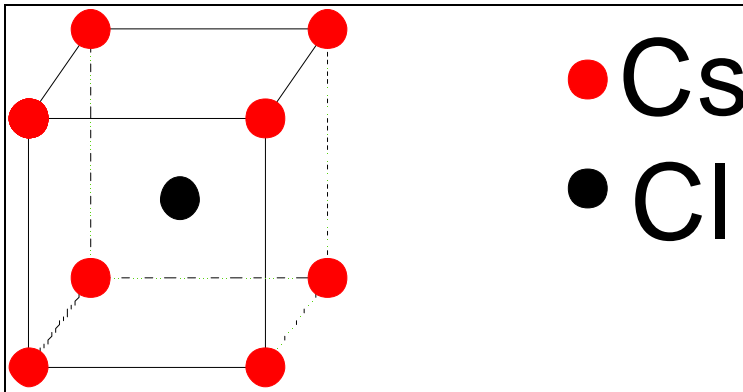


Séances 9 et 10 :

- 1) Le Chlorure de Césium est un minéral ionique cristallisant selon un réseau cubique simple de paramètre $a=4.11\text{Å}$. Son motif comprend 2 atomes, Cs en $0,0,0$ et Cl en $\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}$. Dessinez la maille élémentaire en perspective. Pourquoi ne décrit-on pas cette maille à l'aide d'un réseau cubique centré ? Calculez la densité de cette maille et le nombre de coordinence de chaque atome.



Un réseau cubique centré doit avoir le même atome aux sommets et au centre.

Cette maille contient $8 * \frac{1}{8}$ d'atome de Cs et 1 atome de Cl

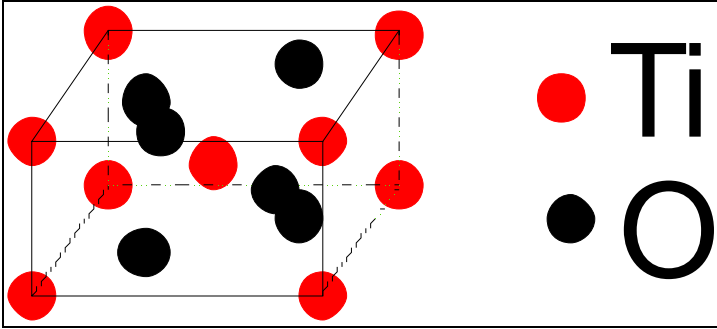
$$D = \frac{1 * 132.9 + 1 * 33.5 \text{ UA}}{4.11^3 \text{ Å}^3} = 2.39 \text{ UA/Å}^3$$

$$= 2.39 \text{ UA/Å}^3 * \frac{1.66 \cdot 10^{-27} \text{ kg/UA}}{(10^{-10} \text{ m/Å})^3} = 3969 \text{ kg/m}^3$$

Coordinance Cs=8

Coordinance Cl=8

- 2) Le rutile est un minéral ionique cristallisant selon un réseau tétragonal simple de paramètre $a=b=4.58\text{Å}$ et $c=2.98\text{Å}$. Son motif comprend 6 atomes, Ti en $0,0,0$ et $\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}$ et O en $0.3,0.3,0$; $0.7,0.7,0$; $0.2,0.8,\frac{1}{2}$; $0.8,0.2,\frac{1}{2}$. Réalisez le même exercice que pour le Chlorure de Césium.



La maille contient 2 atomes de Ti et 4 atomes d'O

$$D = \frac{2 * 47.9 + 4 * 16 \text{ UA}}{4.58^2 * 2.98 \text{ \AA}^3} = 2.55 \text{ UA/\AA}^3$$

$$= 2.55 \text{ UA/\AA}^3 * \frac{1.66 \cdot 10^{-27} \text{ kg/UA}}{(10^{-10} \text{ m/\AA})^3} = 4243 \text{ kg/m}^3$$

Distance entre Ti centre et O (0.2 0.8 0.5) = distance Ti centre et O (0.8 0.2 0.5)

$$d_{Ti-O} = \sqrt{(0.3 * 4.58)^2 + (0.3 * 4.58)^2} = 1.94 \text{ \AA}$$

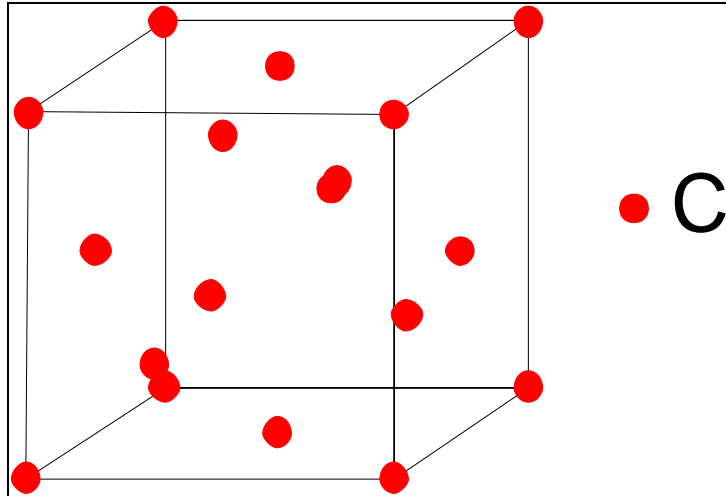
Distance entre Ti centre et les 4 derniers O est identique

$$d_{Ti-O} = \sqrt{(0.2 * 4.58)^2 + (0.2 * 4.58)^2 + (0.5 * 2.98)^2} = 1.97 \text{ \AA}$$

