

Série 1

Les structures métalliques

Exercice 1

L'étude aux rayons X d'un cristal de chrome indique que ce métal cristallise dans un système cubique centré, la maille élémentaire ayant une arête de $2,88\text{\AA}$. La masse atomique du métal est de $51,996\text{g/mole}$.

- 1- Représenter en perspective la maille élémentaire et donner le nombre d'atome par maille.
- 2- Calculer le rayon atomique. Quel est le taux de remplissage de la maille
- 3- Définir la coordinence d'un atome et donner sa valeur pour ce système.
- 4- Calculer la masse volumique du chrome.

Exercice 2

Le cuivre métallique cristallise dans un système cubique à faces centrées. Le paramètre de la maille vaut $3,61\text{\AA}$ est la masse volumique ρ est de 8920Kg/m^3 .

- 1- Dessiner la maille du cuivre en perspective et faire sa projection dans le plan xOy . Donner la coordinence des atomes.
- 2- Donner les coordonnées réduites des atomes.
- 3- Calculer la compacité de cette structure.
- 4- Donner la position des sites tétraédriques et calculer le rayon maximal des atomes qui peuvent être logés dans ces interstices sans déformer la maille.
- 5- Calculer la masse atomique du cuivre.

Exercice 3

L'Or métallique cristallise dans un système (C.F.C), les atomes sont assimilés à des sphères rigides de rayon $R=14.42\text{nm}$. Par ailleurs, l'Or peut former de nombreux alliages, par insertion ou substitution.

1- Représenter un schéma de la maille élémentaire de l'Or. Etablir la relation entre le rayon R et le paramètre a de la maille. Calculer a.

2- Les plus grands sites d'insertion dans la maille sont les sites octaédriques.

a/ Sur le schéma de la maille élémentaire, représenter les centres des sites octaédriques.

b/ Etablir la condition pour qu'un atome étranger puisse occuper le site octaédrique.

L'Or blanc est un alliage d'Or et de nickel(Ni). Le Ni a un rayon $R' = 12.46 \text{ nm}$.

3- Montrer que le Ni ne peut pas former un alliage d'insertion avec l'Or.

4- Un alliage Au-Ni a une maille (C.F.C) dans laquelle un atome d'Or est substitué par un atome de nickel. La masse volumique de cet alliage est $17,63 \text{ g/cm}^3$. Déterminer le nouveau paramètre a' de cette maille.

Données : $M_{\text{Au}} = 197 \text{ g/mole}$.

$M_{\text{Ni}} = 58,7 \text{ g/mole}$.

Exercice 4

Le magnésium (Mg) cristallise dans un système hexagonal compact.

1- Représenter la maille en perspective et faire sa projection dans le plan xOy. Déterminer la coordination de l'atome de Mg.

2- Sur la pseudo-maille donner la position des sites tétraédriques et octaédriques. Déterminer les coordonnées réduites.

3- Montrer que les paramètres de la maille hexagonale compacte sont liés par la relation : $c = a \sqrt{\frac{8}{3}}$.

4- Calculer les valeurs de a et c.

5- Calculer la masse volumique ρ de Mg.

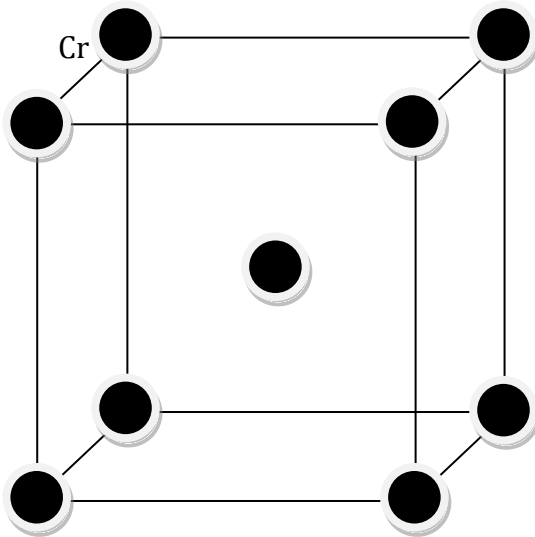
Données : $M_{\text{Mg}} = 24.3 \text{ g/mole}$.

$R_{\text{Mg}} = 1.6 \text{ \AA}$.

