

THEME 1 : Enoncés des exercices

OBJECTIFS :

Quelques ordres de grandeur

Sensibilisation à la symétrie de translation et de rotation

Motif Maille Réseau de Bravais

Création : juin 2003

Dernière modification : juin 2005

LISTE des EXERCICES

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

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

T1_03 : Surface spécifique

T1_04 : Introduction : opérations de symétrie binaire directe

T1_05 : Introduction : centres de symétrie

T1_06 : Structure du Chlorure de Césium (CsCl)

T1_07 : Structure du FER alpha

T1_08 : Structure de l'alliage AuCu₃

T1_09 : Structure type K₂NiF₄

T1_10 : Structure du graphite hexagonal

T1_11 : Structure du carbone diamant

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

La masse volumique de l'eau à l'état liquide étant de 1 g / cm^3 et sa masse molaire de 18 g par mole, déterminer la taille d'une molécule d'eau.

Pour mémoire, le nombre de molécules dans une mole est de $6,02 \cdot 10^{23}$.

On supposera que les molécules d'eau ont approximativement la forme d'une sphère et qu'elles sont au contact dans un empilement compact.

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

Benjamin Franklin (Boston 1706 - Philadelphie 1790) avait remarqué qu'en versant une cuillère à café d'huile à la surface d'un étang , celle - ci s'étalait sur surface d'un demi - acre soit environ $2\,000 \text{ m}^2$.

Calculer l'épaisseur du film d'huile (on supposera que la cuillère à café contenait 3 cm^3)

L'huile s'étale en plusieurs couches mono-moléculaires , déterminer les valeurs possibles de la taille d'une molécule d'huile.

Exercice T1_03 : Surface spécifique

Plus un matériau est à l'état divisé possède plus il a une grande surface : la surface spécifique - c'est - à - dire la surface offerte par 1 g de solide - caractérise cet état de division.

1 : On considère un cas idéal , dans lequel 1 cm^3 de matériau est divisé en cubes identiques de côté l ; ρ étant la masse volumique de ce matériau à l'état solide, établir la relation donnant la surface spécifique S .

Application : calculer S en m^2 / g $\rho = 3 \text{ g / cm}^3$ $l = 1 \mu\text{m}$

On appelle capacité d'absorption la quantité de gaz qui peut être adsorbée sous la forme d'une monocouche par gramme de solide.

2 : Soient V_m le volume T.P.N. occupé par une mole de gaz : $V_m = 22\,400 \text{ cm}^3$, A_m la surface occupée par une molécule de gaz adsorbé en monocouche, établir la relation donnant la surface spécifique.

Application : les mesures ont donné une adsorption de $11,2 \text{ cm}^3$ d'azote T.P.N. par gramme de matériau. Sachant que $A_m = 0,162 \text{ nm}^2$ pour l'azote , déterminer la surface spécifique de ce matériau.

L'adsorption est le mécanisme par lequel un gaz est piégé sur une surface. Pour un matériau donné, la quantité de gaz adsorbée augmente lorsque la température diminue ou la pression croît.

*Fabriqué essentiellement à base de noix de coco ou de bois de pin, le **charbon actif** est l'adsorbant le plus anciennement connu et le plus utilisé. Sa surface spécifique est de $1\,200 \text{ m}^2 / \text{g}$ environ.*

Rappels : Projection cotée

C'est une façon commode de représenter les structures (simples) en projection sur un plan particulier de la maille .

On n'indique que la cordonnée réduite de l'atome suivant la direction de projection, les deux autres sont lues directement sur le plan de projection.

