

TDA5 – Étude des cristaux

Données :

— $\mathcal{N}_A = 6,0221408 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

Applications directes du cours

Exercice 1: Etude de l'aluminium



On considère l'aluminium qui cristallise dans le système *cubique à faces centrées*. Sa masse molaire vaut $M_{Al} = 26,98 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ et sa masse volumique $\rho_{Al} = 2700 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$.

- 1) Dessiner la maille élémentaire et préciser sa population.
- 2) Déterminer les coordonnées des atomes d'aluminium dans une base adaptée que vous préciserez.
- 3) Evaluer le paramètre a de la maille de l'aluminium.
- 4) En déduire la valeur de son rayon atomique r_{Al} .

Exercice 2: Etude du calcium



Le calcium est un métal qui cristallise dans un système *cubique à faces centrées*. Sa masse volumique vaut $1550 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$. La masse molaire du calcium vaut $40,08 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$.

- 1) Dessiner une maille élémentaire du cristal.
- 2) Déterminer la population de la maille et la coordinence des atomes.
- 3) Établir la relation entre le paramètre de maille a et le rayon métallique d'un atome de calcium.
- 4) Exprimer puis calculer la compacité associée à la maille. Commenter.
- 5) Déterminer le paramètre de maille de cette structure. Sachant que les mesures par DRX donnent 556 pm, commenter la valeur obtenue.

Exercice 3: Etude du fer α



Le fer dit α cristallise dans un réseau *cubique centré*. Dans une base orthogonale dont les vecteurs de base ont pour norme a , les coordonnées des atomes sont : $(0,0,0)$ - $(0,1,0)$ - $(0,1,1)$ - $(0,0,1)$ - $(1,0,0)$ - $(1,1,0)$ - $(1,1,1)$ - $(1,0,1)$ - $(1/2,1/2,1/2)$. La masse molaire du fer vaut $55,84 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ et le paramètre de maille vaut 288,6 pm.

- 1) Dessiner la maille du fer α .
- 2) Justifier le besoin de préciser α à propos du fer dans cet exercice. Que cela suggère-t-il ?
- 3) Déterminer la coordinence du Fer.
- 4) Déterminer la population de la maille.
- 5) Déterminer la masse volumique du fer α .
- 6) Calculer le rayon atomique R du fer.
- 7) Calculer la compacité C de la maille. Commenter.

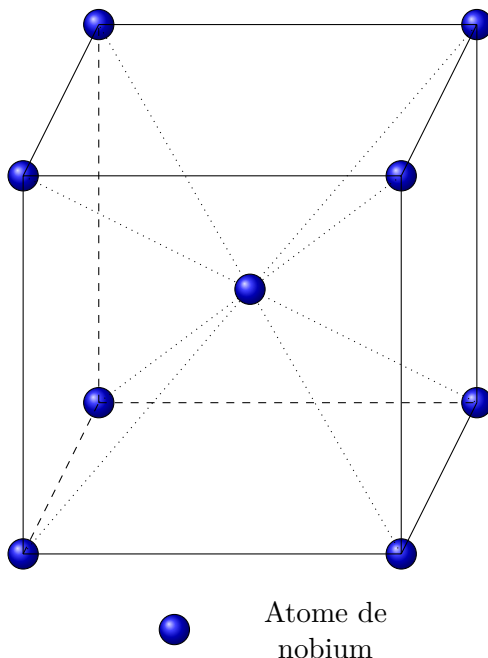
Exercice 4: Etude du polonium

Le polonium cristallise dans une structure *cubique simple*. Dans une base orthogonale dont les vecteurs de base ont pour norme a , les coordonnées des atomes sont : $(0,0,0)$ - $(0,1,0)$ - $(0,1,1)$ - $(0,0,1)$ - $(1,0,0)$ - $(1,1,1)$ - $(1,0,1)$. Le paramètre de maille vaut 336 pm et la masse molaire du polonium vaut $209,98 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$.

- 1) Représenter la maille élémentaire du polonium.
- 2) Déterminer la coordinnence du polonium et la population de la maille.
- 3) Préciser la relation entre a et r .
- 4) Déterminer la masse volumique du polonium.
- 5) Déterminer la compacité du polonium et commenter.

Exercice 5: Etude du niobium

Le niobium est un métal qui cristallise dans un système *cubique centré*. Le paramètre de maille a vaut 330 pm. La masse molaire du niobium vaut $92,90 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$. On donne la maille élémentaire ci dessous :



- 1) Déterminer la population de la maille et la coordinnence des atomes.
- 2) Déterminer le rayon métallique du niobium.
- 3) Déterminer la masse volumique.
- 4) Déterminer la compacité. Commenter.

Pour réfléchir un peu plus**Exercice 6: Détermination de maille**

Le vanadium cristallise avec une structure *cubique*. Il y en a trois possibles :

Cubique simple : Un atome à chaque sommet du cube.

Cubique centrée : Un atome à chaque sommet du cube et un atome au centre du cube.

Cubique à faces centrées : Un atome à chaque sommet du cube et un atome au centre de chaque face.

