Université Moulay Ismaïl

Faculté des Sciences et Techniques

Errachidia

Polycopié des travaux dirigés avec solution du parcours BCG

Module C234-Chimie minérale I/S3

Responsables :

- M. AZDOUZ
- A. BATAN

Université Moulay Ismail
Faculté des Sciences et Techniques Errachidia
Département de chimie

Année universitaire : 2024-2025

Filière B.C.G.
Module C234 - Chimie minérale I -
Correction Série n°1

Exercice 1

On considère le repère bidimensionnel ($\vec{a}$, $\vec{b}$) de la figure 1 (voir annexe) :

1) Trouver la notation des rangées (1), (2), (3), (4), (5), (6) et (7).

Notation rangée (1) : [10] ≡ [$\bar{1}$0]

Notation rangée (2) : [01] ≡ [0$\bar{1}$]

Notation rangée (3) : [32] ≡ [$\bar{3}\bar{2}$]

Notation rangée (4) : [$\bar{2}$3] ≡ [2$\bar{3}$]

Notation rangée (5) : [1$\bar{1}$] ≡ [$\bar{1}$1]

Notation rangée (6) : [1$\bar{3}$] ≡ [$\bar{1}$3]

Notation rangée (7) : [11] ≡ [$\bar{1}\bar{1}$]

2) La notation dépend-elle du choix de l'origine ? sinon pourquoi ?

La notation ne dépend pas du choix de l'origine, tous les nœuds sont équivalents par translation dans un réseau.

3) Que se passe-t-il si on change le signe de tous les indices d'une rangée ?

Il s'agit de la même droite (rangée) dont le vecteur directeur est considéré dans l'autre sens. Comme seule la direction de la rangée qui nous intéresse et non pas son sens. Les deux indexations sont valables.

Exercice 2

Soit le réseau bidimensionnel défini par les vecteurs de base $\vec{a}$ et $\vec{b}$ (figure 2, annexe) :

1) Tracer quelques rangées de la famille [2 1]. **Voir figure 2**

2) Déterminer les vecteurs de base et la multiplicité de la maille M, représentée sur la figure 2.

Vecteurs de base de la maille M : $\vec{v_1}$ (-2, 1) et $\vec{v_2}$ (-3, 1) et m = 1

Multiplicité de la maille M :

- **Méthode du déterminant :**

$$m = \begin{vmatrix} -2 & 1 \\ -3 & 1 \end{vmatrix} = -2 + 3 = 1$$

- **Multiplicité par dénombrement des motifs propre à la maille :**

4 motifs aux sommets × 1/4 = 1

3) Construire les mailles M_1 et M_2 définies par les vecteurs $\vec{v_1}$ et $\vec{v_2}$ tel que :

- **pour M_1 : $\vec{v_1}$ (1, 0) et $\vec{v_2}$ (0, 1) Voir figure 2**
- **pour M_2 : $\vec{v_1}$ (2, 0) et $\vec{v_2}$ (-4, 2) Voir figure 2**

4) Calculer les multiplicités de M_1 et M_2.

Multiplicité de la maille M1 :

- **Méthode du déterminant :**

$$m = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} = 1-0 = 1$$

- **Multiplicité par dénombrement des motifs propre à la maille :**

4 motifs aux sommets × 1/4 = 1 **la multiplicité de M1 = 1**

Multiplicité de la maille M2 :

- **Méthode du déterminant :**

$$m = \begin{vmatrix} 2 & 0 \\ -4 & 2 \end{vmatrix} = 4 + 0 = 4$$

- **Multiplicité par dénombrement des motifs propre à la maille :**

4 motifs aux sommets × 1/4 = 1

4 motifs aux milieux des arêtes × 1/2 = 2 **la multiplicité de M2 = 1 + 2 + 1 = 4**

1 motif au centre de la maille × 1 = 1

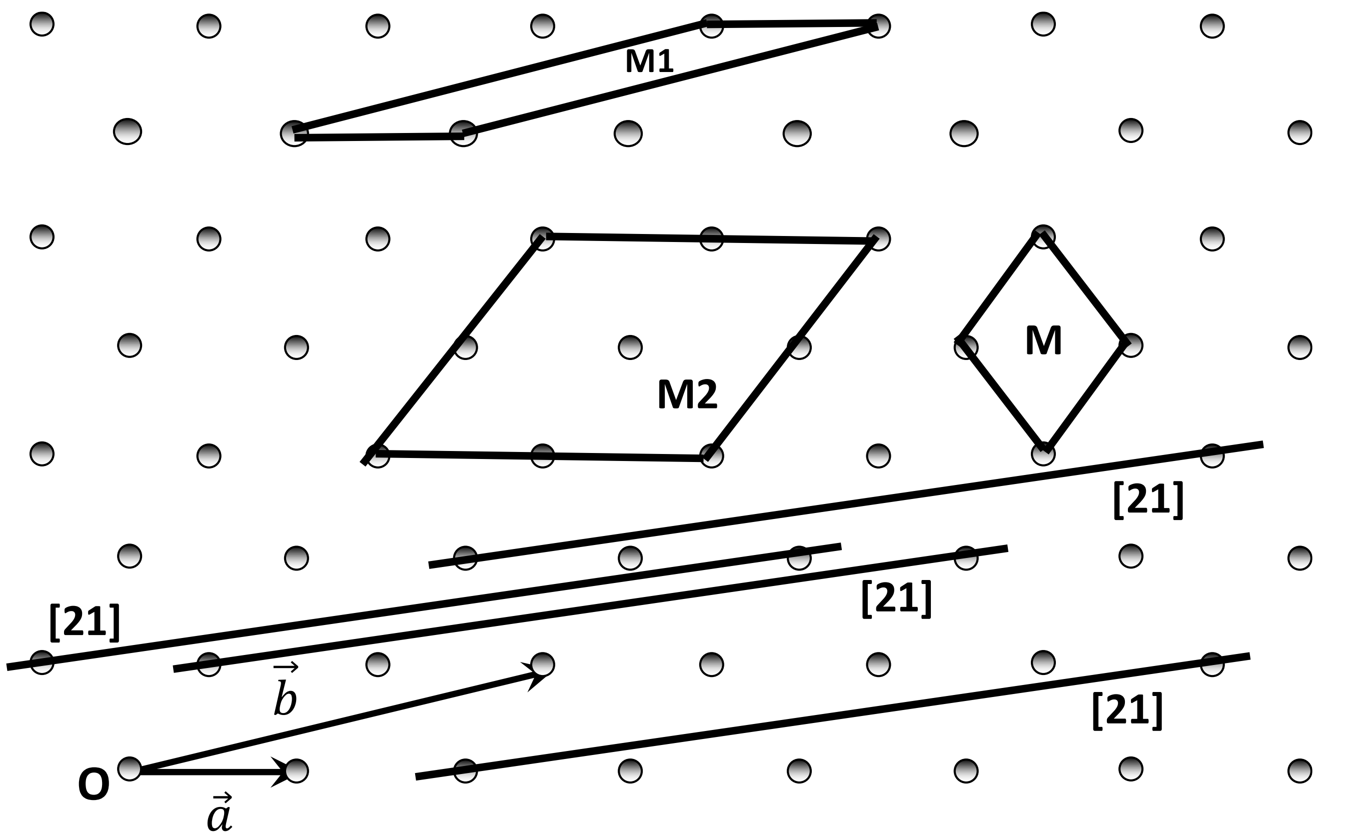
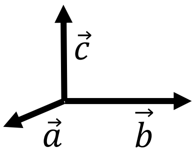