Les 2 distances sont plus ou moins identiques aux erreurs d'approximations près. La coordination du Ti est donc de 6.

Puisqu'il y a 2 fois plus d'O que de Ti dans la maille, la coordination de l'O est donc de 3.

- 3) Le diamant cristallise selon un réseau cubique face centrée de paramètre $a=3.56 \text{ \AA}$. Son motif comprend 2 atomes, C 0,0,0 et $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$.
 Le graphite cristallise selon un réseau hexagonal de paramètre $a=2.46 \text{ \AA}$ et $c=6.79 \text{ \AA}$. Son motif est composé de 4 atomes, C en 0,0,0 ; 0,0, $\frac{1}{2}$; $\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0$; $\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}$.
 Effectuez le même exercice que pour le rutile. Calculez aussi la distance C-C dans le diamant et le graphite et calculez aussi la distance entre les feuillets du graphite.
 Quel lien existe-t-il entre la dureté extrême du diamant et sa structure cristalline.
 Quel lien existe-t-il entre la propriété lubrifiante du graphite et sa structure cristalline ?



La maille contient 8 atomes de C

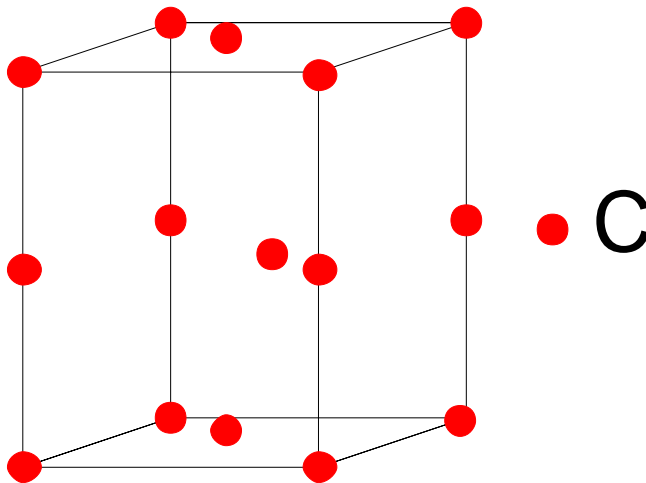
$$D = \frac{8 \cdot 12.01 \text{ UA}}{3.56 \text{ \AA}^3} = 2.13 \text{ UA/\AA}^3$$

$$= 2.13 \text{ UA/\AA}^3 \cdot \frac{1.66 \cdot 10^{-27} \text{ kg/UA}}{(10^{-10} \text{ m/\AA})^3} = 3535 \text{ kg/m}^3$$

Si l'on prend comme atome de référence l'atome qui se trouve en $(\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4})$, il y a 4 atomes qui se trouvent à la même distance de cette atome (000) $(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2})$ $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$ $(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2})$.

$$d_{Ti-O} = \sqrt{(0.25 \cdot 3.56)^2 + (0.25 \cdot 3.56)^2 + (0.25 \cdot 3.56)^2} = 1.54 \text{ \AA}$$

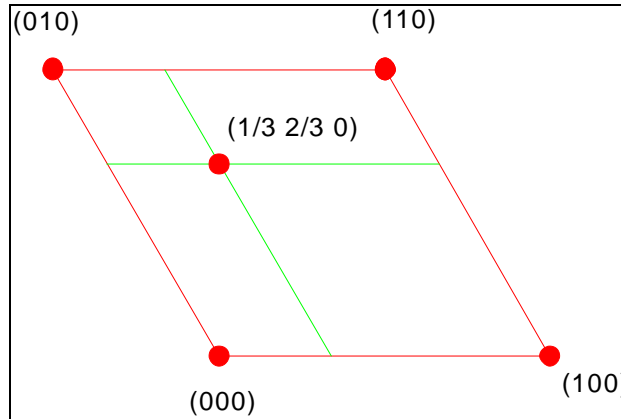
La coordinence est donc de 4.