La densité du vanadium est de 5,96, son rayon atomique est de 133 pm et sa masse molaire de $50,94 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$.

- 1) Dessiner la maille élémentaire pour chaque structure.
- 2) Préciser la condition de tangence de chaque maille et la population associée. En déduire le paramètre pour chaque maille possible.
- 3) Calculer la masse volumique attendue pour chaque structure. Conclure alors sur la structure réelle.

Exercice 7: Etude de l'arséniure de gallium



L'arséniure de gallium (AsGa) cristallise selon une structure de type blende (ZnS) dans laquelle les atomes d'arsenic forment un réseau c.f.c. Les atomes de gallium occupent certains des sites tétraédriques. On donne les informations suivantes :

Atome	Rayon atomique (pm)	Masse molaire atomique ($\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$)
Ga	126	69,7
As	119	74,9

- 1) Déterminer le nombre d'atome d'arsenic par maille. En déduire le nombre de site tétraédriques occupés par les atomes de gallium.
- 2) Représenter la maille de la structure étudiée.
- 3) Déterminer la coordinence des atomes.
- 4) Déterminer la masse volumique de l'arséniure de gallium.
- 5) Déterminer le rayon des sites tétraédriques. Commenter.

Exercice 8: Etude du sulfure de plomb



Le procédé d'extraction du plomb par voie sèche repose sur le traitement d'un minéral, le sulfure de plomb. Ce dernier possède une structure NaCl, c'est-à-dire que les atomes de soufre occupent une structure c.f.c. et que les atomes de plomb s'insèrent dans les sites octaédriques. On indique les rayons ioniques du sulfure S^{2-} , 184 pm, et du plomb Pb^{2+} , 118 pm. On précise $M_{\text{S}} = 32,1 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ et $M_{\text{Pb}} = 207,2 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$;

- 1) Représenter la maille.
- 2) Déterminer la population de la maille et la coordinence des atomes.
- 3) Déterminer le paramètre de maille a .
- 4) Déterminer la masse volumique du sulfure de plomb.
- 5) Déterminer la compacité de la structure. Commenter.
- 6) Vérifier que le plomb peut bien s'insérer dans les sites octaédriques. Commenter.
- 7) La masse volumique mesurée est $7,6 \text{ t} \cdot \text{m}^{-3}$. En déduire le paramètre de maille réel et commenter au regard question précédente.

Exercice 9: Structure de la perovskite



La perovskite a pour formule brute $\text{Ca}_x\text{Ti}_y\text{O}_z$. Elle cristallise dans un réseau cubique de paramètre de maille $a = 384 \text{ pm}$. Les atomes de calcium occupent les sommets du cube, les oxygènes sont au centre des faces et les titanes sont au milieu du cube.

Atome	Ca^{2+}	Ti^{4+}	O^{2-}
Masse molaire atomique ($\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$)	40,1	47,9	16,0
Rayon ionique (pm)	106	60	140

- 1) Préciser la nature du cristal de perovskite et en déduire les principales propriétés attendues.
- 2) Représenter la maille de la perovskite.
- 3) Déterminer la population de chacun des ions. En déduire la formule brute de la pérovskite.

- 4) Déterminer la coordinence de chacun des ions.
- 5) Déterminer la masse volumique de ce cristal.
- 6) Déterminer la compacité de cette structure.
- 7) Etablir les relations de tangence et conclure sur la validité du modèle.

Exercice 10: Structure de l'alliage Ag_xAu_y



On étudie l'alliage argent/or de formule brute Ag_xAu_y . L'argent cristallise naturellement dans un réseau c.f.c. L'or représente environ 10% en masse de l'alliage.

Atome	Ag	Au
Masse molaire atomique ($\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$)	107,87	196,97
Rayon ionique (pm)	144	147

- 1) Déterminer le paramètre de maille d'un cristal d'argent pur et en déduire sa masse volumique.
- 2) Déterminer le rayon des sites octaédriques et tétraédriques dans l'argent pur en fonction du rayon de l'argent puis les calculer.
- 3) Préciser la nature de l'alliage Ag/Au.
- 4) Déterminer le nombre moyen d'atome d'or dans une maille et la formule brute de l'alliage.
- 5) Déterminer la masse volumique de l'alliage, en considérant que le paramètre de maille n'a pas été modifié.

Exercice 11: Structure de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ni}_y\text{Ti}_z$



L'alliage le plus utilisé dans l'aéronautique a pour formule $\text{Al}_x\text{Ni}_y\text{Ti}_z$. Le titane y est présent sous forme β , c'est-à-dire une structure c.f.c. Les atomes d'aluminium occupent la totalité des sites octaédriques et ceux de nickel occupent les sites tétraédriques. Le paramètre de maille vaut $a = 598$ pm. On donne les informations suivantes :

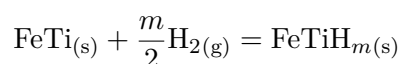
Atome	Rayon atomique (pm)	Masse molaire atomique ($\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$)
Ti	147	47.90
Al	143	26.98
Ni	124	58.70

- 1) Dessiner la maille.
- 2) Déterminer la population de la maille et la coordinence des atomes. En déduire la formule brute de l'alliage.
- 3) Calculer le rayon des sites octaédriques et tétraédriques. L'inversion de l'occupation est-elle possible ?
- 4) Déterminer la compacité. Commenter.
- 5) Comparer les valeurs trouvées précédemment aux caractéristiques moyennes d'un acier courant : $\rho_{\text{acier}} = 7800 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, $C = 0.70$. A qualités mécaniques équivalentes, expliquer en quoi l'alliage de titane présente un intérêt.