Figure 2

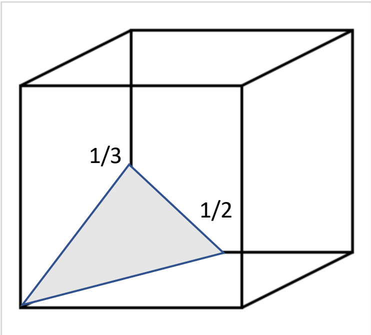
Exercice 3

Soit un réseau cubique simple,

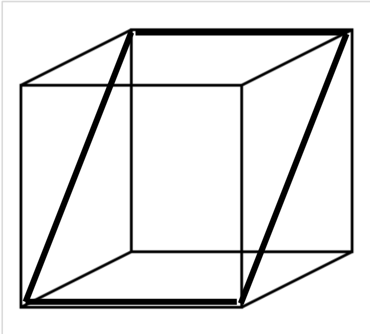
1) Construire, au sein d'une maille, les plans réticulaires d'indices de Miller (123), (101) et ($1\bar{1}0$).



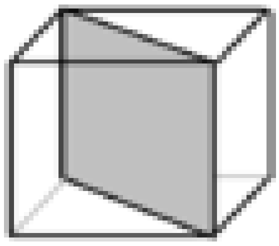
(123)



(101)



($1\bar{1}0$)



2) Donner les indices de Miller des familles auxquelles appartiennent les plans Pi qui coupent les axes de coordonnées en les valeurs numériques suivantes : $P_1(2, 3, 6)$; $P_2(-1, 1, 1/2)$ et $P_3(3, 2, \infty)$.

Un plan réticulaire est construit par la liaison de trois nœuds non colinéaires du réseau. Il contient des nœuds du réseau et est définit par les indices h, k et l dits de Miller. Dans la maille ce plan (hkl) coupe les directions $\vec{a}$, $\vec{b}$ et $\vec{c}$ en a/h, b/k et c/l :

Plan P_1 coupe :

- **la direction $\vec{a}$ (axe ox) en 2a** **a/h = 2a** **h = 1/2**
- **la direction $\vec{b}$ (axe oy) en 3b** **b/k = 3b** **k = 1/3**
- **la direction $\vec{c}$ (axe oz) en 6c** **c/l = 6c** **l = 1/6**

h, k et l sont des entiers, on multiplie par la valeur du P.P.C.M.
6 × (h = 1/2, k = 1/3, l = 1/6) on obtient : (hkl) = (321)

Plan P_2 coupe :

- **la direction $\vec{a}$ (axe ox) en -1a** **a/h = -1a** **h = -1**
- **la direction $\vec{b}$ (axe oy) en 1b** **b/k = 1b** **k = 1**
- **la direction $\vec{c}$ (axe oz) en c1/2** **c/l = c1/2** **l = 2**

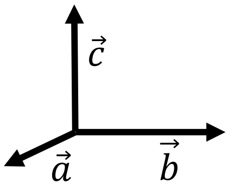
On obtient : (hkl) = ($\bar{1}12$)

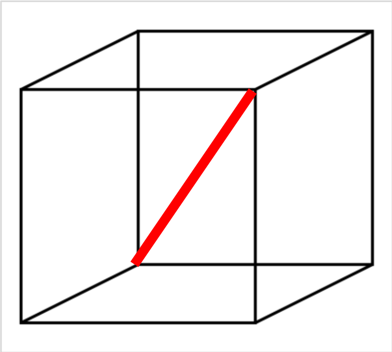
Plan P_3 coupe :

- **la direction $\vec{a}$ (axe ox) en 3a** **a/h = 3a** **h = 1/3**
- **la direction $\vec{b}$ (axe oy) en 2b** **b/k = 2b** **k = 1/2**
- **la direction $\vec{c}$ (axe oz) en ∞c** **c/l = ∞c** **l = 1/∞ = 0**

