



UNIVERSITÉ DE STRASBOURG

TD6

Bernard Doudin

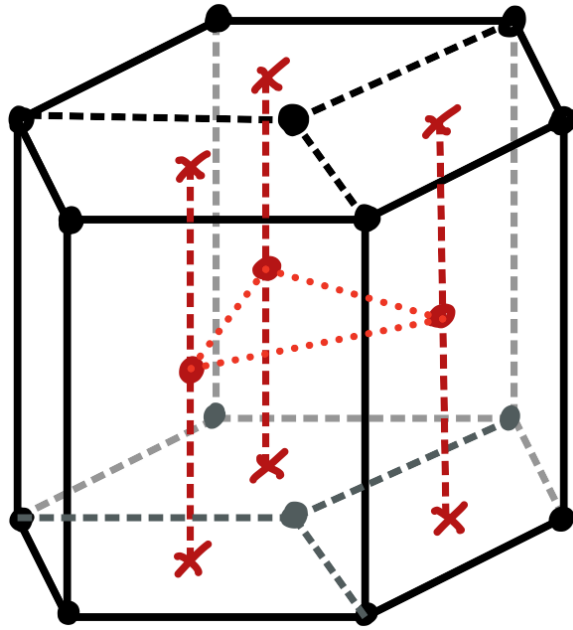
Transcrit par
PIERRE GUICHARD

L3 Semestre 6 2021

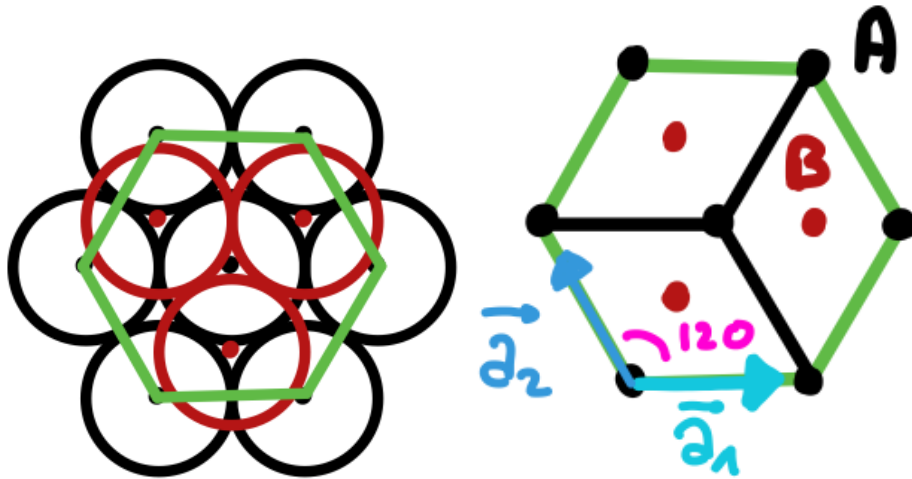
6.1 Structure hexagonale compacte

1. Montrer que le rapport c/a idéal pour cette structure est $\sqrt{\frac{8}{3}} \approx 1.633$.
Rappel d'une maille hexagonale $a = b$; $\alpha = 120^\circ$; c normal à a, b .

Soit la structure hexagonale :



Vu de haut, cela donne :



2. Calculer la compacité de cette structure.

$$\text{compacité} = \frac{6 \text{atomes par mailles} \times \frac{4}{3} \pi r^3}{V_{\text{maille}}}$$

où

$$\begin{aligned} V_{\text{maille}} &= 3a^2 \cos(120^\circ) \times c && = 3a^2 \cos(120^\circ) \times \sqrt{\frac{8}{3}}a \\ &= 3\sqrt{2}a^3 \end{aligned}$$

Alors,

$$\text{compacité} = \frac{6 \times \frac{4}{3}\pi \left(\frac{a}{2}\right)^3}{3\sqrt{2}a^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0.74$$

3. Le sodium subit une transformation martensitique qui le fait passer d'une structure cubique centrée à une structure hexagonale compacte à une température de 23 K. En supposant que la densité demeure constante pendant cette transformation, calculer le paramètre a de la structure hexagonale.

