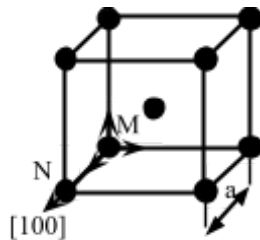


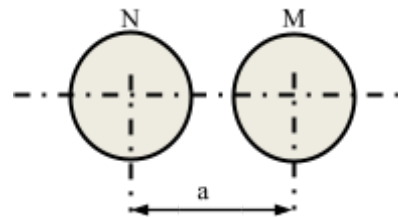
TD 4 Chimie
CP1

Exercice 1

Calculer et comparer les densités linéaires des directions $[100]$, $[110]$ et $[111]$ dans un cristal CC.

Solution 1

* Maille élémentaire CC selon le modèle des sphères réduites, avec indication de la direction $[100]$



* Espacement atomique dans la direction $[100]$ entre les atomes M et N identifiés en a) dans le cas d'une structure cristalline CC

- $[100]$

La figure a) illustre la direction $[100]$ dans une maille élémentaire CC (sphères réduites), alors que la figure b) représente la compacité linéaire dans cette direction. Le calcul devra s'effectuer à partir de la longueur de la ligne au sein de la maille élémentaire, L_c , qui est ici le paramètre du réseau a , soit la distance entre les centres des atomes M et N. Or, les atomes du centre et des coins se touchent de manière tangente et le rapport entre la longueur a et le rayon atomique R s'établit selon l'équation suivante :

$$(4R)^2 = (a\sqrt{2})^2 + a^2 \Rightarrow a = \frac{4R}{\sqrt{3}} \quad ; \quad \text{donc } L_c = a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$$

La longueur totale de la ligne L_c qui croise les cercles représentant les atomes M et N est de $2R$. Quant à la densité linéaire DL , elle s'établit ainsi :

$$DL = \frac{L_c}{L_l} = \frac{2R}{4R/\sqrt{3}} = 0.866$$

- $[110]$

$$DL = \frac{L_c}{L_l} = \frac{2R}{a\sqrt{2}} = \frac{2R}{4R\sqrt{2}/\sqrt{3}} = 0.61$$

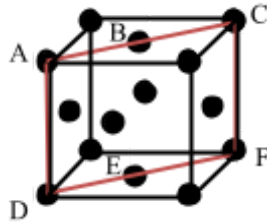
- $[111]$

$$DL = \frac{L_c}{L_l} = \frac{4R}{a\sqrt{3}} = \frac{4R}{4R\sqrt{3}/\sqrt{3}} = 1$$

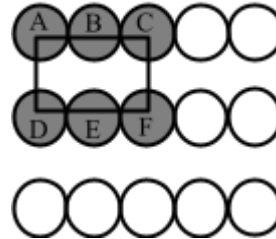
Exercice 2

Calculer et comparer les densités planaires des plans (110), (100) et (111) dans un cristal CFC.

Solution 2



* Maille élémentaire CFC, selon le modèle des sphères réduites, présentant un plan (110)



* Arrangement des atomes dans un plan (110) CFC. La position relative des atomes identifiés en a) est indiquée

☆ (110)

La figure b) présente l'arrangement des atomes dans ce plan. A partir de la portion du plan qui croise une maille élémentaire, on calcule cette aire planaire ainsi que l'aire totale des cercles qu'elle contient en fonction du rayon atomique R . Le rapport entre ces deux aires donne alors la densité planaire.

L'aire planaire de la maille élémentaire, S_p , est simplement l'aire du rectangle formé par les centres des atomes A, C, D et F (figure b). La longueur ($\overline{AC}$) et la largeur ($\overline{AD}$) du rectangle mesurent respectivement :

$$\overline{AC} = 4R \text{ et } \overline{AD} = 2R\sqrt{2} \text{ car } (a^2 + a^2 = (4R)^2 \Rightarrow a = 2\sqrt{2}R = \overline{AD})$$

$$\text{Il s'ensuit que : } S_p = (\overline{AC})(\overline{AD}) = (4R)(2R\sqrt{2}) = 8R^2\sqrt{2}$$