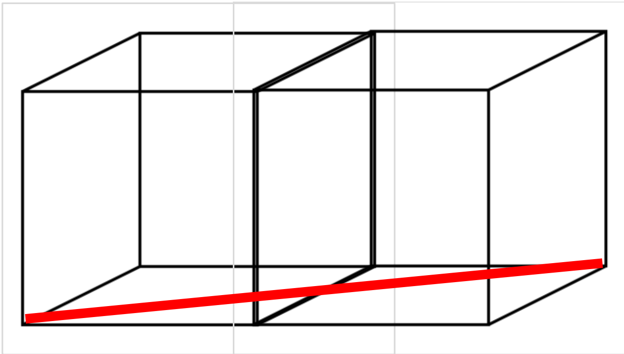
h, k et l sont des entiers, on multiplie par la valeur du P.P.C.M.
6 × (h = 1/3, k = 1/2, l = 0) on obtient : (hkl) = (230)

3) Tracer les deux rangées pour chacune des familles suivantes : [1 1 1] et [$\bar{1}$ 2 0].





[1 1 1]



[$\bar{1}$ 2 0]

4) Indexer les plans réticulaires de la figure ci-dessous.

<u>Plan (1)</u>

Les intersections du plan (1) avec ox est : ox = a/h = ∞a h = 0

Les intersections du plan (1) avec oy est : oy = b/k = ∞b k = 0 (001)

Les intersections du plan (1) avec oz est : oz = c/l = 1c l = 1

Le plan (1) aura les indices de Miller (001)

<u>Plan (2)</u> : De la même façon, le plan (2) aura les indices de Miller (010)

<u>Le plan (3)</u> aura les indices de Miller (100)

<u>Le plan (4)</u> aura les indices de Miller (011)

<u>Le plan (5)</u> aura les indices de Miller (1$\bar{1}$0)

<u>Le plan (6)</u> aura les indices de Miller (10$\bar{1}$)

<u>Le plan (7)</u> aura les indices de Miller (1$\bar{1}\bar{1}$)

<u>Le plan (8)</u> aura les indices de Miller (111)

<u>Le plan (9)</u> aura les indices de Miller (11$\bar{1}$)

Université Moulay Ismail
Faculté des Sciences et Techniques
Département de chimie
Errachidia

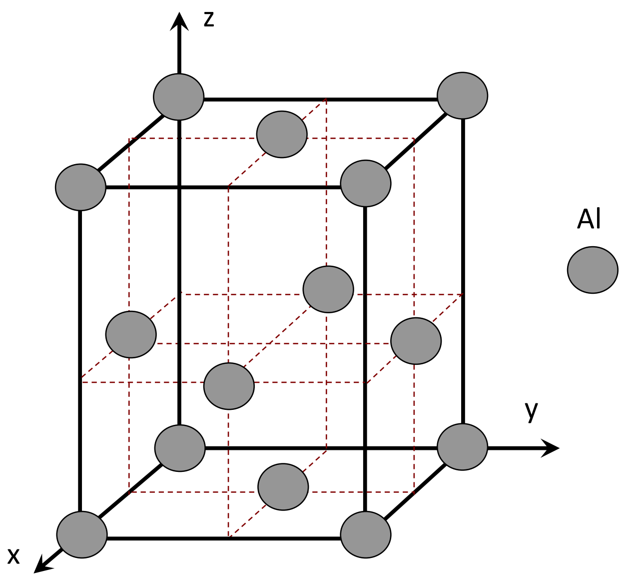
Année universitaire : 2024-2025

Filière B.C.G.
Module C234 - Chimie minérale I -
Correction Série n°2

Exercice 1

L'aluminium (Al) solide cristallise dans le système cubique à faces centrées.

1) Dessiner un schéma clair et soigné de ce réseau cristallin.



2) Quelle est la compacité de ce réseau ? Définir au préalable cette grandeur.

La compacité est le rapport entre le volume occupé par les z atomes de la maille et le volume de la maille considérée).

C = Volume occupé par les (z) atomes de la maille / Volume de la maille

C = z × V (d'un atome) / V(maille)

Où (Z = nombre de motifs par maille = 8×1/8 + 6×1/2 = 4)

La maille contient 4 atomes, considérés comme des sphères de rayon R qui occupent un volume : $V = 4/3\ \pi\ R^3$ et le volume de la maille cubique est $V = a^3$

La compacité sera donc :

$$C = (4 \times 4/3 \times \pi \times R^3)/a^3$$

Les atomes sont tangents entre eux. Pour une maille C.F.C, cette tangence se fait suivant la diagonale d'une face.

Selon la diagonale d'une face, nous avons : $4R = \sqrt{2}a$

$C = (4 \times 4/3 \times \pi \times (\sqrt{2}a/4)^3) / a^3 = \pi\sqrt{2} / 6 = 0.74$

3) Calculer la masse volumique de l'aluminium.

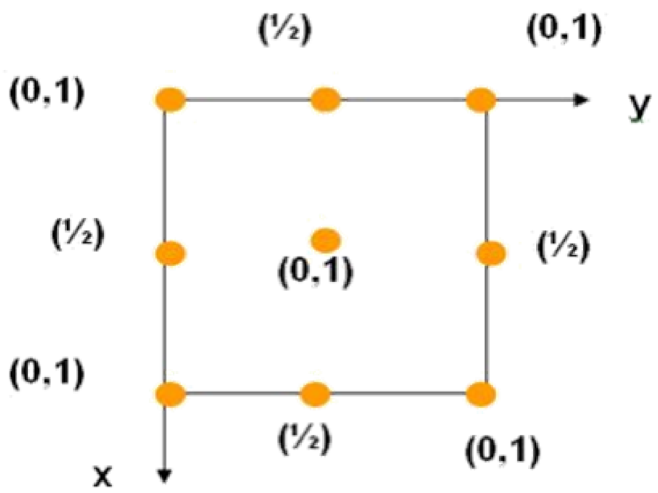
$\rho_{Al} = ZM/NV_{maille} = 4M/Na^3$

M : masse atomique d'aluminium ; N : nombre d'Avogadro ; $V = a^3$.

