

Corrigés du Thème 1 :

Création : juin 2003

Dernière modification : juin 2005

Exercice T1_01 : Evaluation de la taille d'une molécule d'eau

Dans 1g (1 cm³) d'eau, il y a (1/18) 6,02 10²³ molécules. Dans un empilement compact de sphères dures, 74% du volume est occupé.

Soit V le volume occupé par une molécule :

$$0,74 \times 1 = V (1/18) 6,02 \cdot 10^{23} \quad d = 0,28 \text{ nm}$$

Exercice T1_02 : Evaluation de la taille d'une molécule d'huile

Soit S, la surface couverte par l'huile, V la contenance de la cuillère, e l'épaisseur du film d'huile : $e = V / S$ $e = 1,5 \text{ nm}$

Les molécules d'huile sont organisées en monocouches, formées d'une tête hydrophile au contact des molécules d'eau, et d'une queue hydrophobe orientée perpendiculairement.

2 monocouches : $e = 0,75 \text{ nm}$; 3 monocouches : $e = 0,5 \text{ nm}$

Exercice T1_03 : Evaluation de la taille d'une molécule d'huile

1 - : On considère un cube de côté l : $6l^2$ est la surface correspondant à une masse égale à ρl^3 . La surface S offerte pour 1 gramme est égale à $S = 6 / \rho l$ $S = 2 \text{ m}^2 / \text{g}$

2 : Soient V_m le volume T.P.N. occupé par une mole de gaz, V le volume d'azote adsorbé par gramme de solide, N le nombre d'Avogadro :

$$S = (V / V_m) \times N \times A_m \quad S = 49 \text{ m}^2 / \text{g}$$

Exercice T1_04 : Opérations de symétrie binaire directe

1 - : Fig.T1_04A : effet des opérations de symétrie binaire dont les axes se coupent à l'origine, sur l'atome situé en :

$$x = 0,25 \quad y = 0,34 \quad z = 0,28 \quad (\text{unité asymétrique})$$

Les coordonnées sont rapportées à l'origine de la maille

2 - : Fig.T1_04B : position des atomes à l'intérieur de la maille.

Les coordonnées des atomes du motif sont rapportées au centre de la maille ; elles sont obtenues en appliquant les translations de réseau. Il y a 4 atomes dans la maille, remarquer qu'il n'y en a pas à l'origine.

Remarque : la cote indiquée est celle suivant l'axe c (z).

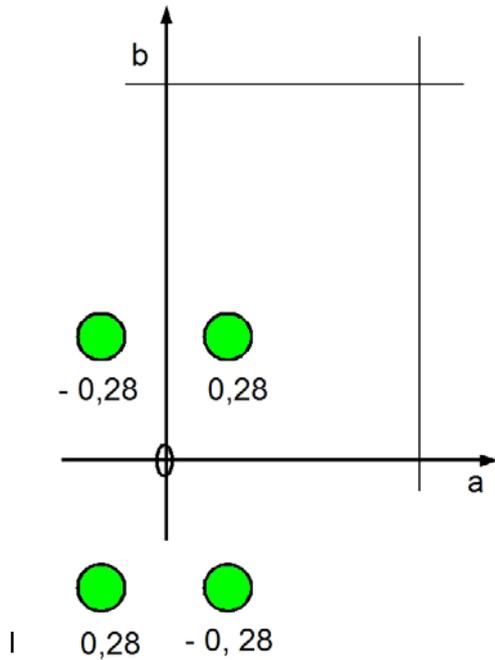


Figure T1_04A :
Les 4 atomes générés par les axes de symétrie binaires se coupant à l'origine de la maille

