

# Chapitre 1: STRUCTURE CRISTALLINE

## I- Introduction

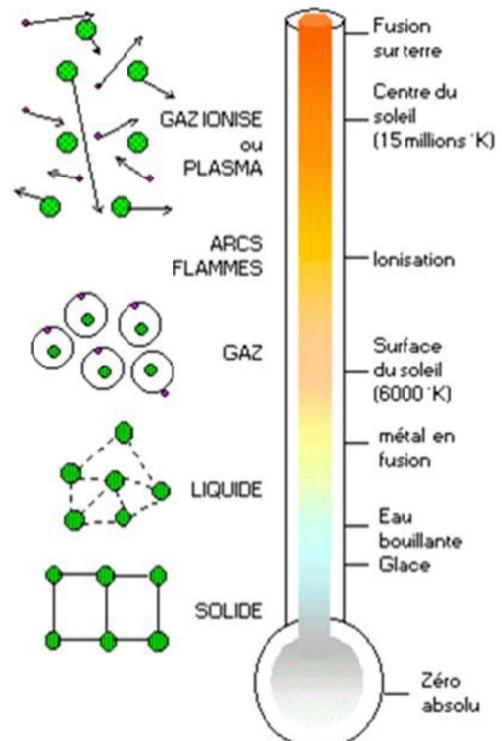
### I.1- Présentation générale des matériaux solides

La matière dont est formé l'Univers qui nous entoure revêt de formes très diverses :

- condensée : solide, liquides
- diluée : vapeur, gaz, plasmas

Dans cette liste, on accordera une place privilégiée aux solides, car ce sont eux que nous avons le plus souvent à considérer.

La physique des matériaux est largement consacrée à l'étude des cristaux et des électrons dans ces cristaux,



### I.2- caractère quantique de la matière

#### a- L'équation de Schrödinger des états stationnaires (1926)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + E_p \Psi = E \Psi$$

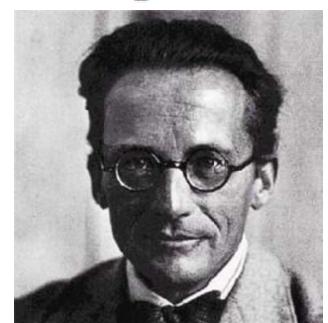
opérateur énergie cinétique  
( $m$  = masse de la particule)  
( $\Delta$  = opérateur laplacien\*)  
( $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  = constante de Planck réduite)

énergie potentielle,  
caractéristique de  
la situation physique  
où se trouve la particule

énergie totale

On peut retenir la forme abrégée de l'équation:

$$H(\Psi) = E \cdot \Psi$$



$H$  l'opérateur hamiltonien. C'est la somme des opérateurs énergie cinétique et énergie potentielle

Pour chaque valeur de  $E$ , appelée valeur propre de l'énergie, la résolution de l'équation de Schrödinger donne les fonctions d'onde  $\Psi$  associées à cette valeur de  $E$

## b- La fonction d'onde

Le comportement des électrons ne peut être décrit qu'en terme de probabilité de présence.

$\Psi$	Fonction d'onde, onde de probabilité ou amplitude de probabilité
$\Psi^2$	Densité de probabilité
$\Psi^2 dV$	Probabilité de trouver la particule à l'intérieur de $\Delta V$ (ou $\Delta x$ )
$\Psi^2 dx$	
$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^2(x) dx = 1$	Exprime que la particule doit se trouver quelque part (fonction d'onde normalisée)

## c. Solution de l'équation : cas de l'atome hydrogénoides

Les solutions  $\Psi$  de l'équation de Schrödinger sont appelées **orbitales atomiques** (OA), sont définies par 3 nombres quantiques et sont notées  $\Psi_{n,l,m}$ , plus un 4ème, lié au spin de l'électron.

- $n$  : nombre quantique principal : 1, 2, .. (numéro de l'orbite)

Valeur du nombre quantique $n$	1	2	3	4	5	6	7
Désignation de la couche	K	L	M	N	O	P	Q

- $l$  : nombre quantique azimutal  $l = 0, 1, \dots, n-1$

nombre quantique azimutal $l$	0	1	2	3	4
Désignation de l'orbitale atomique	s	p	d	f	g

- $m_l$  : nombre quantique magnétique  $m_l = 0, +1, -1, \dots, +l, -l$
- $m_s$  : spin (rotation de l'électron sur lui même)  $m_s = +1/2, -1/2$

- La règle de Klechkowski: On remplit les orbitales à  $n+l$  croissant.  
Pour  $n+l$  égal on remplit à  $n$  croissant.

	0	1	2	3	4	5
0 (s)	1s	2s	3s	4s	5s	
1 (p)		2p	3p	4p	5p	
2 (d)			3d	4d	5d	
3 (f)				4f	5f	

« s » lorsque  $l = 0$  (cette sous-couche supporte 2 électrons) ;  
 « p » lorsque  $l = 1$  (cette sous-couche supporte 6 électrons) ;  
 « d » lorsque  $l = 2$  (cette sous-couche supporte 10 électrons) ;  
 « f » lorsque  $l = 3$  (cette sous-couche supporte 14 électrons) ;  
 « g » lorsque  $l = 4$  (cette sous-couche supporte 18 électrons) et par ordre alphabétique ensuite ;

5

## II- Structure du cristal parfait

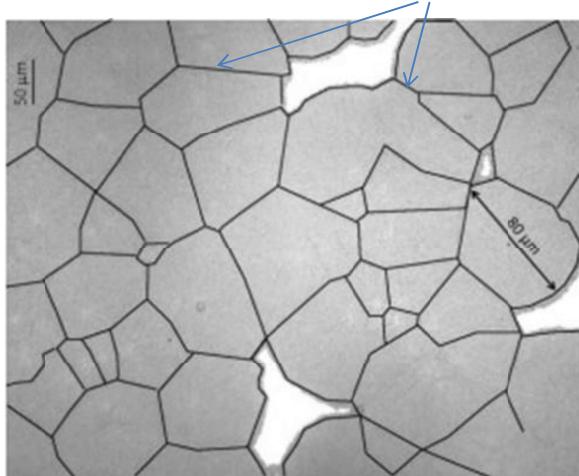
### II.1- Eléments de cristallographie

La répartition des atomes dans l'espace conduit à considérer 2 états :

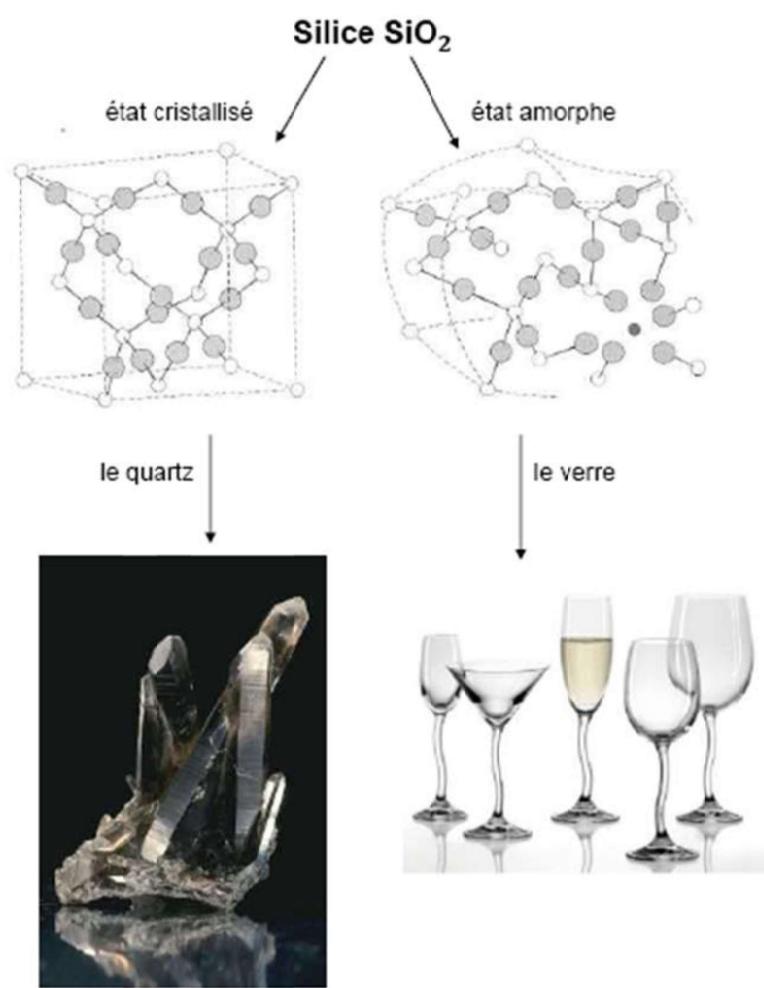
- **l'état désordonné ou amorphe** : les atomes ou molécules sont disposés de manière désordonnée à l'échelle macroscopique.
- La distance entre deux atomes (molécules) proches , quelques dizaines d'Angströms, varie peu à travers le solide : ***ordre à courte portée***.
- La distribution des proche voisins autour d'un atome est appelée **configuration de coordination**.
- Le nombre des proches voisins autour d'un atome central est appelé **nombre de coordination**.
- L'ordre à courte portée conserve la configuration de coordination et le nombre de coordination de tous les atomes ou molécules équivalents.