AN : $\rho_{Al} = 4 \times 26.98/6.022\ 10^{23} \times (4.041\ 10^{-8})^3$

$\rho_{Al} = 2.71\ g/cm^{-3}$

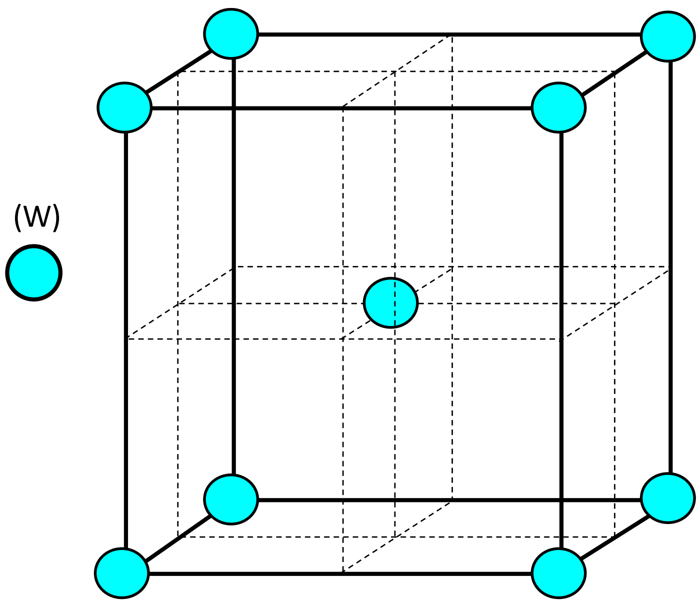
4) Faire projeter la maille sur le plan xoy sans oublier de mentionner la cote des atomes.



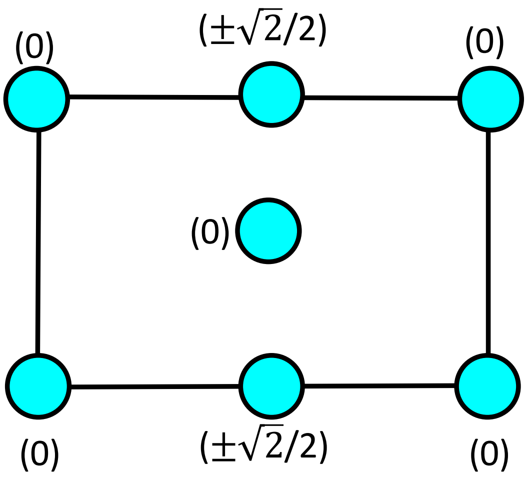
Exercice 2

Le tungstène (W) cristallise dans une structure cubique centré avec un paramètre a = 3.16 Å.

1) Représenter, en perspective, la structure de ce métal.



2) Donner la projection de cette structure sur le plan (110) et noter la cote des atomes.



3) Quelle est la distance qui sépare deux plans consécutifs de la famille de plans (110) ?

$d = a\sqrt{2}/2$

AN : $d = 3.16 \times \sqrt{2}/2 = 2.23$ Å

4) Calculer la compacité de cette structure sachant que le rayon du tungstène est 1.3 Å.

C = Volume occupé par les (n) atomes de la maille / Volume de la maille

C = z × V (d'un atome) / V(maille)

Où (Z = nombre de motifs par maille = 8×1/8 + 1×1 = 2)

La compacité sera donc :

$C = (2 \times 4/3 \times \pi \times R^3)/a^3$

AN : $C = (2 \times 4/3 \times \pi \times (1.3)^3) / (3.16)^3 = 0.58$

Exercice 3

On donne les paramètres des mailles cubiques des deux structures cristallines du fer (Fe) :

- Le fer α cristallise dans un réseau cubique centré (C.C) $a_\alpha = 2.86$ Å.
- Le fer γ cristallise dans un réseau cubique à faces centrées (C.F.C) $a_\gamma = 3.56$ Å.

Calculer dans chacune de ces structures :

1) Le rayon atomique du fer.

- **Rayon atomique du fer α**

Dans la structure C.C, la tangence entre atomes se fait suivant la grande diagonale du cube, nous avons donc : $4R_{Fe\alpha} = \sqrt{3}a$ $\quad$ $R_{Fe\alpha} = \sqrt{3}a/4$

AN : $R_{Fe\alpha} = \sqrt{3} \times 2.86/4 = 1.24$ Å

- **Rayon atomique du fer γ**

Dans la structure C.F.C, la tangence entre atomes se fait suivant la diagonale d'une face du cube, nous avons donc : $4R_{Fe\gamma} = \sqrt{2}a$ $R_{Fe\gamma} = \sqrt{2}a/4$

AN : $R_{Fe\alpha} = \sqrt{2} \times 3.56/4 = 1.26$ Å

2) La densité du fer.

- **Densité du fer α**

$$\rho_{Fe\alpha} = ZM/NV_{maille}$$

$$AN : \rho_{Fe\alpha} = 2 \times 56 / 6.022\ 10^{23} \times (2.86\ 10^{-8})^3$$

$$\rho_{Fe\alpha} = 7.95\ g/cm^{-3}$$

- **Densité du fer γ**

  - $\rho_{Fe\gamma} = ZM/NV_{maille}$

$$AN : \rho_{Fe\gamma} = 4 \times 56 / 6.022\ 10^{23} \times (3.56\ 10^{-8})^3$$

  - $\rho_{Fe\alpha} = 8.24\ g/cm^{-3}$

Exercice 4

La masse volumique d'un métal M ayant une structure hexagonale est ρ = 13.09 g/cm^3 et les valeurs des paramètres de sa maille sont : a = 3.206 Å et c = 5.087 Å.