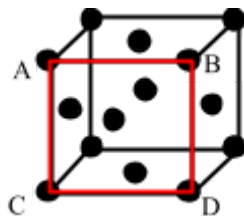
En ce qui a trait à l'aire totale des cercles, un quart de chacun des atomes A, C, D et F de même que la moitié des atomes B et E sont compris dans ce rectangle, ce qui équivaut à deux cercles complets. Ainsi, l'aire totale S_c des cercles est simplement :

$$S_c = (2)\pi R^2$$

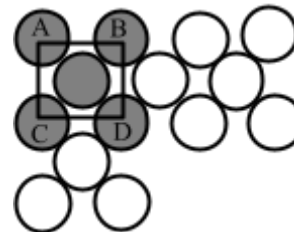
Enfin, la densité planaire DP s'établit comme suit :

$$DP = \frac{S_c}{S_p} = \frac{2\pi R^2}{8R^2\sqrt{2}} = 0.555$$

☆ (100)



* Maille élémentaire CFC, selon le modèle des sphères réduites, présentant un plan (100)



* Arrangement des atomes dans un plan (100) CFC. La position relative des atomes identifiés en a) est indiquée

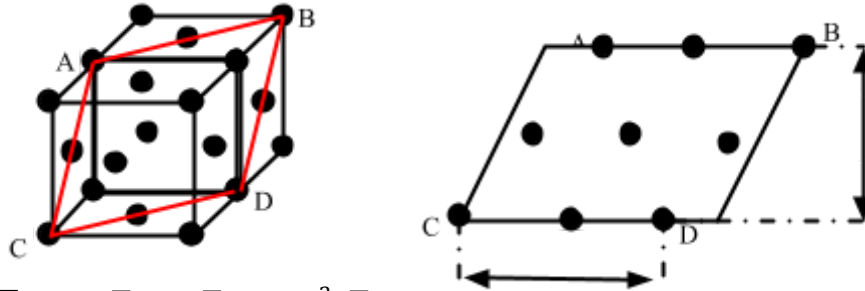
$$\overline{CB}^2 = (4R)^2 = \overline{AC}^2 + \overline{AB}^2 = 2a^2 \Rightarrow a = 2\sqrt{2}R$$

$$S_p = (\overline{AB})(\overline{AC}) = a^2 = 8R^2$$

$$S_c = (1 + 1)\pi R^2 = 2\pi R^2$$

$$DP = \frac{S_c}{S_p} = \frac{2\pi R^2}{8R^2} = 0.79$$

☆ (111)



$$S_p = (\overline{AB})(\overline{AC}) = a\sqrt{2} * a\sqrt{6}/2 = a^2\sqrt{3}$$

$$S_c = \left(2 * \frac{1}{6} + 2 * \frac{1}{3} + 4 * \frac{1}{2} + 1\right)\pi R^2 = 4\pi R^2$$

$$DP = \frac{S_c}{S_p} = \frac{4\pi R^2}{a^2\sqrt{3}} = \frac{4\pi R^2}{(2\sqrt{2}R)^2\sqrt{3}} = 0.90$$

2^{ème} Méthode

Si on considère le triangle ACD (pas de prolongation du plan (111)). Les angles du triangle équilatéral ACD font 60°, donc les sommets A, C et D participent par un coefficient de 60/360=1/6

$$S_c = [(3 * 1/6) + (3 * 1/2)] * \pi * R^2 = 2 * \pi * R^2$$

$$S_p = a * \text{Racine}(2) * h/2 \text{ avec } h^2 = (a * \text{racine}(2))^2 = (a * [\text{racine}(2)]/2)^2 = 3a^2/2 = 3 * 8R^2/2 = 12R^2$$

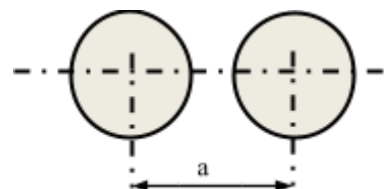
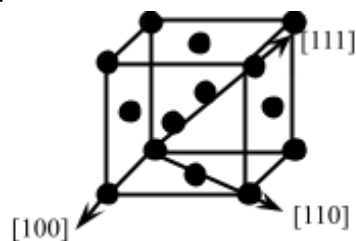
$$\text{Donc, } S_p = 2 * R^2 * \text{Racine}(12) \text{ et } DP = (2 * \pi * R^2) / (2 * R^2 * \text{Racine}(12)) = 0.90$$

Remarque : les densités planaire et linéaire sont des facteurs importants en ce qui concerne le glissement, c'est-à-dire le mécanisme de déformation plastique des métaux. Le glissement survient dans les plans cristallographiques les plus denses et, plus particulièrement, dans les directions présentant la densité linéaire la plus prononcée.