6

- **l'état ordonné ou cristallin** : les atomes (molécules) sont rangé(e)s régulièrement dans tout l'espace. Il existe un *ordre à longue portée*.
  - Si le solide présente un seul arrangement, on a un **monocristal**.
  - Souvent les solides réels (**polycristaux**) comprennent de nombreux monocristaux de tailles et d'orientations diverses séparés par des  **joints de grain**.



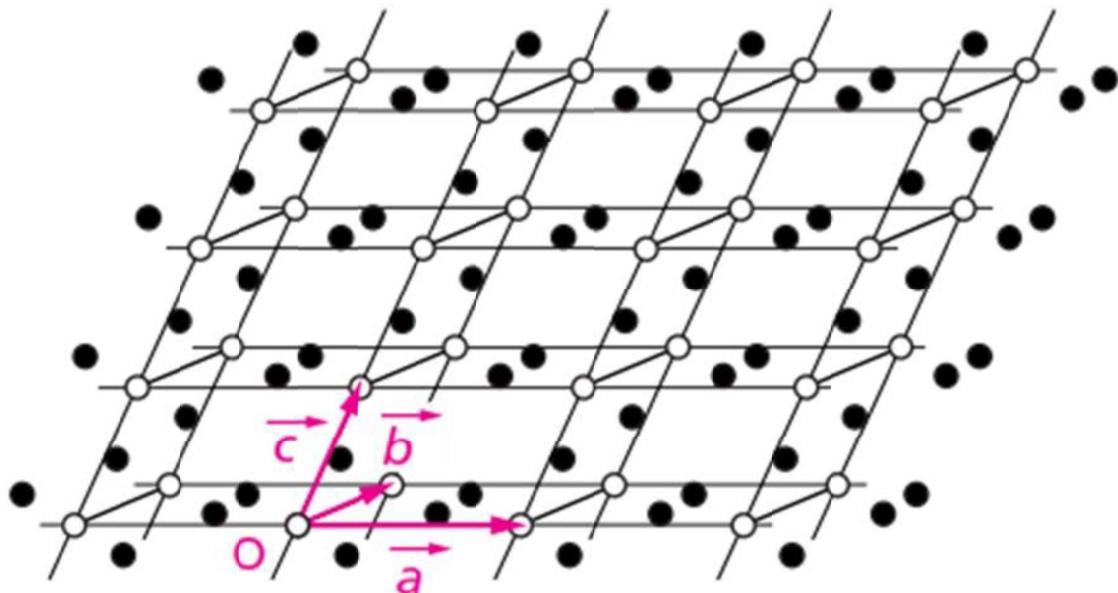
7



8

## a- Bases de vecteurs

La régularité d'un cristal est valable dans toutes les directions. On a ainsi des *translations périodiques dans toutes les directions*.



## b- Réseau et nœuds

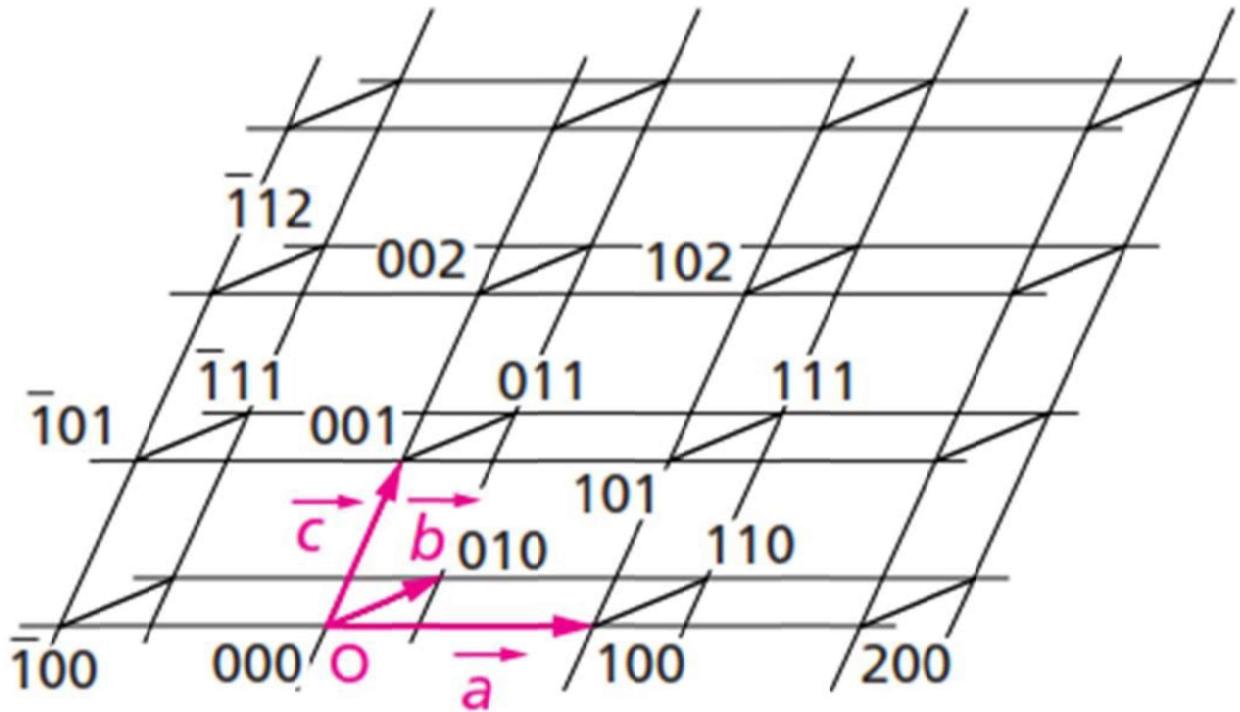
On obtient le réseau d'un cristal en faisant abstraction de la matière (atomes, ions...) pour ne garder qu'un arrangement de points géométriques manifestant les périodes.

Il peut être considéré comme l'ensemble des vecteurs de translation  $\vec{\tau}$ . Une fois choisie une base  $\{\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}\}$ , *tous les vecteurs de translation peuvent alors s'écrire :*

$$\vec{\tau} = p\vec{a} + q\vec{b} + r\vec{c}$$

et les points géométriques ont pour coordonnées :  $p, q, r$

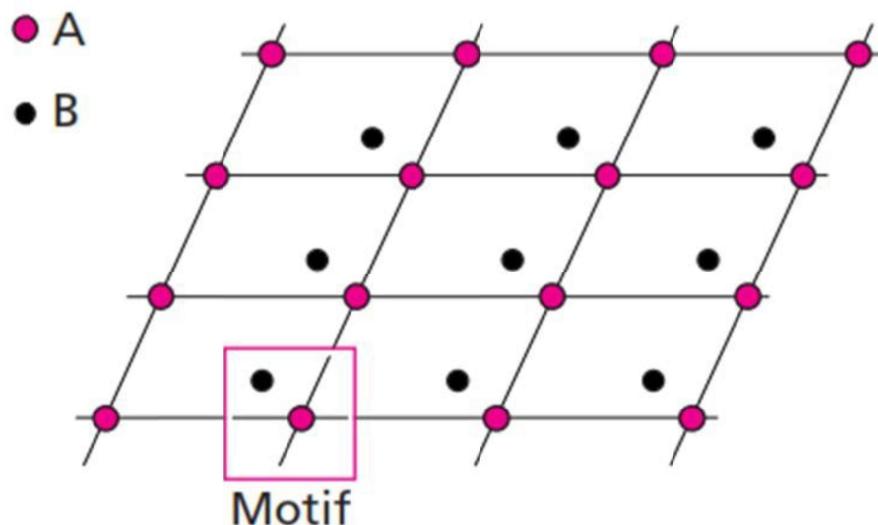
Définition : **Un réseau est un assemblage de points géométriques appelés nœuds (comme les nœuds d'un grillage ou d'un filet).**



Les triplets de nombres sont les coordonnées  $p \ q \ r$  des nœuds du réseau.

