ **Position** : au centre des petits cubes d'arête $a/2$.

◇ **Population** : il y a 8 petits cubes et les entités sont dans le volume, soit $N_T = 8$.

◇ **Habitabilité** : On a tangence sur la moitié de la grande diagonale du petit cube :

$$\begin{aligned} r + r_T &= \frac{a\sqrt{3}}{4} \Leftrightarrow r_T = \frac{a\sqrt{3}}{4} - r \\ &\Leftrightarrow r_T = \left(\sqrt{\frac{3}{2}} - 1 \right) r \approx 0,225r \end{aligned} \quad a = 2r\sqrt{2}$$

Sites octaédriques

◇ **Position** : au centre de chaque arête et 1 au centre.

◇ **Population** : 12 arêtes et 1 centre, soit $N_O = 1 + 12 \times \frac{1}{4} = 4$

◇ **Habitabilité** : On a tangence sur une arête :

$$\begin{aligned} 2(r + r_O) &= a \Leftrightarrow r_O = \frac{a}{2} - r \\ &\Leftrightarrow r_O = (\sqrt{2} - 1) r \approx 0,414r \end{aligned} \quad a = 2r\sqrt{2}$$