On donne le paramètre de la structure cubique centrée $a_{\text{Na}} = 0.423$ nm. On suppose que le rapport c/a est idéal.

$$\begin{array}{ll} V_{\text{CC}} = a_0^3 & 2 \text{ atomes par mailles} \\ V_{\text{HC}} = 3\sqrt{2}a^3 & 6 \text{ atomes par mailles} \end{array}$$

$$\text{masse volumique} = \frac{\text{nombre d'atomes par maille}}{V_{\text{maille}}}$$

$$\rho_{\text{CC}} = \frac{2m_0}{a_0^3} \qquad \rho_{\text{HC}} = \frac{6m_0}{3\sqrt{2}a^3}$$

On suppose que la densité mesure constante, alors :

$$\frac{1}{a_0^3} = \frac{1}{\sqrt{2}a^3}$$

On trouve ainsi :

$$a = a_0 2^{-1/6} = 0.377 \text{ nm}$$

6.2 Réseau réciproque

Caractériser le réseau réciproque associé au réseau cubique.

On rappelle :

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

Alors,

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_{\text{maille}}} \vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3 \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_{\text{maille}}} \vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1 \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V_{\text{maille}}} \vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2$$

0. Cas cubique primitif

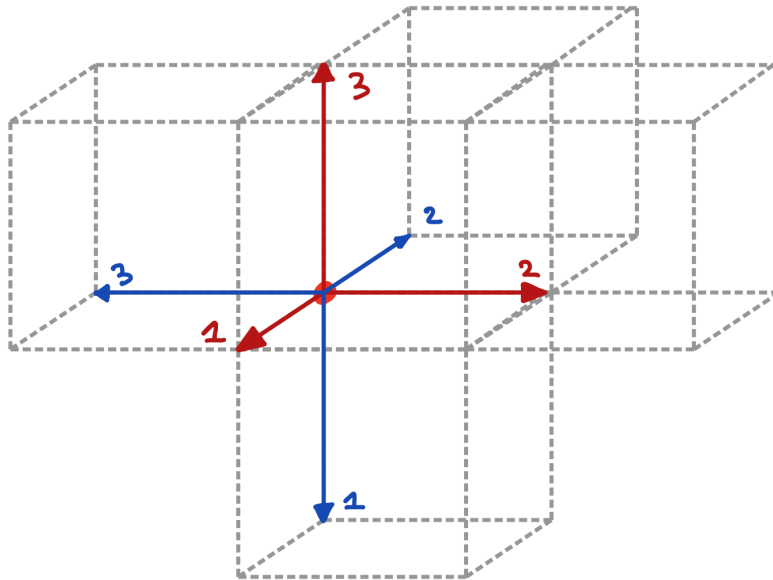
$$\vec{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_2 = a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_3 = a \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Et alors,

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

1. Cas du cubique centré (CC)

2. Cas du cubique faces centrées (CFC : français ; FCC : anglais)



$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

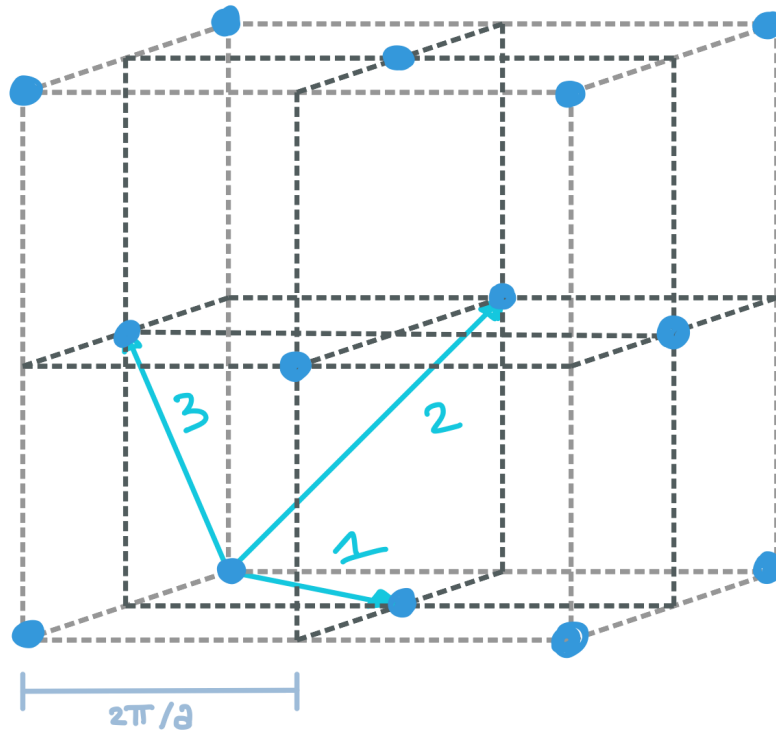
$$V_{\text{maille}} = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3) = \frac{1}{2}a^3$$

