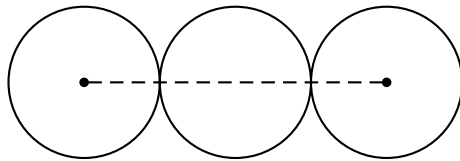


**Exercice 1. Fer métallique**

- Le contact entre atomes se fait le long des diagonales du cube. L'atome central est en contact avec les 8 atomes au sommets, la coordination est donc de 8.  
Remarque : on obtient (ce qui est normal) le même résultat avec les atomes aux sommets. Eux sont en contact avec les atomes centraux des 8 cubes auxquels ils appartiennent.
- La diagonale d'un cube a pour longueur  $L = a\sqrt{3}$ . Le long de la diagonale on a l'image suivante, soit  $L = 4R$ .



On en déduit  $a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$ .

- La population de la maille est de 2 atomes de fer (1 au centre et 8 aux sommets qui comptent pour 1/8).  
Le volume de matière dans la maille est donc  $V_{\text{motif}} = 2 \times \frac{4}{3}\pi R^3$ . Le volume de la maille est  $V_{\text{maille}} = a^3 = \frac{64R^3}{3\sqrt{3}}$ .

On en déduit la capacité :  $C = \frac{V_{\text{motif}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{\frac{8}{3}\pi R^3}{\frac{64}{3\sqrt{3}}R^3} = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} \simeq 0,68$ .

- Dans une maille, la masse de matière est  $m_{\text{maille}} = 2m_{\text{Fe}} = 2\frac{M}{N_A}$ .

Ainsi la masse volumique a pour expression  $\rho = \frac{m_{\text{maille}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{2\frac{M}{N_A}}{a^3} = \frac{3\sqrt{3}M}{32N_AR^3}$ .

Inversement,  $R = \sqrt[3]{\frac{3\sqrt{3}M}{32N_A\rho}} = 124 \text{ pm}$ .

**Exercice 2. Alliage cuivre-or**

- Sur les plans horizontaux, le contact se fait entre atomes d'or, plus gros que les atomes de cuivre. Ainsi  $a\sqrt{2} = 4r_{\text{Au}}$  d'où  $a = b = 2\sqrt{2}r_{\text{Au}} = 416 \text{ pm}$ .

Sur les faces rectangulaires, le long d'une diagonale :  $\sqrt{a^2 + c^2} = 2r_{\text{Cu}} + 2r_{\text{Au}}$  donc  $c = \sqrt{4(r_{\text{Cu}} + r_{\text{Au}})^2 - a^2} = 360 \text{ pm}$ .

- Les 8 sommets comptent pour 1 atome ( $8 \times 1/8$ ), et les 2 centres de faces carrées comptent pour 1 atome ( $2 \times 1/2$ ), il y a donc 2 atomes de cuivre par maille. Et les 4 autres centres de face comptent pour 2 atomes d'or ( $4 \times 1/2$ ).

- Calculée sur une maille, la fraction massique de l'or est  $p_{\text{Au}} = \frac{m(\text{Au})}{m_{\text{tot}}} = \frac{2m_{\text{Au}}}{2m_{\text{Cu}} + 2m_{\text{Au}}}$  soit  $p_{\text{Au}} = \frac{M_{\text{Au}}}{M_{\text{Cu}} + M_{\text{Au}}} = 75,6\%$ , ce qui représente 18,1 g d'or dans 24 g d'alliage. L'alliage est donc à 18 carats.

$$\rho = \frac{\text{masse de la maille}}{\text{volume de la maille}} = \frac{2(M_{\text{Cu}} + M_{\text{Au}})/N_A}{a^2c} = 13,9 \times 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$$

