

## Définitions S2.E

### Extrait programme officiel PCSI option PC

#### 3. Structures microscopiques et propriétés physiques des solides

##### Modèle du cristal parfait

Solides amorphes, cristallins, semi-cristallins, polycristallins ; variétés allotropiques.

Description du modèle du cristal parfait ; population, coordinence, compacité, masse volumique.

Rayons métallique, covalent, de van der Waals ou ionique et évolution dans le tableau périodique.

Modèles d'empilement compact de sphères identiques.

Maille conventionnelle CFC et ses sites interstitiels.

Limites du modèle du cristal parfait.

##### Métaux et alliages

Cohésion et propriétés physiques des métaux.

Alliages de substitution et d'insertion.

- Décrire un cristal parfait comme un assemblage de mailles parallélépipédiques.
- Déterminer la population, la coordinence et la compacité pour une structure fournie.
- Déterminer la valeur de la masse volumique d'un matériau cristallisé selon une structure cristalline fournie.
- Relier le rayon métallique, covalent, de van der Waals ou ionique, selon le cas, aux paramètres d'une maille donnée.
- Citer l'ordre de grandeur de ces rayons.
- Utiliser un logiciel ou des modèles cristallins pour visualiser des mailles et des sites interstitiels et pour déterminer des paramètres géométriques.
- Localiser les interstices tétraédriques et octaédriques entre les plans d'empilement.
- Localiser et dénombrer les sites tétraédriques et octaédriques d'une maille CFC et déterminer leur habitabilité.
- Confronter des données expérimentales aux prévisions du modèle.

- Positionner dans le tableau périodique et reconnaître métaux et non métaux.
- Relier les caractéristiques de la liaison métallique (ordre de grandeur énergétique, non directionnalité) aux propriétés macroscopiques des métaux.
- Citer des exemples d'alliage et leur intérêt par rapport à des métaux purs.
- Prévoir la possibilité de réaliser des alliages de substitution ou d'insertion selon les caractéristiques des atomes mis en jeu.

## Solides covalents et moléculaires

Cohésion et propriétés physiques des solides covalents et moléculaires.

- Identifier les liaisons covalentes, les interactions de van der Waals et les liaisons hydrogène dans un cristal de structure donnée.
- Relier les caractéristiques des liaisons covalentes, des interactions de van der Waals et des liaisons hydrogène (directionnalité ou non, ordre de grandeur des énergies mises en jeu) et les propriétés macroscopiques des solides correspondants.
- Comparer les propriétés macroscopiques du diamant et du graphite et interpréter les différences en relation avec les structures microscopiques (structures cristallines fournies).

## Solides ioniques

Cohésion et propriétés physiques des solides ioniques.

Rayon ionique.

- Relier les caractéristiques de l'interaction ionique dans le cadre du modèle du solide ionique parfait (ordre de grandeur de l'énergie d'interaction, non directionnalité, charge localisée) avec les propriétés macroscopiques des solides ioniques.
- Comparer le rayon d'un atome et ceux de ses ions.
- Associer la tangence anion-cation et la non tangence anion-anion, dans une structure cubique de type AB fournie, à la valeur du paramètre de maille.

## Capacités exigibles

- Savoir dessiner une maille conventionnelle en mode éclaté en perspective ou en projection sur une face.
- Savoir dessiner un plan de coupe quelconque de la maille en faisant apparaître la tangence des motifs dans le modèle des sphères dures.
- Savoir les distances entre les différents points caractéristiques d'un cube (sommet, milieu des arêtes, centre des faces et centre du cube).
- Savoir trouver les relations entre les paramètres de maille et les distances entre les motifs. Faire le lien avec les différents rayons dans le modèle des sphères dures.
- Savoir calculer le rayon maximal d'un motif sphérique qui peut occuper l'espace vide des différents sites interstitiels (cubique, octaédrique et tétraédrique).
- Savoir prévoir si une structure de cristal ionique respecte les propriétés de stabilité.
- Savoir faire la différence entre une maille élémentaire et conventionnelle.
- Savoir relier la densité ou la masse volumique aux paramètres de la maille.

