

# Cristallographie

## TD cristalochimie

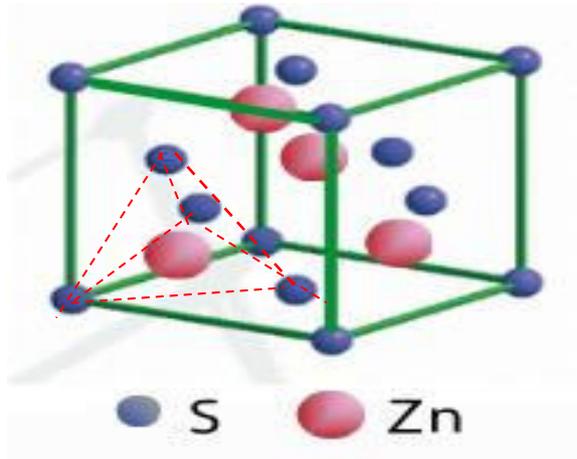
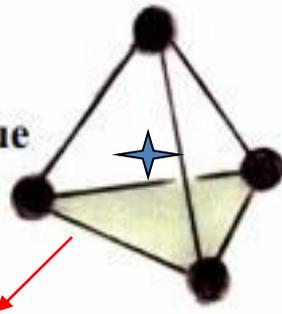


## Rappel : Sites interstitiels:

Les sites cristallographiques correspondent à des vides interstitiels entre les atomes. Les plus fréquents sont les sites tétraédriques[4] délimités par 4 atomes et les sites octaédriques[6] délimités par 6 atomes.

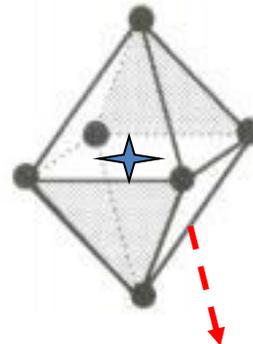
Espace engendré par 4 sphères cotangentes

