

Cristallographie – Exercices – Devoirs

Exercice 1 corrigé disponible

Le polonium cristallise dans un **réseau cubique simple**.

Données : $M_{Po} = 209 \text{ g.mol}^{-1}$; $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

$$Z(Po) = 84 \quad a(Po) = 336 \text{ pm}$$

- Dessiner la maille en perspective et la projection dans le plan xOy.
- Donner les coordonnées réduites de chacun des atomes.
- Donner la définition de la multiplicité (Z) de la maille puis déterminer sa valeur
- Déterminer les conditions de tangence.
- Calculer la compacité (compacité = taux d'occupation)

Calculer la masse volumique du polonium

Exercice 2 corrigé disponible

L'**uranium** est un élément chimique de symbole U et de numéro atomique 92.

L'uranium est l'atome le plus lourd (qui contient le plus de nucléons) présent naturellement sur la terre.

L'uranium présente trois variétés allotropiques entre la température ambiante et sa température de fusion 1130 °C.

La phase α apparaît pour $T < 668$ °C.

La phase β existe entre 668 et 775 °C.

La phase γ est de structure **cubique centrée** pour 775 °C $< T < 1132$ °C.

Données : $M_U = 238 \text{ g.mol}^{-1}$; $a_U = 350 \text{ pm}$; $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$.

1) Dessiner une maille conventionnelle du réseau cristallin associé à cette dernière phase.

2) Dessiner les atomes en projection dans le plan xOy.

3) Donner les coordonnées réduites des atomes.

4) Quelle est la relation qui lie le côté a de la maille et le rayon atomique de l'uranium R_U ?

Comment s'appelle cette relation ?

5) Calculer le rayon atomique de l'uranium dans cette structure.

6) Calculer le nombre d'atomes par maille, la coordinence et la compacité.

7. Calculer la masse volumique de l'uranium

Exercice 3 corrigé disponible

Le plomb est un élément chimique de symbole Pb et de numéro atomique 82.

Le plomb cristallise dans un réseau cubique à faces centrées. Le paramètre de maille du plomb est de : $a = 495,1 \text{ pm}$.

Données : $M_{Pb} = 207,20 \text{ g.mol}^{-1}$, $M_{Fe} = 55,85 \text{ g.mol}^{-1}$ et $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$.

- Dessiner la maille en perspective.
- Déterminer la multiplicité (Z) de la maille (c'est à dire le nombre d'atomes par maille).
- Déterminer les conditions de tangence
- Calculer le rayon atomique du plomb.
- Calculer la compacité
- Calculer le volume d'un lest en plomb de 100 g.

Le fer cristallise sous sa forme α dans un système cubique centré de paramètre de maille $a_{Fe} = 286,4 \text{ pm}$.

- Pour un même volume, quel serait le poids d'un lest en fer ?

Exercice 4 corrigé disponible

Le diamant est un minéral composé de carbone qui cristallise dans un système à face cubique centrée ; des atomes de carbone supplémentaires sont insérés dans des sites tétraédriques dont les coordonnées réduites sont :

$$\left(\frac{1}{4}; \frac{1}{4}; \frac{1}{4}\right), \left(\frac{1}{4}; \frac{3}{4}; \frac{3}{4}\right), \left(\frac{3}{4}; \frac{1}{4}; \frac{3}{4}\right) \text{ et } \left(\frac{3}{4}; \frac{3}{4}; \frac{1}{4}\right)$$

Données : $M_C = 12,01 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ et $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

1. Combien y-a-t-il d'atomes par maille de diamant ?
2. Déterminer la condition de tangence
3. Quelle est la compacité de la maille de diamant ?
4. Calculer la masse volumique du diamant

Exercice 5 corrigé disponible

Le silicium cristallise en structure cubique à face centrée de masse volumique $\rho = 2,33 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$; des atomes de silicium supplémentaires sont insérés dans des sites tétraédriques dont les coordonnées réduites sont :

$$\left(\frac{1}{4}; \frac{1}{4}; \frac{1}{4}\right), \left(\frac{1}{4}; \frac{3}{4}; \frac{3}{4}\right), \left(\frac{3}{4}; \frac{1}{4}; \frac{3}{4}\right) \text{ et } \left(\frac{3}{4}; \frac{3}{4}; \frac{1}{4}\right)$$