1) La structure de ce métal est-elle idéale ?

Structure idéale : $c / a = \sqrt{8/3} = 1.633$

Structure du métal M : $c / a = 5.087/3.206 = 1.59$

Ce rapport diffère de 1.633, donc cette structure est non idéale.

2) Quelle devrait être la hauteur de la maille si tous les éléments étaient sphériques ?

$$c / 3.206 = \sqrt{8/3} = 1.633$$

$$c = 1.633 \times 3.206 = 5.235\ Å$$

3) Calculer la masse atomique de ce métal.

$$\rho_M = ZM/NV_{maille} \qquad M = \rho_M \times N \times V/Z$$

V = Volume de la maille hexagonale = $a^2 \times c \times \sqrt{3}/2$

Z = nombre de motifs par maille = 2

$$M = (\rho_M \times N \times a^2 \times c \times \sqrt{3}/2) / Z$$

$$AN : M = 13.09 \times 6.022\ 10^{23} \times (3.206\ 10^{-8})^2 \times 5.087 \times \sqrt{3}/ 4$$

$$M = 178.47\ g/mole$$

Université Moulay Ismail
Faculté des Sciences et Techniques
Département de chimie
Errachidia

Année universitaire : 2024-2025

Filière B.C.G.
Module C234 - Chimie minérale I -
Correction Série n°3

Exercice 1

Le réseau du chlorure d'ammonium NH_4Cl est cubique centré à des températures au dessous de 184°C, le paramètre de la maille étant a = 3.86 Å.

1) Quel est le rayon maximal de l'ion NH_4^+, sachant que le rayon Cl^- est voisin de 1.87 Å ?

Il s'agit d'un structure cubique AB de type CsCl

La tangence entre ions est selon la grande diagonale du cube :

$$2R^+ + 2R^- = \sqrt{3}a$$

$$R^+ = \frac{\sqrt{3}}{2}a - R^-$$

$$\text{AN : } R^+ = \frac{\sqrt{3}}{2} \times 3.86 - 1.87 = 1.47 \text{ Å}$$

2) Donner la coordinence ou le nombre de plus proches voisins de chaque ion.

Les ions NH_4^+ et Cl^- occupent chacun un site cubique, la coordinence est de huit pour chaque ion : $[NH_4^+] = [Cl^-] = 8$.

3) Vérifier que les rayons ioniques sont bien compatibles avec les conditions géométriques de la maille.

Pour que le cation NH_4^+ de rayon R^+ et l'anion Cl^- de rayon R^- forme une structure cubique AB de type CsCl, il existe une condition basée sur des considérations géométriques et qui est traduite par le rapport R^+ / R^- :

Les Cl^- et les Cs^+ sont tangents suivant la diagonale principale du cube :

$$2R^+ + 2R^- = a\sqrt{3} \qquad \text{Relation 1}$$

Il existe une répulsion entre les anions Cl^- formant le réseau C.S (charges de même nature), cette répulsion s'exprime par :

$$a \geq 2R^- \qquad \text{Relation 2}$$

De même, le rayon de l'anion est toujours supérieur à celui du cation, on a donc : $R^+/R^- < 1$

Pour qu'une structure cubique AB de type CsCl, soit stable il faut que les rayons R^+ et R^- répondent à la condition :

$0.732 \leq R^+/R^- < 1$ (combinaison des deux relations 1 et 2)

$R^+/R = 1.47/1.87 = 0.786 \geq 0.732$

4) Calculer la masse volumique du chlorure d'ammonium NH_4Cl et sa compacité.

- **Masse volumique de NH_4Cl :**

$$\rho_{NH4Cl} = ZM/NV_{maille} = ZM/Na^3$$

Où (Z = nombre de motifs par maille : $Z_{Cl^-} = 8 \times 1/8 = 1$ et $Z_{NH4+} = 1 \times 1 = 1$)

Soit : 1 motif NH_4Cl/maille

$$\rho_{NH4Cl} = 1 \times M_{NH4Cl} / Na^3$$

$$\text{AN : } \rho_{NH4Cl} = (1 \times 53.5) / 6.022\ 10^{23} \times (3.86\ 10^{-8})^3$$

$$\rho_{NH4Cl} = 1.54\ g/cm^{-3}$$

- **Compacité de la structure de NH_4Cl :**

C = Volume occupé par les (n) ions de la maille / Volume de la maille

$$C = z \times V(\text{d'un ion}) / V(\text{maille})$$

La compacité sera donc :

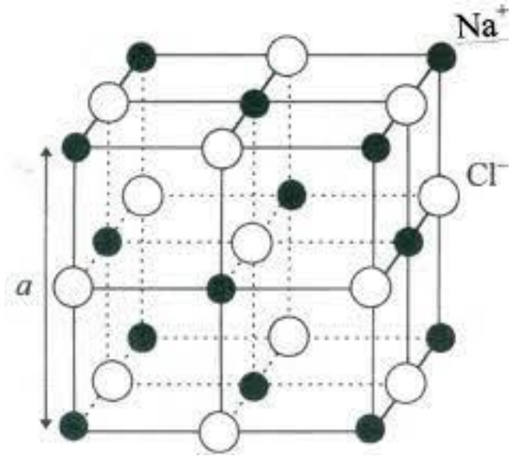
$$C = 4/3 \times \pi \times (1\times(R_{NH4+})^3 + 1\times(R_{Cl-})^3)/a^3$$

$$\text{AN : } C = 4/3 \times \pi \times (1\times(1.47)^3 + 1\times(1.87)^3)/ (3.86)^3 = 0.7$$

Exercice 2

Le chlorure de sodium a pour masse volumique 2165 Kg/m^3, les masses atomiques de Cl et de Na sont respectivement 35.5 g/mole et 23 g/mole.

