

### Travaux dirigés N°3

#### Exercice N°1 :

- 1/ Une variété de cuivre cristallise dans une structure cubique simple, est-ce que cette structure est compacte ?
- 2/ Une variété de plomb cristallise dans une structure cubique simple, est-ce que cette structure est compacte ?

#### Exercice N°2 :

Le baryum métallique (Ba) cristallise dans un système cubique de paramètre de maille  $a = 5.02 \text{ \AA}$ .

- 1/ Quel est le système ? Représenter la maille de ce cristal et retrouver le plan de plus grande densité.
- 2/ Donner les coordonnées réduites des atomes.
- 3/ Quel est l'indice de coordinence de Ba dans cette structure ?
- 4/ Déterminer l'expression reliant le rayon métallique du Ba au paramètre de maille  $a$ . En déduire la valeur du rayon atomique  $r$  (Ba).

On donne :  $M_{\text{Ba}} = 137.3 \text{ g/mol}$  et la masse volumique  $\rho = 3.59 \text{ g/cm}^3$ .

#### Exercice N°3 :

Le nickel est fréquemment utilisé pur ou en alliage. Il cristallise selon une structure CFC.

- 1/ Représenter la maille élémentaire du nickel. Calculer le paramètre  $a$  de la maille et le rayon métallique du nickel. On donne la masse volumique du nickel  $\rho_{\text{Ni}} = 8,90 \cdot 10^3 \text{ kg m}^{-3}$  et  $M(\text{Ni}) = 58,7 \text{ g/mol}$ .
- 2/ Indiquer la position, dans la maille, des sites interstitiels dans lesquels un atome quelconque pourrait se placer. Distinguer et nommer les deux types de sites.

#### Exercice N°4 : Structure d'un alliage du titane,

L'alliage le plus utilisé dans l'industrie aéronautique a pour formule  $\text{Al}_x\text{Ni}_y\text{Ti}_z$ . Le titane y est présent sous la forme  $\beta$ : son système cristallographique est CFC, les atomes d'aluminium occupent la totalité des sites octaédriques et ceux de nickel occupent tous les sites tétraédriques. Le paramètre de la maille ainsi formée vaut  $a = 0,589 \text{ nm}$ .

- 1) Représenter la maille en perspective.
- 2) Déterminer la formule de l'alliage.
- 3) À partir du rayon atomique  $R_{\text{Ti}}$  dans le tableau de données ci-dessous, déterminer quel serait le paramètre de maille  $a'$  si l'empilement du titane était compact. Comparer au paramètre réel  $a$  et commenter.

4) Calculer la compacité et la masse volumique de cet alliage.

**Tableau de données**

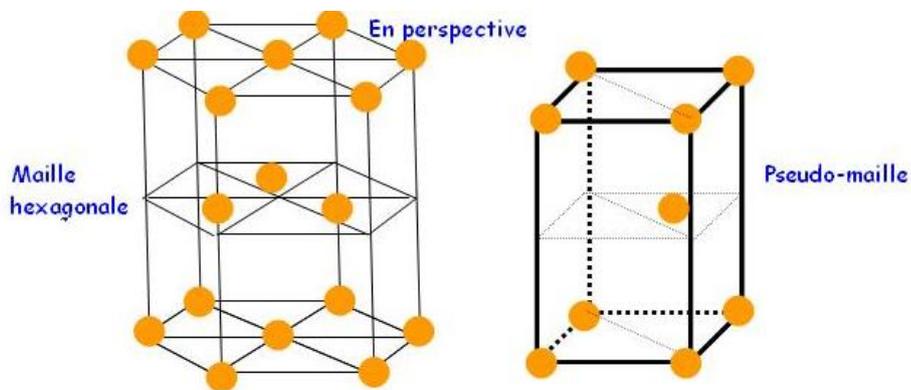
Atome	Rayon atomique (nm)	Masse molaire ( $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ )
Ti	0,147	47,90
Al	0,143	26,98
Ni	0,124	58,70

**Exercice N°5 :**

Le cobalt, de rayon métallique égal à 125pm, cristallise dans un système hexagonal compact (hc).

1/ Déterminer les deux paramètres a et c.

2/ Calculer la compacité de ce cristal.