Données : $M_{Si} = 28,086 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ et $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

1. Représenter une maille dans la projection orthogonale sur (xOy)
2. Déterminer la multiplicité de la maille
3. Donner la définition de la coordinence et calculer sa valeur pour le silicium
4. Donner la condition de tangence
5. Calculer le paramètre de la maille
6. Définir la compacité et calculer celle du silicium
7. Calculer le rayon d'un atome de silicium

Exercice 6 corrigé disponible

L'or est un métal de transition jaune brillant, très ductile et malléable ; l'or se trouve à l'état natif sous forme de pépites ou d'alluvions fluviaux. C'est un métal précieux.

L'or métallique cristallise dans un réseau cubique à faces centrées (cfc). Les atomes d'or sont assimilés à des sphères rigides de rayon $R = 144,1 \text{ pm}$.

Données : $M_{Au} = 196,97 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$, et $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$.

- Déterminer la multiplicité (Z) de la maille
- Etablir la relation entre le rayon R et le paramètre a de la maille cfc. Calculer a .
- Calculer le poids exact d'or d'un lingot dont les dimensions exactes sont : longueur = 8,6 cm, largeur = 4,0 cm et épaisseur = 1,5 cm.

Exercice 7 corrigé disponible

Le cuivre est un élément chimique de symbole Cu et de numéro atomique 29. Le cuivre cristallise dans le système cubique à faces centrées.

Une plaque de cuivre de dimensions 10 * 15 cm et de 2 mm d'épaisseur pèse 267,9 g. Le cuivre cristallise dans un système cubique à faces centrées.

Calculer le paramètre de maille (a_{Cu}) ainsi que le rayon métallique du Cu (R_{Cu}).

Données : $M_{Cu} = 63,55 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ et $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$.

Exercice 8 corrigé disponible

Le magnésium métal cristallise dans une structure hexagonale compacte qu'on admettra idéale.

1- Représenter la maille élémentaire ou **pseudo-maille de cette structure**

(prisme droit à base losange)

2- Montrer que la relation donnant la hauteur **c** de la maille en fonction de la distance interatomique **a** peut se mettre sous la forme $c=k.a$, **k** étant une constante dont on donnera la valeur exacte.

3 - Calculer la compacité ou coefficient de remplissage de la structure.

4- La densité du magnésium métal par rapport à l'eau est $d_{Mg} \approx 1,7$. En déduire une valeur approchée du rayon atomique du magnésium. On donne : $M(Mg) \approx 24 \text{ g.mol}^{-1}$, $N_A \approx 6.10^{23} \text{ mol}^{-1}$

Exercice 9

Le spinelle de magnésium présente un réseau d'ions O^{2-} définissant un système cubique à faces centrées dans lequel les ions Mg^{2+} occupent un huitième des sites tétraédriques et les ions Al^{3+} la moitié des sites octaédriques

Définir la formule du spinelle de magnésium

Exercice 10

L'or peut former de nombreux alliages, par insertion ou par substitution. Les sites d'insertion dans une maille cfc sont les sites tétraédriques et les sites octaédriques.

- Sur le schéma de la maille élémentaire, représenter les centres des sites tétraédriques.
- Établir la condition pour qu'un atome étranger, de rayon R_{Td} , puisse occuper un tel site.
- Sur le schéma de la maille élémentaire, représenter les centres des sites octaédriques.
- Établir la condition pour qu'un atome étranger, de rayon R_0 , puisse occuper un tel site.

1. Montrer que le nickel ne peut pas former un alliage d'insertion avec l'or

2. Un alliage Au-Ni a une maille cfc, dans laquelle un atome d'or par maille est totalement substitué par un atome de nickel. Vérifier cette hypothèse
Déterminer le nouveau paramètre a' de la maille

Données : $R_{Au}=144,2 \text{ pm}$; $R_{Ni}=124,6 \text{ pm}$

Exercice 11

L'alliage le plus utilisé dans l'industrie aéronautique est $Al_xNi_yTi_z$. Dans cet alliage, le Ti cristallise dans une structure CFC alors que l'aluminium occupe la totalité des sites octaédriques et le Ni occupe 100% des sites tétraédriques. Le paramètre de maille de cet alliage est $a = 589 \text{ pm}$.