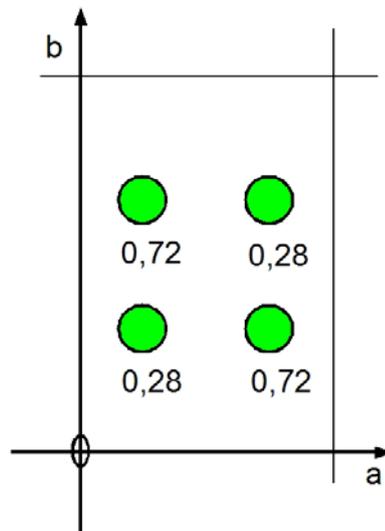


Figure T1_04B : Les 4 atomes du motif

Exercice T1_05 : Centres de symétrie

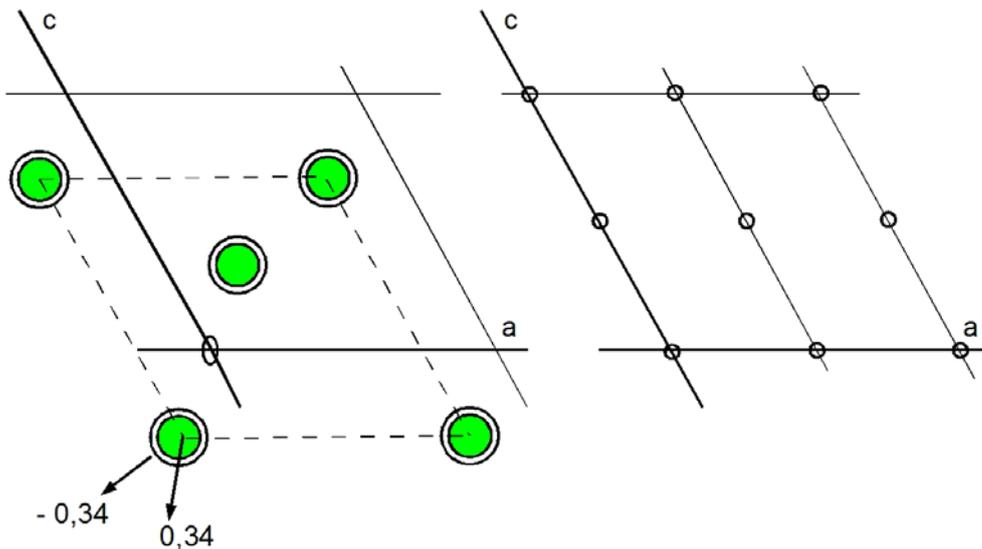


Figure T1_05A : origine de la maille sur un centre de symétrie

Plan (a,c) de la maille : plan du miroir

Axe b de la maille : axe binaire

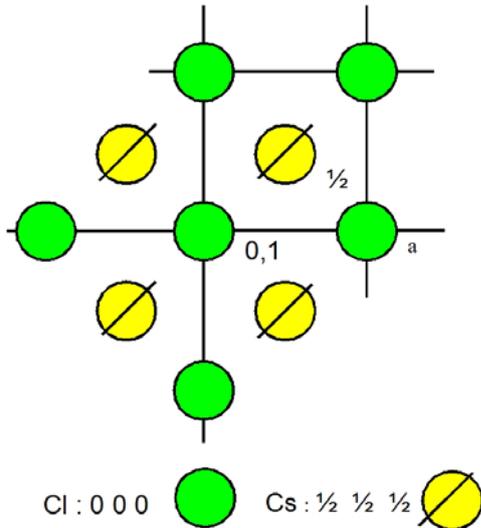
Figure T1_05B : centres de symétrie dans le plan (a,c)

1 - : Fig.T1_05A : effet des opérations de symétrie binaires directes et inverses sur l'atome situé en $x y z$ (pour le dessin on a pris arbitrairement $x = 0,25$ $y = 0,34$ $z = 0,28$). La cote indiquée est celle suivant l'axe b (y).

La maille contient 4 atomes , 2 à la cote 0,34 , 2 autres à la cote 0,66.

2 - : Fig .T1_05B : la position des centres de symétrie dans le plan (a,c) de la maille se déduit de la figure.T1_05A .