Exercice 3

Calculer et comparer les densités linéaires des directions [100], [110] et [111] de la structure CFC.

Solution 3



* Maille élémentaire CFC selon le modèle des sphères réduites, avec indication de la direction [100]

* Espacement atomique dans la direction [100] entre les atomes identifiés en a) dans le cas d'une structure cristalline CFC

- [100]

$$DL = \frac{L_c}{L_l} = \frac{2R}{2R\sqrt{2}} = 0.71$$

- [110]

$$DL = \frac{L_c}{L_l} = \frac{4R}{a\sqrt{2}} = \frac{4R}{2\sqrt{2}R\sqrt{2}} = 1$$

- [111]

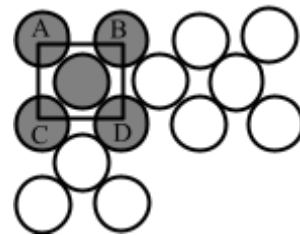
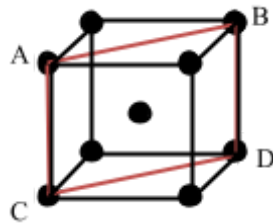
$$DL = \frac{L_c}{L_l} = \frac{2R}{a\sqrt{3}} = \frac{2R}{2\sqrt{2}R\sqrt{3}} = 0.4$$

Exercice 4

Calculer et comparer les densités planaires des plans (110) et (100) dans un cristal CC.

Solution 4

☆ (110)



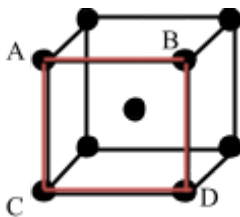
$$\overline{CB}^2 = (4R)^2 = \overline{AC}^2 + \overline{AB}^2 = a^2 + (a\sqrt{2})^2 \Rightarrow a = 4R/\sqrt{3}$$

$$S_p = (\overline{AB})(\overline{AC}) = a\sqrt{2} * a = a^2\sqrt{2} = 16R^2\sqrt{2}/3$$

$$S_c = \left(4 * \frac{1}{4} + 1\right)\pi R^2 = 2\pi R^2$$

$$DP = \frac{S_c}{S_p} = \frac{2\pi R^2}{a^2\sqrt{2}} = \frac{2\pi R^2}{(4R/\sqrt{3})^2\sqrt{2}} = \frac{\pi*3}{8\sqrt{2}} = 0.83$$

☆ (100)



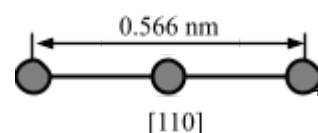
$$S_p = (\overline{AB})(\overline{AC}) = a * a = a^2 = 16R^2/3$$

$$S_c = \left(4 * \frac{1}{4}\right)\pi R^2 = \pi R^2$$

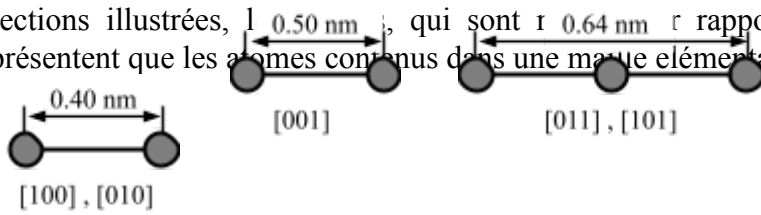
$$DP = \frac{S_c}{S_p} = \frac{\pi R^2}{a^2} = \frac{\pi R^2}{(4R/\sqrt{3})^2} = \frac{\pi*3}{16} = 0.58$$

Exercice 5

Voici les schémas de l'arrangement des atomes le long de diverses directions cristallographiques dans un métal hypothétique quelconque. Dans chacune des



directions illustrées, qui sont $\propto 0.64 \text{ nm}$ rapport à leur taille réelle, ne représentent que les atomes contenus dans une maille élémentaire.



