



TD – Cristallographie

Pour tous les exercices, la valeur de la constante d'Avogadro est : $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

1. Vrai / Faux

1. Dans un cube, la longueur de la diagonale du cube $a\sqrt{3}$, celle d'une face vaut $a\sqrt{2}$.
2. Dans une structure cfc, les sphères dures sont tangentes selon l'arête du cube.
3. Il y a 8 sites octaédriques par maille dans une structure cfc.
4. La coordinence vaut 8 dans une structure cubique centrée.
5. La structure du chlorure de sodium NaCl est telle que les ions chlorure occupent les nœuds d'une structure cubique à faces centrées et les ions sodium, les cavités octaédriques de celle-ci. Il y a tangence des sphères selon la diagonale d'une face.
6. Dans une structure du type fluorine CaF_2 (Ca^{2+} : cubique à faces centrées et F^- : dans les cavités tétraédriques), la somme des rayons ioniques du cation et de l'anion vaut $a/2$.
7. Deux anions sont tangents entre eux dans une structure ionique.
8. La blende ZnS (avec S^{2-} : cubique à faces centrées), les cations Zn^{2+} occupent tous les sites tétraédriques.

2. Alliage pour l'aéronautique

L'alliage le plus utilisé dans l'industrie aéronautique a pour formule brute $\text{Al}_x\text{Ni}_y\text{Ti}_z$.

A l'aide des documents ci-dessous :

- Donner la formule de l'alliage en déterminant les nombres x , y et z .
- Expliquer en quoi l'alliage de titane présente à qualités mécaniques équivalentes de l'intérêt pour l'industrie aéronautique par rapport à un acier courant.

Caractéristiques d'un acier courant

	Masse volumique ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$)	Compacité
Acier courant	7800	0,7

Paramètre de maille

Paramètre de la maille conventionnelle de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ni}_y\text{Ti}_z$: $a = 589 \text{ pm}$

Maille conventionnelle de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ni}_y\text{Ti}_z$

- Le titane admet un système cristallographique cubique faces centrées ;
- Les atomes d'aluminium occupent la totalité des cavités octaédriques ;
- Les atomes de nickel occupent la totalité des cavités tétraédriques ;

Rayons métalliques et masses molaires

Atome	Rayon atomique (pm)	Masse molaire atomique ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$)
Ti	147	47,9
Al	143	27,0
Ni	124	58,7

3. Alliage cuivre-magnésium

A l'état solide, les métaux cuivre et magnésium forme un composé Cu_xMg_y dont la structure peut être décrite de la façon suivante : les atomes de magnésium occupent les nœuds d'un réseau cubique à faces centrées (cfc) ainsi qu'un site tétraédrique sur deux, chaque site tétraédrique non occupé l'est par un assemblage Cu_4 .

1. Quelle est la formule de cet alliage ?
2. Dessiner une coupe de la maille de l'alliage dans un plan contenant deux arêtes parallèles n'appartenant pas à une même face.
3. Déterminer la masse volumique de cet alliage.
4. Peut-on savoir s'il y a tangence entre le magnésium et les ensembles Cu_4 .

Données :

Masses molaires : $M(\text{Mg}) = 24,3 \text{ g.mol}^{-1}$; $M(\text{Cu}) = 63,5 \text{ g.mol}^{-1}$.

Paramètre de maille : $a = 702 \text{ pm}$

4. Bromure de potassium

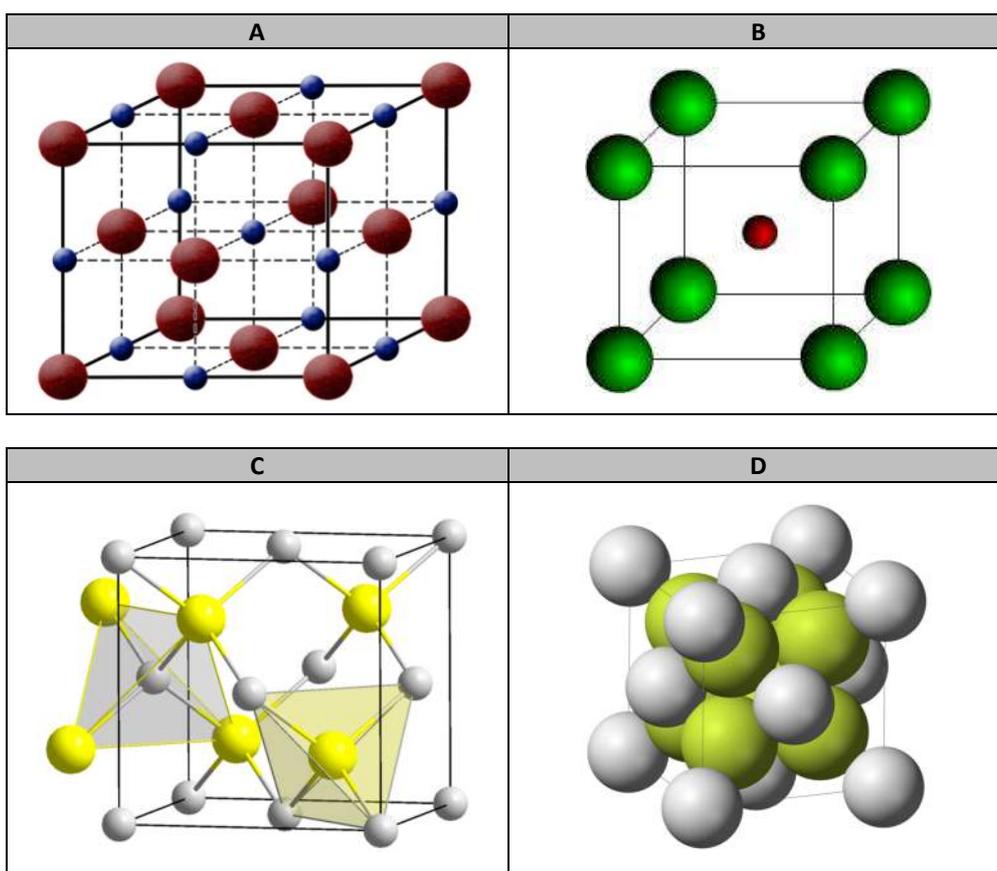
Le bromure de potassium (K^+, Br^-) cristallise dans l'une des structures représentées ci-dessous. Identifier laquelle.