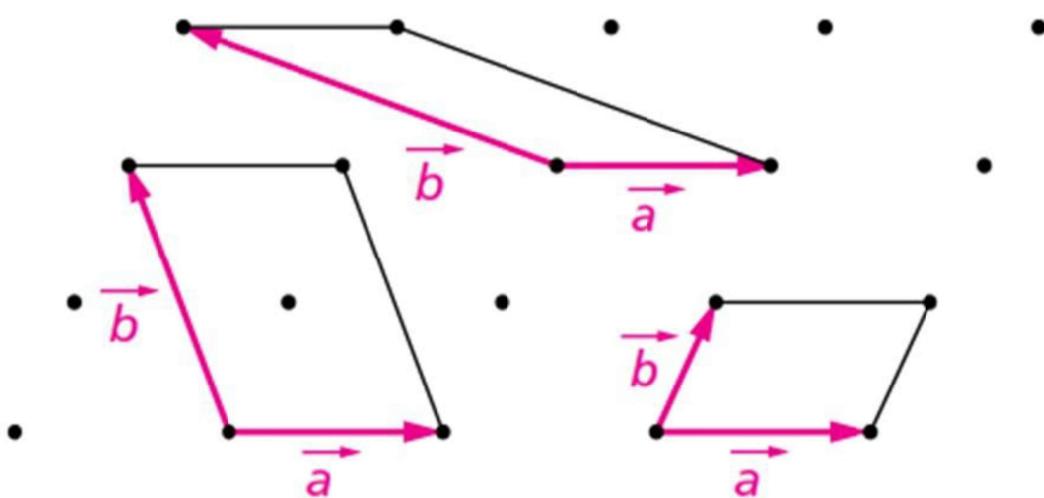
### c- Motif

En considérant un cristal quelconque, on peut toujours trouver un groupe d'atomes minimum qui constitue un motif pour le cristal : ce motif, répété par toutes les translations (vecteurs) du réseau du cristal, reconstruit tout le cristal. À chaque nœud est associé un motif.



#### d- Mailles primitives et mailles multiples

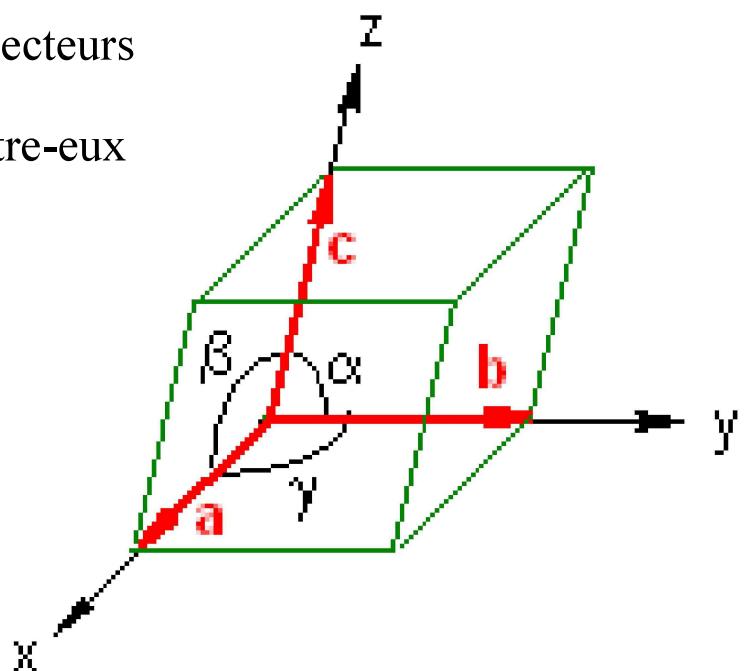
Si la maille construite n'a aucun nœud à l'intérieur ou sur les faces ou encore sur les arêtes, elle est dite primitive ou simple. Dans le cas contraire, elle est dite multiple.



en 3D     $\rightarrow$     Une **maille** est définie par 6 paramètres :

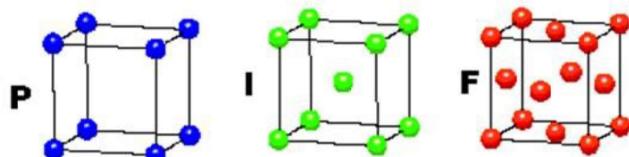
longueurs  $a, b, c$ , des trois vecteurs

angles  $\alpha, \beta, \gamma$ , qu'ils font entre-eux

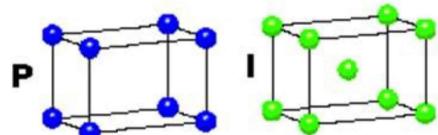


Selon ( $a \neq b \neq c$  et  $\alpha \neq \beta \neq \gamma$ ) jusqu'à ( $a = b = c$  et  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ )  
 $\rightarrow$  on obtient 7 types de mailles qui définissent 7 systèmes cristallins.

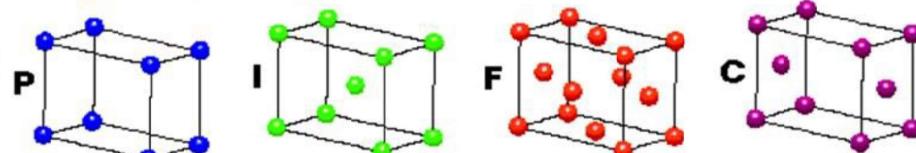
**Cubique**  
 $a = b = c$   
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



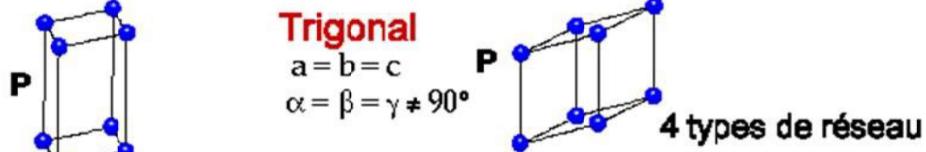
**Quadratique**  
 $a = b \neq c$   
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