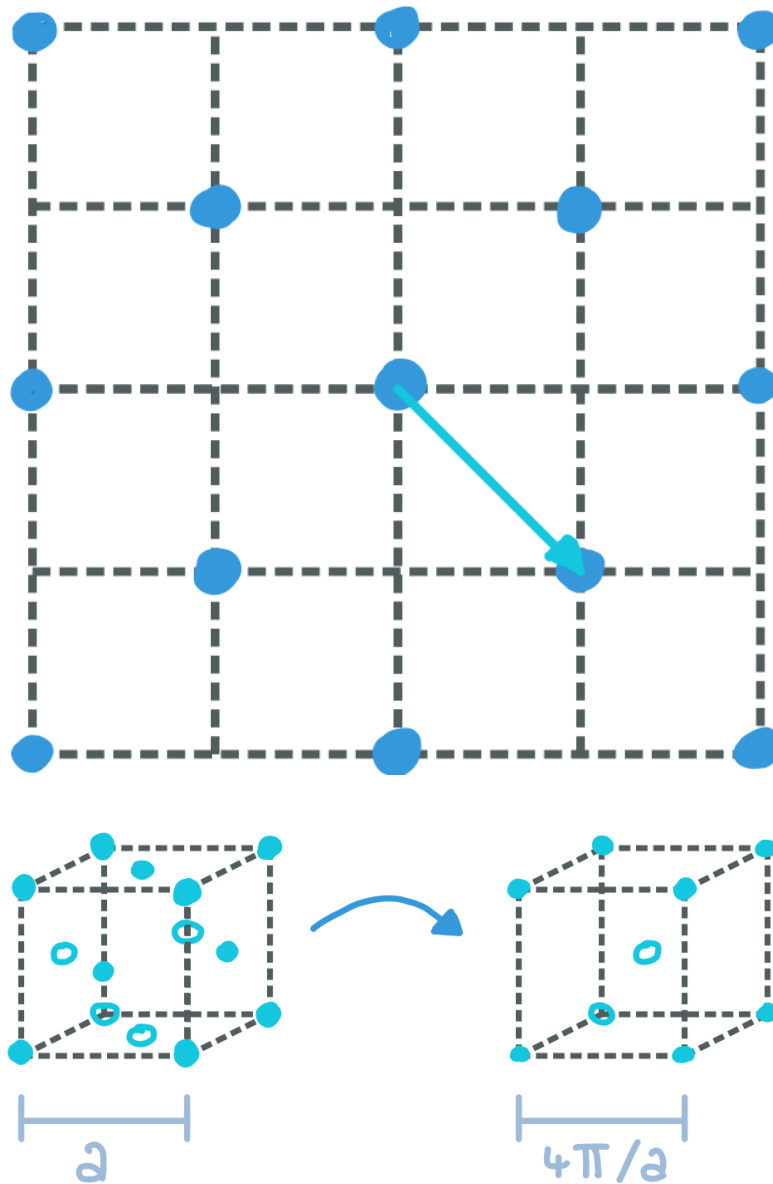
$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Et le volume dans le réseau réciproque V^* :

$$V^* = \vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \wedge \vec{b}_3) = 2 \left(\frac{2\pi}{a} \right)^3$$

Le réseau réciproque du CC est le CFC, et inversement du coup.





De quel type de réseau s'agit-il ? Calculer le volume de la maille élémentaire du réseau réciproque.

