

TP30 : Cristallographie

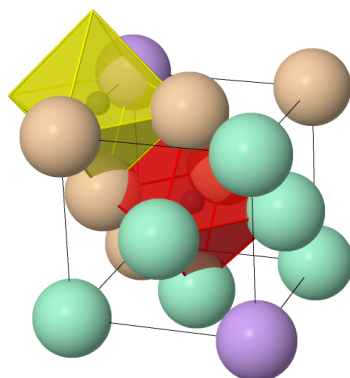
1 Objectif du TP

Le but de ce TP est d'étudier quelques structures cristallines en s'aidant de modèles numériques. C'est un TP qui ressemble beaucoup à un TD, il ne se prête pas vraiment à la rédaction d'un compte-rendu.

Tous les modèles présentés ici sont interactifs. On pourra faire des mesures de distances en double-cliquant sur un premier atome puis sur un second.

2 La structure cubique faces centrées

Cette structure a été vue en détails en cours. Rendez-vous sur la page : <https://mpsi.schleck.ovh/cristaux/cfc.html>



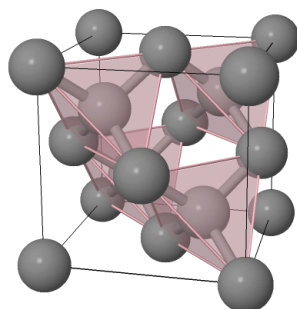
Assurez-vous que vous pouvez :

1. Décrire la maille et sa construction à partir d'un empilement compact de sphères dures.
2. Déterminer sa population.
3. Expliquer pourquoi la coordinence d'un atome est de 12.
4. Situer les sites tétraédriques et octaédriques et visualiser leur position dans l'empilement compact des plans.

Les calculs d'habitabilité des sites interstitiels doivent être connus, mais on ne les fera pas ici.

3 Le diamant

La structure cristalline du diamant est présentée sur cette page : <https://mpsi.schleck.ovh/cristaux/diamant.html>. Tous les atomes sont des atomes de carbone dont la masse molaire est $M_C = 12 \text{ g mol}^{-1}$.

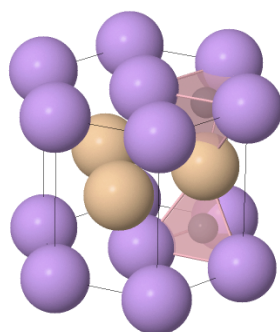


1. Observer la maille du diamant pour reconnaître une structure cubique faces centrées dans laquelle un site tétraédrique sur deux est occupé par un atome de carbone.
2. Déterminer la population d'une maille et la coordinence des atomes.

3. Déterminer la masse volumique du diamant.
4. Déterminer la relation entre le rayon covalent r de l'atome de carbone et le paramètre de maille a . En déduire la valeur de r . Vérifier en effectuant la mesure sur le modèle.
5. Déterminer la compacité de la structure.

4 La structure hexagonale compacte

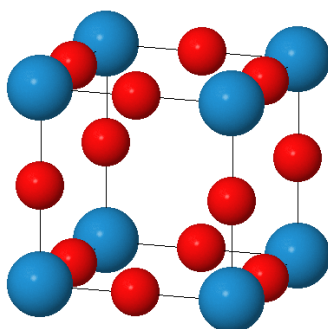
La structure hexagonale compacte est la structure cristalline de plusieurs métaux dont le titane, le zinc ou le cobalt. La structure du titane est présentée sur la page <https://mpsi.schleck.ovh/cristaux/hc.html>



1. Utiliser le modèle pour visualiser comment se construit cette structure à partir d'un empilement de plans compacts.
2. Repérer les sites interstitiels tétraédriques et octaédriques et vérifier qu'ils s'insèrent entre les plans comme dans la structure CFC.
3. On peut représenter cette structure par sa maille primitive (la plus petite possible) ou par une maille conventionnelle hexagonale. La maille primitive a une base losange de côté a et une hauteur c . Déterminer par le calcul le rapport c/a et vérifier la valeur sur le modèle.
4. Déterminer la masse volumique du titane.

5 Le trioxyde de tungstène

Le trioxyde de tungstène WO_3 solide est, en première approche, un solide ionique. Il présente une structure cubique représentée sur cette page : <https://mpsi.schleck.ovh/cristaux/wo3.html>.



1. Déterminer la compacité du cristal.
2. Le centre du cube et le centre des faces sont vides. Calculer le rayon maximal d'un élément qui pourrait s'insérer dans ces sites sans déformation. Vérifier le résultat sur le modèle.