

**Compétences visées:**

- Décrire une structure cristalline avec une maille et un motif.
- Déterminer population, coordinence, compacité et masse volumique.
- Exploiter le modèle des sphères dures tangentes.
- Comparer les structures cubiques simple, centrée, à faces centrées et hexagonale compacte.
- Relier une mesure macroscopique (masse volumique) à une échelle atomique.

Exercices :

- Comptage dans une maille cubique simple
- Rayon atomique du lithium
- Structure cubique centrée du fer
- Cuivre : compacité et masse volumique

[...]

Version Numérique :

Ce cours est disponible en **version numérique**.
Vous pouvez y accéder en scannant le **QR Code**
ci-contre :



Table des matières

I	Décrire un cristal	3
A	Réseau, nœud, maille et motif	3
B	Population et coordinence	4
II	Les grandeurs géométriques et massiques	7
A	Compacité	7
B	Masse volumique	7
III	Les structures cubiques	8
A	Cubique simple (CS)	8
B	Cubique centrée (CC)	9
C	Cubique à faces centrées (CFC)	10
IV	Synthèse des structures cubiques	11

I Décrire un cristal

A Réseau, nœud, maille et motif

📖 Définition : Cristal

Un cristal est un solide dont les constituants sont arrangés de façon périodique à longue distance. On sépare deux idées : le **réseau** est l'ensemble géométrique des positions répétées, tandis que le **motif** est l'objet (atome, ion ou groupe d'atomes) placé sur chaque position.

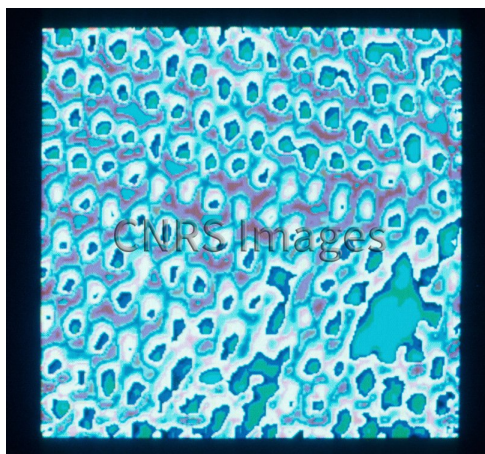


FIGURE 1 – Image par microscopie à effet tunnel d'une surface de graphite - *CNRS*

⚠ Attention : Hypothèse, modèles des sphères dures

De cette image nous pouvons dresser une hypothèse importante. On assimile chaque atome à une sphère indéformable de rayon R . Les sphères d'une même structure sont tangentes lorsque leurs centres sont voisins immédiats ; elles ne s'interpénètrent pas. Le rayon R est donc un rayon *modèle*, dépendant de la structure.

📖 Définition : Réseau et nœud

Un **réseau cristallin** est un ensemble périodique de points. Chaque point est un **nœud**. Une translation par un vecteur du réseau laisse le cristal invariant.

📖 Définition : Maille

Une **maille** est un volume élémentaire qui, répété par translations, reconstruit le réseau. La maille conventionnelle est souvent choisie pour faire apparaître la symétrie ; elle n'est pas toujours la maille de plus petit volume.

 Remarque

Dans ce cours, nous n'aborderons que les cas de mailles cubiques. On notera a l'arête du cube et donc le volume de la maille vaut $V_{\text{maille}} = a^3$.

 Propriété : Comptage des entités

Nous sommes capable de dénombrer le nombre d'entités en fonction de leur position dans la maille.

- Une entité située au sommet est partagée entre 8 mailles : elle compte pour $1/8$.
- Une entité au centre d'une face est partagée entre 2 mailles : elle compte pour $1/2$.
- Une entité au centre du volume appartient à une seule maille : elle compte pour 1.
- Une entité sur une arête compte pour $1/4$.

**Exercice 1** Compter des entités (★)

Dans une maille, il y a :

- 8 atomes sur des sommets
- 4 atomes sur des faces
- 2 atomes sur des arêtes
- 2 atomes au centre

Q1 Compter les entités.

B Population et coordinence

 Définition : Population et coordinence

La **population** N est le nombre effectif d'entités par maille, après partage.

La **coordinence** Z est le nombre de plus proches voisins d'une entité donnée. Elle décrit le voisinage, pas le nombre total d'entités de la maille.

 Methode : Compter une population

1. Repérer les positions (sommets, faces, centre, sites internes).
2. Attribuer à chaque position sa fraction de partage.
3. Additionner les contributions.
4. Vérifier que le résultat est compatible avec la formule chimique.

 Rappel

Deux sphères tangentes de même rayon ont des centres séparés de $2R$. Il faut toujours identifier la direction dans laquelle les sphères sont tangentes avant d'écrire une relation entre a et R .

