

CRISTALLOGRAPHIE

①

Exercice 1

Coordination :

Le réseau cubique faces centrées est un réseau compact

$$N_i/N_c = [12]$$

(6 dans le même plan ; 3 dessus ; 3 dessous)

Nombre d'atomes par maille.

$$Z = \underbrace{8 \times 1/8}_{\text{sommet}} + \underbrace{6 \times 1/2}_{\text{face}} \Leftrightarrow Z = 4$$

Relation rayon \ paramètre de maille

La tangence se fait sur la diagonale d'une face

$$\text{D'où } 4R = \sqrt{2}a \Rightarrow R = \frac{\sqrt{2}a}{4}$$

Application numérique $R = 124 \text{ pm}$

Mass volumique

$$\rho = \frac{\text{masse maille}}{\text{Volume maille}} \Leftrightarrow \rho = \frac{ZM}{N_A a^3} = 9,02 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$$

Exercice 2

1. le rayon atomique

la masse volumique

$$\rho = \frac{\text{masse maille}}{\text{Volume maille}} = \frac{ZM}{N_A a^3}$$

Relation a \ R : la tangence se fait sur la diagonale d'une face : $4R = \sqrt{2}a \Leftrightarrow a = 2\sqrt{2}R$

le nombre de motifs : $Z = \underbrace{8 \times 1/8}_{\text{sommet}} + \underbrace{6 \times 1/2}_{\text{face}} = 4$

$$\text{D'où } a = 2\sqrt{2}R = \left(\frac{N_A \rho}{Z} \right)^{1/3} = 0,389 \text{ nm}$$

$$R = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{N_A \rho}{Z} \right)^{1/3} = 0,137 \text{ nm}$$

(2)

2.a. Nombre de sites T

Il y a 8 sites T par maille; un au centre de chaque sous cube.

On a 4 motifs ou atomes de Palladium par Maille
L'hydruure s'écrit Pd_2H

Les atomes d'hydrogene n'occupent que 2 sites sur les 8 à disposition.

b Modification du réseau

H étant de très petite taille, il ne modifie pas le réseau ($\frac{\Delta a}{a} = 2,6 \cdot 10^{-3}$).

Exercice 3.

1. Le Fer γ

• Masse volumique: $\rho = \frac{\text{masse Maille}}{\text{Volume Maille}} = \frac{Z \cdot M}{N_A a^3}$

• Nombre de motifs: $Z = \underbrace{8 \times \frac{1}{8}}_{\text{sommet}} + \underbrace{6 \times \frac{1}{2}}_{\text{face}} = 4$

• Relation entre a et R: la tangence se fait sur la diagonale d'une face: $\sqrt{2}a = 4R \Rightarrow a = 2\sqrt{2}R$

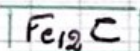
D'où $R = \left(\frac{4M}{N_A 16\sqrt{2}\rho} \right)^{1/3} = 0,128 \text{ nm}$

2. Austenite

a. Composition théorique

Sites O: 1 au centre de la maille et 1 sur chacune des arêtes: $1 \times 1 + 12 \times \frac{1}{4} = 4 \text{ sites.}$

on a 1 carbone pour 12 sites soit 3 mailles de 4 fer



(3)

b. Commentaire

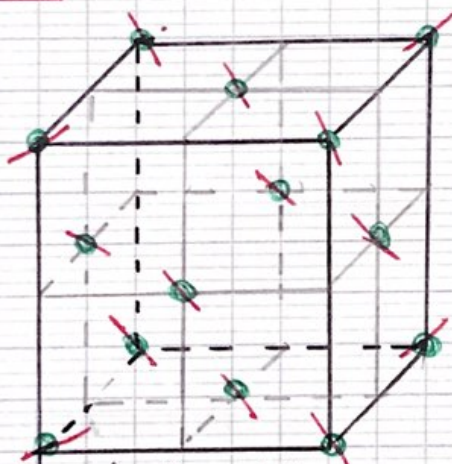
Le fer et le carbone sont tangents sur une arête

$$r + R = \frac{a}{2} = \sqrt{2} R \quad \text{d'après 1)}$$

$$\text{D'où } \frac{r}{R} = \sqrt{2} - 1 \quad \text{au maximum}$$

$$\text{on a donc } \sqrt{2} - 1 = 0,414$$

$$\text{et } \frac{r_c}{R} = 0,602$$

Le réseau cristallin est donc déforméExercice 41. La mailleNombre d'unités formulaires

$$Z = \underbrace{8 \times \frac{1}{8}}_{\text{sommet}} + \underbrace{6 \times \frac{1}{2}}_{\text{faces}} = 4$$

