

**TD N°3**

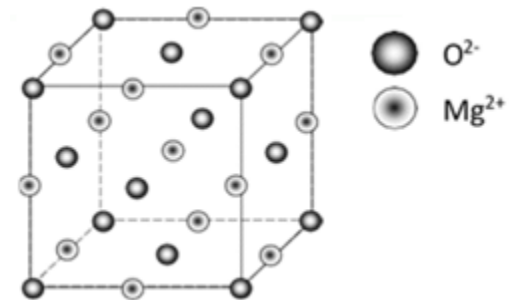
**Exercice 1**

La structure de la magnésite peut être décrite comme un empilement de deux réseaux CFC oxygène et magnésium ce qui implique que les ions se touchent le long de la cellule. En partant des rayons des atomes, calculez les densités théoriques de MgO.

Le poids atomique :  $M_{Mg} = 24.31 \text{ g/mol}$ ,  $M_O = 16 \text{ g/mol}$

Le rayon atomique :  $r_{Mg} = 126 \text{ pm}$ ,  $r_O = 86 \text{ pm}$  (pm : pico mètre =  $10^{-12} \text{ m}$ )

Structure de la magnésite (Liaison ionique)



**Exercice 2**

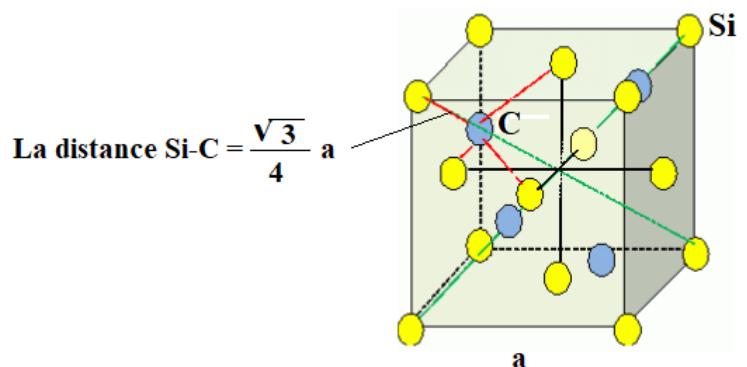
Calculez les densités théoriques de carbure de silicium SiC

Sachons que les atomes de Si se trouvent aux sommets du cube et au centre de chaque face, tandis que les atomes de C occupent les quatre des huit sites tétraédriques, ce qui donne finalement huit atomes par maille 4 atomes de Si et 4 atomes de C (contre 4 pour une structure cfc classique),

Le calcul de paramètre de maille  $a$  pour SiC (liaison covalente) est un peu plus délicat puisque les atomes se touchent le long de la diagonale de la maille de longueur  $\sqrt{3}a$ . La distance Si-C est donc égale au quart de la longueur de la diagonale du corps

Le poids atomique :  $M_{Si} = 28,09 \text{ g/mol}$   $M_C = 12 \text{ g/mol}$

Le rayon atomique :  $r_{Si} = 118 \text{ pm}$ ,  $r_C = 71 \text{ pm}$  (pm : pico mètre =  $10^{-12} \text{ m}$ )



Structure de carbure de silicium SiC

**Exercice 3**

Calculer le nombre d'atome par maille pour  $\text{SiO}_2$  sachant que :

La densité  $\rho = 2.32\text{g/cm}^3$ , paramètre de maille  $a = 0.7\text{nm}$ ,

$M_{\text{Si}} = 28.09\text{ g/mol}$ ,  $M_{\text{O}} = 16\text{g/mol}$                        $N_{\text{A}} = 6.022 \cdot 10^{23}\text{ mol}^{-1}$ .

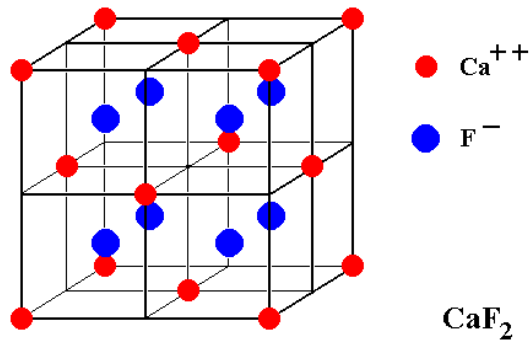
**Exercice 4**

La densité du fluorure de calcium,  $\text{CaF}_2$ , est de  $3\,180\text{ kg/m}^3$  à  $20\text{ °C}$ . Calculez la dimension du cube qui contient quatre ions  $\text{Ca}^{2+}$ .

$M_{\text{Ca}} = 40.08\text{ g/mol}$

$M_{\text{F}} = 19\text{ g/mol}$

$N_{\text{A}} = 6.022 \cdot 10^{23}\text{ mol}^{-1}$



**Exercice 5**

Une tige de laiton doit être utilisée dans une application nécessitant que ses extrémités soient maintenues rigides.

Si la tige ne présente aucune contrainte à la température ambiante de  $20\text{ °C}$ , quelle est la température maximale à laquelle elle peut être chauffée sans dépasser une contrainte de compression de  $172\text{ MPa}$ ?

Supposons un module d'élasticité pour le laiton est de  $100\text{ GPa}$ .

**Solution TD N°3**

La densité de tout solide peut être déterminée à partir d'une connaissance de la maille élémentaire.

La densité peut être calculée à partir de

$$\rho = \frac{\text{poids atomique des ions dans la maille unitaire}}{\text{volume de la maille unitaire}} = \frac{n'(\sum M_C + \sum M_A)}{V_C N_{Av}}$$

Où n' : nombre d'unités de formule dans la maille unitaire.

