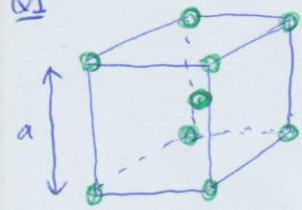


TD Cristallographie

Ex 1 : Fer α : cubique centré.

Q1



Q2 : population : $N_{cc} = 1 + 8 \times \frac{1}{8} = 2$
 coordination : 8

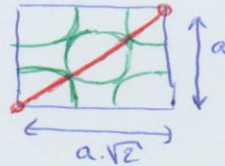
Q3 : paramètre de maille : $\rho = \frac{N \times M(Fe)}{N_A \times a^3} \Rightarrow a = \left(\frac{2 \times M(Fe)}{N_A \times \rho} \right)^{\frac{1}{3}}$

AN : $a = 287 \text{ pm}$ Arrête

Q4 : rayon atomique (métallique)

↳ ligne de tangence :

↳ diagonale du cube



$$4r = \sqrt{3} \cdot a$$

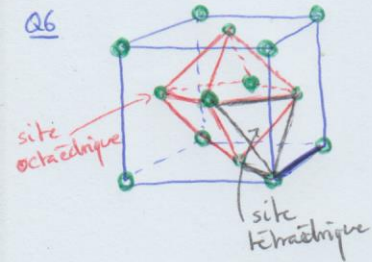
$$r = \frac{\sqrt{3}}{4} \cdot a$$

AN : $r = 124 \text{ pm}$

Q5 : compacité : $C = \frac{N \times \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r^3}{a^3} \Rightarrow \text{AN : } C = 0,68$

Fer δ : cubique faces centrées.

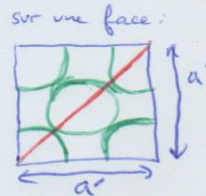
Q6



Q7 : population : $N_{fcc} = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$
 coordination : 12

Q8 : paramètre de maille :

ligne de tangence : diagonale d'une face



$$\sqrt{2} \cdot a' = 4 \cdot r_e$$

or on a déterminé r_e en Q4

↳ $a' = \frac{4 \cdot r_e}{\sqrt{2}}$ AN : $a' = 351 \text{ pm}$

Q9 : compacité : $C_{fcc} = \frac{4 \times \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot (r_e)^3}{a'^3} \Rightarrow \text{AN : } C_{fcc} = 0,74$

Q10 : masse volumique : $\rho_{fcc} = \frac{N_{fcc} \cdot M(Fe)}{N_A \cdot a'^3}$

AN : $\rho_{fcc} = 8,60 \times 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$

La maille FCC est plus compact : il y a plus de masse pour un volume donné.

↳ $\rho_{fcc} > \rho_\alpha$

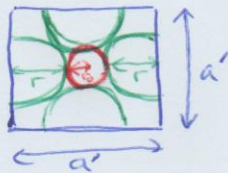
Site octaédrique

Q11 : En coupant le cube en 2 :

$$\Rightarrow 2r_o + 2r = a'$$

$$\Rightarrow r_o = \frac{a' - r}{2}$$

$$\Rightarrow r_o = r \cdot (\sqrt{2} - 1) \quad \text{AN : } r_o^{\text{at}} = 51 \text{ pm}$$



Q12 : Site tétraédrique

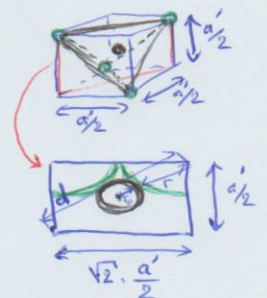
On s'intéresse à $\frac{1}{8}$ de cube :

$$r + r_o = \frac{d}{2} = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \frac{a'}{2}$$

$$r_o = \frac{\sqrt{3}}{4} \cdot a' - r$$

$$\Rightarrow r_o = r \cdot \left(\frac{\sqrt{3}}{2} - 1 \right)$$

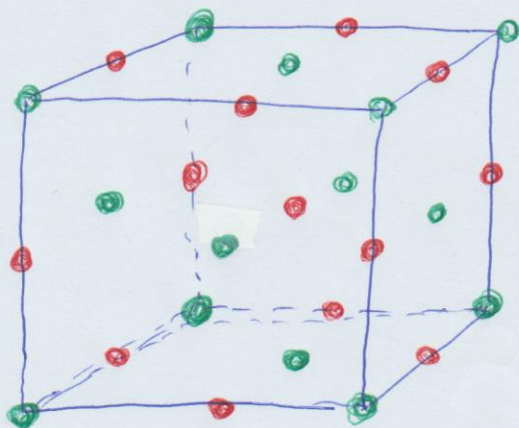
AN : $r_o^{\text{tet}} = 28 \text{ pm}$



Exercice 2

N
Ti

Q1



$$M(\text{Ti}) = 48,0 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$M(\text{N}) = 14,0 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$r(\text{Ti}) = 145 \text{ pm}$$

$$\text{paramètre de maille} : 425 \text{ nm}$$

Q2 • sites octaédriques : Au milieu de chaque arête de la maille CFC et un au centre