Corrigé de la série 1

Exercice 1

1/ Maille élémentaire en perspective :



Nombre d'atome par maille Z :

$$Z = 8 \times \frac{1}{8} (\text{sommets}) + 1 \times 1 (\text{centre du cube}) = 2 \Rightarrow Z = 2 \text{ atomes par maille.}$$

2 / calcul du rayon atomique :

Sur la diagonale du cube on a : $a\sqrt{3} = 4R$ d'où $R = 1,247 \text{ \AA}$.

Calcul du taux de remplissage :

$$\tau = \frac{\text{volume occupé par les atomes}}{\text{volume de la maille}} = \frac{Z \cdot V_{\text{atome}}}{V_{\text{maille}}}$$

$$V_{\text{atome}} = \frac{4}{3} \pi R^3 \quad V_{\text{maille}} = a^3$$

$$\tau = \frac{2 \cdot \frac{4}{3} \pi R^3}{a^3} = \frac{2 \cdot \frac{4}{3} \pi (1,247)^3}{a^3} = 0,68 \Rightarrow \tau = 68\%$$

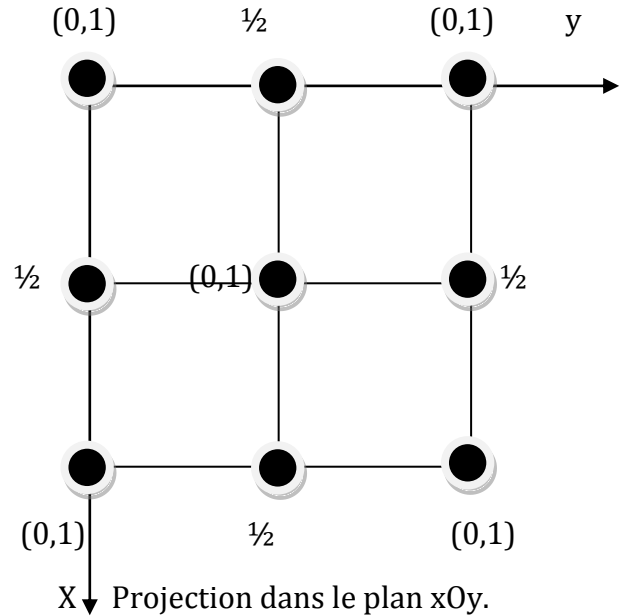
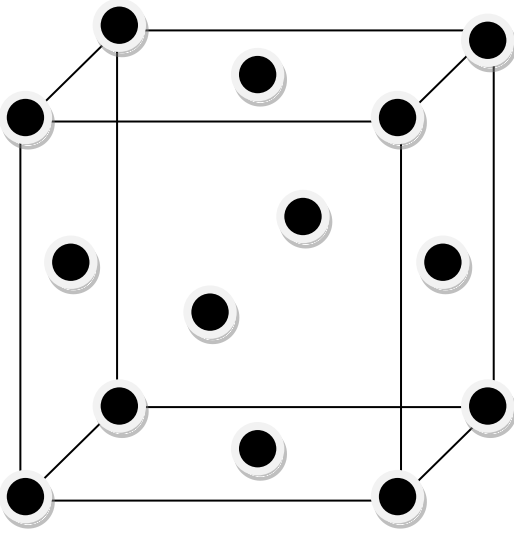
3/ Coordinence des atomes : correspond au nombre d'atomes les plus proches voisins d'un atome donné. Dans le cas du système C.C la coordinence est 8.

4/ Calcul de la masse volumique :

$$\rho = \frac{m}{v} = \frac{Z \cdot M}{N a^3} = \frac{2 \times 51,996}{6,02210^{23} \times (2,88 \cdot 10^{-8})^3} = 7,23 \text{ g/cm}^3.$$

Exercice 2

1/ maille élémentaire C.F.C :



Coordinance des atomes :

A la distance $a \frac{\sqrt{2}}{2}$ chaque atome est entouré par 12 atomes donc la coordinance est 12.

2/ les coordonnées réduites des atomes :

$$(0,0,0); (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}); (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}); (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0).$$

