

TD N°3 Chimie 4

EXO 1 : L'arséniure de Gallium Ga As cristallise selon une structure de type ZnS blende, dans laquelle les atomes As forme un CFC et les atomes de Ga occupent certains sites tétraédrique.

- 1) Représenter la maille élémentaire du réseau CFC .combien y a t'il d'atomes de As par maille.
- 2) Ou sont situés les sites tétraédriques et combien y a-t-il. quelle est la proportion des sites tétraédriques occupés par les atomes de Ga. Représenter la maille.
- 3) Calculer la masse volumique de GaAs, sachant que $a = 566 \text{ pm}$.
- 4) Déterminer le rayon des sites tétraédrique r_t en fonction de a et r_{As} . Le calculer et comparer au rayon covalent de gallium.

On donne

On donne : $M(\text{Ga}) = 70 \text{ g.mol}^{-1}$; $M(\text{As}) = 75 \text{ g.mol}^{-1}$; $r(\text{Ga}) = 126 \text{ pm}$; $r(\text{As}) = 119 \text{ pm}$.

Exo2:

Estimer la taille d'un site octaédriques et tétraédrique (r_{site}) en fonction de la taille des atomes métalliques (r_M) dans un maille cubique a faces centrées.

EXO3:

L'uranium présente trois variétés allotropiques entre la température ambiante et sa température de fusion. La phase γ est de type cubique centrée pour $775 \text{ }^\circ\text{C} < T < 1132 \text{ }^\circ\text{C}$. On demande de préciser quelques caractéristiques de la phase γ .

1. Dessiner la maille élémentaire du réseau cristallin associé à cette phase.
2. Quelle est la relation qui lie le paramètre de la maille a et le rayon atomique de l'uranium?
3. Calculer le rayon atomique de l'uranium.
4. Calculer le nombre d'atomes par maille, la coordinence et la compacité.

5. Calculer la masse volumique de l'uranium.

Données : $M = 238 \text{ g/mol}$; $a = 350 \text{ pm}$; $N_A = 6,023 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$.

EXO4 :

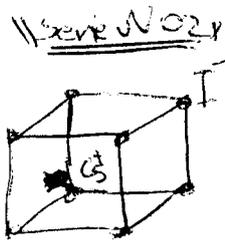
Le titane donne de nombreux alliages, en particulier pour l'aéronautique. Avec l'aluminium et le nickel, il conduit à un alliage de formule $\text{Al}_x \text{Ni}_y \text{Ti}_z$. Dans cet alliage, le titane est décrit par une maille C.F.C et il y a occupation de tous les sites tétraédriques par les atomes de nickel et de tous les sites octaédriques par les atomes d'aluminium. Le paramètre de la maille est $a = 0.589 \text{ nm}$.

1. Donner la formule de cet alliage.
2. Calculer le rayon des sites octaédriques et tétraédriques.
3. Calculer la compacité C et la masse volumique de cet alliage.

On donne : $R(\text{Ti}) = 0.147 \text{ nm}$; $R(\text{Al}) = 0.143 \text{ nm}$; $R(\text{Ni}) = 0.124 \text{ nm}$.

$M(\text{Ti}) = 47.90 \text{ g/mol}$; $M(\text{Al}) = 26.98 \text{ g/mol}$; $M(\text{Ni}) = 58.70 \text{ g/mol}$

Exo 3) Les hémas est



donc $2r_V + 2r_O = a\sqrt{3}$

$$a = \frac{2r_V + 2r_O}{\sqrt{3}}$$

$$a = \frac{2(220) + 2(169)}{\sqrt{3}} = \boxed{449 \text{ pm}}$$

3) calcul de la masse volumique

$$\rho = \frac{nM}{N_A a^3} = \frac{Z_{Cs} M_{Cs} + Z_{I} M_{I}}{N_A a^3}$$

$$= \frac{M_{Cs} + M_{I}}{N_A a^3} = \frac{(133 + 127) \times 10^{-3}}{6,02 \times 10^{23} (449 \times 10^{-10})^3}$$

$$\boxed{\rho = 4771 \text{ kg/m}^3}$$

et la compacité

$$C = \frac{V_{occ}}{V_{maille}} = \frac{\frac{4}{3}\pi (r_V^3 + r_O^3)}{a^3}$$

$$C = 0,72 \Rightarrow \boxed{C = 72\%}$$

→ Série No 3

Exo 4)

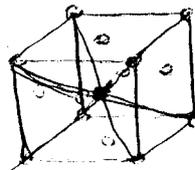
1) $4 \text{ atomes} = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = \boxed{4}$

2) 08 site tétraédrique

04 site T occupé par Gallium

3) la masse volumique

$$\rho = \frac{nM}{N_A a^3} = \frac{2M_{As} + 2M_{Ga}}{N_A a^3} \frac{r\sqrt{3}}{4}$$



$$\rho = \frac{4(70,9 + 75) \times 10^{-3}}{6,023 \times 10^{23} (366 \times 10^{-12})^3}$$

$$\boxed{\rho = 5315 \text{ kg/m}^3}$$

4) on a :