## Définitions

**Réseau** : ensemble de points de l'espace (nœuds) répartis périodiquement. Un réseau est défini par trois vecteurs notés  $\vec{a}, \vec{b}$  et  $\vec{c}$  tels que tout vecteur qui relie deux nœuds ( $N_1 N_2$ ) quelconques du réseau soit de la forme :  $\vec{N_1 N_2} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$  ;  $n_1, n_2$  et  $n_3$  étant des entiers relatifs

**Maille** : volume de l'espace qui le remplit totalement par translation. On dit que la maille pave l'espace. Une maille doit contenir en propre un nombre entier de nœuds. Une maille qui contient un nœud en propre est dite élémentaire (ou primitive ou simple).

**Motif** : il peut être constitué d'un ou de plusieurs atomes, de plusieurs ions, d'une ou de plusieurs molécules. Dans tous les cas le motif est électriquement neutre.

**Cristal** : association d'un réseau et d'un motif (parfois appelé base).

**Cristal parfait** : modèle qui considère qu'un cristal est un empilement ordonné (sans irrégularités) et infini (sans surfaces) d'atomes, d'ions ou de molécules.

**Défauts cristallins** : tout cristal présente des défauts par rapport au modèle du cristal parfait, le premier est la surface extérieure du cristal, les autres étant des défauts ponctuels ou macroscopiques.

**Modes de Bravais** : il en existe 4 : primitif (P), centré (I), bases centrées (S) et faces centrées (F).

**Maille conventionnelle** : plus commode à dessiner que la maille élémentaire, elle est multiple (possède plusieurs nœuds et peut être décrite par exemple par les 3 modes de Bravais non primitif).

**Coordinance** : c'est le nombre de plus proches voisins que possède un point. Si le motif est monoatomique, la coordinance de l'atome est celle du réseau. Si le motif est composé de plusieurs espèces on peut calculer plusieurs types de coordinales (par exemple : anion/cation, cation/anion, anion/anion et cation/cation).

**Nombre de motif par maille (population)** : c'est le nombre de motifs en propre à la maille qui dépend de la (ou des) position(s) et de la fraction de motif associée. Si le motif possède plusieurs espèces chimiques, le nombre des espèces chimiques par maille dépend du nombre de motif mais aussi de leur stœchiométrie.

**Masse volumique** : c'est le rapport de la masse du cristal sur le volume du cristal, cela peut être rapporté à l'étude de la maille.

**Densité** : c'est le rapport de la masse volumique du cristal sur la masse volumique de l'eau à 0°C.

**Compacité** : c'est le rapport du volume occupé par les motifs (dans le modèle des sphères dures) sur le volume du cristal, cela peut être rapporté à l'étude de la maille.

**Empilement compact** : arrangement régulier de compacité maximale, dans le cas d'un seul motif modélisé par une sphère dure la valeur de sa compacité est de 0,74.

**Site interstitiel** : espace vide dans la structure cristalline délimité par les nuages électroniques des motifs qui constituent un environnement géométrique régulier (cube, octaèdre ou tétraèdre).

**Alliage** : c'est la combinaison d'un élément métallique avec un ou plusieurs autres éléments.

**Alliage de substitution** : les autres éléments occupent des positions de l'élément principale dans le réseau.

**Alliage d'insertion** : les autres éléments occupent des positions interstitielles du cristal.

**Cristal métallique** : cristal dont la cohésion entre des atomes métalliques est due à l'existence de liaisons métalliques.

**Cristal covalent** : cristal dont la cohésion entre des atomes non-métalliques est due à l'existence de liaisons covalentes.

**Cristal moléculaire** : cristal dont la cohésion entre des molécules est due à l'existence de liaisons

de Van der Waals et/ou de « liaisons hydrogène ».

**Cristal ionique** : cristal dont la cohésion entre des espèces ioniques est due à l'existence de liaisons ioniques, dans le cas du solide il faut que les attractions l'emportent sur les répulsions.

**Variétés allotropiques** : un même composé chimique peut exister sous plusieurs structures cristallines différentes en fonction de la température, on parle des différentes variétés allotropiques.

Système	Mode P	Mode I	Mode F	Mode S
Cubique				
Hexagonal				
Quadratique				
Rhomboédrique				
Orthorhombique				
Monoclinique				
Triclinique				

### Les 14 réseaux de BRAVAIS