**Orthorhombique**  
 $a \neq b \neq c$   
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

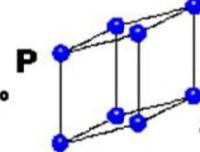


**Hexagonal**  
 $a = b \neq c$   
 $\alpha = \beta = 90^\circ$   
 $\gamma = 120^\circ$



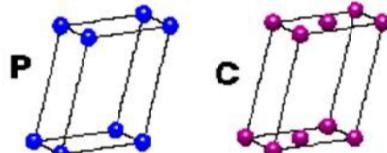
**Trigonal**

$a = b = c$   
 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$

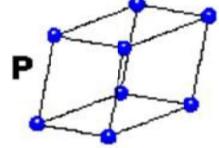


4 types de réseau

**Monoclinique**  
 $a \neq b \neq c$   
 $\alpha = \gamma = 90^\circ$   
 $\beta \neq 120^\circ$



**Triclinique**  
 $a \neq b \neq c$   
 $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$



4 types de réseau

P Primitif

I centré

F toutes faces centrées

C 1 face centrée

+ 7 systèmes cristallins

= 14 réseaux de BRAVAIS

## e- Système d'indices des plans cristallins

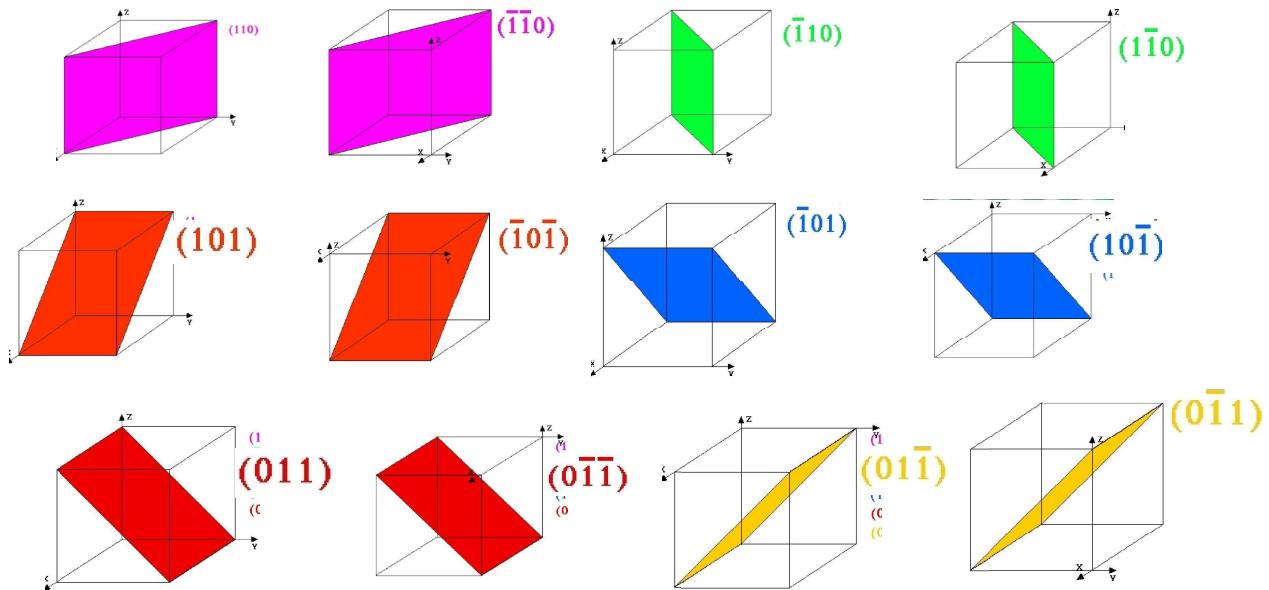
La position et l'orientation d'un plan réticulaire sont déterminées par trois points quelconques non alignés de ce plan. Si chacun de ces points est situé sur un axe cristallographique, le plan peut être déterminé en donnant les abscisses de ces points sur les axes, l'unité sur chacun de ces axes étant la mesure du paramètre de la maille correspondant.

Mais il est plus utile, en analyse de structure, de définir le plan par les indices de miller déterminés par les règles suivantes.

- Trouver les coordonnées des intersections avec les trois axes **a**, **b** et **c**.
- Prendre l'inverse des nombres trouvés et se ramener à trois entiers, habituellement les plus petits possibles.
- Le résultat est placé entre parenthèse (hkl).

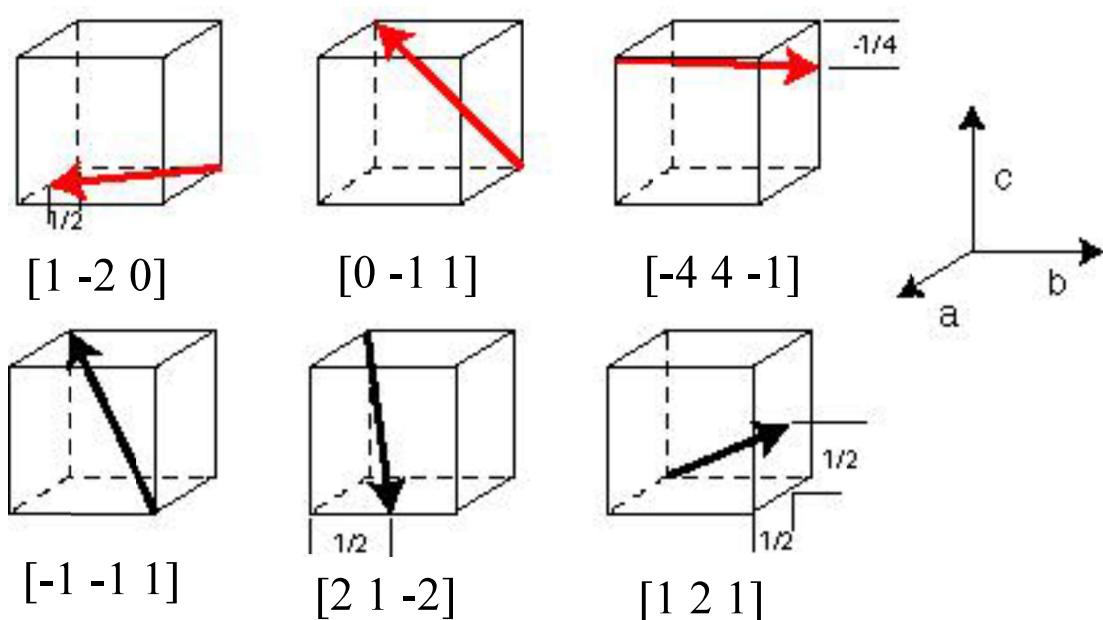
- L'ensemble des plans obtenu par permutations ou oppositions est appelé « **famille de plans** » et noté entre accolades

### Famille de plan $\{110\}$



- La **direction cristallographique** est l'ensemble des rangées d'atomes parallèles et orientées dans une même direction.

Si l'un des nœuds correspond à l'origine du réseau, on peut désigner la rangée par les coordonnées u, v et w du nœud le plus proche de l'origine appartenant à la droite. Ces rangées sont notées [u,v,w].



## f. Le système cubique.

La maille du système cubique se caractérise par :  $a = b = c$  et  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ . Le réseau est alors entièrement défini par une seule grandeur  $a$  : **constante du réseau**.

La majorité des matériaux utilisés en électronique cristallisent dans ce système.

Selon la disposition des nœuds on distingue :

### 1. le réseau cubique simple (noté CS)

Ce réseau est particulier. On ne connaît qu'un seul élément pur qui présente cet arrangement, le Polonium (Po).

Le nombre de coordination, représentant le nombre de premiers voisins d'un atome donné, est de 6.

19

### → Compacité

$$C = \frac{\text{Volume occupé par les atomes}}{\text{Volume de la maille}} = \frac{N_{\text{atomes}} \times \frac{4}{3} \pi \times R^3}{\text{Volume de la maille}}$$

*Volume des atomes*

$$\text{Nombre d'atomes} = 8 \cdot \frac{1}{8} = 1$$

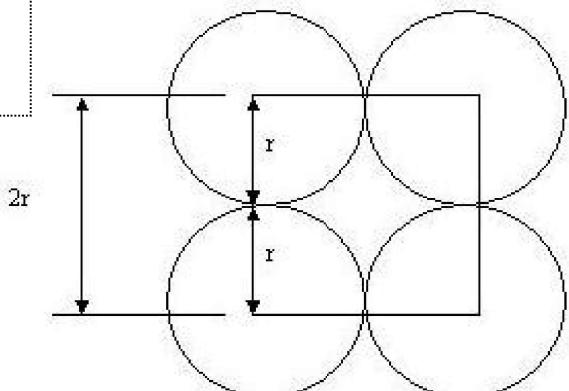
$$\text{Rayon d'un atome} \cdot 2r = a$$

$$V_{\text{atomes}} = 1 \cdot \frac{4}{3} \pi \left(\frac{a}{2}\right)^3$$

*Volume de la maille*

$$V_{\text{maille}} = a^3$$

$$\text{Compacité : } C = \frac{V_{\text{atomes}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{\pi}{6} \cong 0,52$$



20

## → masse volumique

la masse volumique  $m$  ( $\text{kg m}^{-3}$ ) est la masse d'une maille (kg) divisée par le volume de la maille ( $\text{m}^3$ )

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{n \cdot M}{V \cdot N_A}$$

Avec

$n$  : nombre de motifs par maille (atoms/ maille)

$M$  : Masse molaire ( $\text{kg/mol}$ )

$V$  : volume de la maille ( $\text{m}^3$ )

$N_A$  : nombre d'Avogadro ( $6,02 \cdot 10^{23}$  atoms/mol)

Exemple le Polonium (Po):  $M_{\text{Po}} = 209 \text{ g/mol}$ ,  $a = 335.2 \text{ pm}$ ,

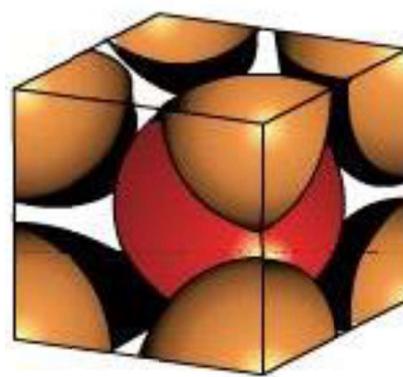
$$\rho = \frac{1 \times 209 \cdot 10^{-3}}{(335.2 \cdot 10^{-12})^3 \times 6.02 \cdot 10^{23}} = 9218 \text{ kg/m}^3$$

21

## 2. Le système cubique centré (noté CC)

La structure CC est définie par un motif élémentaire de 2 atomes, l'un à l'origine et l'autre au centre du cube.