Site tétraédrique

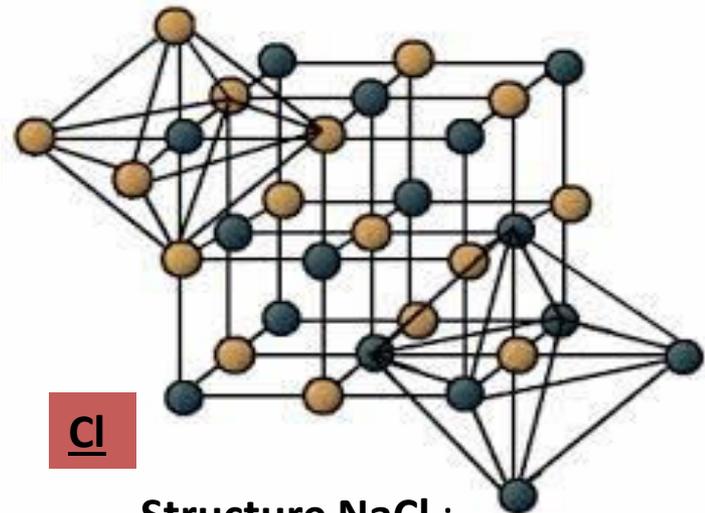


Espace ou creux engendré par 6 sphères cotangentes

Site octaédrique



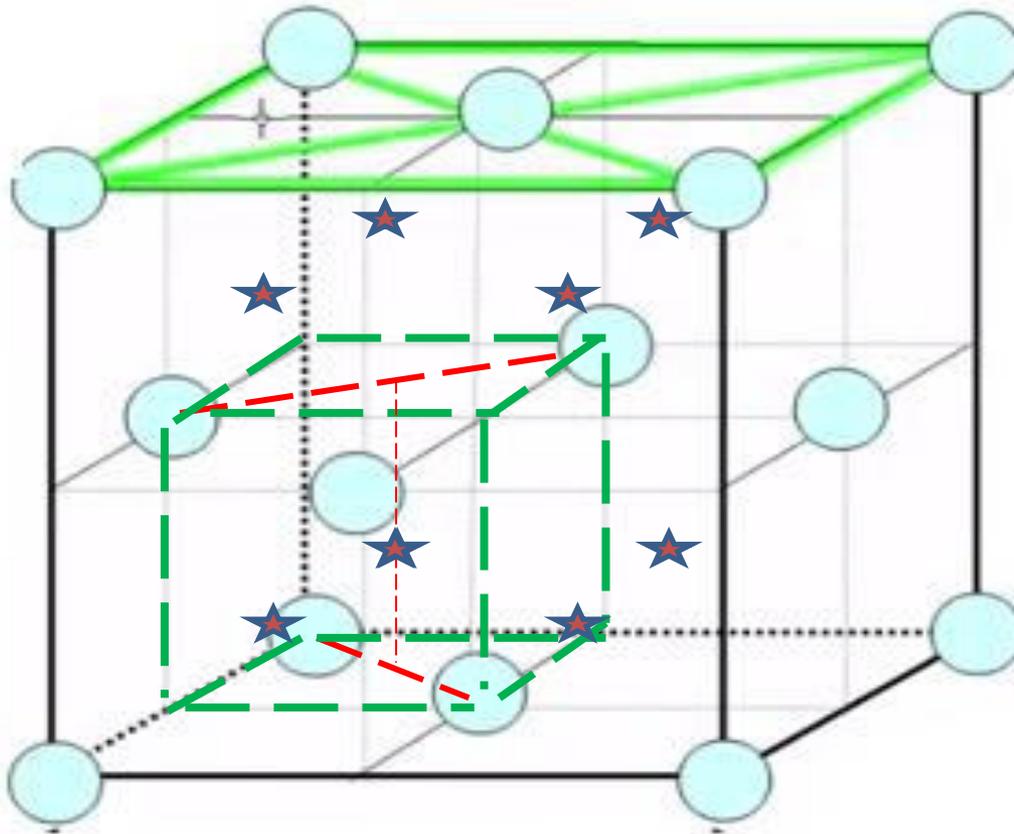
Na



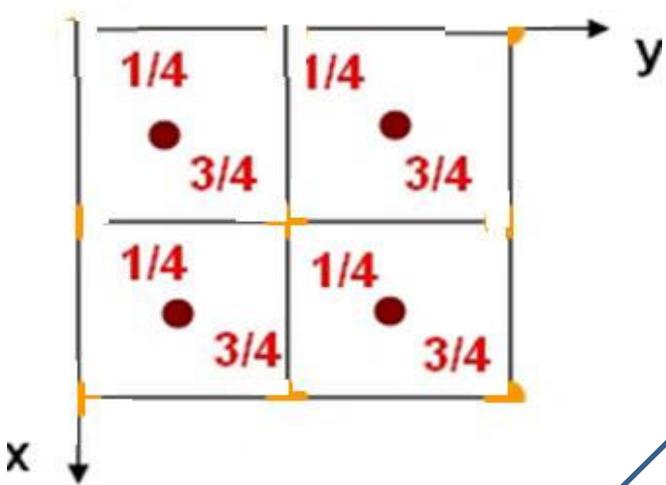
Cl

Structure NaCl :