Exemple : dans une projection, suivant **c** sur le plan (**a,b**), un atome se trouvant en (0,25 0,50 0,33) sera représenté par un cercle (par exemple) dont le centre sera situé au quart de a et au milieu de b avec pour seule indication : 0,33

Rappels : Contenu d'une maille

Élément situé sur :

- un **sommet** : étant commun à 8 mailles, cet élément compte pour **1 / 8**
- une **arête** : étant commun à 4 mailles, cet élément compte pour **1 / 4**
- une **face** : étant commun à 2 mailles, cet élément compte pour **1 / 2**
- à l' **intérieur** : n'étant pas partagé, cet élément compte pour **1**

Exercice T1_04 : Opérations de symétrie binaire directe

On considère un matériau (fictif) dont le système cristallin est **orthorhombique**, de paramètres a, b, c ; la maille contient un seul nœud situé à l'origine.

Ce cristal comporte des opérations de symétrie binaire directe; les éléments de symétrie sont parallèles aux axes a b c et se coupent en 0 0 0 .

L'unique atome de l'unité asymétrique a pour coordonnées : **x = 0,25 y = 0,34 z = 0,28**

1 : Représenter en projection cotée sur le plan (a,b) , les positions des atomes du motif générées par les opérations de symétrie. Prendre, par exemple, a = 6 cm et b = 4 cm .

2 : Représenter les positions des atomes situés à l'intérieur de la maille en projection cotée sur le plan (a,b)

Exercice T1_05 : Centres de symétrie

On considère un matériau (fictif) dont le système cristallin est **monoclinique**, de paramètres a, b, c ; la maille contient un seul nœud pris pour origine.

Ce cristal possède un axe binaire confondu avec l'axe b de la maille et un miroir de normale également confondu avec cet axe b .

L'unité asymétrique du motif se compose d'un seul atome de coordonnées **x y z** .

1 : Représenter les positions des atomes du motif, en projection cotée sur le plan (a,c)

2 : Placer les centres de symétrie situés dans la maille

Exercice T1_06: Structure du Chlorure de Césium (CsCl)

La maille de description du Chlorure de Césium est **cubique** : les atomes occupant les positions :



1 : Représenter la maille en projection cotée sur le plan (a,b) . Indiquer le nombre d'atomes de Chlore et de Césium contenus dans la maille.

2 : Déterminer le nombre de premiers et de seconds voisins autour d'un atome quelconque pris comme origine.

3 : Indiquer les translations de réseau, le motif, et le réseau de Bravais

Exercice T1_07: Structure du FER alpha

La maille de description du fer alpha est **cubique** : les atomes occupent les positions :

$$0\ 0\ 0 \text{ et } \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$$

- 1 : Représenter la maille en projection cotée sur le plan (a,b)
- 2 : Déterminer le nombre de premiers et de seconds voisins autour d'un atome quelconque pris comme origine.
- 3 : Indiquer les translations de réseau, le motif, et le réseau de Bravais.

Exercice T1_08: Structure de l'alliage Au Cu₃

Au dessus de la température critique de 391°C, les alliages de composition Au Cu₃ sont totalement **désordonnés**. Les atomes d'or et de cuivre occupent alors les positions :

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

d'une maille **cubique**, leur répartition se faisant **au hasard**. On peut considérer que ces positions sont occupées par un atome moyen **a** de formule :

$$a = \frac{1}{4} \text{ Au} + \frac{3}{4} \text{ Cu}$$

En refroidissant lentement ce cristal à 225 C et en le laissant suffisamment de temps à cette température (500h !), on obtient l'état **ordonné**. Les atomes d'Or et de Cuivre occupent alors dans chaque maille les positions :

$$\text{Au} : 0\ 0\ 0 \quad \text{Cu} : \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0 \quad \frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2} \quad 0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$$

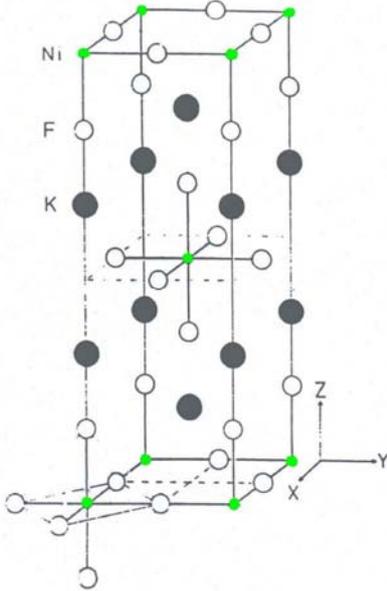
Pour les deux états :