Données :

Masses molaires : $M_{\text{K}} = 39,1 \text{ g.mol}^{-1}$; $M_{\text{Br}} = 79,9 \text{ g.mol}^{-1}$

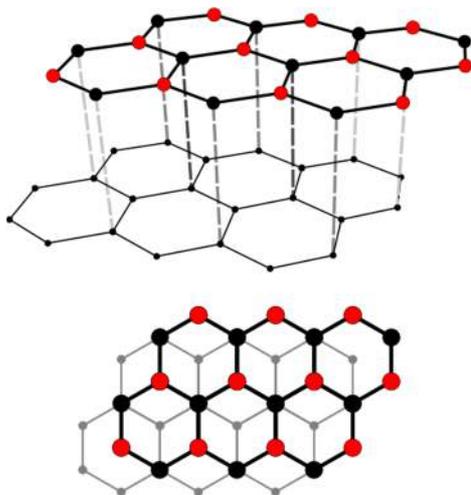
Rayons ioniques : $\text{K}^+ : 138 \text{ pm}$; $\text{Br}^- : 196 \text{ pm}$

On considère que les cations sont en contact avec les anions.



5. Graphite

Le carbone ($M(C) = 12 \text{ g.mol}^{-1}$) à l'état de graphite possède une structure en feuillets. Il n'existe pas de liaison covalente entre des atomes appartenant à des feuillets différents. En revanche, chaque atome de carbone établit des liaisons covalentes avec 3 autres atomes de carbone voisins appartenant au même feuillet.



Structure en feuillets (vue de profil, puis vue de dessus)



Maille conventionnelle

1. Repérer, sur la vue de dessus, la maille conventionnelle du graphite.
2. Calculer la compacité et la densité du graphite.
3. Pourquoi le graphite est-il conducteur ?

Données : Distance entre deux feuillets successifs : 0,336 nm
Longueur d'une liaison covalente CC dans le graphite : 0,141 nm

6. Structure du titanate de baryum

Le titanate de baryum est un solide ionique très utilisé dans l'industrie électronique, en raison de sa forte constante diélectrique, qui en fait le matériau de base de la fabrication des condensateurs. Sa structure cristalline, pour des températures supérieures à 120°C est la structure perovskite, dont une maille cubique élémentaire peut être décrite de la façon suivante :

- Les ions baryum Ba^{2+} occupent les sommets du cube
- Un ion titane Ti^{4+} occupe le centre du cube
- Les ions oxydes O^{2-} occupent les centres des faces du cube.

1. Représenter la maille et préciser le nombre d'ions de chaque sorte dans chaque maille.
2. Donner la formule du titanate de baryum et vérifier la neutralité de la structure.
3. Indiquer, pour les ions titane, le nombre d'ions oxydes qui sont ses plus proches voisins. Même question pour les ions baryum.
4. Indiquer la coordinence de chaque cation.
5. Dans une structure perovskite idéale, tous les cations sont en contact avec les anions qui les entourent.
 - a) Quelles relations devraient vérifier les rayons des différents ions si la structure du titanate de baryum était idéale ?
 - b) Les valeurs des rayons ioniques sont fournies dans les données numériques. La structure du titanate de baryum est-elle une perovskite parfaite ?
 - c) Quels sont, en réalité, les cations tangents aux anions ?
6. Calculer le paramètre a de la maille, la compacité et la masse volumique de la perovskite étudiée.

Données : Rayons ioniques : Ti^{4+} : 68 pm Ba^{2+} : 135 pm O^{2-} : 140 pm
Masses molaires atomiques : Ba : 137,3 g.mol⁻¹ Ti : 47,9 g.mol⁻¹