



## Travaux Dirigés Série 1

### Exercice 01 : *Evaluation de la taille d'une molécule d'eau*

La masse volumique de l'eau à l'état liquide étant de  $1 \text{ g/cm}^3$  et sa masse molaire de 18 g par mole, déterminer la taille d'une molécule d'eau.

Données : Le nombre de molécules dans une mole est de  $6,02 \cdot 10^{23}$ .

On supposera que les molécules d'eau ont approximativement la forme d'une sphère et qu'elles sont au contact dans un empilement compact.

### Exercice 02 : *Structure du Chlorure de Césium (CsCl)*

La maille de description du Chlorure de Césium est cubique : les atomes occupent les positions :



1. Représenter la maille en projection cotée sur le plan  $(a,b)$ . Indiquer le nombre d'atomes de Chlore et de Césium contenus dans la maille.
2. Déterminer le nombre de premiers et de seconds voisins autour d'un atome quelconque pris comme origine.
3. Indiquer les translations de réseau, le motif, et le réseau de Bravais

**Rappels** : Projection cotée

C'est une façon commode de représenter les structures (simples) en projection sur un plan particulier de la maille.

On n'indique que la cordonnée réduite de l'atome suivant la direction de projection, les deux autres sont lues directement sur le plan de projection.

Exemple : dans une projection, suivant  $c$  sur le plan  $(a,b)$ , un atome se trouvant en  $(0,25, 0,50, 0,33)$  sera représenté par un cercle (par exemple) dont le centre sera situé au quart de  $a$  et au milieu de  $b$  avec pour seule indication : 0,33.

**Rappels** : Contenu d'une maille

Elément situé sur :

Un **sommet** : étant commun à 8 mailles, cet élément compte pour  $1/8$

Une **arête** : étant commun à 4 mailles, cet élément compte pour  $1/4$

Une **face** : étant commun à 2 mailles, cet élément compte pour  $1/2$

A l'**intérieur** : n'étant pas partagé, cet élément compte pour 1

### Exercice 03 : *Structure du FER alpha*

La maille de description du fer alpha est cubique : les atomes occupent les positions :



1. Représenter la maille en projection cotée sur le plan  $(a,b)$
2. Déterminer le nombre de premiers et de seconds voisins autour d'un atome quelconque pris comme origine.
3. Indiquer les translations de réseau, le motif, et le réseau de Bravais.

**Exercice 04 : Structure de l'alliage AuCu<sub>3</sub>**

Au dessus de la température critique de 391°C, les alliages de composition AuCu<sub>3</sub> sont totalement désordonnés. Les atomes d'or et de cuivre occupent alors les positions :

$$0 \ 0 \ 0 \quad \frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ 0 \quad \frac{1}{2} \ 0 \ \frac{1}{2} \quad 0 \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2}$$

d'une maille **cubique**, leur répartition se faisant au **hasard**. On peut considérer que ces positions sont occupées par un atome moyen **a** de formule : **a = ¼ Au + ¾ Cu**

En refroidissant lentement ce cristal à 225°C et en le laissant suffisamment de temps à cette température, on obtient l'état **ordonné**. Les atomes d'Or et de Cuivre occupent alors dans chaque maille les positions :

$$\text{Au} : 0 \ 0 \ 0 \quad \text{Cu} : \frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ 0 \quad \frac{1}{2} \ 0 \ \frac{1}{2} \quad 0 \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2}$$

Pour les deux états :

1. Représenter la maille en projection cotée sur le plan (a,b)
2. Déterminer le nombre de groupements AuCu<sub>3</sub> dans la maille
3. Déterminer les translations de réseau, le motif et le réseau de Bravais

**Exercice 05 : Structure type K<sub>2</sub>NiF<sub>4</sub>**

La maille du composé K<sub>2</sub>NiF<sub>4</sub> est quadratique. Elle est représentée en perspective (Fig. 1)

1. Indiquer le nombre de groupements K<sub>2</sub>NiF<sub>4</sub> contenus dans la maille
2. Déterminer les coordonnées des atomes, en déduire la translation non entière. Indiquer les coordonnées des atomes du motif, et le réseau de Bravais.
3. Le composé supraconducteur La<sub>2-x</sub>Ba<sub>x</sub>CuO<sub>4</sub> (Lanthane, Barium, Cuivre, Oxygène) à une structure similaire à celle de K<sub>2</sub>NiF<sub>4</sub>

$$a = b = 0,3787 \text{ nm } ( 3,787 \text{ \AA} )$$

$$c = 1,329 \text{ nm } ( 13,29 \text{ \AA} )$$

$$\text{La / Ba} : 0 \ 0 \ z ; 0 \ 0 \ -z$$

$$z(\text{La/ Ba}) = 0,362 \ c$$

$$\text{Cu} : 0 \ 0 \ 0$$

$$\text{O}_1 : \frac{1}{2} \ 0 \ 0 ; 0 \ \frac{1}{2} \ 0 \quad \text{O}_2 : 0 \ 0 \ z ; 0 \ 0 \ -z$$

$$z(\text{O}_2) = 0,182 \ c$$

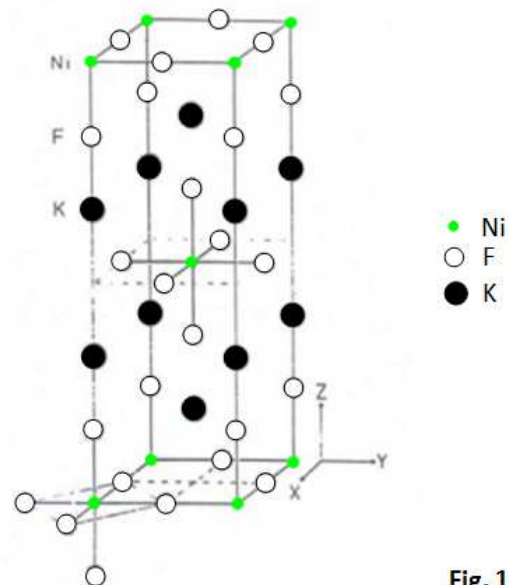


Fig. 1

Représenter la structure en projection cotée sur le plan (b,c) .

Décrire l'environnement des atomes de Cu . Indiquer la particularité de ce composé.