

CHIMIE DU SOLIDE (RÉVISIONS DE PCSI)

Tester les bases

Exercice c0.1 : structure cristalline de l'or

(Grand classique) ★☆☆

L'or cristallise dans le système cubique à faces centrées (cfc).

1. Représenter la maille conventionnelle.
2. Calculer le nombre d'atomes par maille.
3. Donner la coordinence des atomes.
4. Établir la relation entre le paramètre de maille (noté a_{Au}) et le rayon de l'atome d'or (noté r_{Au}). Calculer la valeur de r_{Au} .

Donnée :

- Paramètre de maille de l'or (cfc) : $a_{\text{Au}} = 408 \text{ pm}$

S'entraîner

Exercice c0.2 : chlorure de sodium

(Grand classique) ★☆☆

La structure NaCl est définie comme :

- une structure cubique à faces centrées d'ions chlorures Cl^- ;
- un ion sodium Na^+ dans chaque site octaédrique.

1. Représenter la maille NaCl en perspective.
2. Déterminer la population de la maille.
3. Déterminer la coordinence cation/anion.
4. Indiquer la direction selon laquelle se fait la tangence anion-cation. En déduire la relation entre le paramètre de maille a ainsi que r_+ et r_- .
5. Calculer la plus petite distance entre deux anions dans la structure. En déduire l'inégalité portant sur le rapport r_+/r_- .

Exercice c0.3 : chlorure de césium

(Grand classique) ★★★

La structure de chlorure de césium CsCl est définie comme :

- une structure cubique simple d'ions chlorure Cl^- ;
- un ion césium Cs^+ au centre de la maille

1. Représenter la maille CsCl en perspective.
2. Déterminer la population de la maille.
3. Déterminer la coordinence cation/anion.
4. Indiquer la direction selon laquelle se fait la tangence anion-cation. En déduire la relation entre le paramètre de maille a ainsi que r_+ et r_- .
5. Calculer la plus petite distance entre deux anions dans la structure. En déduire l'inégalité portant sur le rapport r_+/r_- .

Exercice c0.4 : le nitrure de titane (écrits Banque PT 2020)

★★★

Le nitrure de titane présente une dureté dépassant celle de la plupart des matériaux métalliques et a une température de fusion très élevée (environ 3000°C). Ces remarquables propriétés physiques sont contrebalancées par sa fragilité ce qui conduit à l'employer principalement comme film de revêtement. Ce composé présente une structure cristalline dans laquelle les atomes de titane forment un réseau cubique à faces centrées, les atomes d'azote occupant tous les sites interstitiels octaédriques de la structure.

1. Représenter en perspective la maille du réseau métallique. Indiquer et décrire précisément la localisation et le nombre de sites octaédriques appartenant à la maille.
2. Déterminer le nombre de motifs par maille, ainsi que la coordinence du titane et de l'azote.
3. Donner un ordre de grandeur de la masse volumique μ du nitrure de titane.
4. Écrire la relation de tangence entre le métal et l'azote.
5. En considérant que les atomes de titane ne doivent pas être tangents, donner l'inégalité vérifiée par le rayon r_{Ti} des atomes métalliques.
6. Indiquer la relation entre la taille du site octaédrique et r_{Ti} le rayon de l'atome métallique dans une maille cubique à faces centrées de titane pur de paramètre de maille a .
7. Le rayon de l'atome d'azote est de 65 pm . Que peut-on en conclure?

Données :

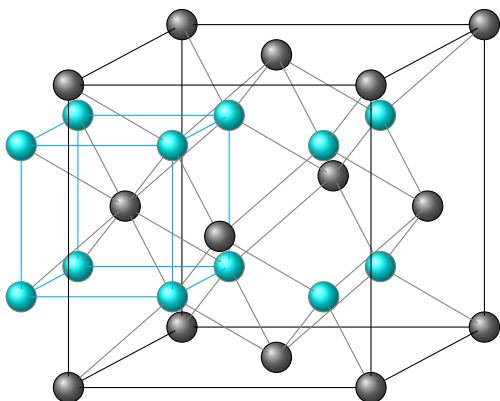
- Paramètre de la maille du nitrure de titane : $a = 425 \text{ pm}$
- Rayon métallique du titane : $r_{\text{Ti}} = 145 \text{ pm}$
- Masses molaires : $M(\text{Ti}) = 48,0 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$, $M(\text{N}) = 14,0 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$

Exercice c0.5 : cristal de dioxyde d'uranium (écrits Centrale MP 2012) ★★☆

Le cristal de dioxyde d'uranium UO_2 est un cristal ionique ($\text{U}^{4+}, \text{O}^{2-}$) qui a la structure d'une fluorite (CaF_2), à savoir :

- les ions d'uranium forment un réseau cubique à faces centrées;
- les ions d'oxygène forment un réseau cubique.

La maille correspondante est visible sur le schéma ci-dessous.



Nous considérerons dans la suite que les proportions naturelles de l'uranium sont de 99,28 % pour ^{238}U et 0,72 % pour ^{235}U .

1. Indiquer sur cette figure la position des ions U^{4+} et O^{2-} . Comment s'appellent les sites du réseau de l'uranium occupés par les ions d'oxygène?
2. Vérifier que le nombre d'ions est cohérent avec la formule UO_2 .
3. Quelle est la longueur du côté de la maille?

Données :

- Masse volumique de l'oxyde d'uranium : $\rho(\text{UO}_2) = 11,0 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$
- Masse molaire de l'oxygène : $M(\text{O}) = 16,0 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$

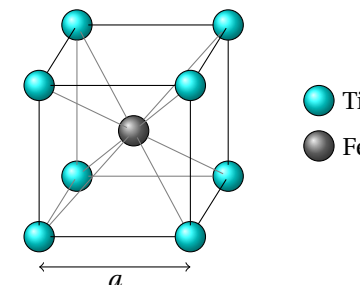
Approfondir

Exercice c0.6 : un alliage comme méthode de stockage du dihydrogène ★★☆

L'utilisation du dihydrogène comme source d'énergie nécessite que l'on soit en mesure de pouvoir le stocker, de manière à en disposer quand bon nous semble.

L'une des idées émises par les chercheurs est de placer les molécules de dihydrogène au sein de la matière solide, en l'intégrant dans une structure cristalline. Il suffit alors de trouver une structure d'accueil adaptée, au sein de laquelle un atome d'hydrogène peut s'insérer dans un site interstitiel.

Parmi les candidats potentiels, l'alliage fer-titane (FeTi) a souvent été évoqué pour permettre le stockage du dihydrogène. La maille de FeTi est cubique centrée : un atome de titane se situe à chaque sommet et un atome de fer est situé au centre du cube.



1. Donner la définition d'un alliage métallique. Quels peuvent être les intérêts de concevoir un alliage?
2. Déterminer la population de la maille.
3. Donner la coordinence Fe/Ti de cette maille.
4. Dans cette structure, il y a tangence des atomes selon la diagonale du cube. Donner la relation entre le paramètre de maille et les rayons des métaux. Calculer le paramètre de maille.
5. Donner, à l'aide d'un schéma et d'explications les plus claires possible, la position des sites octaédriques dans la maille de FeTi. On précise qu'il existe deux types de sites octaédriques dans cette maille.
6. L'hydrogène se place préférentiellement dans l'un des deux types de sites octaédriques. Expliquer. On considèrera que le but visé est l'insertion d'un atome d'hydrogène dans la structure cristalline.

Données :

atome	H	Fe	Ti
rayon atomique (pm)	37	124	145