Exercice 12: Stockage du dihydrogène dans un cristal



Les entreprises se tournent de plus en plus vers le dihydrogène comme source d'énergie alternative. Le problème principal de cette dernière est le stockage. En effet, le dihydrogène est un gaz inflammable qui est très difficile à conserver dans une enceinte hermétique. On se propose ici d'étudier le stockage du dihydrogène au sein d'un cristal de FeTi. Cela se traduit par l'équation :



L'alliage FeTi a une structure cubique simple. Le titane occupe les sommets d'un cube et le fer le centre. Les atomes d'hydrogène se placent dans les sites interstitiels en contact avec deux atomes de fer et quatre de titane.

- 1) Représenter la maille sans les atomes d'hydrogène.
- 2) Déterminer la population de la maille et la coordinence de chaque atome.
- 3) Déterminer où se placent les atomes d'hydrogène et compléter la maille précédente.
- 4) En déduire la formule brute du cristal avec le maximum d'atomes d'hydrogène adsorbés.
- 5) En réalité, la formule est plutôt $\text{TiFeH}_{1,9}$. Déterminer alors la capacité volumique d'adsorption de dihydrogène, en kg de dihydrogène absorbé par m^3 d'alliage.

Exercice 13: Etude du diiode



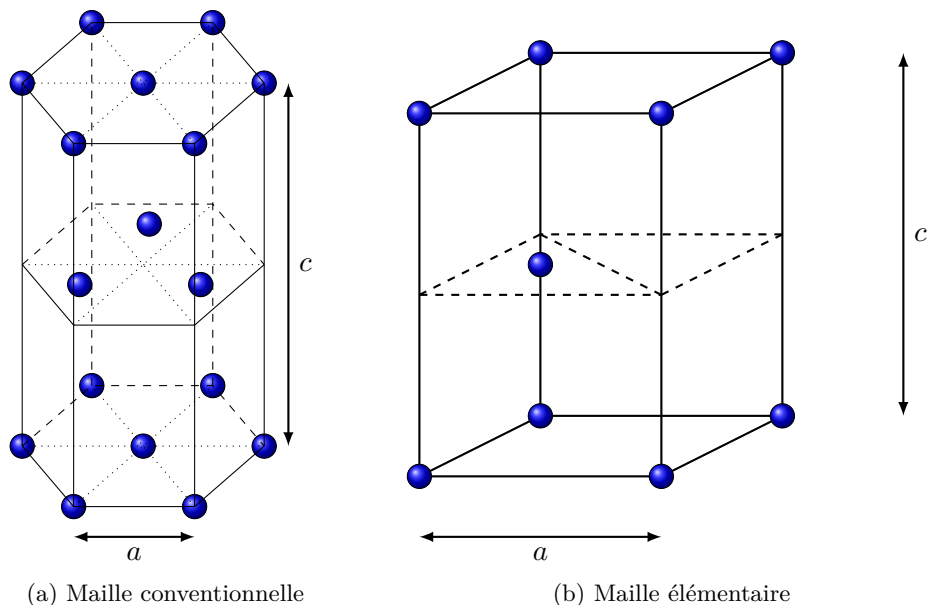
Le diiode solide cristallise suivant un système orthorhombique à faces centrées dont les paramètres de maille sont $a = 725 \text{ pm}$, $b = 977 \text{ pm}$ et $c = 478 \text{ pm}$. On indique que la masse molaire atomique de l'iode vaut $126,9 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$.

- 1) Préciser la nature du cristal de diiode. En déduire alors les propriétés macroscopiques attendues.
- 2) Dessiner la maille associée au diiode.
- 3) Quelle est la population de la maille?
- 4) Peut-on déterminer la compacité de la maille?
- 5) Déterminer la masse volumique du diiode.

Exercice 14: Etude du titane



Le titane est un métal qui cristallise dans un système *hexagonal compact*. Les paramètres de maille sont $a=295,1 \text{ pm}$ et $c=469,2 \text{ pm}$. La masse molaire du titane est de $47,87 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$. On donne la maille conventionnelle et la maille élémentaire ci-dessous :



- 1) Préciser la méthode d'étude des cristaux et détailler brièvement son principe.
- 2) Déterminer la population de la maille conventionnelle et la coordinence des atomes.
- 3) Déterminer la relation entre paramètre de maille et rayon métallique.
- 4) Déterminer la relation entre a et c .
- 5) Déterminer la compacité associée à cette structure. Commenter.
- 6) Déterminer la quantité de matière par unité de volume n^* .
- 7) Déterminer la masse volumique du titane et la commenter sachant que la mesure donne $4509 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$.