Methode : Identifier la direction de tangence

- Repérer les sphères voisines dont les centres sont réellement alignés et en contact.
- Selon la géométrie, chercher un contact le long d'une arête, d'une diagonale de face ou de la diagonale du cube.
- Écrire la longueur du segment entre les centres en fonction de a , puis l'égaliser au nombre de diamètres correspondant.
- Vérifier que cette direction décrit bien l'alignement des sphères réellement tangentes.

Exercice 2 Relation rayon et arête (★ ★)

Dans le cas d'une maille cubique simple :

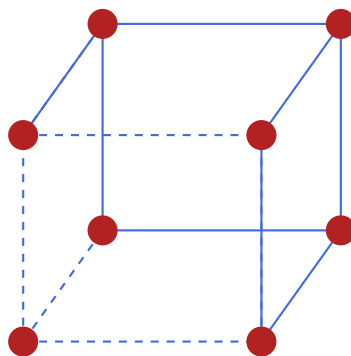


FIGURE 2 – Maille cubique simple (CS).

Q1 Quelle est la population des motifs rouges ?

Q2 Déterminer la relation entre le rayon des atomes R et l'arrête de la maille a . On pourra s'aider de théorèmes de la géométrie.

Dans le cas d'une maille cubique centrée :

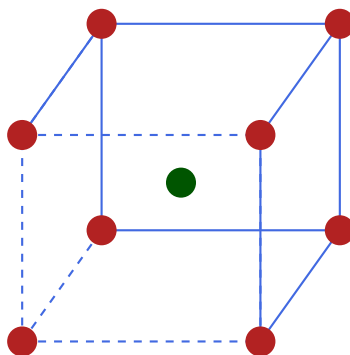


FIGURE 3 – Maille cubique centrée (CC).

Q3 Quelle est la population des motifs rouges ?

Q4 Déterminer la relation entre le rayon des atomes R et l'arrête de la maille a . On pourra s'aider de théorèmes de la géométrie.

Dans le cas d'une maille cubique à faces centrées :

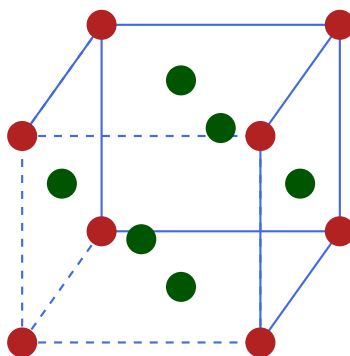


FIGURE 4 – Maille cubique à faces centrées (CFC).

Q5 Quelle est la population des motifs rouges ?

Q6 Déterminer la relation entre le rayon des atomes R et l'arrête de la maille a . On pourra s'aider de théorèmes de la géométrie.

II Les grandeurs géométriques et massiques

A Compacité

Définition : Compacité

La compacité C est la fraction du volume de la maille effectivement occupée par les sphères :

$$C = \frac{N \frac{4}{3} \pi R^3}{V_{\text{maille}}}.$$

Elle est sans unité et vérifie $0 < C < 1$.

B Masse volumique

Définition : Masse volumique d'un cristal

Si une maille contient N entités de masse molaire M , sa masse est $m_{\text{maille}} = NM/N_A$ et sa masse volumique est

$$\rho = \frac{m_{\text{maille}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{NM}{N_A V_{\text{maille}}}.$$

Methode : Relier une mesure à une structure

Convertir a en mètres, M en kg.mol^{-1} et utiliser $N_A = 6,022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$.

Pour déterminer R , calculer d'abord a à partir de ρ , puis appliquer la relation géométrique (lien entre R et a) de la structure.

III Les structures cubiques

A Cubique simple (CS)

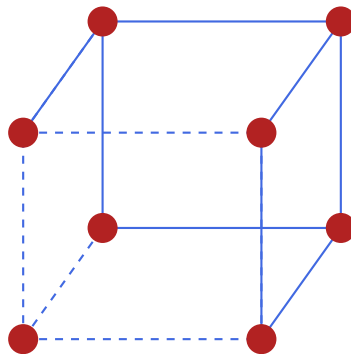
Exercice 3 Comptage dans une maille cubique simple (★)

FIGURE 5 – Maille cubique simple

Q1 Une maille CS d'arête $a = 3,50 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ contient-elle un ou huit atomes ?

Q2 Calculer sa population, son volume et sa compacité si $R = 1,75 \text{ \AA}$.

B Cubique centrée (CC)



Exercice 4

Rayon atomique du lithium (★)

Les sphères sont tangentes le long de la grande diagonale du cube, car l'atome central touche les atomes de sommet le long de cette diagonale.

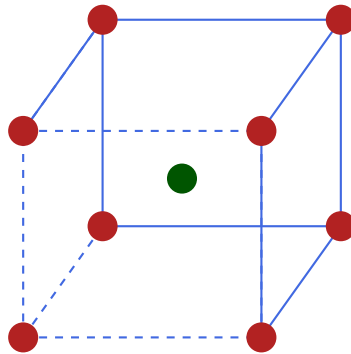


FIGURE 6 – Maille cubique centrée.

