

Examen
Cristallochimie(S₃)
(Durée 2h)

Exercice I

1-Le carbone présente deux variétés structurales, le diamant et le graphite. *+ famille des fullérens.*

1.a. Donner le nombre d'atomes par maille dans le carbone diamant. Justifiez votre réponse.

1.b. Le paramètre de maille a_d , vaut 3,57 Å. Calculer le rayon du carbone dans le diamant r_{cd} , puis la compacité.

2- Dans la structure du carbure de silicium SiC (structure cubique), les coordonnées réduites des atomes sont : C : (0,0,0), (0, 1/2, 1/2) (1/2, 0, 1/2) (1/2, 1/2, 0)

Si : (1/4, 1/4, 3/4), (3/4, 3/4, 3/4), (3/4, 1/4, 1/4), (1/4, 3/4, 1/4)

Le paramètre de maille, a , vaut 4,34 Å.

2.a. Effectuer une projection de cette structure sur le plan (xoy)

2.b. Calculer le rayon de l'atome de silicium sachant que le carbone conserve la valeur qui est la sienne dans le diamant.

2.c. Déterminer la compacité et la masse volumique du carbure de silicium.

Données : Masses molaires : carbone : $M_C = 12 \text{ g.mol}^{-1}$, silicium : $M_{Si} = 28 \text{ g.mol}^{-1}$.

*le m rayon
Carbone*

Exercice II :

A l'état solide, l'oxyde de bismuth Bi_2O_3 présente une structure cubique telle que les anions occupent les centres des arêtes et les centres des faces du cube alors que les ions Bi^{3+} ont pour coordonnées : (1/4, 1/4, 3/4) ; (1/4, 3/4, 1/4) ; (3/4, 1/4, 3/4) ; (3/4, 3/4, 1/4)

On admettra qu'il y a tangence des anions et des cations selon la grande diagonale du petit cube d'arête $a/2$.

1-Dessiner la maille de cette structure.

2-Vérifier la stœchiométrie de l'oxyde (en utilisant le nombre de motif/maille)

3-Préciser la coordinence de chaque ion par rapport à l'autre.

4-Déterminer la masse volumique et la compacité de l'oxyde de bismuth.

Données : $R(\text{Bi}^{3+}) = 1.08 \text{ Å}$; $R(\text{O}^{2-}) = 1.40 \text{ Å}$; $M(\text{O}) = 16 \text{ g/mol}$; $m(\text{Bi}) = 209 \text{ g/mol}$.

O²⁻

*qu'on a bien cette
formule /
lenbr de Bi et O*

Exercice III :

1- Donner la relation de l'énergie réticulaire selon le modèle électrostatique de Born Landé. Calculer l'énergie réticulaire de CaF_2 selon ce modèle.

2- Calculer l'énergie réticulaire de CaF_2 selon la méthode de Born Haber. Comparer les valeurs trouvées.

Données : Constante de Madelung = 2.519 ; $e = 4.803 \cdot 10^{-10} \text{ ucgs}$

Distance inter ionique Ca-F = 2.35 Å Facteur de Landé: $n = 8$

$\Delta H^{\circ}_f(\text{CaF}_2) = -1228 \text{ kJ/mole}$

$\Delta H^{\circ}_{\text{sub}}(\text{Ca}) = 177.8 \text{ kJ/mole}$

$\Delta H^{\circ}_{\text{diss}}(\text{F}_2) = 157 \text{ kJ/mole}$

$\text{Ca(g)} \rightarrow \text{Ca}^{2+}(\text{g}) + 2e \quad \Delta H^{\circ}_i = 1735 \text{ kJ/mole}$

$\text{Fg} + 1e \rightarrow \text{F}^{-}(\text{g}) \quad (\text{AE} = 328 \text{ kJ/mole})$