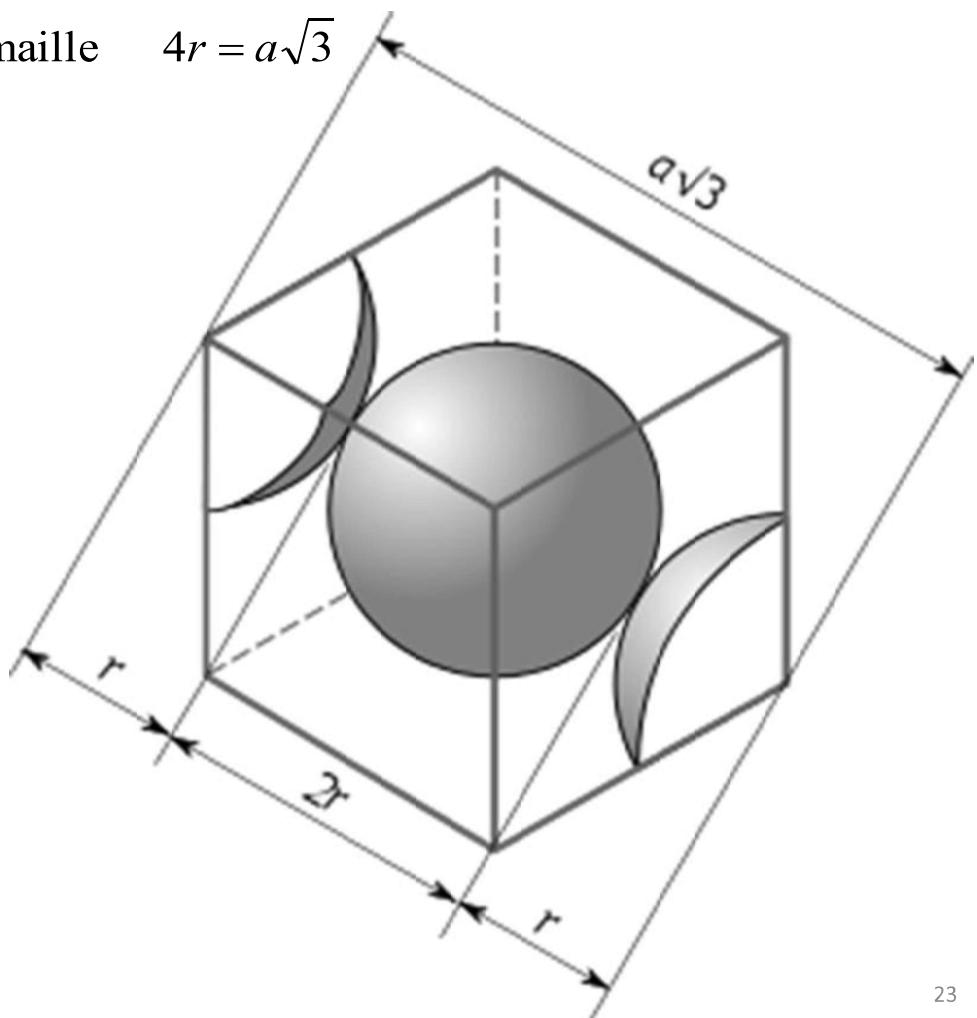
Un réseau *cubique centré* a un *nombre de coordination* égal à 8 .



Elle se rencontre dans tous les métaux alcalins et dans les métaux baryum, radium, vanadium, niobium, tantale, chrome, molybdène, et tungstène, ainsi que le fer à l'état alpha (stable aux températures ordinaires et jusqu'à 912 °C).

22

→ Paramètre de maille       $4r = a\sqrt{3}$



23

→ Compacité

Volume des atomes

$$\text{Nombre d'atomes} = 8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2$$

Paramètre de maille       $4r = a\sqrt{3}$

$$V_{\text{atomes}} = 2 \cdot \frac{4}{3} \pi \left(\frac{a\sqrt{3}}{4}\right)^3$$

Volume de la maille

$$V_{\text{maille}} = a^3$$

$$\text{Compacité : } C = \frac{V_{\text{atomes}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{\pi \sqrt{3}}{8} \cong 0,68$$

24

→ Masse volumique :

Exemples :

Pour  $\text{Fe}_\alpha$  :  $r_{Fe} = 0,126 \text{ nm}$

$$M_{Fe} = 55,85 \text{ g/mol}$$

$$a : \text{côté du cube}, \quad a = \frac{4r_{Fe}}{\sqrt{3}} = \frac{4 \times 126}{\sqrt{3}} = 291 \text{ pm}$$

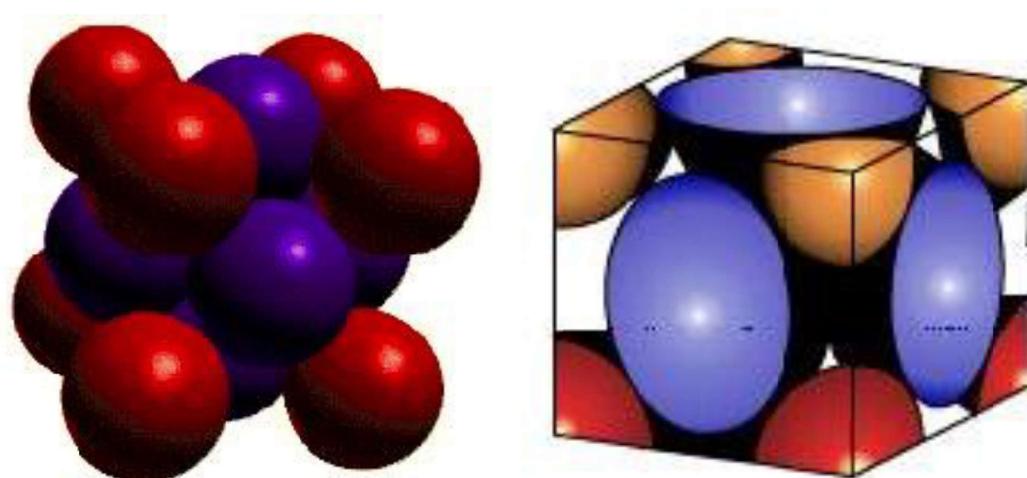
$$\rho = \frac{2 \times M_{Fe}}{N_a \times V_{\text{maille}}} = \frac{2 \times 55,85 \cdot 10^{-3}}{6,02 \cdot 10^{23} \times (291 \cdot 10^{-12})^3} = 7520 \text{ kg.m}^{-3}$$