Exercice T1_06 : Structure du Chlorure de césium



1 : Cs $1/1 = 1$ Cl = $8/8 = 1$

2 : Cl : 8 Cs à $(a\sqrt{3})/2$; 6 Cl à a

Cs : 8 Cl à $(a\sqrt{3})/2$; 6 Cs à a

3 : translations entières $\vec{a} \vec{b} \vec{c}$

motif : 1 Cs (en $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$) 1 Cl (en 0 0 0)

1 nœud par maille

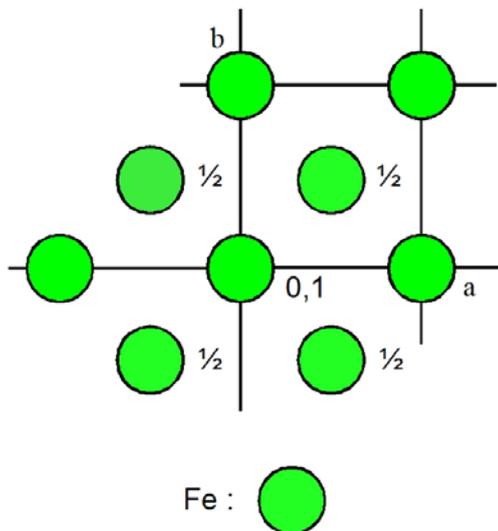
réseau cubique simple

Remarque :

la cote indiquée est celle suivant la direction de l'axe c, Fig.T1_06.

Figure T1_06 : CsCl

Exercice T1_07 : Structure du Fer alpha



1 : Fe : 0 0 0 , $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$

2 : Fe(0 0 0) :

8 Fe à $(a\sqrt{3})/2$ 6 Fe à a

Fe($\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$) :

8 Fe à $(a\sqrt{3})/2$ 6 Fe à a

3 : translations entières $\vec{a} \vec{b} \vec{c}$ et

demi - entières $1/2(\vec{a} + \vec{b} + \vec{c})$

2 nœuds par maille en

000 et en $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$

motif : un Fe en 000

réseau cubique corps centré

Figure T1_07 : Fer alpha

Exercice T1_08 : Structure de l'alliage AuCu₃

Etat désordonné : Figure T1_08A

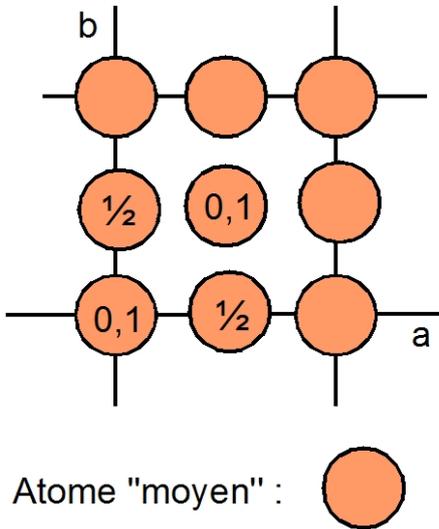


Figure T1_08A :

1 : 4 atomes "moyens" : $8 / 8 + 6 / 2 = 4$

l'équivalent d'un Au Cu₃ par maille

2 : atome en (000) : 12 proches voisins à $(a\sqrt{2})/2$

idem pour les atomes en

$$\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0 ; \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2} ; 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$$

3 : translations entières $\vec{a} \vec{b} \vec{c}$ et
demi-entières :

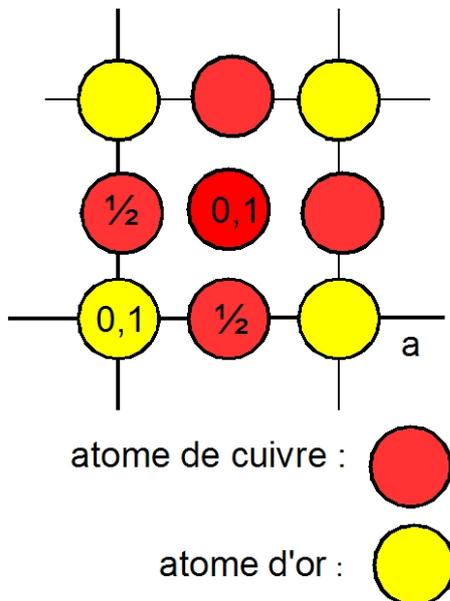
$$\frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b}) ; \frac{1}{2}(\vec{b} + \vec{c}) ; \frac{1}{2}(\vec{c} + \vec{a})$$