1) Représenter la maille élémentaire de NaCl en prenant l'origine sur le cation.



2) Donner la multiplicité de la maille.

$$Cl^- : 12 \times 1/4 + 1 = 4$$

$$Na^+ : 8 \times 1/8 + 6 \times ½ = 4$$

Soit : 4 motifs NaCl/maille

3) Quelle est la longueur a de l'arête de la maille ?

$$\rho_{NaCl} = ZM/NV_{maille} = ZM/Na^3$$

$$a^3 = 4 \times M_{NaCl} / \rho_{NaCl} \times N \qquad a = \sqrt[3]{4 \times MNaCl/\rho NaCl \times N}$$

$$\text{AN : } a = [(4 \times 58.5) / (2165 \times 10^{-27} \times 6.022 \times 10^{23})]^{1/3}$$

$$a = 5.98\ Å$$

4) Calculer les rayons ioniques Na^+ et de Cl^-.

Les ions dans la structure NaCl sont tangents suivant l'arête a du cube.

Soit : $2R_{Na+} + 2R_{Cl-} = a = 5.98$

Le rapport : $R_{Na+}/R_{Cl-} = 0.55$

La résolution de ce système donne les deux valeurs de R_{Na+} et R_{Cl-}

On obtient : $R_{Na+} = 1.07$ Å et $R_{Cl-} = 1.92$ Å

Exercice 3

1) Donner les limites de stabilité des structures CsCl, NaCl et ZnS Blende.

Structure	Limites de stabilité R+/R-
CsCl	$0,732 \le R^+/R^- < 1$
NaCl	$0,414 \le R^+/R^- < 0,732$
ZnS	$0,225 \le R^+/R^- < 0,414$

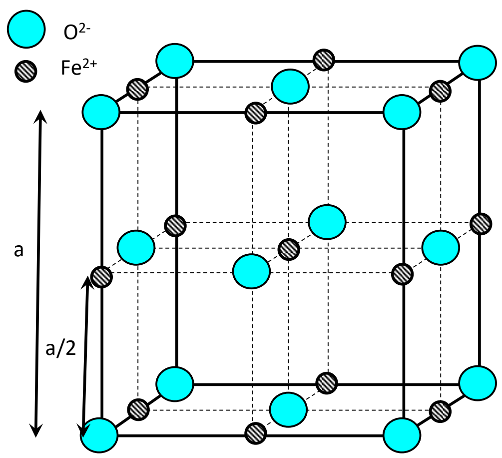
2) Quelles sont les coordinences des ions dans ces structures ? Expliquer.

Structure	Coordinence
CsCl	8-8
NaCl	6-6
ZnS	4-4

- **Structure type CsCl : les cations occupent un site cubique [8]**
- **Structure type NaCl : les cations occupent un site octaédrique [6]**
- **Structure type ZnS : les cations occupent un site tétraédrique [4]**

3) L'oxyde ferreux FeO cristallise dans une structure type NaCl, avec un paramètre de sa maille cristalline d'une valeur a = 4.30 Å.

   a) Dessiner en perspective une maille élémentaire.



b) Donner les coordonnées réduites des différents ions.

<u>Coordonnées réduites des anions O^{2-} :</u>

- Les O^{2-} aux sommets : (0, 0, 0)

- Les O^{2-} aux centres des faces : (1/2, 1/2, 0) ; (0, 1/2, 1/2) ; (1/2, 0, 1/2)

<u>Coordonnées réduites des cations Fe^{2+} :</u>

- Les Fe^{2+} aux milieux des arêtes : (1/2, 0, 0) ; (0, 1/2, 0) ; (0, 0, 1/2)

- Le Fe^{2+} au centre du cube : (1/2, 1/2, 1/2)

c) Quel est le nombre de groupement formulaire par maille ?

4 motifs FeO/maille

d) Déterminer les coordinences des ions Fe^{2+} et O^{2-}.

- **Les cations Fe^{2+} sont entourés de 6 anions O^{2-} car ils occupent des sites octaèdriques. La coordinence est de six pour chaque cation : $[Fe^{2+}] = 6$.**
- **Les anions O^{2-} sont entourés de 6 cations Fe^{2+}. La coordinence est de six pour chaque anion : $[O^{2-}] = 6$.**
- **Les ions Fe^{2+} et O^{2-} occupent les sites octaédriques. Donc l'indice de coordination de FeO est : [6-6]**

e) Calculer la masse volumique de ce composé.

<u>Masse volumique de FeO :</u>

$$\rho_{FeO} = ZM_{FeO}/NV_{maille} = ZM/Na^3$$

Où (Z = 4 motifs FeO/maille)

$$AN : \rho_{FeO} = (4 \times 72) / 6.022\ 10^{23} \times (4.30\ 10^{-8})^3$$

$$\rho_{FeO} = 6.01\ g/cm^{-3}$$

f) Quel est le rayon ionique du cation Fe^{2+}, sachant que celui de O^{2-} est 1.4 Å ?