Données : $R_{Ti}=147 \text{ pm}$; $R_{Al}=143 \text{ pm}$; $R_{Ni}=124 \text{ pm}$;

1) Dessiner la maille.

2) Quelle est la formule de cet alliage. Justifier.

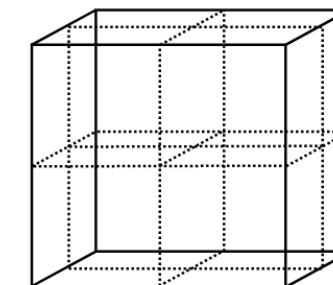
3. L'empilement des Ti est-il compact ? Justifier

4. Calculer la taille des sites cristallographiques dans la structure CFC et comparer avec le rayon des différents atomes

Exercice 12

Le cuivre cristallise dans une maille cubique à faces centrées.

1) Dessiner en perspective le contenu de la maille de paramètre de maille a



2) Etablir la relation entre le paramètre de maille a et le rayon métallique du cuivre, R_{Cu} .

3) Donner la multiplicité de la maille.

Cette structure est susceptible d'accueillir des atomes étrangers, notés B, venant s'insérer dans les sites cristallographiques.

Indiquer la position des sites tétraédriques (\blacktriangle) sur le schéma de la maille

4) Soit r le rayon maximum d'un atome pouvant s'insérer dans ce type de site cristallographique sans déformer le réseau (invariance du paramètre de maille). Exprimer r en fonction de a .

Calculer r donnée : $R_{Cu}=127,6 \text{ pm}$

5. Un alliage d'insertion sur des sites tétraédriques est-il possible avec le cuivre ?

Exercice 13

Le bromure d'ammonium NH_4Br peut cristalliser sous deux formes allotropiques α et β : la variété α , observée à basse température, est caractérisée par une **structure cubique de type CsCl**. La variété β , observée à haute température, peut être décrite comme une **structure de type NaCl** et de paramètre $a = 690\text{pm}$.

Données : $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$, $\text{NH}_4\text{Br} : M = 97,94 \text{ g.mol}^{-1}$.

- 1) Représenter la maille de la variété β du bromure d'ammonium en assimilant Br^- et NH_4^+ à des sphères.
- 2) Calculer, en assimilant l'ion NH_4^+ à une sphère de rayon $R = 150 \text{ pm}$, le rayon de l'ion Br^- dans la variété β .
- 3) Représenter la maille de la variété α du bromure d'ammonium en assimilant Br^- et NH_4^+ à des sphères.
- 4) Estimer alors, dans l'hypothèse d'une invariance des rayons ioniques avec la coordinnce, la valeur approchée du paramètre cristallin du bromure d'ammonium α .
- 5) Calculer la valeur exacte de ce paramètre a , la masse volumique de $\alpha\text{-NH}_4\text{Br}$ étant de $2,43 \text{ g.cm}^{-3}$.

Exercice 14

Le principal minéral de zinc est le sulfure de zinc **ZnS de type blende** – de l'allemand blenden, briller.

La blende, aussi appelée sphalérite, est la variété allotropique du sulfure de zinc qui cristallise dans le système cubique.

On se propose d'étudier la structure cristalline de la blende dans le cadre du modèle du cristal ionique parfait. Dans ce modèle, les ions du cristal sont assimilés à des sphères indéformables et anions et cations sont en contact.

Dans la blende, des études par diffraction aux rayons X montrent que les ions sulfure occupent un réseau cubique à faces centrées et les ions zinc (II) occupent un site tétraédrique sur deux.

Données : $M_{\text{Zn}} = 65,38 \text{ g.mol}^{-1}$, $M_{\text{S}} = 32,06 \text{ g.mol}^{-1}$ et $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$; $R(\text{Zn}^{2+}) = 74 \text{ pm}$ et $R(\text{S}^{2-}) = 184 \text{ pm}$,

- Dessiner la maille élémentaire en perspective
- Déterminer le nombre d'unités ZnS dans la maille.
- Établir la condition de tangence entre les ions Zn^{2+} et les ions S^{2-} en fonction de a paramètre de maille, et $R(\text{Zn}^{2+})$ et $R(\text{S}^{2-})$ rayons des ions constituant le cristal.
- En déduire la valeur théorique du paramètre de maille, a .