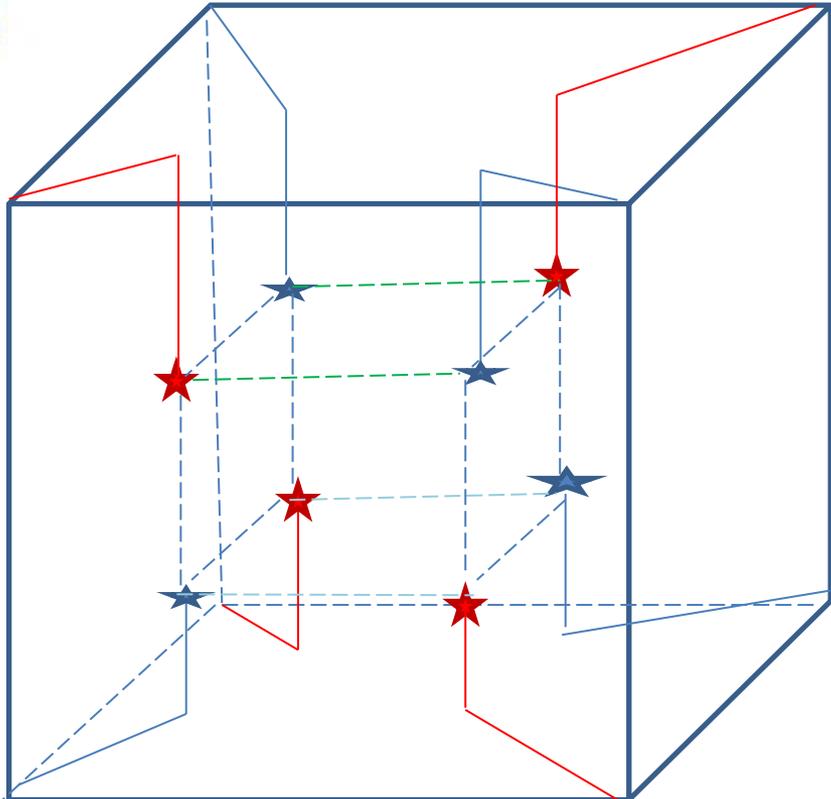
# Site (4) dans C.F.C ( $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$ )



