

## FICHE DE TD CHIMIE : CRISTALLOGRAPHIE

### EXERCICE 1 :

- 1) Donner la structure électronique de l'atome de zinc.
- 2) L'ion  $Zn^{2+}$  ne possède pas d'électrons 4s. En déduire la structure électronique de cet ion.
- 3) Le métal zinc cristallise dans le système hexagonal compact, le rayon de l'atome est pris égal à  $r=133\text{pm}$  : calculer les paramètres  $a$  et  $c$  de la maille élémentaire ; déterminer la masse volumique du zinc  
 $Zn$  ( $Z=30$ ) ;  $M=65,4\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$  ;  $N_A=6,02\cdot 10^{23}\text{mol}^{-1}$ .

### EXERCICE 2:

Calculer le volume d'un kilogramme d'or.

Données : rayon atomique :  $1,45\cdot 10^{-10}\text{m}$  ; structure cristalline :cfc.  $M=197\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ .

### EXERCICE 3 :

Le fer cristallise sous deux formes. Le fer  $\gamma$  cristallise dans le système cfc. Sachant d'autre part que le rayon d'un atome est pris égal à  $1,28\cdot 10^{-10}\text{m}$ , déterminer si on peut insérer un atome d'azote de rayon  $0,5\cdot 10^{-10}\text{m}$  dans le fer  $\gamma$ .

### EXERCICE 4 :

Le fluorure de calcium est un composé ionique qui cristallise de la façon suivante : les ions calcium forment un réseau cubique à faces centrées, les ions fluorures occupant tous les sites tétraédriques.

- 1) Représentez avec précision une maille de ce réseau.
- 2) Retrouvez à partir de cette maille la formule du fluorure de calcium.
- 3) Sachant que le paramètre de maille  $a=5,43\cdot 10^{-10}\text{m}$ , calculez la masse volumique du fluorure de calcium.

Elément chimique	Ca	F
Numéro atomique	20	9
Masse molaire atomique $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$	40,08	19,00

### EXERCICE 5 :

Le chlorure de potassium a la même structure cristalline que le chlorure de sodium.  $M(\text{Cl})=35,5\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$  et  $M(\text{K})=39\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ . La masse volumique du chlorure de potassium est égale à  $1,986\cdot 10^3\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ .

- 1) Déterminer la longueur de l'arête de la maille élémentaire du chlorure de potassium.
- 2) Quel est le rayon ionique  $r(\text{K}^+)$  de l'ion potassium, sachant que  $r(\text{Cl}^-)=1,81\cdot 10^{-10}\text{m}$ .

### Exercice 6 :

Le cuivre cristallise dans le réseau c.f.c d'arête  $a=360\text{pm}$ . Déterminer le rayon métallique puis la masse volumique du cuivre.

Le cuivre est un bon conducteur. Dans le modèle classique  $\text{Cu} \rightarrow \text{Cu}^+ + e^-$ . Calculer le nombre d'électrons libres par unité de volume.

$M(\text{Cu})=63,54\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ,  $N_A=6,02\cdot 10^{23}\text{mol}^{-1}$ .

### Exercice 7 :

L'or et le cuivre forment de nombreux alliages. L'un d'eux a la composition  $\text{Au},1\text{Cu},3$ .

Les atomes d'or dans cette structure se trouvent au niveau des sommets d'une maille cubique simple et les atomes de cuivre se trouvent au centre des faces du cube.

- 1) Cette structure est-elle compatible avec la composition de l'alliage ?
- 2) Calculer la masse volumique de l'alliage.
- 3) Calculer sa compacité.

$M(\text{Cu})=63,54 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$ , rayon de l'atome  $r_{\text{Cu}}=0,129\text{nm}$

$M(\text{Au})=197 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ,  $r_{\text{Au}}=0,144\text{nm}$

$$N_A=6,02\cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}.$$

#### Exercice 7 :

Le cuivre cristallise dans le réseau C.F.C. Sa densité est de 8,96 et sa masse molaire est de  $63,55 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$ .

1°) Calculer le rayon atomique du cuivre.

2°) Déterminer la compacité du cuivre.

