

TD N°1 CALCULS DANS LES RESEAUX

Les cristaux métalliques

Déterminer la masse volumique de l'argent (Ag) pur sachant qu'il cristallise dans une structure de type CFC (paramètre de maille $a = 407 \text{ pm}$).

Sa masse molaire $M = 107,9 \text{ g/mol}$ ($N = 6,02 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ et $1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m}$).

Rep : Masse d'un atome $m = M/N$ et $\rho = n \cdot M/N a^3$ ($n = 4 \text{ CFC}$)

$$\rho = (4 \cdot 107,9) / 6,02 \cdot 10^{23} \cdot (407 \cdot 10^{-12})^3 = 10,7 \text{ g/cm}^3$$

2- Calculer la masse volumique (densité) du Fer α sachant qu'il cristallise dans le système cubique centré et $M(\text{Fe}) = 55,85 \text{ g.Mol}^{-1}$, le paramètre de maille est $a = 2,886 \text{ \AA}$. ($N = 6,02 \times 10^{23}$)

Rep : $\rho = 7,72 \text{ g/cm}^3$

Les cristaux ioniques

Les cristaux ioniques type AB

1- Calculer pour chaque type de coordinance (T et O) le rapport des rayons cation/anion (R^+/R^-)

Rep : T (R^+/R^-) = 0.225 et O (R^+/R^-) = 0.414

2- Le Chlorure de Césium CsCl :

On donne : $a = 404 \text{ pm}$ (paramètre de maille), $R_a = 181 \text{ pm}$ (rayon de l'anion Cl^-), et $R_c = 169 \text{ pm}$ (Rayon cation Cs^+)

a- Décrire la maille de ce cristal

b- Déterminer le nombre de motif par maille, la coordinence de chaque ion.

c- L'édifice est stable uniquement si les anions ne sont pas en contact. Etablir, à partir de cette condition, une relation entre les rayons des ions. Cette condition est-elle respectée ici ?

Rep :

a) les anions Cl^- sont positionnés aux sommets d'un cube, et le cation Cs^+ se trouve au centre du cube cependant le réseau de Bravais est P.

b) Population $\text{Cl}^- = 8 \cdot 1/8 = 1$ (sommets cube) ; Population $\text{Cs}^+ = 1$ (centre cube) donc 1 CsCl/Maille . Coordination 8 : 8 Cubique pour chacun

c) L'édifice n'est stable que si les anions ne sont pas en contact le long de l'arête du cube on obtient $R^+/R^- > 0,732$ (voir brochure cours)

Les cristaux ioniques AB2

3- Le Quartz est la variété de silice, SiO_2 , (AB_2) stable à basse température et basse pression. Son réseau cristallin est hexagonal, avec les paramètres de maille suivants : $a = 4,9134 \text{ \AA}$ $c = 5,4052 \text{ \AA}$ et $Z = 3$

Sachant que la masse molaire est de $60,085 \text{ g}$, calculer le volume molaire et la masse volumique du quartz.

Rep : Pour décrire le quartz, on a besoin d'une unité formulaire correspondant à la formule chimique du minéral SiO_2 .

Z = nombre d'unités formulaires par maille

$$V_{\text{maille}} = (a \cdot b \cdot \sin \gamma) \cdot c = (4,9134)^2 (\sqrt{3}/2) \cdot 5,4052 = 113,007 \text{ \AA}^3$$

$$V_{\text{molaire}} = (V_{\text{maille}}/N) \cdot Z = 2,267 \cdot 10^{27} \text{ \AA}^3 = 2,267 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 = 10^3 \text{ cm}^3$$

Masse volumique du quartz $\rho = M_{\text{molaire}} / V_{\text{molaire}} = 60,085 \text{ g} / 2.267 \cdot 10^{-27} \text{ \AA}^3$

Donc : $\rho = 2.647 \cdot 10^{-27} \text{ g} / \text{\AA}^3 = 2.647 \cdot 10^3 \text{ g} / \text{cm}^3$

Les cristaux covalents

1- La structure Diamant

Décrire la composition chimique de la maille **diamant**.

Sachant la densité du diamant $\rho = 3,51 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$, déterminer le paramètre de maille « a » du diamant.

Rep :

Pour former du diamant, on insère des atomes de carbone (C) dans la moitié des sites tétraédrique ($8/2=4$) d'une maille CFC de carbone (4 atomes). La taille des sites n'étant pas suffisant pour insérer un atome de même taille ($R_{\text{Tétra}} = 0,225 R_a$), la maille est donc nécessairement déformée.

$$\rho = 8.M_C / N.a^3 \rightarrow a = 3,57 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 357 \text{ pm}$$

2- La structure Graphite

a) Quelle est la nature des interactions entre deux atomes C-C d'un même feuillet ?

Entre deux atomes de carbone de deux feuillets adjacents ?

b) Déterminer la population de la maille ainsi que sa compacité. Sachant que les atomes de carbones sont en contact selon un côté « d » de l'hexagone tel que :

$d = 2R = 142 \text{ pm}$ et $h = 335 \text{ pm}$; $R =$ rayon atome carbone

a) Dans un plan feuillet, les liaisons sont covalentes. Entre deux feuillets, les interactions sont de types Van der Waals

b) Les sommets : $8 \cdot 1/8 = 1$

Les bases inf et sup : $(2 \cdot 1/2) = 1$

Au niveau C/2 on 2 atomes en propre au centre de la maille

Total = 4

La compacité C est : avec

$$C = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi R^3}{3 \sqrt{3} d^2 h} = \frac{\frac{16}{3} \pi \frac{d^3}{8}}{3 \sqrt{3} d^2 h} = \frac{2 \pi d}{9 \sqrt{3} h}$$

On fait l'application numérique avec $d = 142 \text{ pm}$ et $h = 335 \text{ pm}$

$$\underline{C = 0,17}$$