25

### 3. Le système cubique à faces centrées (CFC)

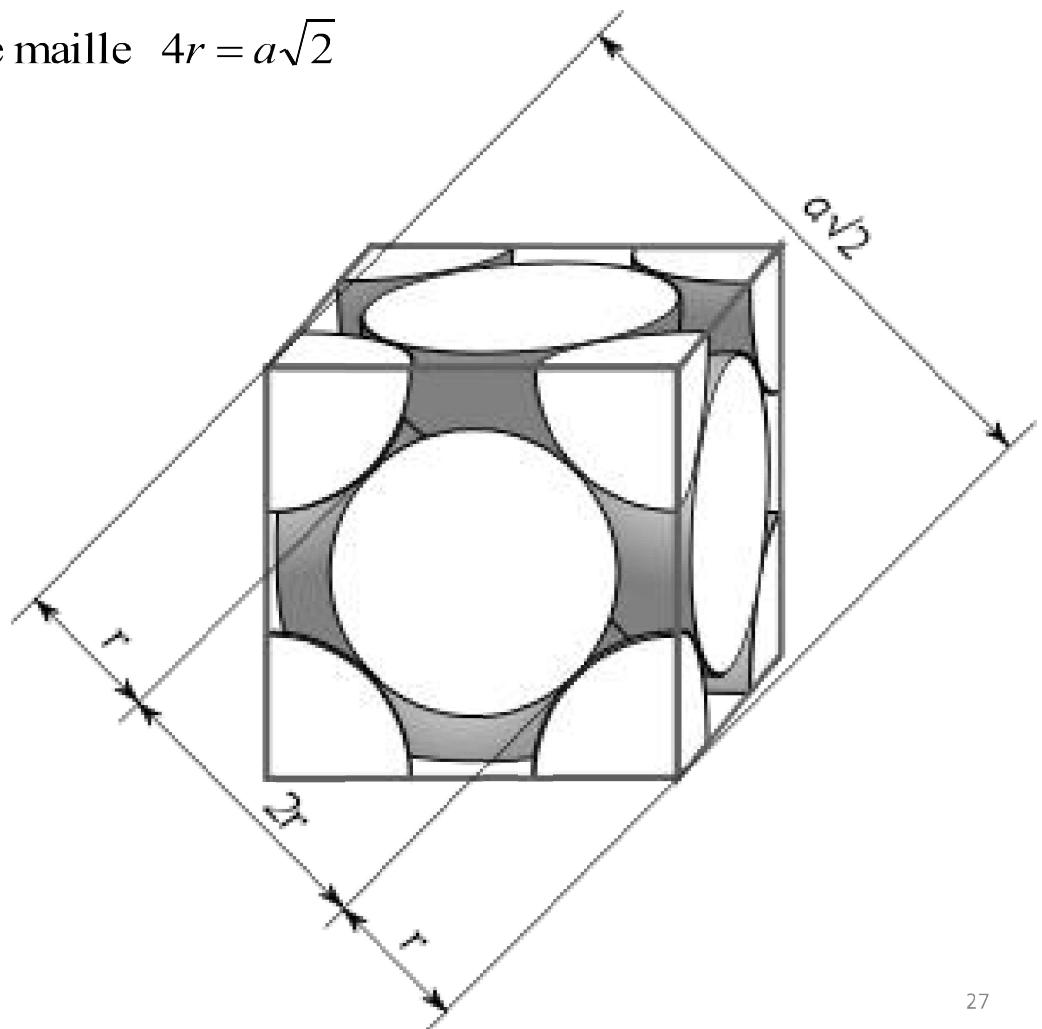
La structure CFC est définie par un motif élémentaire de 4 atomes, l'un à l'origine et les trois autres aux centres des faces du cube. Elle est constituée de 4 atomes par maille, six sur les faces du cube appartenant chacun à deux mailles et huit aux sommets du cube appartenant à huit mailles chacun.

Un réseau *cubique à face centré* a un *nombre de coordination* égal à 12 .



26

→ Paramètre de maille  $4r = a\sqrt{2}$



27

→ Compacité

*Volume des atomes*

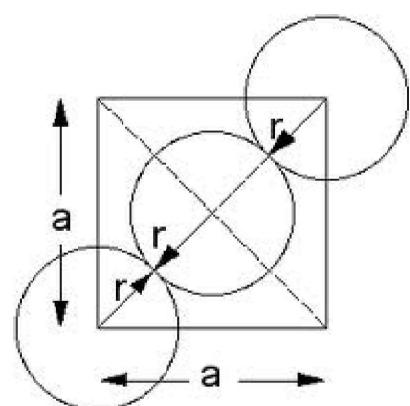
$$\text{Nombre d'atomes} = 6 \cdot \frac{1}{2} + 8 \cdot \frac{1}{8} = 4$$

Paramètre de maille  $4r = a\sqrt{2}$

$$V_{\text{atom}} = 4 \cdot \frac{4}{3} \pi \left( \frac{a\sqrt{2}}{4} \right)^3 = a^3 \left( \frac{\pi\sqrt{2}}{6} \right)$$

*Volume de la maille*

$$V_{\text{maille}} = a^3$$



$$\text{Compacité: } C = \frac{V_{\text{atom}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{\pi\sqrt{2}}{6} \cong 0,74$$

28

## → Masse volumique :

Exemples :

Pour Cu     $r_M = 128 \text{ pm}$

$M_{\text{Cu}} = 63,5 \text{ g/mol}$

$$a : \text{côté du cube}, \quad a = 2r_M \sqrt{2} = 362 \text{ pm}$$

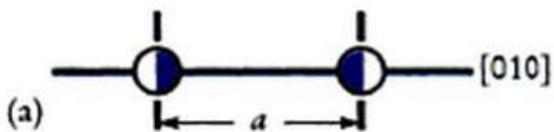
$$\rho = \frac{N_{\text{propre}} M_{\text{Cu}}}{N_a \times V_{\text{maille}}} = \frac{4 \times 63,5 \cdot 10^{-3}}{6,02 \cdot 10^{23} (362 \cdot 10^{-12})^3} = 8890 \text{ kg.m}^{-3}$$

29

## → Densité de nœuds

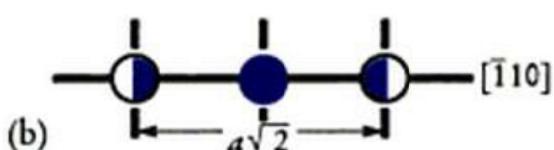
Dans un réseau cristallin, il est souvent important de pouvoir déterminer la densité de nœuds soit par unité de longueur (densité linéique), soit par unité de surface (densité surfacique), soit par unité de volume.

(a) exemple de calcul sur une rangée :



Densité linéique de nœuds selon [010] :

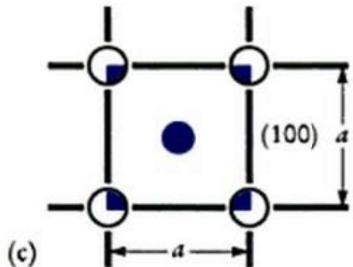
$$\left( \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right) \frac{1}{a} = \frac{1}{a}$$



Densité linéique selon [110] :

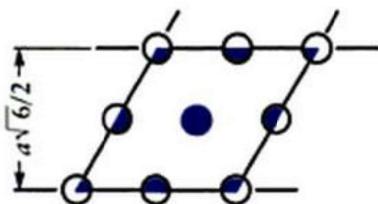
$$\left( \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + 1 \right) \frac{1}{a\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{2}}{a}$$

(b) exemple de calcul sur une surface :



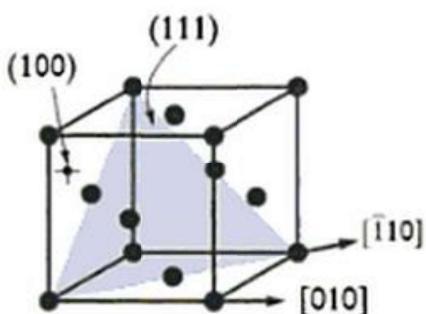
Densité des noeuds dans le plan (100) :

$$\left(4 \times \frac{1}{4} + 1\right) \frac{1}{a^2} = \frac{2}{a^2}$$



Densité des noeuds dans le plan (111) :

$$\left(4 \times \frac{1}{4} + 4 \times \frac{1}{2} + 1\right) \frac{1}{a^2 \sqrt{3}} = \frac{4\sqrt{3}}{3a^2}$$



Pour la maille, le nombre de nœuds en propre est :

$$\left(8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2}\right) = 4$$

#### 4. Structure cubique-diamant (cd).

Un cristal de type « diamant » est une forme dérivée du cristal cubique à faces centrées (fcf). Il peut se décrire par une maille élémentaire d'un cristal fcf dont quatre des huit sites tétraédriques sont occupés. Un réseau *cubique centré* a un *nombre de coordination* égal à 4 .