3 /Calcul de la compacité :

$$\tau = \frac{Z \cdot V_{\text{atome}}}{V_{\text{maille}}}$$

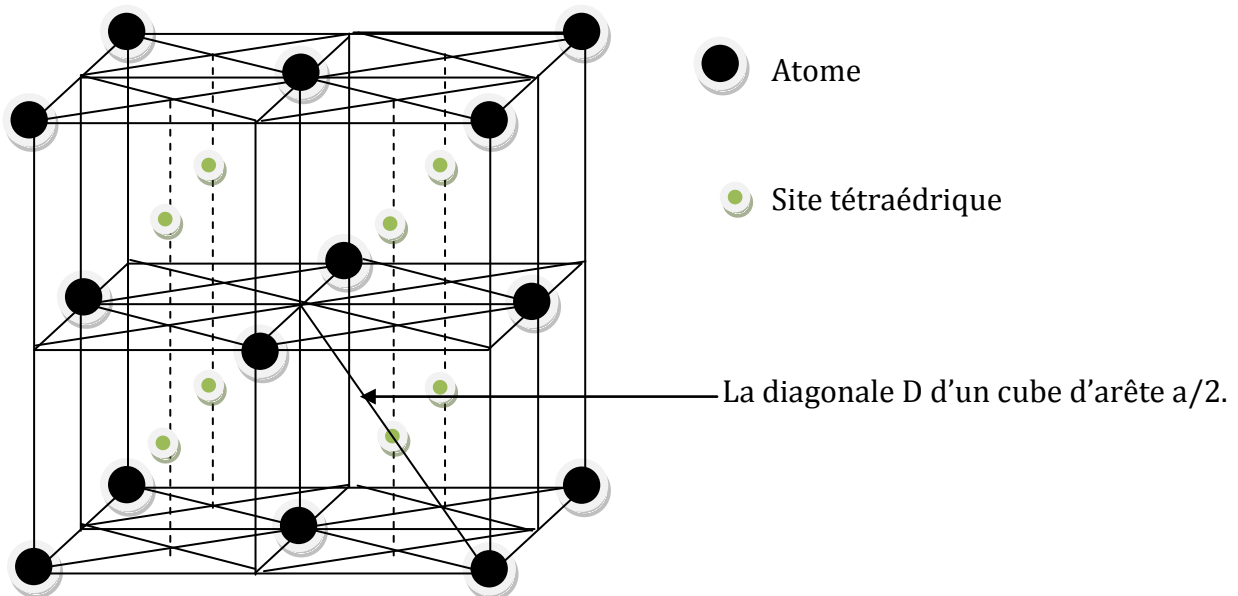
on aura besoin de a (paramètre de la maille) et R(rayon de l'atome).

Calcul de a : on a sur la diagonale d'une face : $4R = a\sqrt{2} \rightarrow R = a \frac{\sqrt{2}}{4}$.

Calcul de Z = $8 \times \frac{1}{8}$ (sommets) + $6 \times \frac{1}{2}$ (centre des faces) = 4.

$$\tau = \frac{4 \cdot \frac{4}{3} \pi a^3 \frac{2\sqrt{2}}{4^3}}{a^3} = \frac{\pi\sqrt{2}}{6} = 0,74 = 74\%.$$

4/ Position des sites tétraédriques dans le système C.F.C.



Calcul du rayon du site tétra. (R_T) :

$$\text{Sur la diagonale D on a : } 2R + 2R_T = a \frac{\sqrt{3}}{2} \rightarrow R_T = a \frac{\sqrt{3}}{4} - R$$

$$\text{Sur une face de la maille : } R = a \frac{\sqrt{2}}{4}$$

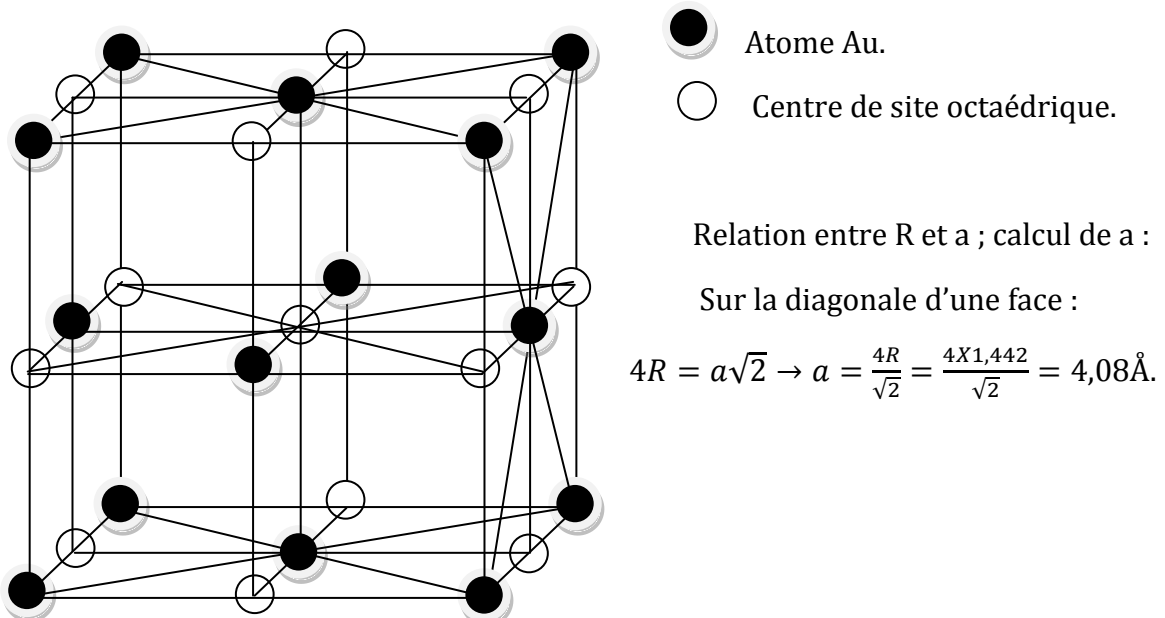
$$\text{D'où } R_T = a \frac{\sqrt{3}}{4} - a \frac{\sqrt{2}}{4} \rightarrow R_T = \frac{a}{4} (\sqrt{3} - \sqrt{2}) \Leftrightarrow R_T = 0,287 \text{ \AA}.$$