- 1 : Représenter la maille en projection cotée sur le plan (a,b)
- 2 : Déterminer le nombre de groupements Au Cu₃ dans la maille
- 3 : Déterminer les translations de réseau, le motif et le réseau de Bravais

Exercice T1_09 : Structure type $K_2 Ni F_4$

La maille du composé $K_2 Ni F_4$ est **quadratique**. Elle est représentée en perspective cavalière **Fig. T1_09** :

- 1 : Indiquer le nombre de groupements $K_2 Ni F_4$ contenus dans la maille
- 2 : Déterminer les coordonnées des atomes, Fig. T1_09, en déduire la translation non entière. Indiquer les coordonnées des atomes du motif, et le réseau de Bravais.

**Figure T1_09**

petits cercles pleins (verts) :

atomes de nickel (**Ni**)

grands cercles pleins :

atomes de potassium (**K**)

cercles vides : atomes de fluor (**F**)

- 3 : Le composé supraconducteur $La_{2-x} Ba_x Cu O_4$ (Lanthane, Barium, Cuivre, Oxygène) a une structure similaire à celle de $K_2 Ni F_4$

$$a = b = 0,3787 \text{ nm } (3,787 \text{ \AA}) \quad c = 1,329 \text{ nm } (13,29 \text{ \AA})$$

$$La / Ba : 0 0 z ; 0 0 -z \quad z(La / Ba) = 0,362 \quad Cu : 0 0 0$$

$$O_1 : \frac{1}{2} 0 0 ; 0 \frac{1}{2} 0 \quad O_2 : 0 0 z ; 0 0 -z \quad z(O_2) = 0,182$$

Représenter la structure en projection cotée sur le plan (b,c) .

Décrire l'environnement des atomes de Cu . Indiquer la particularité de ce composé.

Exercice T1_10 : Structure du Graphite hexagonal

Dans le graphite, les atomes de carbone sont disposés en **couches parallèles** superposées ; dans chaque couche, les atomes sont aux sommets d'**hexagones** liés.

Ces pavages plans d'hexagones sont empilés suivant une séquence de deux couches appelées **A,B,A,B** Trois atomes d'un même hexagone de la couche **B** sont à l'aplomb des centres de trois hexagones de la couche **A** qui sont situés directement en - dessus et en - dessous. Les trois autres se projettent sur les sommets d'hexagones, ils sont donc à l'aplomb d'un atome **A**.

Dans un plan (**A** ou **B**), la distance Carbone – Carbone (C-C) est de 0,142 nm , sensiblement égale à la distance C-C dans l'anneau benzénique . La distance la plus courte entre un atome de la couche **A** et de la couche **B** est de 0,335 nm .

- 1** : Représenter la structure en projection cotée sur un plan parallèle aux couches .
- 2** : Déterminer la maille primitive et ses dimensions
- 3** : La masse volumique du graphite est de 2,28 g/cm³ : calculer le nombre d'atomes contenus dans la maille de description.

Masse atomique du Carbone : 12g / mole. Nombre d'Avogadro $N = 6,023 \cdot 10^{23}$ at / mole

Exercice T1_11: Carbone diamant

Le réseau de Bravais du diamant est **cubique à faces centrées** de paramètre $a = 0,3567$ nm ; le motif est composé de 2 atomes de carbone situés en **0 0 0** ; $\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}$

- 1** : Représenter les atomes situés dans la maille, en projection cotée sur le plan (a, b) .
- 2** : Calculer la masse volumique ρ du diamant, connaissant :
 - o la masse atomique du Carbone : $m = 12$ g / mole .
 - o le nombre d'Avogadro : $N = 6,023 \cdot 10^{23}$ at / mole