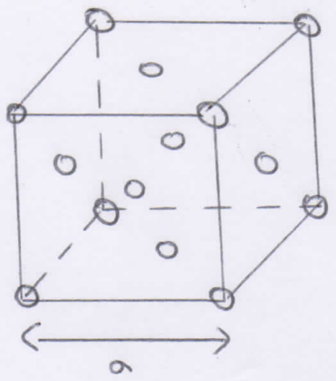
Aluminium.

1)



2) le contact se fait suivant la diagonale d'une face.

$$\boxed{a\sqrt{2} = 4\, r_{Al}}$$

3) $Z = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$

sommets du cube — centre des faces.

4) $C = \dfrac{\text{Volumes sphères}}{\text{Volume maille.}} = \dfrac{Z\,\frac{4}{3}\pi r_{Al}^3}{a^3} = \dfrac{16\,\pi}{3}\left(\dfrac{r_{Al}}{a}\right)^3$

avec $\dfrac{r_{Al}}{a} = \dfrac{\sqrt{2}}{4} = \dfrac{1}{2\sqrt{2}}$ $\qquad C = \dfrac{\cancel{16}\,\pi}{3}\;\dfrac{1}{\cancel{16}\sqrt{2}}$

$$\boxed{C = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0{,}74}$$

5) $\rho_{Al} = \left(\dfrac{m}{V}\right)_{maille} = \dfrac{M_{Al}\, Z}{\mathcal{N}_a\, a^3} = \dfrac{4\, M_{Al}}{\mathcal{N}_a \left(\dfrac{4\, r_{Al}}{\sqrt{2}}\right)^3}$

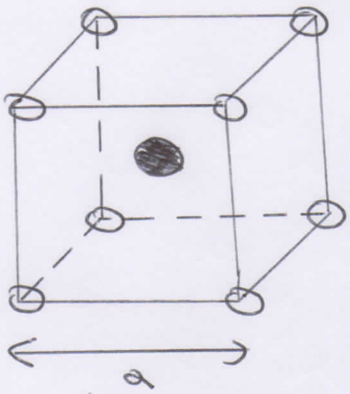
$\rho_{Al} = \dfrac{\cancel{4}\, M_{Al} \times 2\sqrt{2}}{\mathcal{N}_a \times \cancel{4} \times 16 \times r_{Al}^3}$ $\qquad \boxed{\rho_{Al} = \dfrac{M_{Al}}{4\sqrt{2}\,\mathcal{N}_a\, r_{Al}^3}}$

$\rho_{Al} = \dfrac{27 \cdot 10^{-3}}{4 \sqrt{2} \times 6{,}02 \cdot 10^{23} \times (143 \cdot 10^{-12})^3} = \underline{2710 \text{ kg/m}^3}$

$d_{Al} = \dfrac{\rho_{Al}}{\rho_{H_2O}} = \dfrac{2710}{1000} = \underline{2{,}71}$

stockage

1)



○ Fe

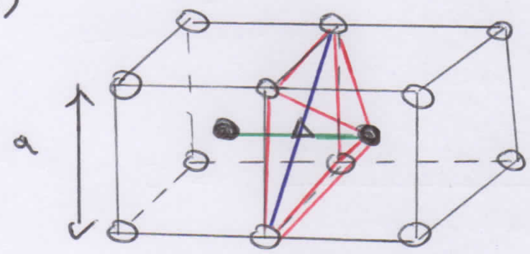
● Ti

2) contact Fe – Ti suivant la diagonale du cube de longueur $a\sqrt{3}$.

soit $a\sqrt{3} = 2(r_{Ti} + r_{Fe})$

$$\boxed{a = \frac{2}{\sqrt{3}}(r_{Ti} + r_{Fe})} = \underline{312 \text{ pm}}$$

3)



△ sites O (type B)

* dans l'octaèdre il y a 4 arêtes de longueur a.
et 8 arêtes de longueur $\frac{a\sqrt{3}}{2}$
(moitié de la diagonale d'un cube)

Donc les arêtes n'ont pas toutes la même longueur.

* on calcule l'habitabilité d'un site O (type B).
on prend la contrainte la plus forte à définir entre 2

soit $a = 2(r_{Ti} + r_O)$ $\quad r_O = \frac{a}{2} - r_{Ti} = \underline{11 \text{ pm}}.$

Soit $a\sqrt{2} = 2(r_{Fe} + r_O)$ $\quad r_O = \frac{a\sqrt{2}}{2} - r_{Fe} = \underline{96 \text{ pm}}.$

$r_H > r_O = 11$ pm il y a <u>déformation</u>.

4) $Z_{Fe} = 8 \times \frac{1}{8} = 1$
sommets du cube

$Z_{Ti} = 1$
centre du cube.

$Z_H = 6 \times \frac{1}{2} = 3$
centre des faces

soit la formule $\boxed{FeTiH_3}$

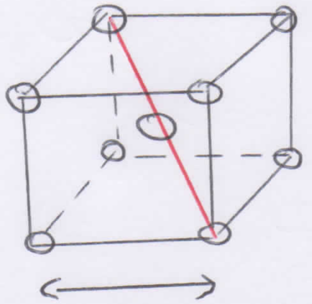
5) Il y a $\frac{3}{2}$ H_2 par maille pour un volume a^3.

d'où $\frac{V'_m}{a^3} = \frac{N_a}{3/2}$

$$\boxed{V'_m = \frac{2 N_a a^3}{3}} = 1{,}2 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3/\text{mol} = \underline{1{,}2 \cdot 10^{-2} \text{ L/mol}}.$$

$\frac{V_m}{V'_m} = 1970$ on stocke beaucoup plus d'hydrogène dans l'alliage.

question ouverte.



* il y a contact suivant la diagonale du cube.

$$4 r_{Fe} = a\sqrt{3}.$$

* il reste à relier ρ et a

$$\rho = \left(\frac{m}{V}\right)_{maille} = \frac{Z M_{Fe}}{\mathcal{N}_a a^3}$$

$$a = \left(\frac{Z M_{Fe}}{\mathcal{N}_a \rho}\right)^{\frac{1}{3}} = \frac{4 r_{Fe}}{\sqrt{3}}$$

$$\boxed{r_{Fe} = \frac{\sqrt{3}}{4}\left(\frac{Z M_{Fe}}{\mathcal{N}_a \rho}\right)^{\frac{1}{3}}} = \frac{\sqrt{3}}{4}\left(\frac{2 \times 55{,}8 . 10^{-3}}{6{,}02 . 10^{23} \times 7840}\right)^{\frac{1}{3}} = \underline{124 \text{ pm}}.$$

avec $Z = 8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$

population de la maille