5/ Calcul de la masse atomique du cuivre :

$$\rho = \frac{m}{v} = \frac{Z.M}{N.a^3} \rightarrow M = \frac{\rho.N.a^3}{Z} = \frac{9,82 \times (3,61 \cdot 10^{-8})^3 \times 6,02210^{23}}{4} = 63,2 \text{ g/mole}.$$

Exercice 3

1/ Schéma de la maille élémentaire de l'Or :



2/ b- Condition pour qu'un atome étranger puisse occuper un site octaédrique :

$$\text{Sur les arêtes on a : } 2R_{Au} + 2R_{octa.} = a \rightarrow R_{octa.} = \frac{a}{2} - R_{Au} = \frac{4,08}{2} - 1,442 = 0,598\text{\AA}.$$

3 / Alliage d'insertion :

On constate que : $R_{Ni} > R_{octa.}$

Le rayon de Ni est beaucoup plus grand que celui des sites octaédriques, il est donc impossible d'insérer des atomes de nickel dans ces interstices.

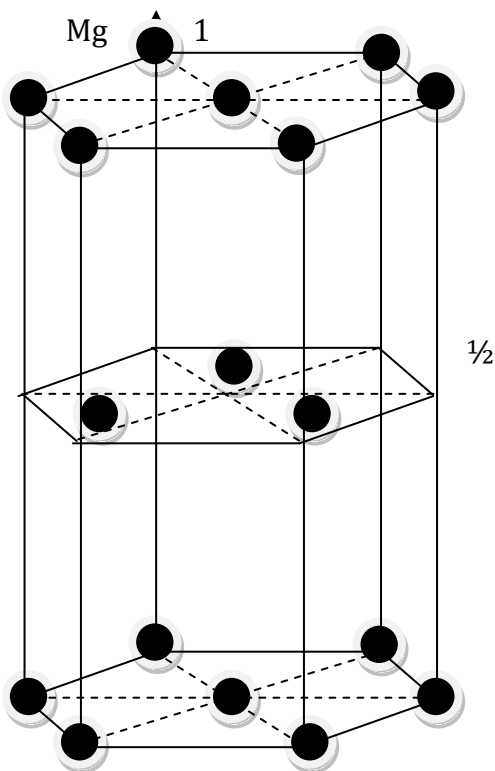
4/ Calcul du nouveau paramètre (a'):

$$\rho = \frac{m}{v} = \frac{m_{Au} + m_{Ni}}{v} = \frac{Z_{Au} \cdot M_{Au} + Z_{Ni} \cdot M_{Ni}}{N \cdot a'^3}$$