4 nœuds par maille en

$$0 0 0 ; \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0 ; \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2} ; 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$$

réseau cubique à faces centrées

Etat ordonné : Figure T1_08B



1 : Au : $8/8 = 1$ Cu : $6/2 = 3$

1 Au Cu₃ par maille

2 : Au : 12 proches voisins Cu à $(a\sqrt{2})/2$

Cu : 8 proches voisins Cu à $(a\sqrt{2})/2$

4 proches voisins Or à $(a\sqrt{2})/2$

3 : translations entières $\vec{a} \vec{b} \vec{c}$ (uniquement)

1 nœud par maille

motif : 1 Au Cu₃

réseau cubique simple

Figure T1_08B : Au : 0 0 0 Cu : $\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0 ; \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2} ; 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$

Exercice T1_09 : Structure des composés de type " K₂ Ni F₄ "

1 - : **K** : $8/4 + 2/1 = 4$ **Ni** : $8/8 + 1/1 = 2$ **F** : $8/4 + 8/4 + 8/4 + 2/1 = 8$
 soit 2 groupements " **K₂ Ni F₄** " par maille

2 - : Coordonnées des atomes dans la maille :

K : $0,0,z(K)$; $1/2,1/2,1/2+z(K)$ *** $0,0,-z(K)$; $1/2,1/2,1/2-z(K)$

Ni : $0,0,0$; $1/2,1/2,1/2$

F : $1/2,0,0$; $0,1/2,1/2$ *** $0,1/2,0$; $1/2,0,1/2$
 $0,0,z(F)$; $1/2,1/2,1/2+z(F)$ *** $0,0,-z(F)$; $1/2,1/2,1/2-z(F)$

translations entières $\vec{a} \vec{b} \vec{c}$ et demi - entières $1/2(\vec{a} + \vec{b} + \vec{c})$

2 nœuds ; réseau quadratique centré ; motif : **K₂ Ni F₄**

K : $0,0,z(K)$ *** $0,0,-z(K)$

Ni : $0,0,0$

F : $1/2,0,0$ *** $0,1/2,0$ *** $0,0,z(F)$ *** $0,0,-z(F)$

3 - : Projection sur le plan (b,c) du composé supraconducteur $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$