Le lithium métallique est modélisé par une structure CC, de paramètre $a = 0,351$ nm.

Q1 Déterminer R .



Exercice 5

Le fer cubique centré (★★)

À 20°C , le fer α cristallise dans une maille cubique centrée et a pour arête : $a = 286,6$ pm et $M(\text{Fe}) = 55,85$ g.mol $^{-1}$.

Q1 Calculer ρ .

C Cubique à faces centrées (CFC)



Exercice 6

Cuivre : compacité et masse volumique (★ ★)

Les sphères sont tangentes le long de la diagonale d'une face, car deux atomes de sommet opposés sur une face et l'atome au centre de cette face sont alignés et tangents.

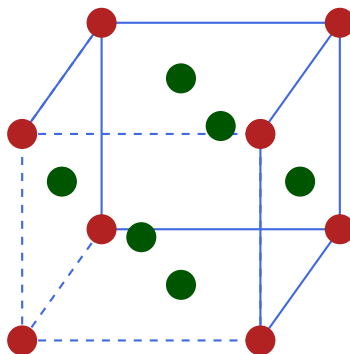


FIGURE 7 – Maille cubique à faces centrées (CFC).

Q1 Le cuivre est CFC, $R = 128$ pm et $M = 63,55$ g.mol⁻¹. Calculer a , puis ρ .



Exercice 7

Silicium, structure diamant (★ ★ ★)

Le silicium est très présent dans les matériaux du quotidien, il présente de plus, une structure hybride présentée ci-contre.



Données

$a = 543$ pm et $M = 28,085$ g.mol⁻¹,

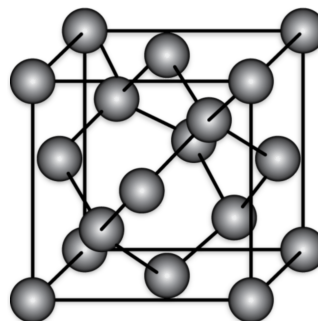


FIGURE 8 – Maille du diamant - CK12

Q1 Calculer la population des atomes de Silicium.

Q2 Calculer ρ .

IV Synthèse des structures cubiques

Structure	Population N	Coordinnence Z	Compacité	Relation $a-R$
CS	1	6	$\frac{\pi}{6} \simeq 52,4\%$	$a = 2R$
CC	2	8	$\frac{\pi\sqrt{3}}{8} \simeq 68,0\%$	$a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$
CFC	4	12	$\frac{\pi}{3\sqrt{2}} \simeq 74,0\%$	$a = 2\sqrt{2} R$



Exercice 8

Le sodium : identification d'une structure cristalline (?)

À 20 °C, on souhaite déterminer la structure cristalline du sodium métallique parmi trois hypothèses : cubique simple (CS), cubique centrée (CC) ou cubique à faces centrées (CFC).

Données

- Masse molaire : $M(\text{Na}) = 22,99 \text{ g.mol}^{-1}$
- Masse volumique mesurée : $\rho = 0,97 \text{ g.cm}^{-3}$
- Paramètre de maille mesuré par diffraction X : $a = 429 \text{ pm}$
- Rayon atomique tabulé : $R_{\text{tab}} = 186 \text{ pm}$
- Constante d'Avogadro : $N_A = 6,022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

Q1 Exprimer littéralement la masse volumique ρ d'un cristal cubique en fonction de N , M , N_A et a , puis en déduire l'expression de a en fonction de ρ , M , N_A et N .

Q2 En utilisant ρ , calculer la valeur de a que l'on obtiendrait successivement pour les structures CS, CC et CFC. Comparer ces valeurs à $a = 429$ pm et conclure sur les structures pouvant être écartées.

Q3 En utilisant à présent la valeur expérimentale $a = 429$ pm, calculer le rayon atomique R correspondant pour chacune des trois structures (CS, CC, CFC), en précisant à chaque fois la direction de tangence des atomes retenue.

Q4 Comparer les valeurs de R obtenues à $R_{\text{tab}} = 186$ pm. En déduire la structure cristalline la plus probable du sodium.

Q5 Calculer la compacité du sodium dans la structure retenue et commenter sa valeur par rapport à celle d'une structure CFC ($C \approx 74\%$).

Q6 Dessiner cette structure.

**Exercice 9****Métal inconnu : exploitation d'une mesure (★ ★ ★)**

Un métal pur de masse molaire $M = 58,69 \text{ g.mol}^{-1}$ possède $\rho = 8,90 \text{ g.cm}^{-3}$ et un rayon modèle $R = 125 \text{ pm}$. Déterminer, parmi CS, CC et CFC, la structure compatible avec ces données.