Total : 8 sites tétraédrique

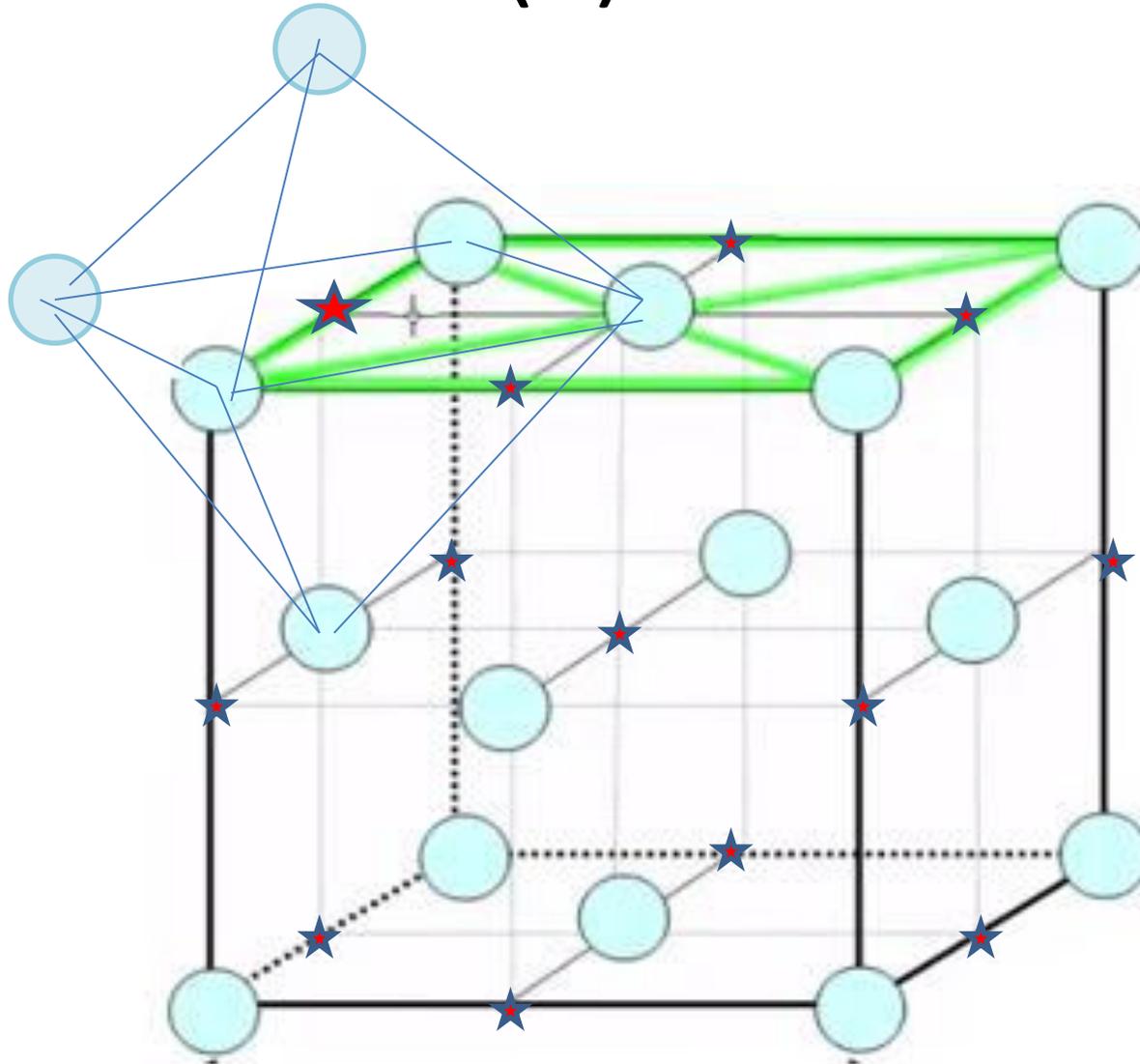


Projection sur xoy

