SdM R2.03
TD Cristallographie

1 Etude du Fer

Le Fer solide existe sous 2 formes allotropiques, le Fer α (ferrite) et le Fer γ (austénite) (cf. cours M2104). Le Fer α cristallise dans le système cubique centré. Il possède un rayon atomique de 0.125nm. Le Fer γ cristallise dans le système cubique faces centrées et possède un rayon atomique de 0,127nm. La masse molaire du fer est de 55.85g/mol.

1. Représenter les 2 mailles.

2. Calculer le paramètre de maille a ainsi que la masse volumique pour le Fer α et le Fer γ.
   Aide : Il faut chercher les directions denses de chaque structure, c'est à dire les directions dans lesquelles les atomes se touchent.

3. Calculer la compacité du Fer α et du Fer γ.

   Pour insérer des atomes dans un métal afin de former un alliage, on peut travailler en insertion ou en substitution.

4. Quel est l'influence du type de solution solide (insertion ou substitution) sur la taille des atomes ?

   On travaillera ici sur les solutions solides d'insertion dans les structures CFC.

5. Trouver et représenter les sites octaédriques et tétraédriques dans la maille CFC du fer γ. Calculer le nombre de chaque type de site par maille.

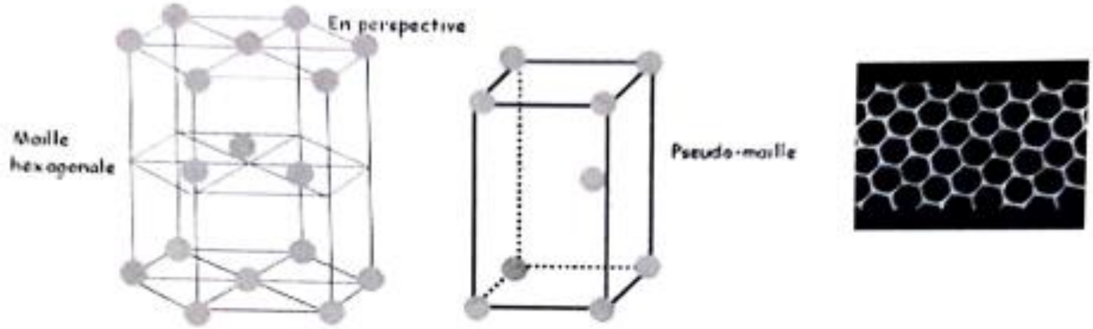
6. Exprimer le rayon r des atomes que l'on peut placer en interstitiel sur les TO en fonction du rayon R de l'atome hôte ?.

7. Dans les alliages à base de fer γ, on donne que le diamètre des sites tétraédriques est de 0,058nm. Déterminer celui des sites octaédriques.

8. Le diamètre atomique du carbone est de 0,154nm. Comment vont se placer les atomes de C en insertion dans le fer γ à 910° sachant que la solubilité maximale à cette température est de $1,2\%m$?

2 Etude d'une structure HC

On donne ci-dessous le schéma d'une structure cristalline hexagonale compacte. Dans ce type de structure, on a besoin de 2 paramètres (a et c) pour définir la maille. Le paramètre a défini le côté de l'hexagone tandis que c représente la hauteur de la maille.



1. Déterminer le nombre d'atomes par maille. On peut travailler dans la maille ou bien dans la pseudo maille (qui représente 1/3 de la maille).

2. Déterminer la relation entre les paramètres a et c. Il faut bien prendre en compte que la maille est compacte donc les atomes se touchent.

3. Calculer la compacité de la structure HC. Que peut-on en conclure ?

4. Le magnésium cristallise dans une structure hexagonale compacte. Les paramètres de maille sont $a = 3.21\ 10^{-10}m$ et $c = 5.21\ 10^{-10}m$. La masse molaire est de 24.31g/mol.

   Déterminer sa masse volumique.

3 Etude de ZnS

Le sulfure de zinc (ZnS) cristallise sous 2 formes différentes :
— Structure CFC : La blende
— Structue HC : La wurtzite
On observe une transition entre les 2 formes vers $1000°C$.

3.0.1 La Blende

La blende, cristallise dans un système CFC. Les ions sulfures S^{2-} se positionnent aux sommets de la maille tandis que les ions zinc Zn^{2+} se placent dans 1 TT/2.

1. Représenter la maille.

2. Déterminer le nombre d'atomes de soufre et de zinc par maille. En déduire la formule chimique de la blende.

3. Exprimer la distance Zn-S ($r^+ + r^-$) en fonction du paramètre de maille a. En déduire ce paramètre de maille a sachant que $r^- = 0,184nm$ et $r^+ = 0,074nm$.

4. En réalité, la masse volumique de la blende est $\rho = 4084kg.m^{-3}$. Déterminer ainsi le paramètre de maille a sachant que les masses molaires sont de $M_{Zn} = 65,4g.mol^{-1}$ et $M_S = 32,1g.mol^{-1}$. Comparer au résultat précédent. Que peut on en déduire ?

3.0.2 La Wurtzite

La wurtzite cristallise dans un système HC. Les ions zinc Zn^{2+} se positionnent aux sommets de la maille tandis que les ions sulfures S^{2-} se placent dans 1 TT/2.

1. Représenter la maille.

2. Déterminer le nombre d'atomes de soufre et de zinc par maille. En déduire la formule chimique de la blende.

3. Exprimer la distance Zn-S ($r^+ + r^-$) en fonction du paramètre de maille a. En déduire ce paramètre de maille a sachant que $r^- = 0,184nm$ et $r^+ = 0,06nm$.