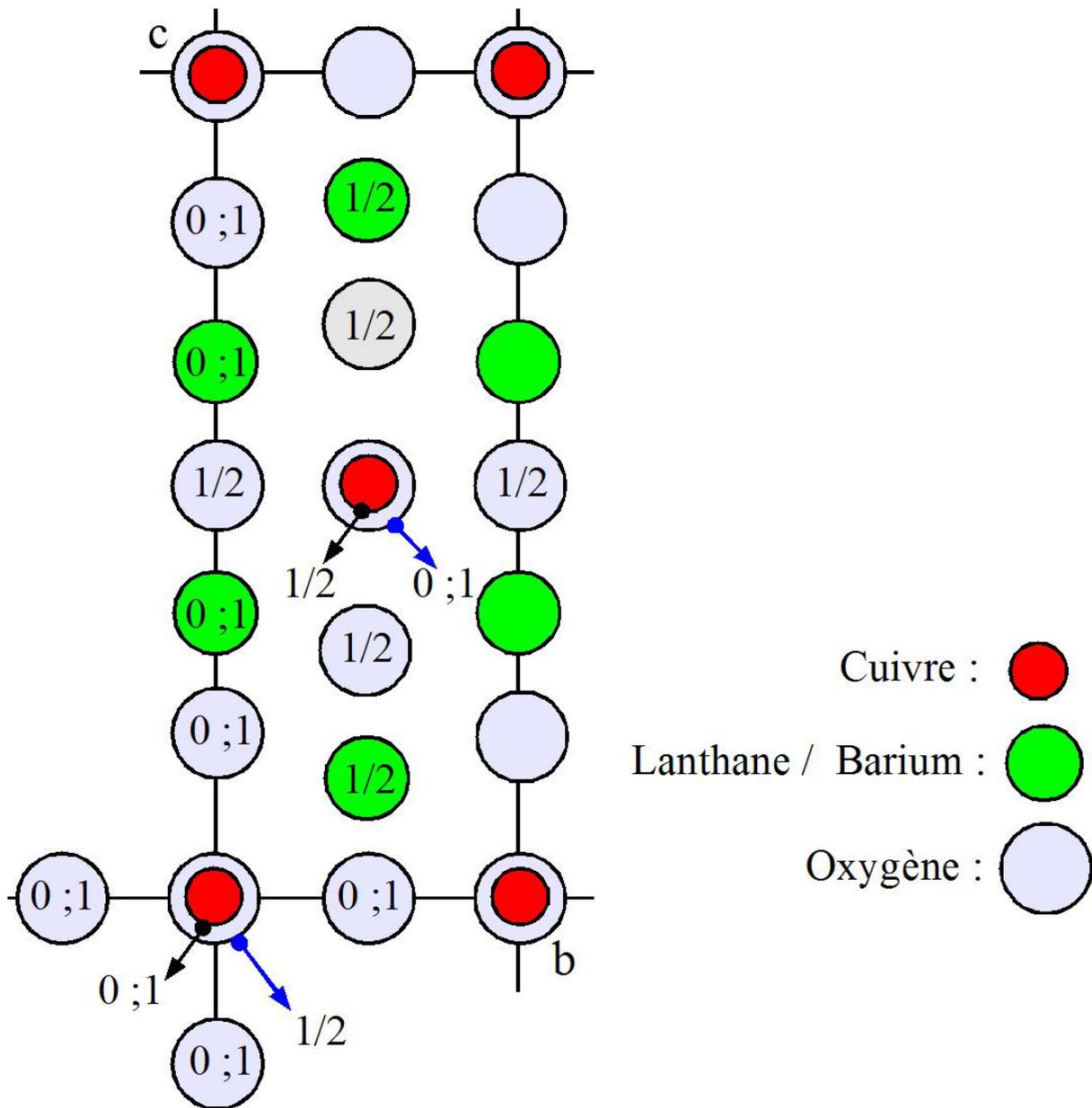


Figure T1_09B : $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$

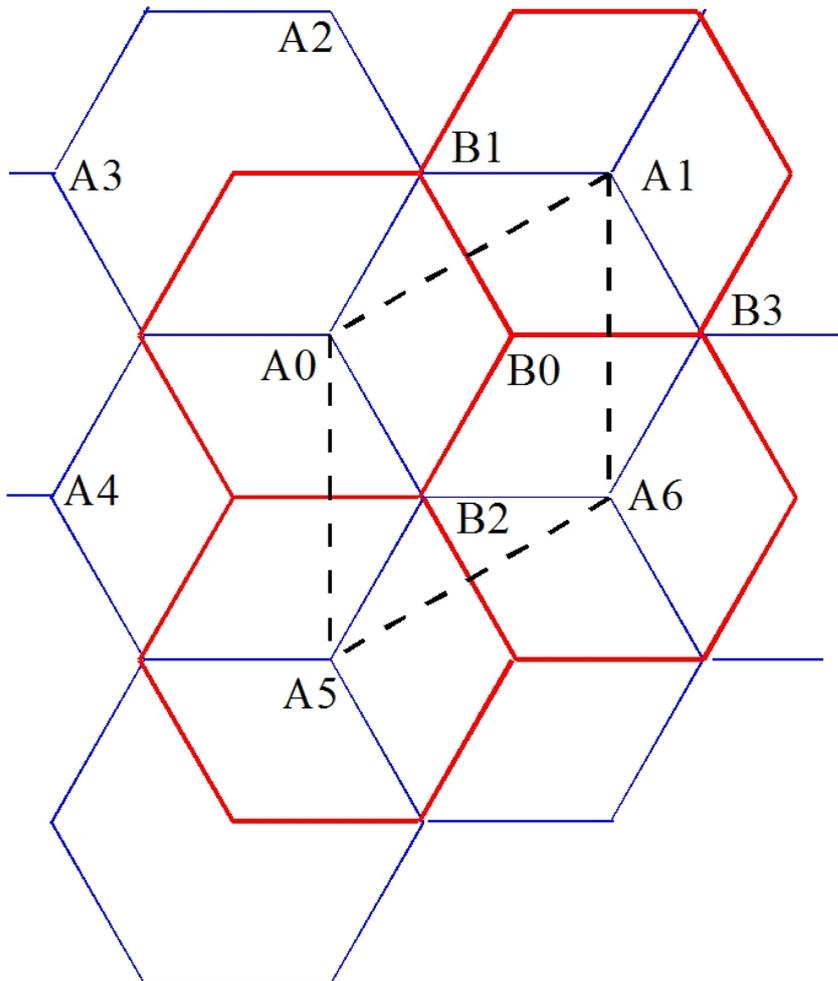
Projection sur le plan (b,c) : les cotes indiquées sont celles de a

Indications : faire la projection à l'échelle $c/a \approx 3,5$

Chaque atome de cuivre est au centre d'un octaèdre d'atomes d'oxygène allongé suivant c

Les couches CuO_4 parallèles au plan (a,b) sont séparées les unes des autres par une double couche d'atomes de La / Ba et d'oxygène O(2) .

Exercice T1_10 : Structure du graphite



2 - : Maille primitive : rechercher les 3 translations non coplanaires les plus courtes

Remarque : pour des raisons de commodité on appelle atomes A et B, les atomes qui se trouvent dans les couches A et B : en réalité les atomes A et B sont des atomes de carbone identiques.

Couche A :

Les atomes de Carbone sont disposés au sommet d'un hexagone de côté $a = 1,42 \text{ \AA}$ égal à la distance entre 2 proches voisins .

Considérons un atome quelconque A_0 de la couche A (traits fins bleus) : il est à l'aplomb du centre d' un hexagone de la couche B située en- dessous et au- dessus (traits épais rouges).