2. La masse volumique

$$\rho = \frac{\text{masse maille}}{\text{Volume maille}} = \frac{ZM}{N_A a^3}$$

$$\text{CO}_2: \rho = 1,69 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3 \quad \text{N}_2\text{O} \quad \rho = 1,62 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$$

3. a Compacité

$$C = \frac{\text{Volume occupé}}{\text{Volume Maille}}$$

(4)

$$\text{CO}_2 : C = \frac{Z \cdot \frac{4}{3} \pi (R_C^3 + 2R_O^3)}{a^3} = 12,0\%$$

$$\text{N}_2\text{O} : C = \frac{Z \cdot \frac{4}{3} \pi (2R_N^3 + R_O^3)}{a^3} = 11,5\%$$

b. Ecart des températures de fusion
La compacité de N_2O étant plus faible les interactions sont aussi.

Exercice 5

1. Nombre d'unités formulaires

$$\text{O}^{2-} \text{ CFC } \underbrace{8 \times 1/8}_{\text{sommet}} + \underbrace{6 \times 1/2}_{\text{faces}} = 4$$

Na^+ site T 1 au centre de chaque sous cube : 8
Il y a 4 unités formulaires par maille

2. Coordination

Na^+ forment un réseau cubique simple : $\text{Na}^+/\text{Na}^+ = [6]$

O^{2-} CPC $\text{O}^{2-}/\text{O}^{2-} = [12]$

Na^+ dans un site T formé par O^{2-}

$$\text{Na}^+/\text{O}^{2-} = [4]$$

O^{2-} dans un site C formé par Na^+

$$\text{O}^{2-}/\text{Na}^+ = [8]$$

3. Le rayon du sodium

• Calcul de a

$$\text{Masse volumique } \rho = \frac{\text{masse maille}}{\text{volume maille}} = \frac{Z \cdot M}{N_A a^3}$$

$$a = (Z \cdot M / (\rho \cdot N_A))^{1/3} = 566 \text{ pm.}$$

• Le rayon : la tangence se fait sur le quart de la diagonale du cube

$$\frac{a\sqrt{3}}{4} = R_O + R_{Na}$$

$$R_{Na} = \frac{a\sqrt{3}}{4} - R_O = 105 \text{ pm.}$$

Exercice 61. Le nombre d'ions

$$\text{Ni}^{2+} \quad \underbrace{8 \times 1/8}_{\text{sommet}} + \underbrace{1 \times 1}_{\text{intérieur}} = 2$$

$$\text{K}^+ \quad \underbrace{2 \times 4 \times 1/4}_{\text{arêtes verticales}} + \underbrace{2 \times 1}_{\text{intérieur}} = 4$$

$$\text{F}^- \quad \underbrace{2 \times 4 \times 1/4}_{\text{arêtes verticales}} + \underbrace{1 \times 8 \times 1/4}_{\text{arêtes horizontales}} + \underbrace{2 \times 1}_{\text{intérieur}} = 8$$

L'électroneutralité est bien respectée.

2. Formule chimique

On compte 2 motifs par maille : K_2NiF_4

3a. $d(\text{K}^+; \text{Ni}^{2+})$

$$\text{Sur } \text{O}_3 \quad d_1 = R_{\text{Ni}} + 2R_{\text{F}} + R_{\text{K}} = 474 \text{ pm}$$

b. $d(\text{F}^-; \text{F}^-)$

$$\text{Sur } \text{O}_2 \quad d_2 = R_{\text{F}} + 2R_{\text{Ni}} + R_{\text{F}} = 410 \text{ pm}$$

le paramètre c

$$c = \underbrace{d_2}_{\text{intérieur}} + \underbrace{2d_1}_{\text{arête}} = 1358 \text{ pm}$$

4a. Paramètres a et b

$$a = b = 2(R_{\text{F}} + R_{\text{Ni}}) = 410 \text{ pm}$$

b. Système

On a $a = b = c = \frac{\pi}{2}$ et $a = b \neq c$ Quadratique I

5. Masse volumique

$$\rho = \frac{\text{masse maille}}{\text{volume maille}} = \frac{M Z}{a^2 c N_A} = 3,1 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$$