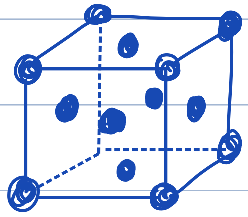
TD R5

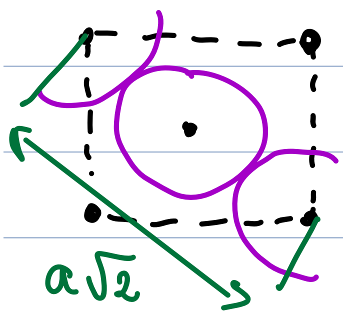
SF1



$$N = \underbrace{8 \times \frac{1}{8}}_{\text{sommets}} + \underbrace{6 \times \frac{1}{2}}_{\text{faces}} = 4$$

La coordinence vaut 12.

Dans la structure CFC, la tangence a lieu sur la diagonale d'une face : $4R = a\sqrt{2}$



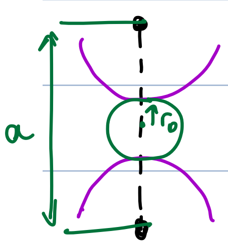
On a donc $C = \dfrac{4 \times 4/3\,\pi \left(\frac{a\sqrt{2}}{4}\right)^3}{a^3} = \dfrac{\pi}{4 \times 3}\, 2\sqrt{2} = \dfrac{\pi\sqrt{2}}{3}$

$= \underline{0{,}74}$

Ⓡ Sites octaédriques : $N = 1 + 12 \times \frac{1}{4} = 4$

au centre (1) ; nb arête (12) ; une arête se partage entre 4 mailles ($\frac{1}{4}$)

Sur une arête :



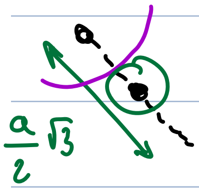
On a $a = 2r_o + 2R$

Donc $r_o = \dfrac{a}{2} - R$ or $4R = a\sqrt{2}$ donc $a = \dfrac{4R}{\sqrt{2}}$

$r_o = \dfrac{4R}{2\sqrt{2}} - R = \underline{R(\sqrt{2} - 1)}$

② Sites tétraédriques : $N = 8$

sur la diagonale d'un petit cube :

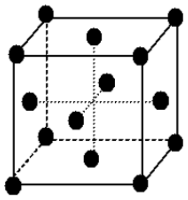


On a $R + r_T = \frac{a}{4}\sqrt{3} \Rightarrow r_T = \frac{4R}{4\sqrt{2}}\sqrt{3} - R = \boxed{\left(\sqrt{\frac{3}{2}} - 1\right)R}$

Rq : $r_T < r_O$ → il y a plus de "place" dans les sites octaédriques

Exercice 1

1) Le cristal d'argent suit une maille cubique faces centrées : sa maille est donc un cube d'arête a, le paramètre de maille.



2) Population $Z = 8 \times \dfrac{1}{8} + 6 \times \dfrac{1}{2} = 4$ Coordinence : 12

3) Compacité : $C = \dfrac{Z\frac{4}{3}\pi R^3}{a^3}$. Or, la condition de tangence pour une maille CFC est atteinte sur la diagonale de chaque face, ainsi : $4R = \sqrt{2}a$.

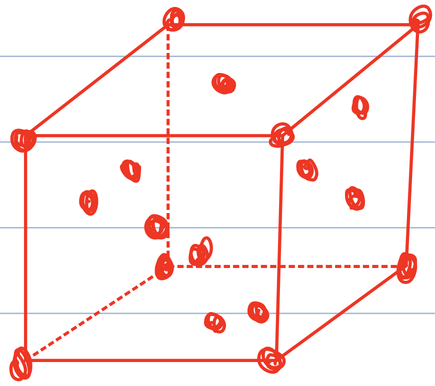
Donc $C = \dfrac{4 \times 4\pi(\frac{\sqrt{2}}{4}a)^3}{3a^3} = \dfrac{\sqrt{2}\pi}{6} = 0,74$

4) $\rho = \dfrac{Z.M_{Ag}}{\mathcal{N}_a.a^3} = \dfrac{4 \times 108}{6.10^{23}.(0,4.10^{-9})^3} = \dfrac{108}{6 \times 16}.10^7 = 1,1.10^7$ g.m^{-3}.