**Exercice 3. Fluorine**

- Les ions calcium occupent un réseau cfc, et les ions fluorure occupent tous les sites tétraédriques (ils forment un réseau cubique simple de paramètre  $a/2$ ).
- Chaque ion  $\text{F}^-$  est en contact avec les 4 ions  $\text{Ca}^{2+}$  qui encadrent son site tétraédrique. Inversement chaque ion  $\text{Ca}^{2+}$  participe à 8 huitièmes de cube donc est en contact avec 8 ions  $\text{F}^-$  des sites tétraédriques correspondants.
- Pour un réseau cfc, il y a 4 nœuds par maille, donc 4 ions  $\text{Ca}^{2+}$ , et sites tétraédriques donc 8 ions  $\text{F}^-$ , soit 4 motifs  $\text{CaF}_2$ . La stœchiométrie qui assure la neutralité est bien respectée.
- Les sites tétraédriques sont centrés au centres des huitièmes de cube, donc au quart de la grande diagonale. La distance d'un nœud du réseau cfc à un centre de site tétraédrique est donc de  $a\sqrt{3}/4$ . Elle est ici égale à la somme des rayons ioniques de  $\text{Ca}^{2+}$  et  $\text{F}^-$  qui sont en contact donc

$$a = \frac{4}{\sqrt{3}}(r_+(\text{Ca}^{2+}) + r_-(\text{F}^-)) = 536 \text{ pm}$$

La distance qui sépare les centres de deux ions  $\text{F}^-$  est  $a/2 = 268 \text{ pm}$  qui est de justesse supérieure à  $2r_-(\text{F}^-) = 266 \text{ pm}$  : les ions  $\text{F}^-$  ne se touchent pas.

$$C = \frac{\text{volume de matière}}{\text{volume de la maille}} = \frac{4\pi}{3}(4r_+(\text{Ca}^{2+})^3 + 8r_-(\text{F}^-)^3) / a^3 = 62\%$$

$$\rho = \frac{\text{masse de la maille}}{\text{volume de la maille}} = \frac{4M(\text{CaF}_2)/N_A}{a^3} = 3,37 \times 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$$

## Exercice 4. Alliage Titane-Aluminium-Nickel

1. La population de la maille est de : 4 Ti pour le réseau cfc, 4 Al pour les sites octaédriques et 8 Ni dans les sites tétraédriques.

La formule statistique est donc  $\text{AlNi}_2\text{Ti}$ .

2. Pour un empilement compact de sphères dures dans la structure cfc, le paramètre de maille  $a'$  est tel que  $a' = 2\sqrt{2}r_{\text{Ti}} = 416 \text{ pm}$ .

L'alliage d'insertion a un paramètre bien bien important, ce qui signifie que les atomes insérés élargissent la structure, et que les atomes de titane ne sont plus en contact.

3. Site octaédrique : le contact est sur une demi-arête du cube donc l'habitabilité du site est  $r_o = \frac{a}{2} - r_{\text{Ti}} = 147,5 \text{ pm}$ . Un atome d'aluminium a effectivement un rayon légèrement plus petit.

Site tétraédrique : le contact est sur un quart de diagonale du cube donc l'habitabilité du site est  $r_t = \frac{a\sqrt{3}}{4} - r_{\text{Ti}} = 108 \text{ pm}$ . On remarque que les atomes de nickel ont un rayon métallique plus grand que la taille du site, ce qui montre la limite du modèle des sphères dures.

4. Si on calcule la compacité en supposant que le volume des atomes est celui donné par le modèle des sphères dures, on obtient :

$$C = \frac{V(\text{atomes})}{V(\text{maille})} = \frac{4 \times \frac{4\pi}{3}r_{\text{Ti}}^3 + 4 \times \frac{4\pi}{3}r_{\text{Al}}^3 + 8 \times \frac{4\pi}{3}r_{\text{Ni}}^3}{a^3} = 0,81$$

Pour la masse volumique, on obtient :

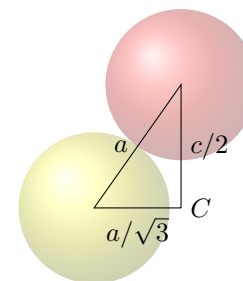
$$\rho = \frac{m(\text{atomes})}{V(\text{maille})} = \frac{4 \times \frac{M(\text{Ti})}{N_A} + 4 \times \frac{M(\text{Al})}{N_A} + 8 \times \frac{M(\text{Ni})}{N_A}}{a^3} = 6250 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$$

5. À qualité mécanique égale, cet alliage est bien plus léger, ce qui est important en aéronautique.

## Exercice 5. Magnésium

1. L'atome rouge et les trois atomes en-dessous forment un tétraèdre de côté  $a = 2R$ . L'atome rouge est situé à la verticale du centre  $C$  du triangle équilatéral au dessous. Le centre du triangle se situe au  $1/3$  de chaque hauteur du triangle. Or une hauteur de triangle équilatéral a pour longueur  $h = a\sqrt{3}/2$ . On en déduit que la distance entre le centre et un sommet du triangle est  $2h/3 = a\sqrt{3}/3 = a/\sqrt{3}$ .