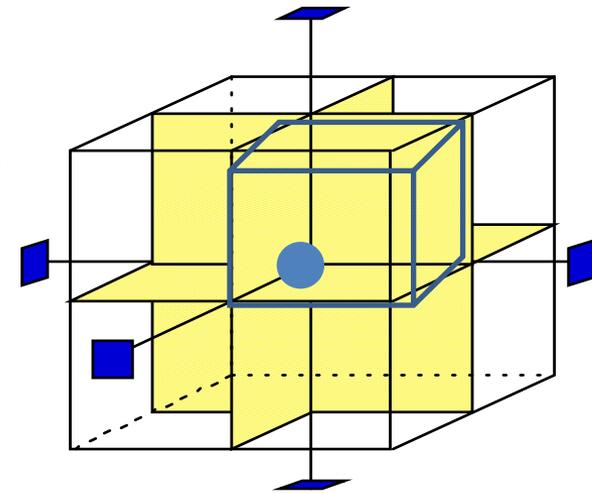
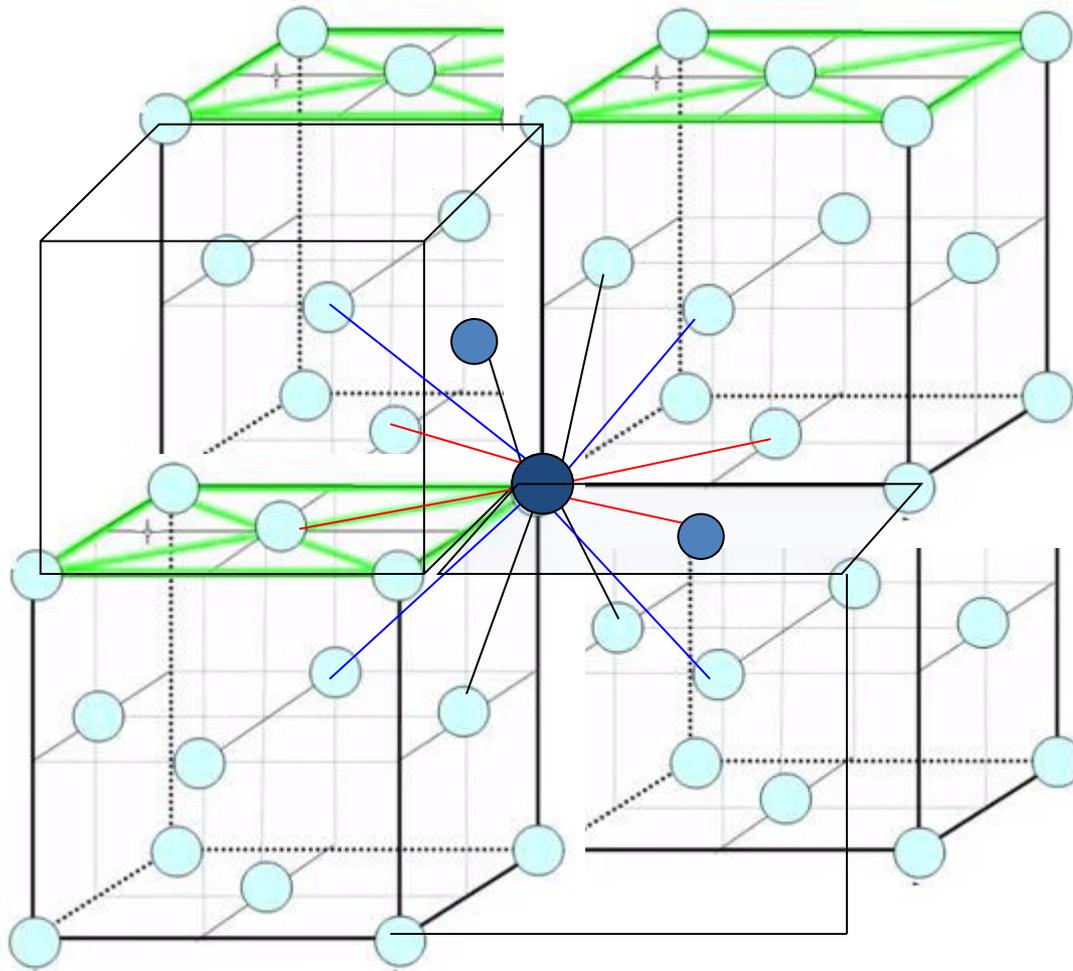