↳ 13 sites mais ceux sur les arêtes appartiennent à 4 mailles.

$$\Rightarrow \text{population d'azote } N_N = 1 + \frac{12}{4}$$

$$\Rightarrow N_N = 4$$

• coordination : $\begin{cases} \text{pour N} : 6 \\ \text{pour Ti} : 6 \end{cases}$

$$\text{Q3 : } \rho = \frac{N_N \times M(\text{N}) + N(\text{Ti}) \times M(\text{Ti})}{N_A \times a^3}$$

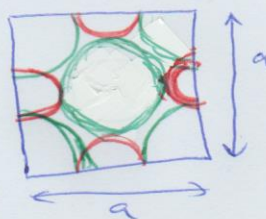
$$\text{avec } \begin{cases} N_N = 1 + \frac{12}{4} = 4 \\ N_{\text{Ti}} = 8 \times \frac{1}{8} + \frac{6}{2} = 4 \end{cases}$$

$$\text{AN : } \rho = 5,4 \times 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$$

Q4 : sur une face :

$$2r_{\text{Ti}} + 2r_{\text{N}} = a$$

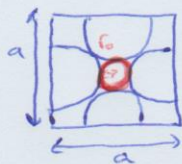
ligne de tangence = arête du cube.



Q5 : si les titanes ne sont pas tangents alors, selon la diagonale de la face :

$$\sqrt{2} \cdot a > 4 \cdot r_{\text{Ti}}$$

Q6 : habitabilité du site octaédrique :



$$2r_{\text{O}} + 2r_{\text{Ti}} = a$$

$$\text{Or dans une maille CFC : } a = 2\sqrt{2} \cdot r$$

$$\Rightarrow r_{\text{O}} = r_{\text{Ti}} \cdot (\sqrt{2} - 1)$$

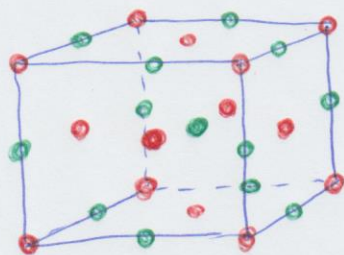
$$\text{AN : } r_{\text{O}} = 60 \text{ pm}$$

Q7 : $r_{\text{N}} > r_{\text{O}}$ mais $r_{\text{N}} \approx r_{\text{O}} \Rightarrow$ l'azote occupe les sites octaédrique mais déforme légèrement la maille
↳ la tangence entre les atomes de Ti est perdue.



Exercice 3: Galène

Q1



S^{2-}, Pb^{2+}

Q2: coordonnée: pour S^{2-} : 6
pour Pb^{2+} : 6.

Q3: densité $\rightarrow$ masse volumique: $\rho = 7,62 \times 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$

$$\text{or } \rho = \frac{N_{S^{2-}} \cdot M(S) + N_{Pb^{2+}} \cdot M(Pb)}{N_A \cdot a^3}$$

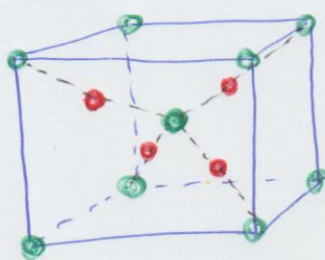
$$\text{population: } \begin{cases} N_{S^{2-}} = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4 \\ N_{Pb^{2+}} = 1 + 12 \times \frac{1}{4} = 4 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \boxed{a = \left(\frac{4 \cdot (M(S) + M(Pb))}{N_A \cdot \rho} \right)^{1/3}} \quad \text{AN: } \underline{a = 593 \text{ pm}}$$

Exercice 4: Cuprite

Q1

O^{2-}, Cu^{+}



Q2: Un cristal ionique est un assemblage électriquement neutre d'ions positifs et d'ions négatifs de grande différence d'électronégativité.

Un cristal ionique est cassant et dur.

Les cristaux covalents sont plus durs.

Les cristaux moléculaires sont plus fragiles.

$$\left. \begin{aligned} \text{Q3: } N_{O^{2-}} &= 1 + 8 \times \frac{1}{8} = 2 \\ N_{Cu^{+}} &= 4 \end{aligned} \right\}$$

Formule de la cuprite: Cu_2O

$$\text{Q4: } \rho = \frac{4 \cdot M(Cu) + 2 \cdot M(O)}{N_A \cdot a^3} = \frac{2 \cdot M(Cu_2O)}{N_A \cdot a^3}$$

$$\Rightarrow \boxed{a = \left(\frac{2 \cdot M(Cu_2O)}{N_A \cdot \rho} \right)^{1/3}}$$

$$\text{AN: } \underline{a = 4,3 \times 10^2 \text{ pm.}}$$