On vérifiera que les atomes tels que $A_0; A_1 \dots A_6$ (de la couche A) situés aux sommets d'un hexagone de côté $d = a\sqrt{3}$ occupent des positions analogues .

Prenons comme base de réseau 2 vecteurs faisant un angle de 120° , par exemple :

$$\vec{a} = \overrightarrow{A_0 A_5} \quad \vec{b} = \overrightarrow{A_0 A_1}$$

Couche B :

Considérons maintenant un atome quelconque B_0 à l'aplomb du centre des hexagones de A situés immédiatement en - dessous et au - dessus (traits fins).

--- Les 3 atomes B_1, B_2, B_3 , situés autour de B_0 et à l'aplomb d'un A forment trois branches $B_0 B_1, B_0 B_2, B_0 B_3$, à 120° l'une de l'autre : la branche " horizontale $B_0 B_3$ " est orientée vers la **droite** de la figure **T1_10**.

--- Considérons maintenant 3 atomes A autour de A_0 à l'aplomb d'un B : ils forment également 3 branches à 120° l'une de l'autre, mais la branche " horizontale " est orientée vers la **gauche** de la figure **T1_10**.

La conclusion est que la position occupée par B_0 n'est pas analogue à celle occupée par A_0 ; le vecteur $\overrightarrow{A_0 B_0}$ ne peut pas être pris comme translation de réseau. Il n'y a pas dans les couches B de positions analogues à celles de la couche A.

