***Devoir (cristallochimie structurale) :SMP S4***

**EXERCICE I**

Le cobalt (Co) cristallise sous deux variétés allotropiques : c.f.c et h.c.

A/ On se propose d’étudier la variété h.c.

1- Rappeler la définition d’une maille hexagonale. Donner les coordonnées réduites du Co.

2- Représenter la maille en perspective et faire sa projection dans le plan (xoy).

3- Sachant que le rayon d’un atome de cobalt égal à 1,25Å.

i) Trouver l’expression qui relie les deux paramètres a et c.

ii) calculer les deux paramètres.

4- Calculer la masse volumique de cobalt ρ.

**EXERCICE II**

**A-**Un métal M de masse molaire atomique égale à 55,84g /mole cristallise dans un système cubique. Sa masse volumique est égale à 7870 Kg/m3. Le paramètre a=2,91Å .

1/ Dans quel mode de réseau cristallise le métal M ?

2/ Représenter la maille en perspective. Faire la projection dans le plan (110).

3/ Définir la coordinence et la calculer dans ce système.

4/ Calculer la compacité.

**B-** Le métal M en présence de l’oxygène peut donner plusieurs oxydes parmi les quels on site l’oxyde MO qui cristallise dans un système cubique dont la projection dans le plan (002) (c’est le plan qui coupe l’axe OZ en ½ ) est la suivantes :

 0 ±½ 0 ±½ 0 ±½

 ±½ 0 ±½ cation M2+ 0 ±½ 0 anion O2-

 0 ±½ 0 ±½ 0 ±½

1/ Représenter la maille en mode éclaté.

2/Donner les coordonnées réduites des deux ions. Quel réseau forme l’oxygène ?

3/ Déterminer la coordinence des deux ions et en déduire celle de la structure.

4/ Déterminer la distance dM—O. Calculer le paramètre a de la maille.

5/ Calculer la masse volumique et la compacité de MO.

**Données** : Rayons ioniques en Å :R(M2+) =0,73 ; R(O2-) =1,40.

 Masse molaire atomique de l’oxygène : M(O)=16g/mole. N=6,02.1023mol-1.

**EXERCICE III**

 Le Calcium peut former avec le Zinc un composé (alliage) de formule CaZnx. La projection de la maille dans le plan xoy est la suivante :

 (0 ,1) ½ (0,1) y

 ½ ½ Zn

 (0,1) (0,1) (0,1) Ca

 ½ ½

x (0,1) ½ (0,1)

1/ Représenter la maille en perspective.

2/ Déduire la valeur de X.

3/ Quelle est la coordinence des atomes de Calcium ?

**EXERCICEIV**

***Partie A***

 Le potassium K et le nickel Ni à l’état métallique cristallisent dans le système cubique.

Sachant que les masses volumiques sont : ρ(K) = 860Kg/m3 et ρ(Ni) = 8920 Kg/m3 .

1) Déterminer le mode de réseau pour chaque métal.

2) Représenter en perspective et on projection la maille de chaque métal.

3) Calculer pour les deux métaux :

 a- la distance la plus courte entre deux atomes.

 b- la compacité de chacun.

**Données** : a(K) = 5,42Å ; a(Ni) = 3,50Å .

 M(K) = 39,09g/atome ; M(Ni) = 58,71g/atome et N = 6,02.1023mole-1.

***Partie B***

 Le potassium et le nickel forment avec le fluore F un composé ionique de formule KxNiyFz qui cristallise dans un système caractérisé par les paramètres cristallographiques : a, b et c ; α=ß=δ=90°.

Sachant que :

* Les coordonnées réduites des ions Ni2+ et K+ sont :

Ni2+: (0,0,0) ; (½,½,½)

K+ : ( $\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{6} );\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{5}{6} \right) ;\left(0,0,\frac{1}{3}\right) ;(0,0,\frac{2}{3} )$.

-La projection des ions F- dans le plan xoy est :

 ($\frac{1}{6}, \frac{5}{6})$ (0,½,1) ($\frac{1}{6}, \frac{5}{6})$

 x

 (0,½,1) ($\frac{1}{3}$,$ \frac{2}{3})$ (0,½,1)

 ($\frac{1}{6}, \frac{5}{6})$ (0,½,1) ($\frac{1}{6}, \frac{5}{6})$

 Y

1) Représenter la maille en perspective du composé KxNiyFz.

2) Dans le plan xoy faire la projection des cations Ni2+ et K+.

3) Déterminer la formule du composé. En déduire le nombre de motif/maille.

4) En réalité les ions F- sont tangents à la fois aux ions Ni2+ et K+ selon la direction OZ. Calculer :

 a- selon l’axe oz la distance dNi2+\_\_ K+.

 b- selon l’axe central la distance d F-\_\_ F-.

 c- déduire la valeur du paramètre c.

5) Dans le plan xoy les ions F- ne sont tangents qu’aux ions Ni2+, calculer les paramètres a et b.

6) Calculer la masse volumique et la compacité de ce composé.

***Données*** : les rayons ioniques :R(K+) = 1,33Å . R(Ni2+) = 0,72 Å ; R(F-) = 1,36 Å.

 les masses atomiques (g/atome) : K = 39,09 ; Ni = 58,71 ; F = 19.

<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<<