

Exo1 :

Déterminer le nombre de points de réseau par cellule dans les systèmes de cristallin cubique. S'il n'y a qu'un seul atome situé à chaque point de réseau, ----- calculez le nombre d'atomes par unité de cellule

Exo2 :

Déterminer la relation entre le rayon atomique (r) et le paramètre de réseau (a_0) dans les structures CS (cubique simple), CC (Cubique centré) et CFC (Cubique a faces centrées) lorsqu'un atome se trouve à chaque point de réseau.

Exo3

la densité d'empilement est la fraction d'espace occupée par les atomes,

Calculez la densité d'empilement pour la cellule CFC. Calculer le la densité d'empilement pour la maille CC et la maille CS.

Exo4

Déterminer la densité du fer CC, qui a un paramètre de réseau de 0,2866 nm.

Solution TD 1

Solution EXO 1

- Dans la cellule unitaire cubique, les points de réseau sont situés uniquement aux coins du cube:

Le nombre de points de réseau de toutes les positions de coin dans une maille unité est :

$$\left(\frac{1 \text{ points de réseau}}{8 \text{ coins}}\right) \left(8 \frac{\text{coins}}{\text{cellules}}\right) = 1 \frac{\text{points de réseau}}{\text{cellules}}$$

Dans les cellules unitaires C C, les points de réseau sont situés à chaque coin avec un au centre du cube:

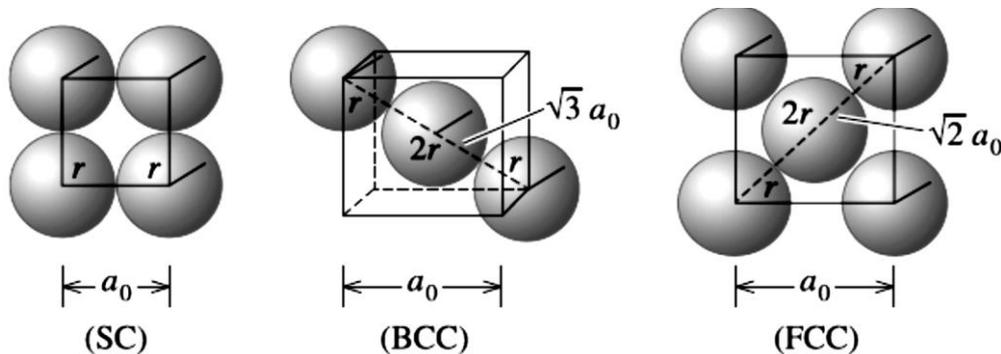
Point de réseau/ cellule unitaire = $(1/8 * \text{points de réseau/coins}) * 8 (\text{coins/cellules}) + 1 \text{ au centre du cube} = 2$

Dans les cellules unitaires CFC, les points de réseau sont situés à tous les coins et toutes les faces du cube

Point de réseau/ cellule unitaire =

$(1/8)(\text{Points de réseau/coins}). 8(\text{coins/cellules}) + 6 \text{ milieu de face} * 1/2 = 4$

Solution EXO 2 :



- Dans une structure SC ; les atomes se touchent le long du bord du cube. Les atomes de coin sont centrés sur les coins du cube, donc:

$$a_0 = 2r$$

- Dans une structure CC, les atomes se touchent le long de la diagonale du corps.

$$a_0^2 + a_0^2 = 2 a_0^2 = d^2$$

La diagonale : $d^2 + a_0^2 = 3 a_0^2 = 4 \text{ rayons d'atomes}$

$$d'ou \ a_0 = r * 4/\sqrt{3}.$$

- Dans une structure CFC : les atomes se touchent le long de la diagonale de la face du cube

$$d^2 = 2a_0^2 \text{ d'ou } d = a_0 * \sqrt{2} \quad \text{et} \quad d = 4 * r$$

$$a_0 = 4 * r / \sqrt{2}.$$

Solution EXO 3:

L'expression générale pour la densité d'empilement est:

$$\text{densité d'empilement} = \frac{(\text{nombre d'atome /cellule}) * (\text{volume de l'atome})}{\text{volume de cellule unitaire}}$$

Dans une maille CFC, il y a quatre points de réseau par cellule;

Il y a un atome par nœud de réseau, et quatre atomes par cellule.

Le volume d'un atome est $\frac{4\pi r^3}{3}$

Le volume de la cellule unitaire est a_0^3 .

$$\text{densité d'empilement} = \frac{(4 \text{ atoms/cell}) \left(\frac{4}{3}\pi r^3\right)}{a_0^3}$$

$$\text{densité d'empilement} = \frac{(4) \left(\frac{4}{3}\pi r^3\right)}{(4r/\sqrt{2})^3} = \frac{\pi}{\sqrt{18}} \cong 0.74$$

Dans la cellule unitaire CFC la densité d'empilement de $p = \frac{\pi}{\sqrt{18}} = 0.74 = 74\%$ est le plus important possible.

Pour la maille Cubique Centrée ont une la densité d'empilement de $0,68 = 68\%$

Et la cellules Cubique simple ont une la densité d'empilement de $0,52 = 52\%$

Solution EXO 4:

$$\text{densité } \rho = \frac{(\text{nombre d'atome /cellule}) * (\text{masse atomique})}{(\text{volume de cellule unitaire}) * (\text{nombre d'Avogadro})}$$

Nombre d'atome par cellule = 2

$$a_0 = 0.2866 \text{ nm} = 2.866 * 10^{-8} \text{ cm}$$

masse atomique de fer = 55.847 g/mol

$$\text{Volume de la cellule unitaire } a_0^3 = (2.866 * 10^{-8} \text{ cm})^3 = 23.54 * 10^{-24} \text{ cm}^3/\text{cellule}$$

Nombre d'Avogadro $N_A = 6.02 * 10^{23}$ atomes/mol

$$\rho = \frac{(2)(55.847)}{(23.54 * 10^{-24})(6.02 * 10^{23})} = 7.882 \text{ g/cm}^3$$