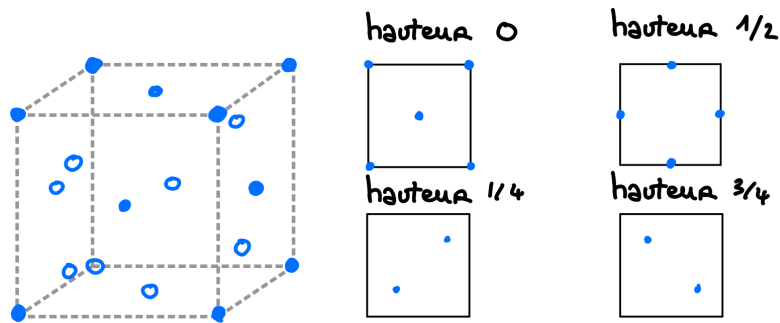
6.3 Structure cristalline

A partir des réseaux de Bravais et des motifs donnés dans chaque cas, représenter les édifices cristallins correspondants.

Réseau de Bravais : cfc

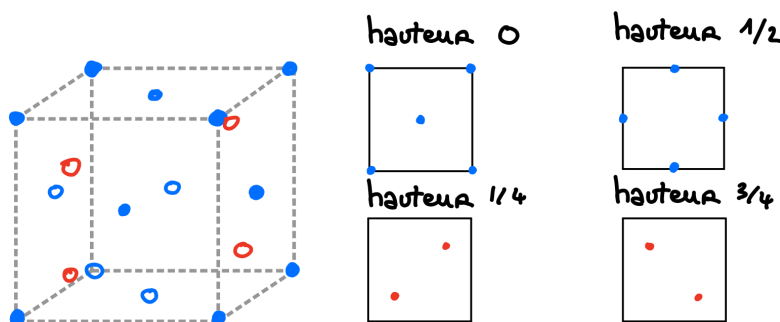
- Silicium :

Motif : un atome de Si en $0,0,0$ et un en $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$



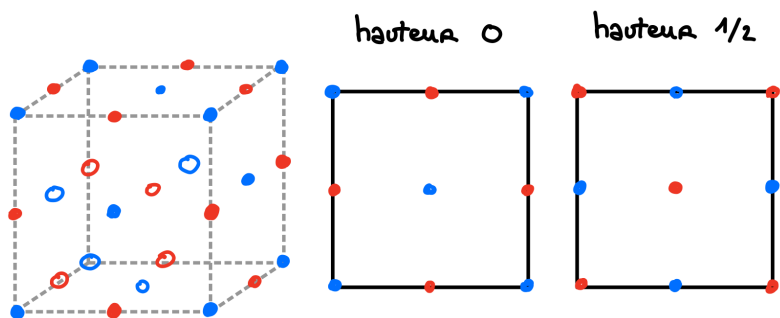
- GaAs :

Motif : un atome de As en $0,0,0$ et un atome de Ga en $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$



- NaCl :

Motif : un atome de Na en $0,0,0$ et un atome de Cl en $\frac{1}{2}, 0,0$



6.4 Densité massique de l'or et du tungstène

L'or qui a une structure cubique à faces centrées et le tungstène qui est cubique centré ont la même densité massique de 19.3 g/cm^3 . Leurs masses molaires sont respectivement 197 et 183.9 g.mol^{-1} .

1. Quels sont les paramètres de maille de chaque métal ?

$$\rho = \frac{\text{nombre d'atomes par maille}}{V_{\text{maille}}} \times \frac{\text{masse molaire}}{\mathcal{N}_A}$$

$$\rho_{\text{Au}} = \frac{4}{a_{\text{Au}}^3} \frac{197}{6 \times 10^{23}} \longrightarrow a_{\text{Au}} = 0.408 \text{ nm}$$

$$\rho_{\text{W}} = \frac{2}{a_{\text{W}}^3} \frac{183.9}{6 \times 10^{23}} \longrightarrow a_{\text{W}} = 0.316 \text{ nm}$$

2. En supposant un modèle de sphères dures, quel est le rapport des rayons atomiques ?

$$R_{\text{Au}} = \text{demi-diagonale face} = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{2}}{2} a_{\text{Au}}$$

$$R_{\text{W}} = \text{demi-diagonale volume} = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{3}}{2} a_{\text{W}}$$

Alors,

$$\frac{R_{\text{Au}}}{R_{\text{W}}} = \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{408}{316} = 1.05$$