### Travaux dirigés N°4

#### Exercice N°1 :

1/Connaissant les rayons ioniques de  $\text{Ag}^+$ (126pm),  $\text{Na}^+$ (95pm),  $\text{Cs}^+$ (69pm) et  $\text{Br}^-$ (195pm), quelle est la structure des cristaux AgBr, NaBr et CsBr ?

2/ Calculer l'indice de compacité de ces différents cristaux.

#### Exercice N°2 :

Un composé ionique AB cristallise dans un système cubique, sachant que l'anion B occupe les positions (0,0,0) et le cation A se place dans les positions (1/2,1/2,1/2) :

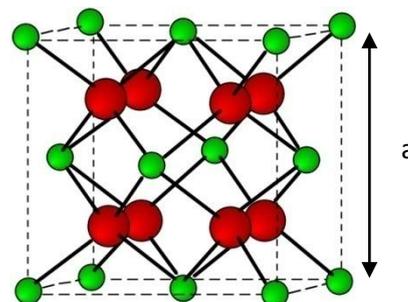
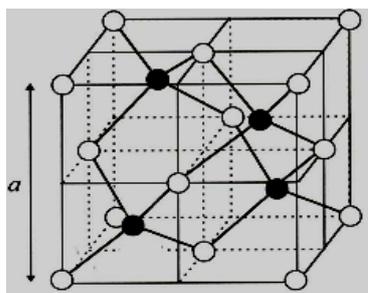
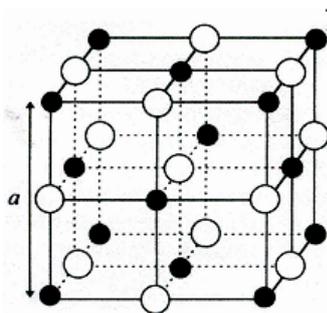
1/ Dessiner la maille.

2/ Calculer le nombre de motif par maille et donner l'indice de coordinence des cations et des anions.

3/ Déterminer la relation de la plus courte distance entre cation et anion.

#### Exercice N°3 :

1- Quel est le type des structures représentées par les mailles suivantes :

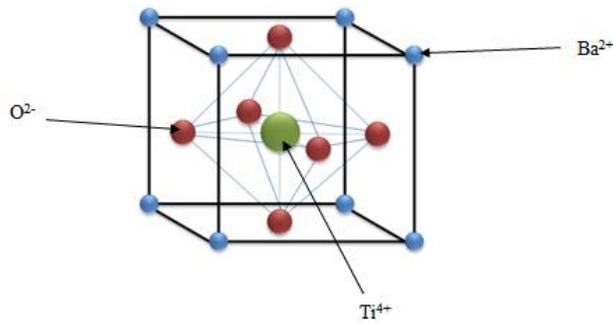


2- Indiquer pour chaque structure les positions et le nombre des atomes par maille.

3-Calculer, pour chaque structure, la plus courte distance entre cation-anion (on donne  $a = 120 \text{ pm}$ ).

#### Exercice N° 4 : Structure type ABO3

La maille élémentaire du titanate de baryum a pour formule  $\text{Ba}_x\text{Ti}_y\text{O}_z$  est représentée ci dessous :



- a) Déterminer la formule chimique de ce composé.  
 b) Donner, en fonction de  $a$ , les plus courtes distances :  $(\text{Ba}^{2+}-\text{O}^{2-})$ ,  $(\text{Ti}^{4+}-\text{O}^{2-})$  et  $(\text{Ba}^{2+}-\text{Ti}^{4+})$ .

**Exercice N° 5 : Structure du carbone solide**

Le carbone solide existe dans la nature sous deux structures cristallines différentes : le graphite et le diamant. Dans la structure diamant, les atomes de C forment une structure cfc avec la moitié des sites tétraédriques occupés.

- 1- Représenter la maille cristalline du diamant.
- 2- Définir et calculer la coordinence et le nombre d'atomes par maille.
- 3- Donner la relation liant le paramètre de maille noté  $a$  et le rayon  $r$  d'un atome de carbone. En déduire la compacité du diamant.
- 4- Calculer la masse volumique du diamant.
- 5- Le diamant contient-il des sites permettant d'accueillir des atomes supplémentaires ? Si oui, combien sont-ils et où se situent-ils ?

Données :  $M_C = 12 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$  ; Nombre d'Avogadro :  $6.10^{23} \text{ mol}^{-1}$  ; Rayon de l'atome de carbone :  $r = 8.10^{-11} \text{ m}$ .