<u>Rayon ionique de</u> Fe^{2+} :

Les ions dans la structure FeO (type NaCl) sont tangents suivant l'arête a du cube.

$$\text{Soit : } 2R_{Fe2+} + 2R_{O2-} = a = 4.30\ Å$$

$$R_{Fe2+} = 2.15 - 1.4 = 0.75\ Å$$

Université Moulay Ismail
Faculté des Sciences et Techniques
Département de chimie
Errachidia

Année universitaire : 2024-2025

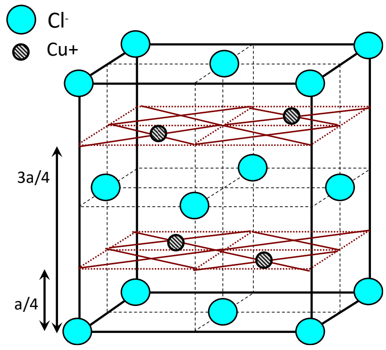
Filière B.C.G.
Module C234 - Chimie minérale I -
Correction Série n°4

Exercice 1

Le chlorure de cuivre CuCl cristallise dans une structure type blende, le paramètre de la maille élémentaire est égal à 5.41 Å.

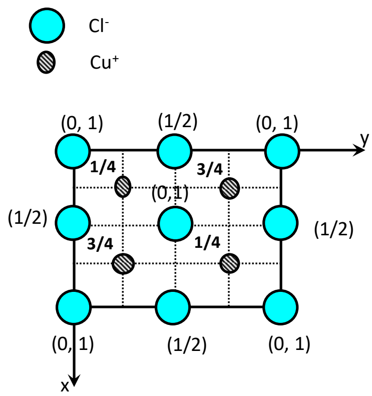
1) Représenter la maille de CuCl et faire la projection sur les plans (001) et (002).

- **Représentation en perspective**

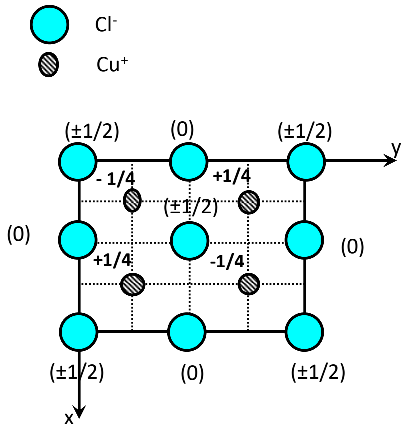


Les ions Cl^- forment un réseau cubique à faces centrées (CFC) dont la moitié des sites [4] est occupée par les ions Cu^+.

- **Projection sur le plan (001)**



- **Projection sur le plan (002)**



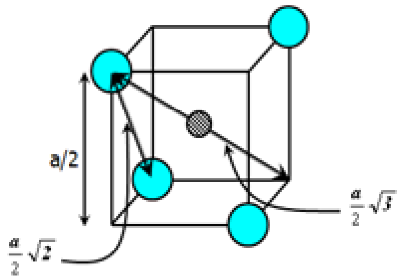
2) Quel est le nombre des plus proches voisins autour de chaque ion ?

Les cations Cu^+ sont entourés de 4 anions Cl^- car ils occupent des sites tétraédriques. Donc la coordinence est de 4 pour chaque cation : $[Cu^+] = 4$.

Les anions Cl^- sont entourés de 4 cations Cu^+ donc la coordinence est de 4 pour chaque anion : $[Cl^-] = 4$.

3) Calculer la distance la plus courte entre deux ions de signes opposés.

Cations et anions sont tangents suivant la diagonale principale du petit cube d'arête a/2 :

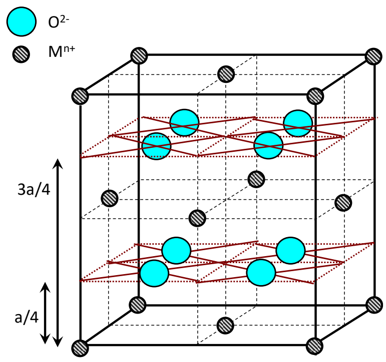


d(cation-anion) = $R^+ + R^- = a\sqrt{3}/4 = 5.41\times\sqrt{3}/4 = 2,34$ Å.

Exercice 2

Le dioxyde MO_2 possède la structure cristalline de la fluorine.

1) Dessiner clairement la stéréochimie de ce composé en prenant à l'origine M^{n+}.



Dans la structure type fluorine, les cations M^{n+} forment un réseau C.F.C et les anions O^{2-} occupent tous les sites tétraédriques du réseau CFC, ils se trouvent donc au centre d'un petit cube d'arête a/2.

2) Quelle sont les coordonnées réduites des ions ?

- **Les M^{n+} forment un C.F.C :**

  - M^{n+} aux sommets : (0, 0, 0)

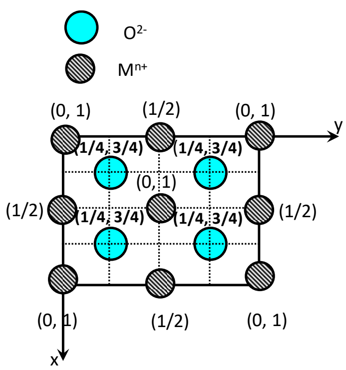
  - M^{n+} aux centres des 6 faces du cube : (1/2, 1/2, 0) ; (1/2, 0, 1/2) ; (0, 1/2, 1/2).

- **Les anions O^{2-} occupant tous les sites tétraédriques :**

  (1/4, 1/4, 1/4) ; (1/4, 3/4, 1/4) ; (3/4, 1/4, 1/4) ; (3/4, 3/4, 1/4)

  (1/4, 1/4, 3/4) ; (1/4, 3/4, 3/4) ; (3/4, 1/4, 3/4) ; (3/4, 3/4, 3/4)

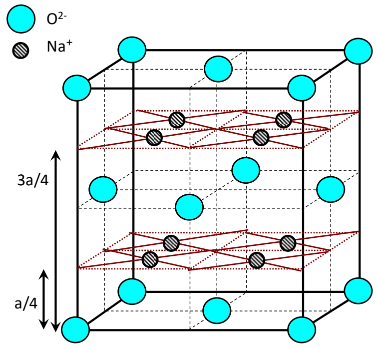
3) Projeter la structure sur le plan xoy.



