D.S. de chimie PSI 1

Lundi 03 mars 2025 - Durée 1h00

Vous devez écrire au stylo bic bleu ou noir. L'utilisation d'un correcteur est interdite.

Donnée pour l'ensemble du DS : Nombre d'Avogadro : $N_a = 6,02.10^{23}\ mol^{-1}$.

Problème 1 : Étude cristallographique de l'aluminium Al

L'aluminium comme de nombreux métaux cristallise suivant la structure **cubique à face centrée**.

1. Représenter l'allure d'une maille conventionnelle.
2. Comment s'effectue le contact entre les atomes ? En déduire la relation entre le paramètre de maille a et le rayon atomique r_{Al}.
3. Combien y a-t-il d'atomes par maille ? Justifier.
4. Définir la compacité C puis l'évaluer numériquement.
5. Soient M_{Al} la masse molaire de l'aluminium, r_{Al} son rayon atomique, N_a le nombre d'Avogadro et ρ_{Al} la masse volumique de l'aluminium, déterminer la relation entre M_{Al}, r_{Al}, N_a et ρ_{Al}. Application numérique : évaluer la densité d_{Al} de l'aluminium.

Données :

— masses molaires atomiques : $M_{Al} = 27\ g.mol^{-1}$

— rayons atomiques : $r_{Al} = 143\ pm$

Problème 2 : Stockage du dihydrogène

Un des problèmes de l'utilisation du dihydrogène comme vecteur énergétique est son stockage. Des alliages à base de fer et de titane permettent le stockage du dihydrogène. Dans ces composés, l'hydrogène est stocké sous forme atomique (H) et non pas moléculaire (H_2). L'alliage utilisé ici présente une structure cubique dans laquelle les atomes de fer occupent les sommets de la maille cubique et un atome de titane son centre. Les sites octaédriques de la structure sont de deux types : type A (situés au milieu de chaque arête) et type B (situés au centre de chaque face).

1. Représenter la maille cubique de l'alliage de fer/titane.
2. Calculer le paramètre de maille a associé à cette maille sachant que les atomes de fer et de titane sont en contact mais pas les atomes de fer entre eux.
3. Les sites octaédriques de type B ont-ils des octaèdres avec des arêtes toutes de la même longueur ? Justifier. Ces derniers seront-t-ils déformés après introduction d'un atome d'hydrogène ? Justifier.
4. Des atomes d'hydrogène occupent la totalité des sites octaédrique de type B. Indiquer le nombre d'atomes de fer, de titane et d'hydrogène par maille. Justifier. En déduire la formule de cet « alliage hydrogéné » sous la forme $Fe_xTi_yH_z$.
5. Calculer le volume molaire V'_m du dihydrogène H_2 stocké dans ce composé en supposant qu'il en occupe tout le volume (on prendra pour valeur de a celle trouvée à la question 2).
   Comparer au volume molaire $V_m = 24\ L.mol^{-1}$ d'un gaz parfait à $T = 25°C$ et $P = 1\ bar$. Conclure.

Données :

— rayons métalliques : $r_{Fe} = 125\ pm$, $r_{Ti} = 145\ pm$.

— rayon atomique : $r_H = 35\ pm$.

Problème 3 : Question ouverte

Le fer peut cristalliser sous deux formes selon la température. A basse température, le fer α cristallise dans une structure cubique centrée CC. Les atomes de fer sont situés sur tous les sommets d'un cube et au centre du cube.

La masse volumique du fer α vaut $\rho = 7,84.10^3\ kg.m^{-3}$

En déduire, par le calcul, la valeur du rayon métallique r_{Fe} du fer.

Données :

— masse molaire atomique : $M_{Fe} = 55,8\ g.mol^{-1}$