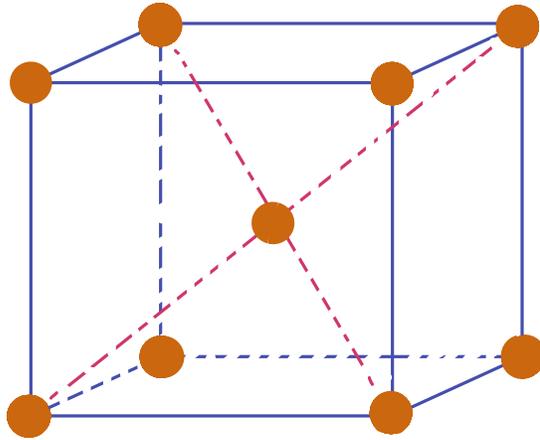


Exercice 1 :

1)



Distance entre deux centres de motifs situés aux sommets de la maille : paramètre a .

2)

Dans cette structure, la maille rassemble :

→ 8 motifs sur les sommets comptant pour $\frac{1}{8}$.

→ 1 motif au centre du cube comptant pour 1

La population Z vaut
 $Z = 8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$

Considérons le motif central, ses plus proches voisins sont situés aux sommets du cube ($\frac{\sqrt{3}a}{2}$)

Il est entouré de 8 de ces motifs : coordination de 8.

3)

$a?$ → r
 → ρ

Par définition, $\rho = \frac{m_{\text{maille}}}{V_{\text{maille}}}$

avec $V_{\text{maille}} = a^3$
 $m_{\text{maille}} = Z \times m_{\text{motif}}$
 ↳ masse d'un motif

or $m_{\text{motif}} = \frac{M}{N_A}$

Donc, $\rho = \frac{ZM}{N_A a^3}$

Donc, $a = \sqrt[3]{\frac{ZM}{N_A \rho}}$

↳ cm

↳ $g \cdot mol^{-1}$

↳ $g \cdot cm^{-3}$

AN: $a = 2,87 \times 10^{-8} \text{ cm}$
 $= 2,87 \times 10^{-10} \text{ m} = 287 \text{ pm}$

4) Les plus proches voisins sont les motifs du sommet avec celui du centre du cube. Ainsi, sur une grande diagonale, 3 atomes sont tangents (2 pts de tangence) on en déduit que la longueur de la grande diagonale est égale à 4 fois le rayon atomique:

$$\sqrt{3} a = 4r \Rightarrow r = \frac{\sqrt{3} a}{4} = \frac{\sqrt{3}^3}{4} \sqrt{\frac{2 \rho}{NA \rho}}$$

AN: $r = 1,24 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 124 \text{ pm}$. Invariable.

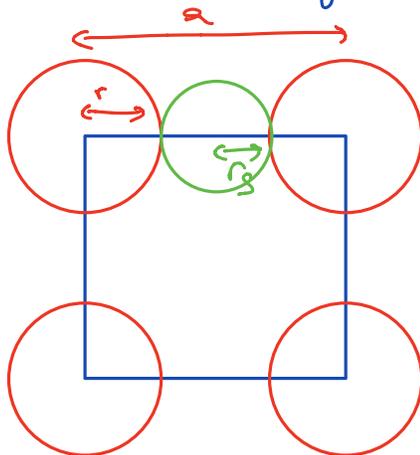
5) Par définition: $C = \frac{V_{\text{matière}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{Z \times V_{\text{motif}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{Z \times \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3}$

\swarrow volume de matière contenue dans la maille
 \downarrow
 volume du cube

Or, d'après la réponse précédente $a = \frac{4}{\sqrt{3}} r$ donc $C = \frac{2 \times \frac{4}{3} \pi}{\left(\frac{4}{\sqrt{3}}\right)^3} = \frac{1}{8} \times \pi \times \sqrt{3}$

AN: $C = 0,68$

6) Compte tenu de la condition de tangence, on peut dessiner une face du cube



D'après le schéma, sur un côté du carré, on a:

$$a = 2r_s + 2r \quad \left(r_s = \frac{a}{2} - r \right)$$

Or, $a = \frac{4}{\sqrt{3}} r$ donc, $r_s = \frac{4}{\sqrt{3} \times 2} r - r = \underbrace{\left(\frac{2}{\sqrt{3}} - 1 \right)}_{0,155} r.$

Exercice 3

1) Ex 1: $r_s = 0,155 r$

Ex 2: $r_s = 0,41 r.$

$r_t = 0,22 r.$

Les sites de l'austénite sont plus grands que ceux de la ferrite → Carbone est plus soluble dans l'austénite.