Exercice 3

L'oxyde de sodium comporte une structure cubique à faces centrées en ion O^{2-} et les ions Na^+ au centre de tous les petits cubes d'arête a/2.

1) Représenter la maille et préciser les coordonnées réduites des ions Na^+ et O^{2-}.



- **Les O^{2-} forment un C.F.C :**

- O^{2-} aux sommets : (0, 0, 0)

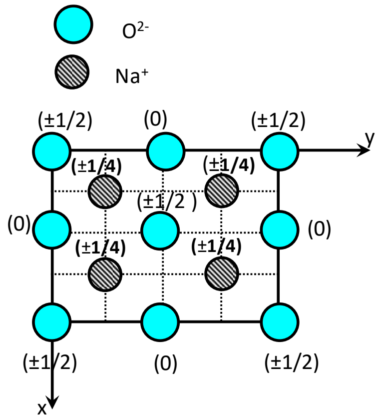
- O^{2-} aux centres des 6 faces du cube : (1/2, 1/2, 0) ; (1/2, 0, 1/2) ; (0, 1/2, 1/2).

- **Les Na^+ occupant tous les sites tétraédriques :**

(1/4, 1/4, 1/4) ; (1/4, 3/4, 1/4) ; (3/4, 1/4, 1/4) ; (3/4, 3/4, 1/4)

(1/4, 1/4, 3/4) ; (1/4, 3/4, 3/4) ; (3/4, 1/4, 3/4) ; (3/4, 3/4, 3/4)

2) Faire une projection sur le plan (002).



3) Vérifier la formule stœchiométrique de l'oxyde de sodium.

O^{2-} : 8 × 1/8 + 6 × 1/2 = 4

Na^+ : 8 × 1 = 8

Soit : 4 motifs Na_2O/maille

4) Déterminer le nombre de coordination des ions Na^+ et O^{2-}.

Les cations Na^+ sont entourés de 4 anions O^{2-} car ils occupent des sites tétraédriques. Donc la coordinence est de 4 pour chaque cation : $[Na^+] = 4$.

Les anions O^{2-} sont entourés de 8 cations Na^+ donc la coordinence est de 8 pour chaque anion : $[O^{2-}] = 8$.

5) Calculer la masse volumique de ce composé.

- **Masse volumique de Na_2O :**

$\rho_{Na2O} = ZM_{Na2O} / NV_{maille} = ZM/Na^3$

Où (Z = 4 motifs Na_2O /maille)

Les ions dans la structure Na_2O (type antifluorine) sont tangents suivant la grande diagonale du cube.

Soit : $R_{Na+} + R_{O2-} = a\sqrt{3}/4$ a = $4 \times (R_{Na+} + R_{O2-}) / \sqrt{3}$

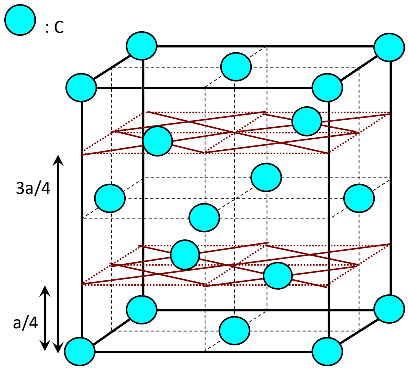
AN : $a = 4 \times (0.98 + 1.4) / \sqrt{3} = 5.49$ Å

AN : $\rho_{Na2O} = (4 \times 62) / 6.022\ 10^{23} \times (5.49\ 10^{-8})^3 = 2.49\ g/cm^{-3}$

Exercice 4

Le carbone existe sous deux variétés allotropiques, le graphite et le diamant. Le diamant est un solide covalent qui cristallise dans un système cubique. La projection de sa maille sur le plan xoy est la suivante :

1) Représenter en perspective la maille du diamant.



Les atomes de carbone occupent un réseau C.F.C. et un site tétraédrique sur 2 ; cette coordinence du site correspond exactement à l'hybridation sp^3 du carbone.

On distingue deux types de sous réseaux cubiques à faces centrées décalés l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale du cube.

2) Quelle est la coordinence du carbone dans cette structure ?

[4]

3) Combien y a-t-il d'atomes de carbone par maille ?

C : $8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 + 4 \times 1 = 4$

Soit : 8 atomes de carbone/maille

4) Calculer le rayon covalent du carbone diamant.

Cations et anions sont tangents suivant la diagonale principale du petit cube d'arête a/2 :

$d(C\text{-}C) = 2R_c = a\sqrt{3}/4$.

$R_c = a\sqrt{3}/8$

AN : $R_c = 3.55 \times \sqrt{3}/8 = 0.76$ Å

5) Calculer la compacité et la masse volumique du diamant.

- **Compacité de la structure diamant :**

C = Volume occupé par les (n) atomes de la maille / Volume de la maille

C = z × V (d'un atome) / V(maille)

La compacité sera donc :

$C = 8 \times 4/3 \times \pi \times (R_c)^3 / a^3$

AN : $C = 8 \times 4/3 \times \pi \times (0.76)^3 / (3.55)^3 = 0.32$

- **La masse volumique du diamant :**

$\rho_{diamant} = ZM/NV_{maille} = ZM/Na^3$

AN : $\rho_{NH4Cl} = (8 \times 12) / 6.022\ 10^{23} \times (3.55\ 10^{-8})^3$

$\rho_{diamant} = 3.56\ g/cm^{-3}$