On dispose de huit atomes propres par maille

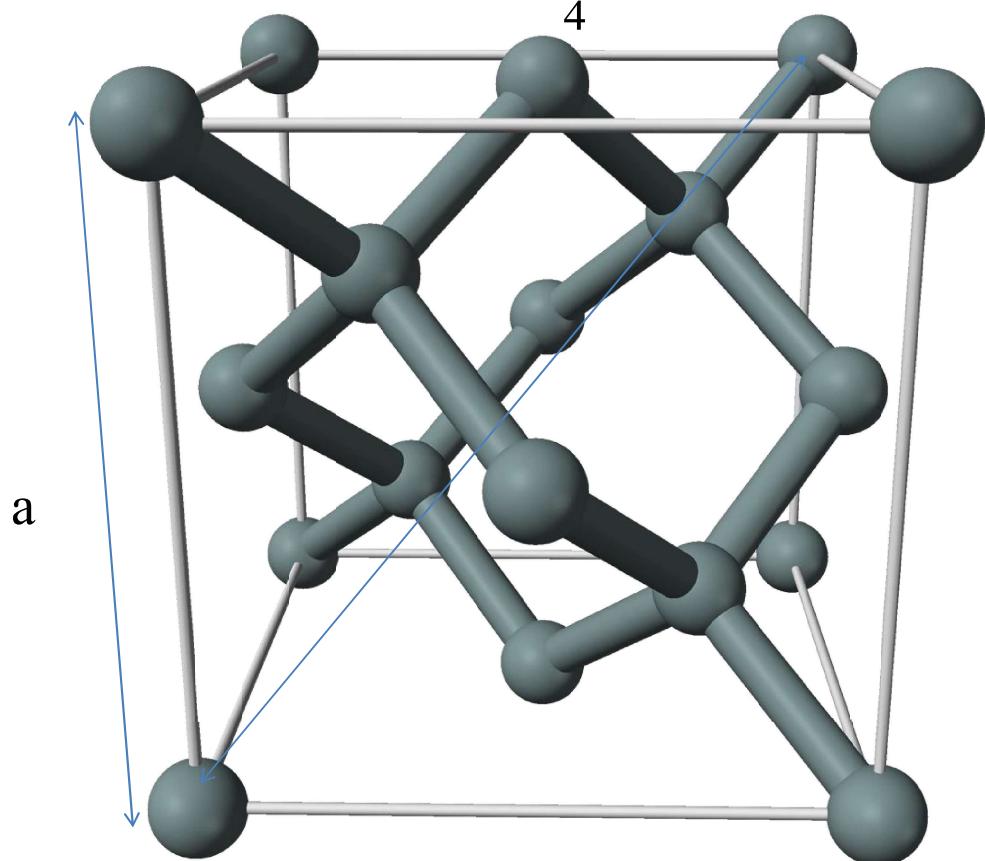
- 8 atomes comptant pour un huitième d'atome à chaque sommet,
- 6 atomes comptant pour un demi-atome à chaque face.
- 4 atomes à l'intérieur du cube et donc de la maille, dans 4 des 8 sites tétraédriques qui comptent pour 1

Eléments possédant la structure cristalline du diamant.

Élément	Arête du cube $a$ (Å)
C (diamant)	3,57
Si	5,43
Ge	5,66
$\alpha$ -Sn (gris)	6,49



→ Paramètre de maille  $2r = \frac{a\sqrt{3}}{4}$



## → Compacité

*Volume des atomes*

$$\text{Nombre d'atomes} = 6 \cdot \frac{1}{2} + 8 \cdot \frac{1}{8} + 4 = 8$$

$$\text{Paramètre de maille } 2r = \frac{a\sqrt{3}}{4}$$

$$V_{\text{atomes}} = 8 \cdot \frac{4}{3} \pi \left( \frac{a\sqrt{3}}{8} \right)^3 = a^3 \left( \frac{\pi\sqrt{3}}{16} \right)$$

*Volume de la maille*

$$V_{\text{maille}} = a^3$$

$$\text{Compacité : } C = \frac{V_{\text{atomes}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{\pi\sqrt{3}}{16} \cong 0,34$$

35

## → Masse volumique :

Pour: le silicium Si       $r_{\text{Si}} = 118 \text{ pm}$

$$M_{\text{Si}} = 28,1 \text{ g/mol}$$

$$a : \text{côté du cube}, \quad a = \frac{8r_{\text{Si}}}{\sqrt{3}} = \frac{8 \times 118}{\sqrt{3}} = 543 \text{ pm}$$

$$\rho = \frac{N_{\text{propre}} M_{\text{Si}}}{N_a \times V_{\text{maille}}} = \frac{8 \times 28,1 \cdot 10^{-3}}{6,02 \cdot 10^{23} (543 \cdot 10^{-12})^3} = 2330 \text{ kg.m}^{-3}$$

36

## 5. Structure Zinc-Blende.

On parle de cristal type « *blende* » pour des cristaux de même structure que le diamant, mais composés de deux types d'atomes différents. Ainsi la maille élémentaire comporte deux types d'atomes différents:

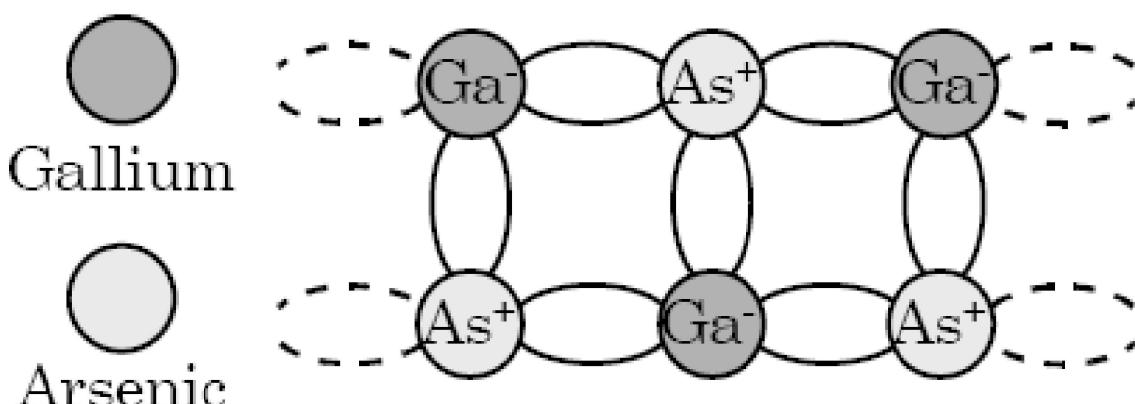
- les atomes qui composent la maille cfc étant d'une sorte,
- les quatre atomes dans les sites tétraédriques de l'autre sorte, ce qui fait que chaque atome est lié à 4 voisins de nature différente de la sienne

C'est le cas de la sphalérite ( $\text{ZnS}$  - nom actuel de la blende), et de la plupart des composés de type I-VII, II-VI ( $\text{CdS}$ ,  $\text{ZnSe}$ ,  $\text{CdSe}$ ,  $\text{CdTe}$ ,  $\text{ZnTe}$ ,  $\text{BeTe}$ ...), III-V (**arséniure de gallium** ( $\text{AsGa}$ ), **phosphure d'indium** ( $\text{InP}$ ), etc.) ou d'alliage de silicium (silicium-germanium, carbure de silicium type- $\beta$ ), dont la plupart sont des semi-conducteurs.

37

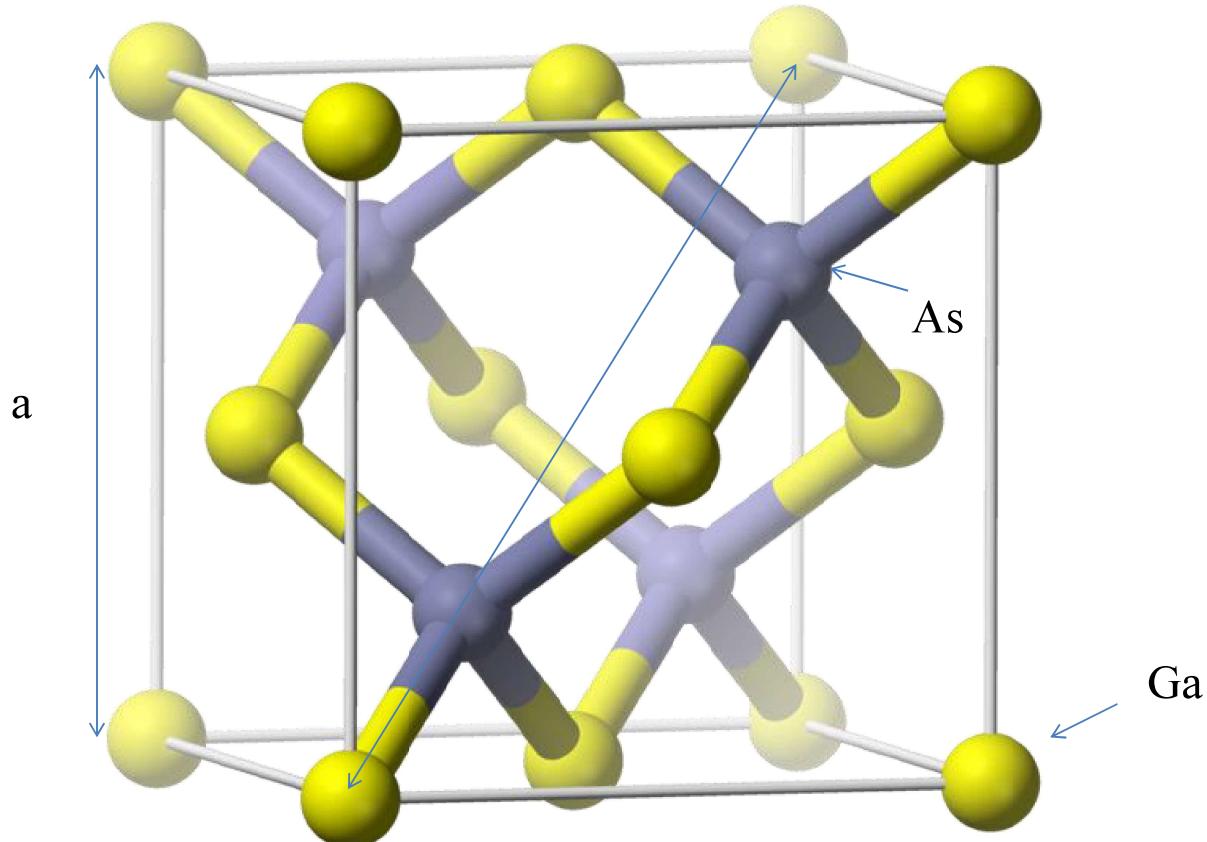
→ Application: **arséniure de gallium**  $\text{AsGa}$ .