# Site (6) dans CFC

★  $(\frac{1}{2}, 0, 0)$



# Exemple de coordinence: CFC

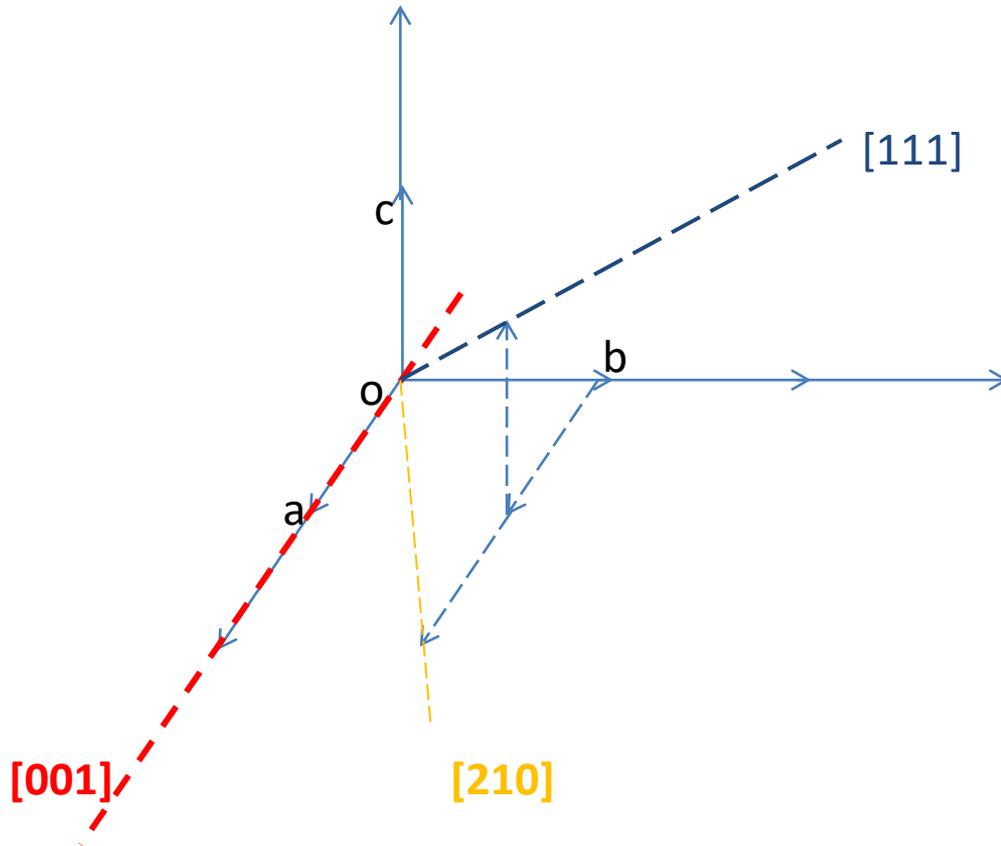


**Coordinance:** nombre de plus proche voisin dans une structure

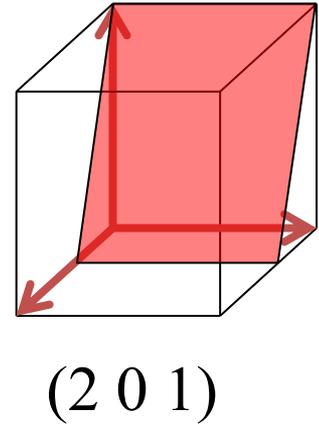
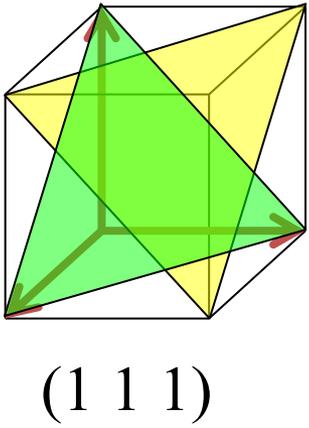
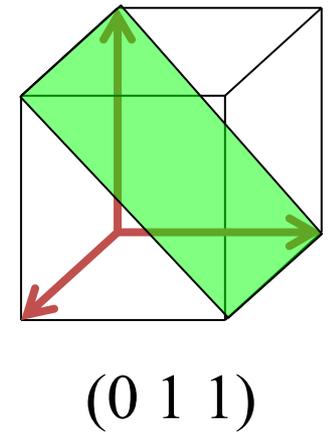
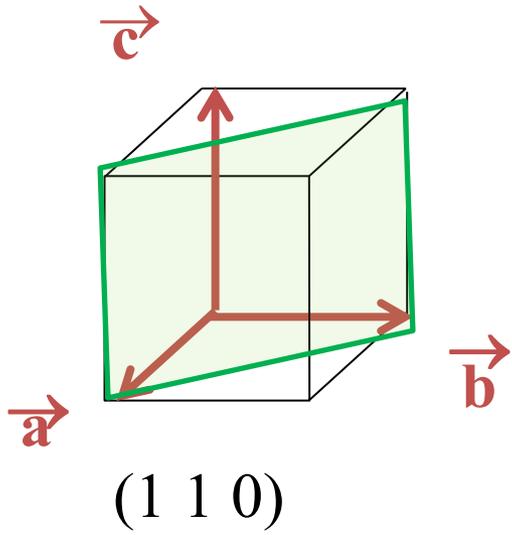
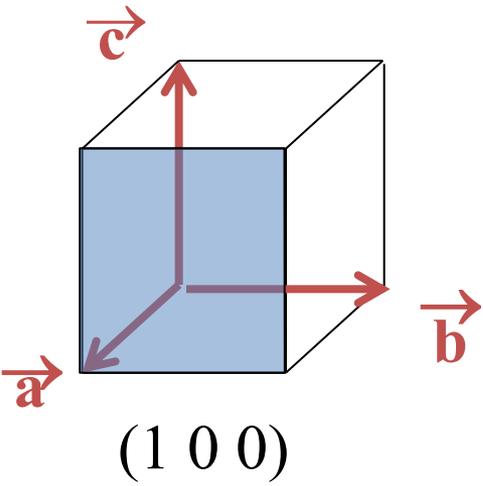
**Coordinance 12 dans un CFC**

## Exercice 1: rangées:

$[u\ v\ w]$  : droite qui passe par l'origine et le point de coordonnées  $u\ v\ w$ .