4. En réalité, la masse volumique de la blende est $\rho = 3980kg.m^{-3}$. Déterminer ainsi le paramètre de maille a sachant que les masses molaires sont de $M_{Zn} = 65,4g.mol^{-1}$ et $M_S = 32,1g.mol^{-1}$. Comparer au résultat précédent.

4 Etude du Titanate de Baryum

Le Titanate de Baryum est composé d'ions Ti^{4+}, Ba^{2+} et O^{2-}. Il cristallise dans le système cubique. Les ions Ba^{2+} occupent les sommets, les ions O^{2-} les centres des faces et les ions Ti^{4+} le centre de la maille.

1. Calculer le nombre d'ions par maille et vérifier l'électroneutralité de cet édifice.

2. Exprimer la masse de la maille en fonction des masses molaires des atomes.

3. On donne la masse volumique du solide $\rho = 6,02g.cm^{-3}$. En déduire le paramètre de maille a.

SDM

$N = n \times \mathcal{N}_A$ — Nbr d'atome ; nbr de mol ; Cste d'Avogadro

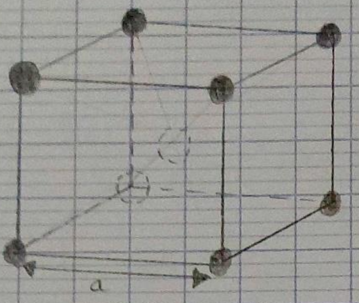
$\mathcal{N}_A = 6{,}022 \cdot 10^{23}$ at/mol

$n = \frac{m}{M}$ — mol ; $m \to$ g ; $M \to$ g/mol

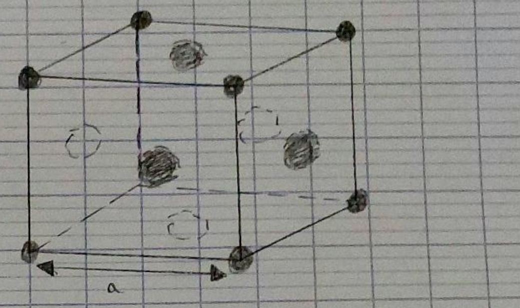
$\rho = \frac{m}{V}$

1 - Étude du Fer

1. Fer α (ferrite) = 0,125 nm



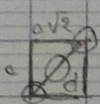
Fer γ (austénite) = 0,127 nm



2.

$d^2 = a^2 + a^2 = 2a^2$

$d = a\sqrt{2}$



$d^2 = a^2 + a\sqrt{2}$

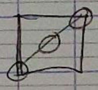
$d^2 = 3a^2$

$d = a\sqrt{3} = 4R$

$a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$

$a = \frac{4 \times 0{,}125}{\sqrt{3}}$

$a = \frac{\sqrt{3}}{6} = 0{,}288$



$d^2 = a^2 + a^2 = 2a^2$

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

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

$a = \frac{4 \times 0{,}127}{\sqrt{2}}$

$a = 0{,}36$

$\rho = \frac{m}{V} = \frac{55{,}85}{0{,}288^3} = 2338$

$\rho = \frac{m}{V} = \frac{55{,}85}{0{,}36^3} = 1197{,}05$

3. $C = \frac{\text{Nbr d'atome / maille} \times 4/3\pi \times R^3}{\text{vol de la maille}}$

2 ×

$C = 0{,}68$

$C = 0{,}74$

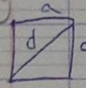
Système Cubique Centré (CC) :

Compacité : $C = \dfrac{\text{Volume occupé par les atomes}}{\text{Volume de la maille}}$

$$C = \frac{\text{Nombre atome / maille} \times \text{volume atome}}{a^3}$$

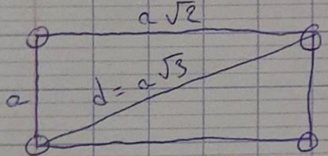
$$C = \frac{\text{Nombre d'atome / maille} \times \frac{4}{3}\pi \times R^3}{a^3}$$

autre diagonale



$d^2 = a^2 + a^2 = 2a^2$

$d = a\sqrt{2}$



$D^2 = a^2 + (a\sqrt{2})^2$
$= 3a^2$
$D = a\sqrt{3}$

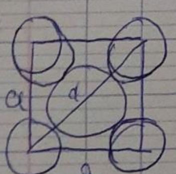
$a\sqrt{3} = 4R$ (Rayon)

$$C = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi \times R^3}{\left(\frac{4R}{\sqrt{3}}\right)^3} = \frac{\frac{8}{3} \times \pi \times \cancel{R^3}}{\frac{4^3}{\sqrt{3}^3} \times \cancel{R^3}}$$

$$= \frac{8}{\cancel{3}} \times \pi \times \frac{\cancel{3}\sqrt{3}}{4^3} = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} = \boxed{0,68}$$

Système Cubique Face Centrée (CFC)

$d^2 = a^2 + a^2 = 2a^2$
$d = a\sqrt{2}$
$4R = a\sqrt{2}$



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

16 se simplifie par 4

$$C = \frac{16}{3}\pi \times \left(\frac{\cancel{a}\sqrt{2}}{4}\right)^3 \times \frac{1}{\cancel{a^3}}$$

$$C = \frac{2\sqrt{2}}{3} \times \frac{\pi}{4} = \frac{\pi\sqrt{2}}{6} = \boxed{0,74}$$

Trou octaédrique où et combien ?