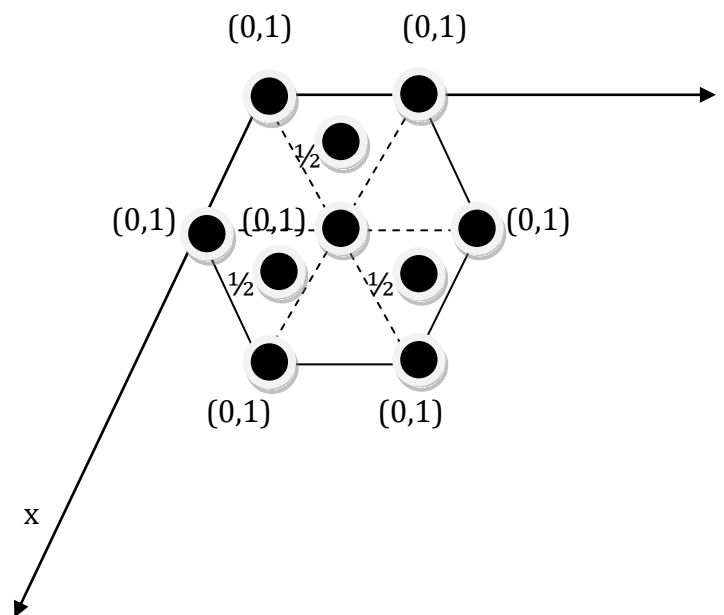
$$\text{D'où } a' = \sqrt[3]{\frac{Z_{Au} \cdot M_{Au} + Z_{Ni} \cdot M_{Ni}}{N \cdot \rho}} = \sqrt[3]{\frac{3 \times 197 + 1 \times 58,7}{6,022 \cdot 10^{23} \times 17,63}} = 3,9310^{-8} \text{ cm} = 3,94\text{\AA}.$$

Exercice 4

1/ La maille en perspective



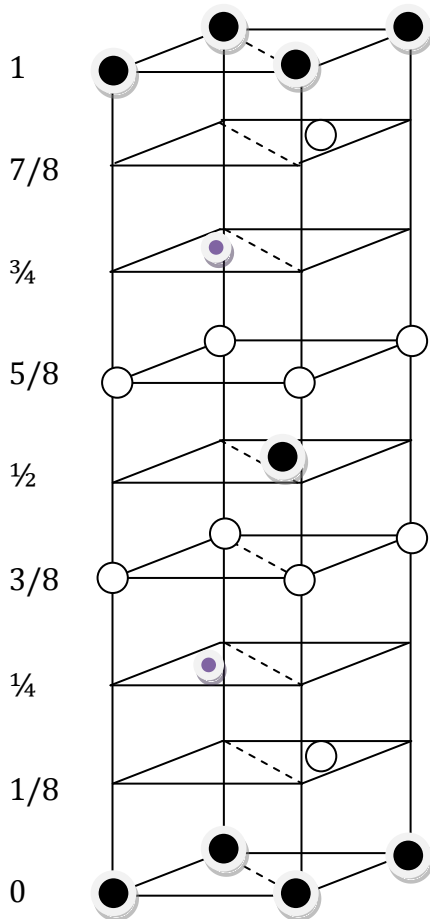
Projection de la maille dans le plan xOy.



Coordination de Mg :

Chaque atome est entouré de 12 proches voisins. Soit l'atome situé au milieu de la base de l'hexagonale, il est entouré de 6 atomes du plan xOy , 3 atomes du plan à $Z=c/2$ et 3 atomes du plan $Z=-c/2$. La coordination est donc égale à 12.

2/ La pseudo-maille :



- atome Mg.
- site octaédrique.
- site tétraédrique.

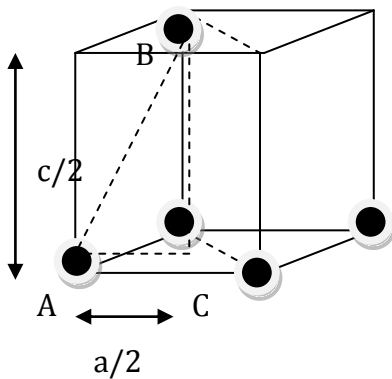
Les coordonnées réduites :

Mg : $(0,0,0)$; $(\frac{2}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2})$.

sites octa. : $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4})$; $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{3}{4})$.

sites tétra. : $(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{8})$; $(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{7}{8})$; $(0,0, \frac{3}{8})$; $(0,0, \frac{5}{8})$.

3/ Relation entre a et c :



on a : $(AB)^2 = (BC)^2 + (CA)^2$

$$AB=a ; BC=c/2 ; \csc(30^\circ) = \frac{a}{2AC} = \frac{\sqrt{3}}{2} \rightarrow AC = \frac{a}{\sqrt{3}}$$

$$\text{donc : } a^2 = \frac{c^2}{4} + \frac{a^2}{3} \rightarrow \frac{2}{3}a^2 = \frac{c^2}{4} \rightarrow \frac{c^2}{a^2} = \frac{8}{3} \rightarrow \frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}}$$