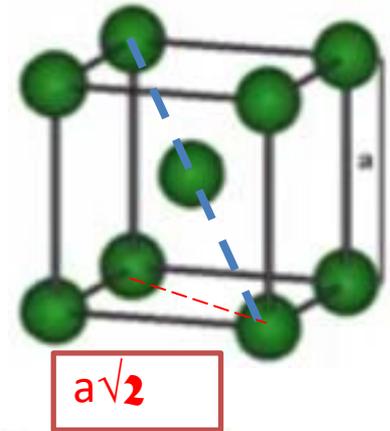
# Exercice 1: plans réticulaires



## Exercice 2 TD: Etude de la maille cubique centré :CC

1- Calculer la multiplicité

La **multiplicité** ou nombre de motifs est  $m = 8 \times 1/8 + 1 = 2$   
2 motifs (ou atomes) par maille



2- Coordinance :

**Coordinance** : dans cette structure, chaque atome, possède 8 proches voisins. Les atomes du cubique centré ont donc une coordinance de 8.

3- Donner la relation entre le rayon  $r$  et paramètre de maille  $a$

**Condition de tangence et paramètre de maille** : le plus proche contact s'effectue le long de la diagonale principale du cube, le paramètre  $a$  s'exprime par  $4r = a\sqrt{3}$  où  $r$  est le rayon atomique de l'atome.

4- Calculer la compacité et donner la relation de la masse volumique:

Calcul de la **compacité** : 
$$C = \frac{V_{\text{atomes}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{2 \times \frac{4}{3} \pi \cdot r^3}{a^3} = \frac{\pi \cdot \sqrt{3}}{8} = 0.68$$

$$\rho = \frac{m_{\text{atomes}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{2 \cdot M}{N_A \cdot a^3}$$

### Exercice 4:

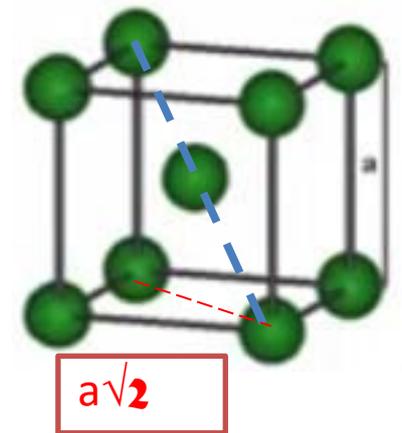
Le rayon atomique du sodium étant

$r=0.19$  nm, calculer la densité de sodium métallique pour une structure cubique centré ( $M(\text{Na})= 23$  g/mol)

$$\rho = \frac{m_{\text{atomes}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{2 \cdot M}{N_A \cdot a^3}$$