- De quel système cristallin la maille élémentaire fait-elle partie ?
- Comment appellerait-on cette structure cristalline ?

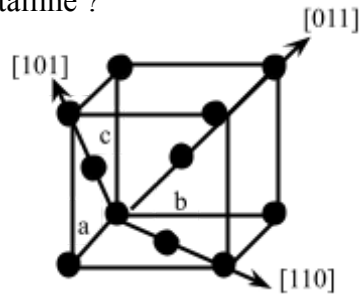
Solution 5

$$a=b=0.40 \text{ nm} ; c=0.50 \text{ nm} ;$$

$$[101]=[011]=(a^2+c^2)^{0.5}=0.64 \text{ nm}$$

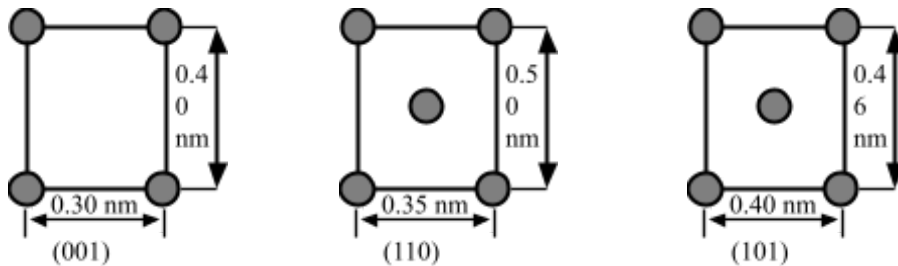
$$[110]=(a^2+b^2)^{0.5}=a(2)^{0.5}=0.566 \text{ nm}$$

- $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ et $a=b \neq c$; système quadratique
- Structure cristalline : ?



Exercice 6

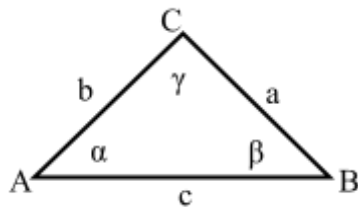
Voici trois plans cristallographiques distincts pour la maille élémentaire d'un métal hypothétique. Les cercles représentent des atomes.



- De quel système cristallin la maille élémentaire fait-elle partie ?
- Comment appellerait-on cette structure cristalline ?

Solution 6

Pour chercher les valeurs des angles, on peut utiliser le théorème d'Al-Kashi, appelé aussi théorème de Pythagore généralisé, qui relie dans un triangle la longueur d'un côté à celle des deux autres et au cosinus de l'angle formé par ces deux côtés:



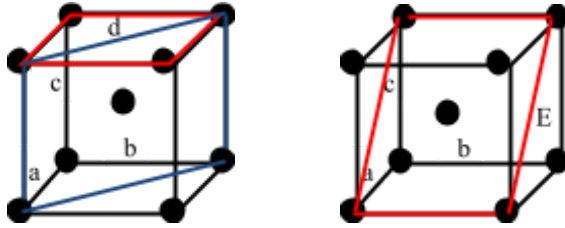
$$c^2 = \|\vec{AB}\|^2 = \|\vec{AC} + \vec{CB}\|^2 = \|\vec{AC}\|^2 + \|\vec{CB}\|^2 + 2\|\vec{CB}\| \cdot \|\vec{CA}\| \cdot \cos \gamma$$

$$\text{Soit } c^2 = a^2 + b^2 - 2ab \cos \gamma$$

(001) : $a=0.40 \text{ nm}$ et $b=0.30 \text{ nm}$ ou $a=0.30 \text{ nm}$ et $b=0.40 \text{ nm}$. Mais, le plan (101) confirme que $b=0.40 \text{ nm}$, donc $a=0.30 \text{ nm}$.

(110) : $c=0.50 \text{ nm}$ ou $c=0.35$. Vérification : $d=(a^2+b^2)^{0.5}=0.5$, donc $c=0.35 \text{ nm}$

(101) : $b=0.40$ nm et $E=0.46$ nm. Vérification : $E=(a^2+c^2)^{0.5}=(0.3^2+0.35^2)^{0.5}=0.46$ nm, donc vérifié.



- $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ et $a \neq b \neq c$; système cristallin : orthorhombique.
- Structure cristalline: orthorhombique centrée.