La maille contient 4 atomes

$$D = \frac{4 * 12.01 \text{ UA}}{2.46 * 2.46 \sin 60 * 6.79 \text{ A}^3} = 1.34 \text{ UA/A}^3$$

$$= 1.34 \text{ UA/A}^3 * \frac{1.66 \cdot 10^{-27} \text{ kg/UA}}{(10^{-10} \text{ m/A})^3} = 2240 \text{ kg/m}^3$$



La longueur de la liaison entre (1/3 2/3 0) et (000) est égale à la longueur de la liaison entre (1/3 2/3 0) et (110).

$$d_{c-c} = \frac{2}{3} * 2.46 * \sin 60 = 1.42 \text{ A}$$

La longueur de la liaison entre (1/3 2/3 0) et (010) est égal à

$$d_{c-c} = \frac{1}{3} * 2.46 * \sin 60 * 2 = 1.42 \text{ A}$$

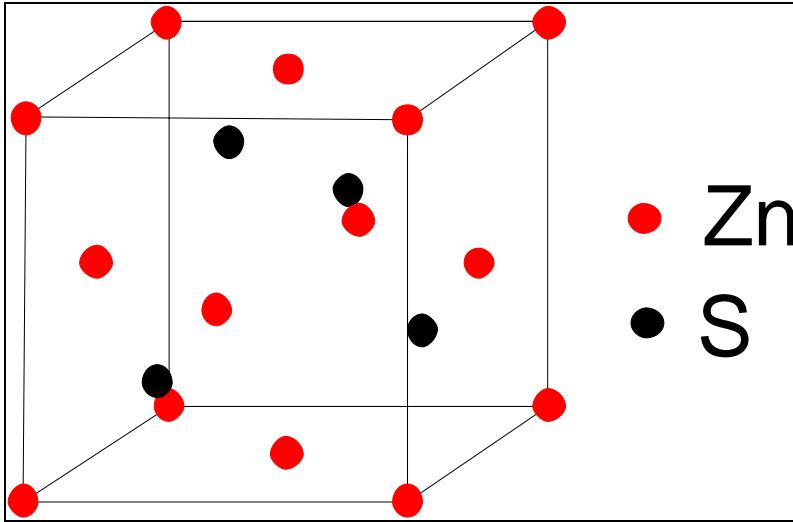
La coordinnence est donc de 3.

La distance entre les feuillets est de 3.4A.

Le diamant est très dur car les longueurs des liaisons entre atomes sont très courtes.

Le graphite présente une liaison très courte de coordinnence 3 dans le plan qui est donc très solide. Par contre, la distance entre les feuillets est très longue et donc facile a briser. Ce qui lui donne des propriétés lubrifiantes.

4) La blende (ZnS) se développe dans une structure cubique simple de paramètre $a=5.43 \text{ \AA}$; son motif se compose de Zn : $0,0,0$; $1/2,1/2,0$; $1/2,0,1/2$; $0,1/2,1/2$ et S : $1/4,1/4,1/4$; $3/4,3/4,1/4$; $3/4,1/4,3/4$; $1/4,3/4,3/4$. Que peut-on conclure de la comparaison de cette structure avec celle du diamant ?



C'est une structure du même type (cubique face centrée). Mais il y a 2 atomes différents. 1 de Zn en (000) et un de S en $(\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4})$

5) Ci-dessous, vous trouverez un diagramme représentant la structure de la perovskite.

Dans quel type de réseau ce minéral cristallise-t-il ?

orthorhombique

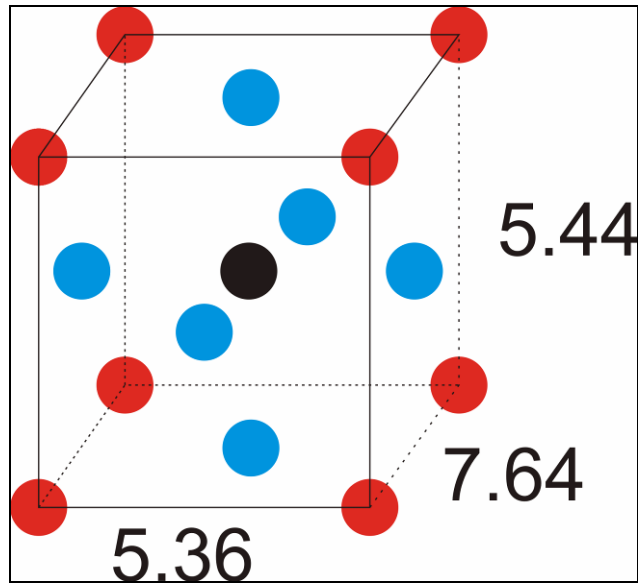
De combien d'atomes son motif est-il composé ?

Un atome rouge en (000), 3 atomes bleu en $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$, $(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2})$ et $(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2})$

Un atome noir en $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2})$

Quels sont ses paramètres du réseau?

$A=5.36\text{Å}$ $b=7.64\text{Å}$ $c=5.44\text{Å}$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



6) Voici la structure d'un supraconducteur. Quelles sont les différences entre sa structure et la structure vue dans l'exercice précédent ?