Mc : somme des poids atomiques de tous les cations dans la maille unitaire (ex : Na<sup>+</sup>)

MA : somme des poids atomiques de tous les anions dans la maille unitaire (ex : Cl<sup>-</sup>)

Vc : volume de la maille unitaire

N<sub>Av</sub> : numéro d'Avogadro

**Exercice 1**

Structure similaire au NaCl. Les ions O<sup>2-</sup> sont répartis selon un CFC. Les ions Mg<sup>2+</sup> se trouvent au milieu des arêtes et au centre de la maille.

Cette structure du MgO implique que les ions se touchent le long de l'arête de la maille élémentaire. (Liaison ionique)

Le paramètre de la maille est = 2r<sub>Mg</sub> + 2r<sub>O</sub> = 2(126 + 86) = 424 pm (pm : pico mètre = 10<sup>-12</sup> m)

Le poids atomique de Mg est de 24,31 g/mol. Alors que le poids atomique de O est de 16g/mol.

Comme il y a quatre ions magnésium et quatre ions oxygène dans la cellule unitaire, il s'ensuit

que :

$$\rho = \frac{4(16+24.31)}{(6.022 \times 10^{23})(424 \times 10^{-10})^3} = 3.51 \text{ g.cm}^{-3}$$

**Exercice 2**

La distance Si-C est donc égale au quart de la longueur de la diagonale du corps. Le rayon atomique de Si est de 118 pm, tandis que celui de C est de 71 pm. Il s'ensuit que :

$$\sqrt{3}.a / 4 = 118 + 71 \quad a = 436 \text{ pm}$$

Étant donné que chaque maille élémentaire contient quatre atomes de C et quatre atomes de Si, avec des poids moléculaires de 12 et 28,09, respectivement, l'application de la formule de la

densité donne :

$$\rho = \frac{4(12+28.09)}{(6.022 \times 10^{23})(436 \times 10^{-10})^3} = 3.214 \text{ g.cm}^{-3}$$

Notez que bien que les poids des atomes dans la maille unitaire soient très comparables, la densité plus faible de SiC est une conséquence directe du paramètre de réseau plus grand qui reflète la structure plus « ouverte » des solides liés par covalence.

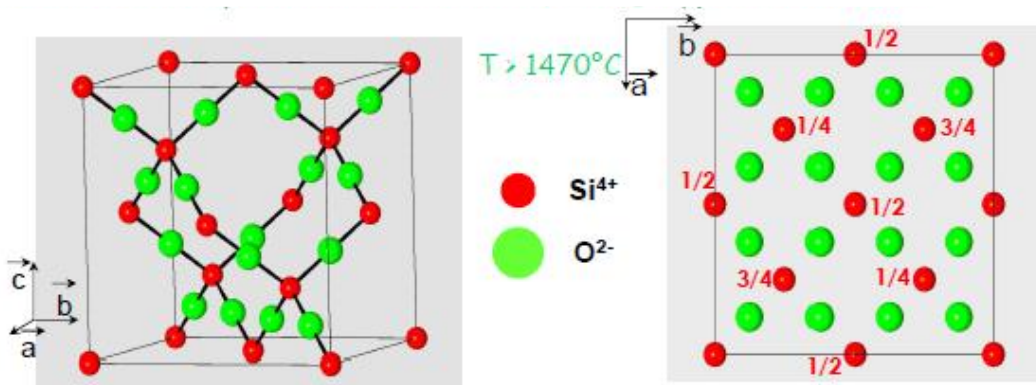
**Exercice 3**

$$\rho = \frac{\text{poids des ions dans la maille}}{\text{volume de la maille unitaire}} = \frac{n \cdot M}{V \cdot N_A} \quad n = \frac{\rho \cdot V \cdot N_A}{M}$$

$$n = \frac{2.32 \cdot (0.7 \cdot 10^{-7})^3 \cdot (6.02 \cdot 10^{23})}{28.09 + 2 \cdot 16}$$

$n = 7.97 \text{ atom/maille} = 8$

Le nombre d'atome par maille pour SiO<sub>2</sub> est 8 atome/maille



**Exercice 4**

La relation entre la densité  $d$ , la masse  $M$  et le volume  $V$  est :

$$\rho = \frac{\text{poids des ions dans la maille}}{\text{volume de la maille unitaire}} = \frac{n \cdot M}{V \cdot N_A}$$

$$V = a^3 = \frac{n \cdot M}{\rho N_A}$$

$$a^3 = \frac{4(40.08 + 2 \times 19.00)}{3180 \times 6.02 \cdot 10^{23}} = 0.163 \text{ nm}^3$$

alors :  $a = 0.5464 \text{ nm}$

**Exercice 5**

La contrainte de 172 MPa est considérée comme négative. De plus, la température initiale  $T_0$  est de 20 °C et la magnitude du coefficient de dilatation thermique linéaire ( $\alpha_L$ ) est de  $20,0 \times 10^{-6}$  (°C<sup>-1</sup>). Le module d'élasticité pour le laiton est de 100 GPa.

La contrainte de cisaillement est donnée par la relation suivante :

$$\sigma = \alpha_L \cdot E \cdot (T_f - T_0)$$

Ainsi, la résolution de la température finale  $T_f$  donne

$$T_f = T_0 - \frac{\sigma}{E \alpha_L}$$

$$T_f = 20 - \frac{-172}{(100 \times 10^3)(20 \times 10^{-6})}$$

$$T_f = 20 + 86 = 106^\circ\text{C}$$