Le réseau correspondant est celui de la blende (mineraï de sulfure de zinc :  $\text{ZnS}$ ) qui peut être considéré comme une variante du réseau diamant : pour  $\text{GaAs}$ , le Gallium Ga occupe quatre des huit sites tétraédriques du réseaux cubiques faces centrées de l'Arsenic As.



38

→ Paramètre de maille  $r_{\text{As}} + r_{\text{Ga}} = \frac{a\sqrt{3}}{4}$



39

→ *Compacité*  $r_{\text{As}}=119 \text{ pm}, r_{\text{Ga}}=126 \text{ pm}$

\* *Volume des atomes*

*Nombre d'atomes : As=4, Ga =  $6 \cdot \frac{1}{2} + 8 \cdot \frac{1}{8} = 4$*

*Paramètre de maille  $r_{\text{As}} + r_{\text{Ga}} = \frac{a\sqrt{3}}{4}$*

$$a = \frac{4 \cdot (r_{\text{As}} + r_{\text{Ga}})}{\sqrt{3}} = \frac{4 \times (119 + 126)}{\sqrt{3}} = 566 \text{ pm}$$

$$V_{\text{atomes}} = 4 \cdot \frac{4}{3} \pi (r_{\text{As}})^3 + 4 \cdot \frac{4}{3} \pi (r_{\text{Ga}})^3$$

$$= 4 \cdot \frac{4}{3} \pi (119 \cdot 10^{-12})^3 + 4 \cdot \frac{4}{3} \pi (126 \cdot 10^{-12})^3 = 6.175 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3$$

\* *Volume de la maille*

$$V_{\text{maille}} = a^3 = (566 \cdot 10^{-12})^3 = 18 \cdot 1 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3$$

*Compacité :  $C = \frac{V_{\text{atomes}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{6.175}{18 \cdot 1} \cong 0,34$*

40

## → Masse volumique :

Pour AsGa       $r_{As} = 119 \text{ pm}$ ,  $r_{Ga} = 126 \text{ pm}$

$M_{As} = 75 \text{ g/mol}$ ,  $M_{Ga} = 70 \text{ g/mol}$

$$\text{Paramètre de maille } r_{As} + r_{Ga} = \frac{a\sqrt{3}}{4}$$

$a$  : côté du cube,

$$a = \frac{4.(r_{As} + r_{Ga})}{\sqrt{3}} = \frac{4 \times (119 + 126)}{\sqrt{3}} = 566 \text{ pm}$$

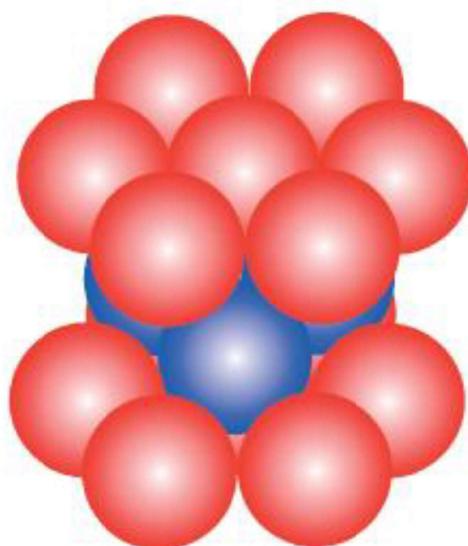
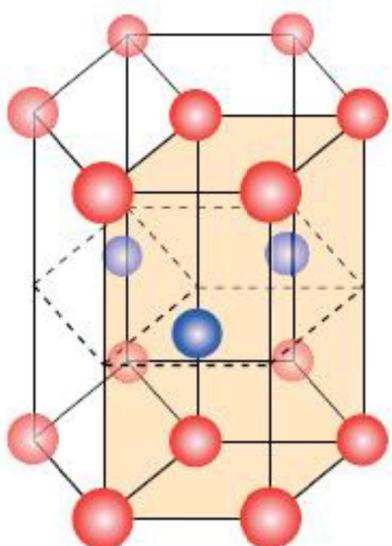
$$\rho = \frac{4 \left( \frac{M_{As}}{N_a} \right) + 4 \left( \frac{M_{Ga}}{N_a} \right)}{V_{\text{maille}}} = \frac{4.(M_{As} + M_{Ga})}{N_a \times V_{\text{maille}}} = 5310 \text{ kg.m}^{-3}$$

41

## g. Le système hexagonal compact.

- 6 atomes dans le même plan,
- 3 dans le plan au-dessus,
- 3 dans le plan au-dessous.

La coordinence d'un tel assemblage est de 12



## → Compacité

*Volume des atomes*

$$\text{Nombre d'atomes} = 1 + 8 \cdot \frac{1}{8} = 2$$

$$V_{\text{atomes}} = 2 \cdot \frac{4}{3} \pi (R)^3$$

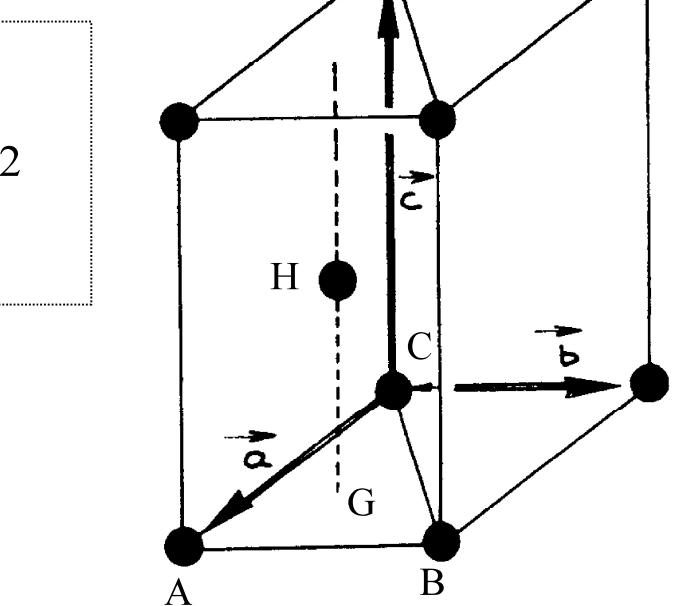
\* *Volume de la maille*

$$V_{\text{maille}} = c \cdot a^2 \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{3}\right)$$

$$c = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \cdot a = \frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \cdot R$$

$$a = 2 R$$

$$V_{\text{maille}} = 8\sqrt{2} R^3$$



$$C = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0,74$$

## → Masse volumique :

$$M_{\text{Ti}} = 47,9 \text{ g/mol}$$

Rayon ionique de l'ion titane:  $r_{\text{Ti}} = 68 \text{ pm}$

$$V_{\text{maille}} = 8 \cdot \sqrt{2} \cdot r_{\text{Ti}}^3$$

$$\rho = \frac{2 \cdot \left( \frac{M_{\text{Ti}}}{N_a} \right)}{V_{\text{maille}}} = 4,51 \text{ g.cm}^{-3}$$