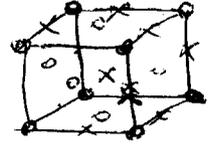
$$r_{As} + r_{tetra} = \frac{a\sqrt{3}}{4}$$

$$\Rightarrow r_{tetra} = \frac{a\sqrt{3}}{4} - r_{As} = \frac{366 \cdot 10^{-12} \sqrt{3} - 119}{4}$$

$$\boxed{r_{tetra} = 126 \text{ pm} = r_{Ca}}$$

Exo 2)

Site octaédriques



Selon la suite $a = 2r_n + 2r_o$ --- (1)

1) Alors $a\sqrt{2} = 4r_n$ --- (2)

$$\text{--- (2)} \quad a = \frac{4r_n}{\sqrt{2}}$$

$$\frac{4r_n}{\sqrt{2}} = 2r_n + 2r_o$$

$$2r_o = \left(\frac{4}{\sqrt{2}} - 2\right)r_n$$

$$r_o = \left(\frac{2}{\sqrt{2}} - 1\right)r_n$$

$$r_o = (\sqrt{2} - 1)r_n$$

$$\boxed{r_o = 0,41 r_n}$$

2) $4r_n = a\sqrt{2}$ --- (1)

$$2r_n + 2r_{sit} = \frac{a\sqrt{3}}{2}$$
 --- (2)

$$\text{--- (1)} \quad a = \frac{4r_n}{\sqrt{2}}$$

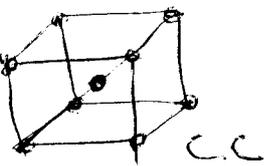
$$2r_n + 2r_{sit} = \frac{4r_n}{\sqrt{2}} \frac{\sqrt{3}}{2}$$

$$r_{sit} = \frac{r_n \sqrt{3}}{\sqrt{2}} - r_n$$

$$r_{sit} = r_n \left(\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} - 1\right) \Rightarrow \boxed{r_{sit} = 0,22 r_n}$$

EXO 3

① La relation entre a et le rayon atomique R



② $4R_u = a\sqrt{2}$

③ $R_u = \frac{a\sqrt{2}}{4} \Rightarrow R_{Ni} = \frac{350\sqrt{2}}{4} = 151,5 \text{ pm}$

④ Le nombre de atomes en CC

$8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$

* La coordonnée = $8 a \sqrt{2}$

La compacité ϵ

$\epsilon = \frac{2 \times \frac{4}{3} \pi R^3}{a^3}$

$\epsilon = \frac{2 \times \frac{4}{3} \pi (151,5)^3}{(350)^3} = 0,68$

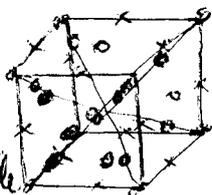
$\epsilon = 68\%$

⑤ la masse volumique ρ

$\rho = \frac{ZM}{N_A a^3} = \frac{2(238)}{6,023 \times 10^{23} (350 \times 10^{-10})^3}$

$\rho = 18,43 \text{ g/cm}^3$

EXO 4



• Ti CFC

$8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4 \text{ atomes/maille}$

• Al: $12 \times \frac{1}{4} + 1 = 4 \text{ atomes/maille}$

• Ni: 8

* La formule d'alliage

$Al_4 Ni_8 Ti_4 \Rightarrow Al_1 Ni_2 Ti_1$

② Site octaédrique

on a $2r_{oct} + 2r_{Ti} = a$

$\Rightarrow r_{oct} = \frac{a}{2} - r_{Ti} = \frac{350}{2} - 151,5 = 94,25$

$r_{oct} = 94,25 \text{ nm} > r_{Al} \Rightarrow \text{h.p. de déformation}$

• Les sites tetraédriques

on a $r_T + r_{Ti} = \frac{a\sqrt{2}}{4}$

$\Rightarrow r_T = \frac{a\sqrt{2}}{4} - r_{Ti}$

$r_T = \frac{\sqrt{2}}{4} a - r_{Ti}$

$= (\frac{\sqrt{2}}{4} - 1) r_{Ti}$

$= 0,22 r_{Ti} = 0,108 < r_{Ni}$

Il y a une déformation

* 3) la compacité

$\epsilon = \frac{\sum Z \frac{4}{3} \pi R^3}{a^3}$

$= \frac{\frac{4}{3} \pi [Z_{Ti} R_{Ti}^3 + Z_{Al} R_{Al}^3 + Z_{Ni} R_{Ni}^3]}{a^3}$

$\epsilon = 0,87 \Rightarrow \epsilon = 87\%$

* la masse volumique ρ

$\rho = \frac{\sum Z.M}{N_A a^3}$

$= \frac{4 \times (26,98) + 8 \times (58,7) + 4 \times (47,9)}{6,023 \times 10^{23} (0,359 \times 10^{-9})^3}$

$\rho = 6250 \text{ Kg/m}^3$

$4r_{Ti} = a\sqrt{2}$
 $a = \frac{4}{\sqrt{2}} r_{Ti}$