La 3^{ème} translation la plus courte est parallèle à la normale commune aux plans hexagonaux et a pour longueur la distance la plus courte entre atomes A-A ou B-B. appartenant à des couches différentes.

La maille primitive est hexagonale : $a = b = 0,246 \text{ nm} \quad (2 \times 0,142 \cos 30)$

$$c = 0,670 \text{ nm} \quad (2 \times 0,335)$$

elle contient 4 atomes, **Fig .T1 -10**, situés en :

$$(\text{atomes } \mathbf{A}) : 0 \ 0 \ 0 ; 2/3 \ 1/3 \ 0 ; \quad (\text{atomes } \mathbf{B}) : 1/3 \ 2/3 \ 1/2 ; 2/3 \ 1/3 \ 1/2$$

ou encore en prenant l'origine de la maille sur l'atome situé en $2/3 \ 1/3 \ 0$

$$1/3, 2/3, 0 ; \quad 0, 0, 0 ; \quad 2/3, 1/3, 1/2 ; \quad 0, 0, 1/2$$

3 - : Détermination expérimentale du nombre d'atomes par maille :

$$\text{volume de la maille : } V = 3,511 \cdot 10^{-2} \text{ nm}^3$$

$$\text{masse volumique : } \rho = 2,28 \text{ g / cm}^3$$

$$\text{masse d'une atome – gramme de carbone : } A = 12 \text{ g / mole}$$

$$\text{Nombre d'Avogadro : } \mathbb{N} = 6,023 \cdot 10^{23} \text{ atomes par mole}$$

$$\text{Masse d'un atome : } m = \frac{A}{N}$$

nombre d'atomes par maille : $N = \text{partie entière de } \rho V/m$

$$\rho V/m = 4,01 \quad N = 4$$

Exercice T1_11 : Structure du diamant

1 - : Projection cotée sur le plan (a,b) de la maille

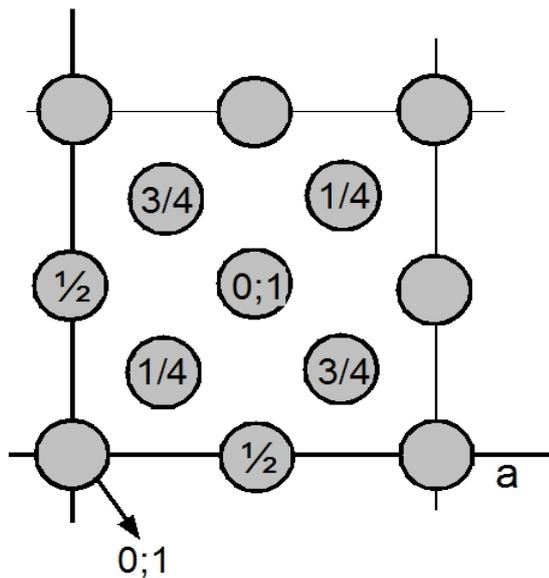


Figure T1_11 : Structure du diamant
Projection cotée sur le plan (a, b)

2 - : Masse volumique : $\rho a^3 = N(A/N)$

8 atomes dans la maille : $N = 8$

masse d'une atome – gramme de carbone : $A = 12 \text{ g /mole}$

Nombre d'Avogadro : $N = 6,023 \cdot 10^{23}$ atomes par mole

$$\rho = 3,51 \text{ g / cm}^3 \text{ (à comparer avec la masse volumique du graphite : } 2,28 \text{ g / cm}^3 \text{)}$$

Remarque : Le diamant est le plus dur des matériaux naturels. Il doit cette propriété à sa structure compacte et à la petitesse des liaisons entre atomes de carbone : 0,1544 nm

($a\sqrt{3}/4$ a paramètre de maille) comparativement au graphite : 0,335 nm entre plans graphitiques, Exercice T1-10.