5) $\eta = \dfrac{1,1.10^7 \times 38.10^{-6}}{1000 \times 0,5} = 0,8$, on a donc un rendement de 80%.

Exercice 2

1)



On a $N = \overbrace{8 \times \frac{1}{8}}^{\text{sommets}} + \overbrace{6 \times \frac{1}{2}}^{\text{faces}} + \overbrace{4}^{1/2 \text{ sites T}}$

$= 8$.

Les voisins les + proches sont pour un sommet les sites T tangent (ie 4) (ou pour un site T les 4 sommets du tétraèdre)

Donc la coordinence vaut 4.

⚠ unités

2) On a $\rho = \dfrac{8 \times M_C}{N_A \times a^3}$ donc $a = \sqrt[3]{\dfrac{8 \times M_C}{N_A \rho}} = 357 \text{ pm}$.

3) La tangence a lieu entre un sommet et un site T :

$2R = \dfrac{a\sqrt{3}}{4}$ ie $R = \dfrac{a\sqrt{3}}{8} = 77 \text{ pm}$

4) $C = \dfrac{8 \times \frac{4}{3} \pi R^3}{a^3} = \underline{0,34}$

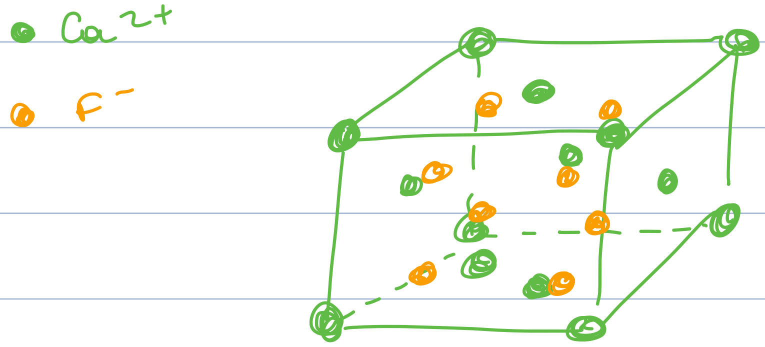
Exercice 3

1) Pour que CaF_2 soit neutre, il faut 2 fois plus de F^- que de Ca^{2+}.

Or la population d'une maille CFC est 4 $\left(8\times\frac{1}{8}+6\times\frac{1}{2}\right)$:
il y a donc 4 Ca^{2+} par maille.

Par ailleurs, il y a 8 sites tétraédriques. Pour avoir 2× plus de F^- que de Ca^{2+}, il faut donc remplir tous les sites.

2)

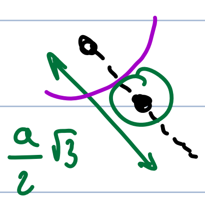


3) Coordinence des anions : 4
Coordinence des cations : 8

4) $$\rho = \frac{N_{Ca^{2+}} \times M(Ca) + N_{F^-} \times M(F^-)}{\mathcal{N}_A \times a^3} = \frac{4\times 40{,}1 + 8\times 19}{6.10^{23} \times (546.10^{-12})^3}$$

$$= 3{,}19.10^6 \ g.m^{-3} = \underline{3{,}19.10^3 \ kg\, m^{-3}}$$

5)



La tangence anion/cation donne $R_+ + R_- = \frac{a\sqrt{3}}{4}$

ie $R_- = \frac{a\sqrt{3}}{4} - R_+$

et

$$C = \frac{4\times\frac{4}{3}\pi R_+^3 + 8\times\frac{4}{3}\pi R_-^3}{a^3} = \frac{16}{3}\pi \, \frac{R_+^3 + 2\left(\frac{a\sqrt{3}}{4} - R_+\right)^3}{a^3}$$

$$= \underline{55\%}$$