2)

$t = 0,5\% \rightarrow t = \frac{m_{\text{carbone}}}{m_{\text{fer}} + m_{\text{carbone}}} \Rightarrow t m_{\text{fer}} = (1-t) m_{\text{carbone}}$

Or, $m_{\text{fer}} = m_{\text{fer}} \times n(\text{Fe})$ $m_{\text{carbone}} = m_{\text{C}} \times n(\text{C})$

Pour un atome de carbone, on a N atomes de fer, donc:

$$\left[\frac{N}{1} = \frac{m_{\text{fer}}}{m_{\text{C}}} = \frac{m_{\text{fer}}/n(\text{Fe})}{m_{\text{carbone}}/n(\text{C})} = \frac{1-t}{t} \times \frac{n(\text{C})}{n(\text{Fe})} \right]$$

AN: $N = 43 \rightarrow 43$ atomes de fer pour un atome de carbone.

3)

2 types de sites:

→ 2 sur des faces: $\frac{1}{2}$) 2 sites

→ 4 sur des arêtes: $\frac{1}{4}$)

VS CS : population de fer: $Z = 2.$

Pour chaque atome de fer, il y a un site dans la structure.

La proportion de sites occupés est donc de $\frac{1}{43}$.

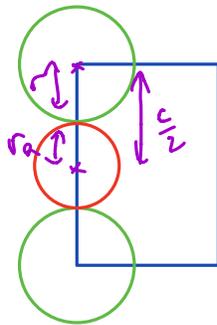
4)

Site sur arête : habitabilité r_a

Site centre de face : habitabilité r_c .

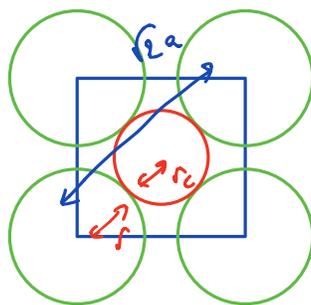
$$* r_a = \frac{c}{2} - r$$

AN: $r_a = 21,5 \text{ pm} < r$



$$* r_c = \frac{\sqrt{2}a}{2} - r$$

AN: $r_c = 78,9 \text{ pm} < r$

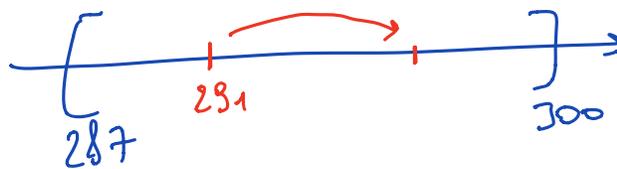


5)

$r_{\text{carbone}} < r_c$ mais $r_{\text{carbone}} > r_a \Rightarrow$ les atomes de carbone ne déformeraient pas la maille s'ils sont insérés dans les sites situés sur les centres des faces.

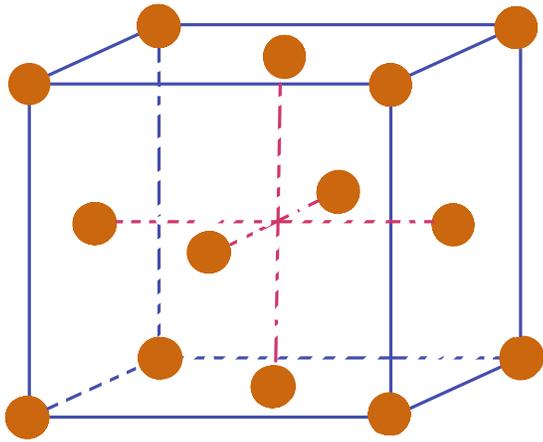
6) $\uparrow t \Rightarrow$ proportion de sites occupés $\uparrow \Rightarrow$ sites arêtes sont occupés \rightarrow trop petits \Rightarrow déformation.

$$287 \text{ pm} < C < 300 \text{ pm}.$$



Ex 2

1)



2) 8 motifs aux sommets : $\frac{1}{8}$ } $Z = 4$ / 2 atomes de plus que la CC.
6 motifs sur les faces : $\frac{1}{2}$ }

Les atomes les plus proches sont un atome au sommet et un atome au centre d'une face.
Un des atomes de fer est entouré par 12 tels atomes, la coordination est donc de 12.

3) Le rayon atomique ne dépend que de l'élément, nous pouvons donc utiliser le résultat de l'exercice précédent.

Les plus proches voisins sont en contact dans le modèle des sphères dures.
On en déduit donc que les atomes sont tangents sur la diagonale d'une face :

$$\sqrt{2}a = 4r \Rightarrow a = \frac{4}{\sqrt{2}}r$$

AN : $a = 351 \text{ pm}$ > a_{CC} la maille de CFC accueille davantage d'atomes mais est plus volumineuse.