3°) Peut-on insérer, sans déformation du cristal des atomes de rayon 44 pm.

Si oui dans quels sites ? (On justifiera la réponse).

On donne :  $N_A = 6,02\cdot 10^{23}$

#### Exercice 8 :

##### Le Nickel et ses alliages

- 1) Le nickel pur possède une structure cubique à faces centrées, dont le paramètre de maille est  $a=352,4\text{pm}$ . Représenter une maille, préciser la coordination d'un atome et déterminer en le justifiant le nombre d'atomes par maille.
- 2) Déterminer la relation de contact entre atomes voisins, en déduire le rayon atomique  $R_{\text{Ni}}$  du nickel.
- 3) Définir (en fonction de  $R_{\text{Ni}}$  et  $a$ ) et calculer la compacité de cette structure. Calculer la masse volumique  $\mu_{\text{Ni}}$  du nickel. On donne  $N_A=6,02\cdot 10^{23} \text{ Mol}^{-1}$  et  $M_{\text{Ni}}=58,7\text{g}\cdot\text{Mol}^{-1}$ .
- 4) On envisage la formation d'un alliage de nickel avec du titane (alliage à mémoire de forme). Le rayon atomique du titane est  $R_{\text{Ti}}=144,8\text{pm}$ .
  - a) Déterminer le rayon  $r_{\text{T}}$  des sites tétraédriques du nickel.
  - b) Déterminer le rayon  $r_{\text{O}}$  des sites octaédriques du nickel.
  - c) Compte tenu des valeurs trouvées précédemment dire si cet alliage est un alliage d'insertion ou de substitution c'est-à-dire si les atomes de titane viennent s'insérer dans les sites du nickel ou s'ils viennent remplacer certains atomes de nickel (substitution d'atomes).
- 5) On considère maintenant la formation d'un alliage de nickel avec de l'aluminium dans lequel la maille cubique comporte un atome d'aluminium à chacun de ses sommets et un atome de nickel au centre de chaque face. Le paramètre de la maille est  $a=359\text{pm}$ .
  - a) Dessiner la maille de cet alliage et déterminer la formule brute de l'alliage sous la forme  $\text{Ni}_x\text{Al}_y$ .
  - b) Calculer la masse volumique  $\mu_{\text{NiAl}}$  de cet alliage. On donne  $M_{\text{Al}}=27\text{g}\cdot\text{Mol}^{-1}$ .

##### Etude de l'oxyde de barium

L'oxyde de barium  $\text{BaO}$  est un cristal ionique constitué d'ions  $\text{O}^{2-}$  et d'ions  $\text{Ba}^{2+}$  et possède la structure de type  $\text{NaCl}$  (réseau CFC d'anions et les cations occupant les sites octaédriques).

- 1) Donner la relation de contact entre les rayons  $R(\text{O})$  et  $R(\text{Ba})$  des ions et le paramètre  $a$  de la maille. Vérifier cette relation avec  $R(\text{O})=140\text{pm}$ ,  $R(\text{Ba})=135\text{pm}$  et  $a=553\text{pm}$ .
- 2) Montrer que les ions  $\text{O}^{2-}$  ne sont pas en contact. Calculer la masse volumique  $\mu$  de  $\text{BaO}$ . On donne la masse molaire de  $\text{BaO}$  :  $M(\text{BaO})=153,3\text{g}\cdot\text{Mol}^{-1}$ .
- 3) Déterminer la compacité de cette structure.

## EXERCICE 9

Le rayon de l'atome de fer est de 124 pm. Le fer cristallise soit en cubique centré soit en cubique faces centrées.

- 1°) Calculer dans les deux cas le nombre d'atomes par maille élémentaire.
  - 2°) Calculer la masse volumique du fer cristallisé dans le système cubique centré.
  - 3°) Calculer le rayon maximal de l'atome que l'on peut insérer dans un site tétraédrique et dans un site octaédrique de système c.f.c.
- On donne : Nb d'AVOGADRO =  $6,02 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$  et  $M(\text{Fe}) = 56 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ .
- 4°) Quels seraient les sites occupés par des atomes de rayon  $r = 25 \text{ pm}$ .