0.89

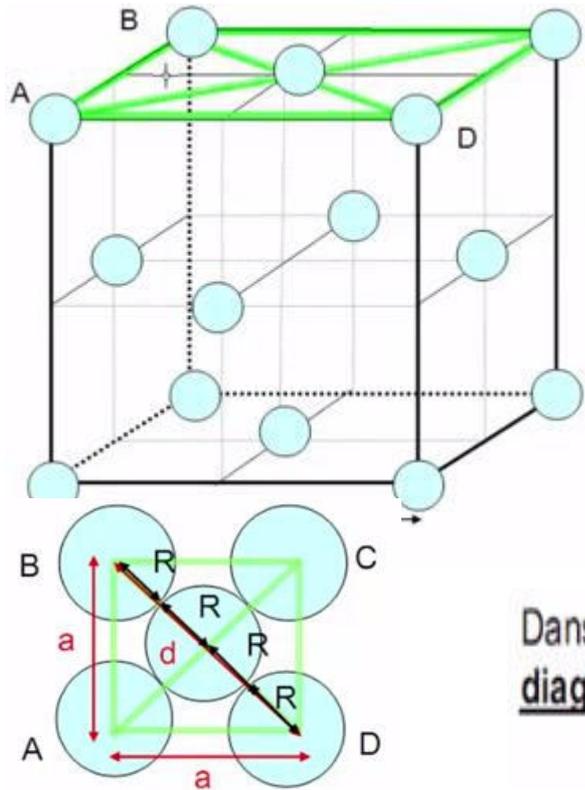
$$4r = a\sqrt{3}$$



# TD 1(suite)

## Exercice 5:

Calculer le paramètre  $a$  de la maille cubique face centré du cuivre (CFC) dont la densité vaut  $d=8.96$ , en déduire le rayon atomique du cuivre ( $M(\text{Cu}) = 63.5 \text{ g/mol}$ )  $d = \frac{\text{masse d'un certain volume du solide (sans unités)}}{\text{masse du même volume d'eau}}$



$$\rho = \frac{Z M_{\text{motif}}}{N V_{\text{maille}}} \quad \rho \text{ (en g/cm}^3\text{)} = d \text{ (sans unités)}$$

Avec :

$Z$  = nombre de motifs par maille

$M$  motif = masse molaire du motif

$N$  = nombre d'Avogadro

$V_{\text{maille}}$  = volume de la maille  $a^3$

Dans le plan de compacité, sur la petite diagonale, on a :

$$4R = a\sqrt{2}$$

$$a = 0.36 \text{ nm}$$

$$r = 0.127 \text{ nm}$$

# Exercice 6:

Réponse : G est le centre de gravité du triangle équilatérale ABC

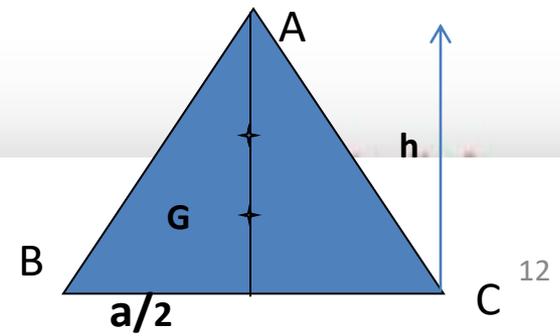
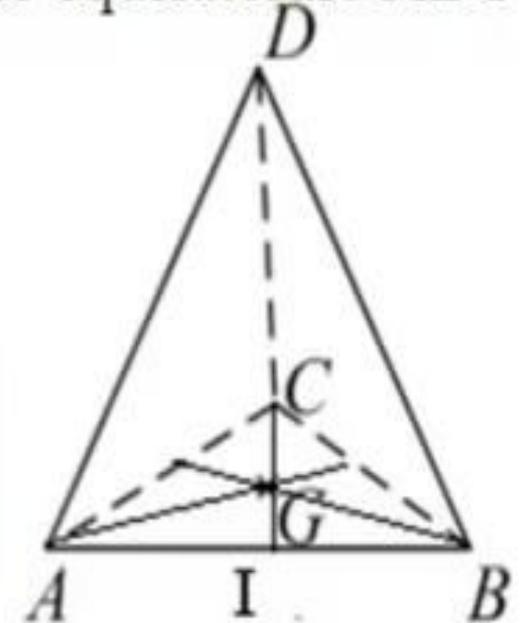
$$AD = a = 2r, \quad DG = \frac{c}{2} \quad \text{et} \quad GA = \frac{2}{3}h$$

$$\text{avec } h = \frac{a\sqrt{3}}{2} \quad \text{donc } GA = \frac{a\sqrt{3}}{3}$$

$$\text{Avec } DG^2 + GA^2 = DA^2 \quad \text{donc} \quad \left(\frac{c}{2}\right)^2 + \left(\frac{a\sqrt{3}}{3}\right)^2 = a^2$$

$$\text{Soit } \left(\frac{c}{2}\right)^2 = a^2 \left(1 - \left(\frac{1}{3}\right)\right) = \frac{2}{3}a^2 \quad \text{ou} \quad \left(\frac{c}{a}\right)^2 = \frac{8}{3}$$

$$\text{et} \quad \left(\frac{c}{a}\right) = \sqrt{\frac{8}{3}}$$



Centre de gravité du triangle équilatéral est situé  
Au 2/3 de l'une de ces deux médianes. h est la médiane