4) Par définition :

$$C = \frac{V_{\text{matière}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{Z V_{\text{motif}}}{V_{\text{maille}}} \quad \text{ou } V_{\text{motif}} = \frac{4}{3} \pi r^3$$

Or, le rayon atomique du fer ne varie pas, on peut prendre la valeur trouvée à l'exercice précédent:

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

3) La masse volumique est donnée par:

$$\rho = \frac{m_{\text{maille}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{Z \times m_{\text{motif}}}{V_{\text{maille}}} \sim \text{masse d'1 motif} \quad \text{donc } m_{\text{motif}} = \frac{M(\text{Fe})}{N_A}$$

Donc, $\rho = \frac{4 \cdot N(\text{Fe})}{a^3 N_A}$

AN: $\rho = 8,58 \cdot 10^8 \text{ g} \cdot \text{m}^{-3} = 8,58 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3} > \rho_{\text{cc}}$

La structure CFC est plus compacte. Pour un même volume, il y a davantage de matière.

$$\frac{C_{\text{CFC}}}{C_{\text{CC}}} = \frac{\frac{V_{\text{matière CFC}}}{V_{\text{maille CFC}}}}{\frac{V_{\text{matière CC}}}{V_{\text{maille CC}}}} = \frac{Z_{\text{CFC}}}{a_{\text{CFC}}^3} \times \frac{a_{\text{CC}}^3}{Z_{\text{CC}}} = \frac{Z_{\text{CFC}} \times m_{\text{motif}}}{a_{\text{CFC}}^3} \times \frac{a_{\text{CC}}^3}{Z_{\text{CC}} \times m_{\text{motif}}}$$

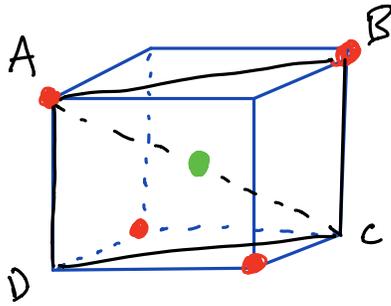
Donc, $\frac{C_{\text{CFC}}}{C_{\text{CC}}} = \frac{\rho_{\text{CFC}}}{\rho_{\text{CC}}}$

Plus la structure est compacte, plus la masse volumique est élevée.

6) Le milieu d'une arête de la maille CFC est un site octaédrique. On peut donc y loger une sphère de rayon r_0 tel que $2r_0 + 2r = a$. Par ailleurs: $a\sqrt{2} = 4r$ d'où:

$$r_0 = (\sqrt{2} - 1) r \Rightarrow r_0 = 51 \text{ pm}$$

7) Un site tétraédrique est au centre d'un cube de côté $\frac{a}{2}$. Il est donc au centre du rectangle ABCD de longueur $\frac{a\sqrt{2}}{2}$ et de largeur $\frac{a}{2}$, dont la diagonale a une longueur $AC = \frac{a\sqrt{3}}{2}$.



La sphère pouvant être logée dans ce site a un rayon r_t tel que $2r_t = AC$, ce qui donne :

$$r_t = \left(\frac{\sqrt{3}}{2} - 1\right) r \Rightarrow \underline{r_t = 28 \text{ pm}}$$

Exercice 4

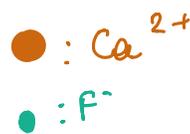
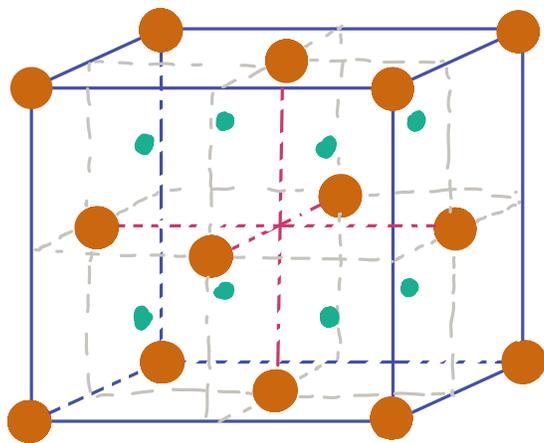
1) Ici, on cherche à vérifier la neutralité de la structure :

→ population de Ca^{2+} : CFC → population de 4.

Donc, $4 \times 2+ = 8+$ → 8 charges positives par maille.

→ Il faut 8 ions F^- pour assurer l'électroneutralité de la maille ou il y a 8 sites tétraédriques par maille (un au centre de chaque sous cube) → 8 sites occupés (tous)

2)



3) Les plus proches voisins des ions F^- sont les ions qui forment le tétraèdre :
Coordination anion : 4.

Les plus proches voisins d'un cation sont les ions au centre de chaque tétraèdre qu'il forme. Il forme en tout 8 tétraèdres.
Coordination cation : 8.

\Rightarrow Coordination (4, 8).

4) Par définition: $\rho = \frac{M_{\text{maille}}}{V_{\text{maille}}}$

la masse de la maille est due aux cations et aux anions donc :

$$M_{\text{maille}} = \underbrace{Z_+}_{\substack{\uparrow \\ \text{pop cations} \\ 4}} \times \frac{M(\text{Ca})}{N_A} + \underbrace{Z_-}_{\substack{\uparrow \\ \text{pop anions} \\ 8}} \times \frac{M(\text{F})}{N_A}$$

$$\text{Donc, } \rho = \frac{4M(\text{Ca}) + 8M(\text{F})}{N_A a^3}$$

AN: $\rho = 3,19 \text{ g.cm}^{-3}$