En se plaçant dans le plan contenant le centre du triangle, un atome rouge et un atome jaune (voir ci-dessous), on obtient avec Pythagore que  $c/2 = a\sqrt{2}/3$ .



On en déduit le rapport  $\frac{c}{a} = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}}$ .

2. La multiplicité de la maille est de 2 (les 8 atomes jaunes aux sommets comptent chacun pour  $1/8$  en moyenne, soit 1 au total, plus 1 rouge au centre).

Le volume de la maille est  $V_{\text{maille}} = c \times a \times \frac{a\sqrt{3}}{2} = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2c = 12\sqrt{2}R^3$ .

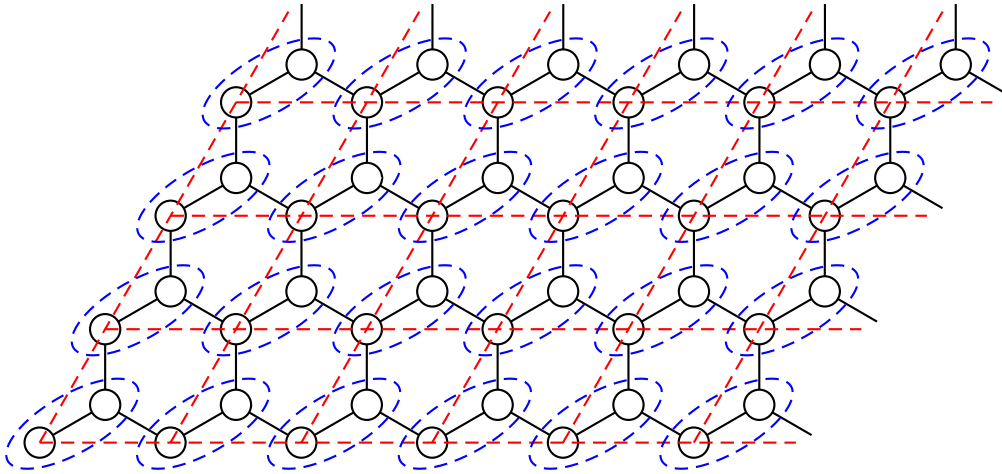
Le volume de matière est  $V_{\text{matière}} = 2 \times \frac{4}{3}\pi R^3$ .

La compacité vaut alors  $C = \frac{V_{\text{matière}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}}$ . C'est la même valeur que pour la maille cubique à faces centrées, ce qui est normal car ce sont toutes deux des mailles de compacité maximale pour des sphères dures.

3.  $\rho = \frac{m_{\text{matière}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{2M}{N_A 12\sqrt{2}R^3}$ .

Inversement,  $R = \sqrt[3]{\frac{M}{6\sqrt{2}\rho N_A}} = 139 \text{ pm}$ .

## Exercice 6. Graphène



1. La maille élémentaire est un losange (en rouge). Le motif est constitué de deux atomes de carbones (en bleu).
2. On considère un triangle dont deux côtés appartiennent à un polygone et le troisième est un côté de maille. Ce triangle est isocèle d'angle au sommet  $120^\circ$  dans d'angles de base  $30^\circ$ . La base a pour longueur  $a = 2d \cos(30^\circ) = d\sqrt{3} = 246 \text{ pm}$ .  
L'angle du losange au sommet associé est le double :  $\alpha = 60^\circ$  et l'autre angle est le complément à  $180^\circ$  :  $\beta = 120^\circ$ .
3. Il y a 2 atomes de carbone par maille, de masse  $m = 2M_C/N_A = 3,99 \times 10^{-26} \text{ kg}$ .  
L'aire du losange vaut  $S = a \times a \sin(\alpha) = a^2 \sqrt{3}/2 = 5,24 \times 10^{-20} \text{ m}^2$ , si bien que les 2 atomes occupent un volume  $V = Sh = 1,76 \times 10^{-29} \text{ m}^3$ .

La masse volumique du graphite est donc  $\rho = \frac{m}{V} = 2,27 \times 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ .