



TD CH3 – SOLIDES CRISTALLINS

D.Malka – MPSI 2018-2019 – Lycée Jeanne d'Albret

CH1 – Le lithium et son oxyde

Données :

- masse molaire du lithium $M_{Li} = 6,9 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$,
- masse molaire de l'oxygène : $M_O = 16,0 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$,
- masse volumique du lithium métallique : $\rho = 500 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$,
- rayon ionique de l'ion l'oxygène : $r_1 = 140 \text{ pm}$,
- rayon ionique de l'ion lithium : $r_2 = 76 \text{ pm}$.

1. A quelle famille le lithium appartient-il ?
2. Le lithium métallique cristallise suivant la structure cubique centrée (fig.1). On note a l'arête de la maille.

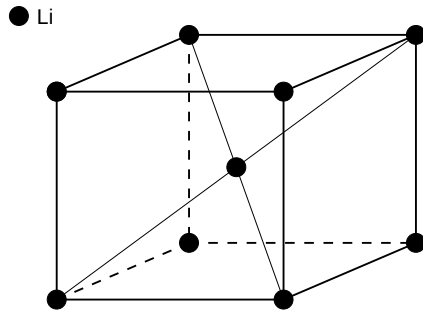


FIGURE 1 – Lithium métallique

- 2.1 Donner la coordinence Li/Li de chaque atome de lithium.
- 2.2 Calculer la compacité de la structure.

2.3 Déterminer le paramètre de maille a du lithium métallique.

3. La combustion du lithium forme de l'oxyde de lithium. On propose, pour cet oxyde, les structures cristallines représentées fig.2.

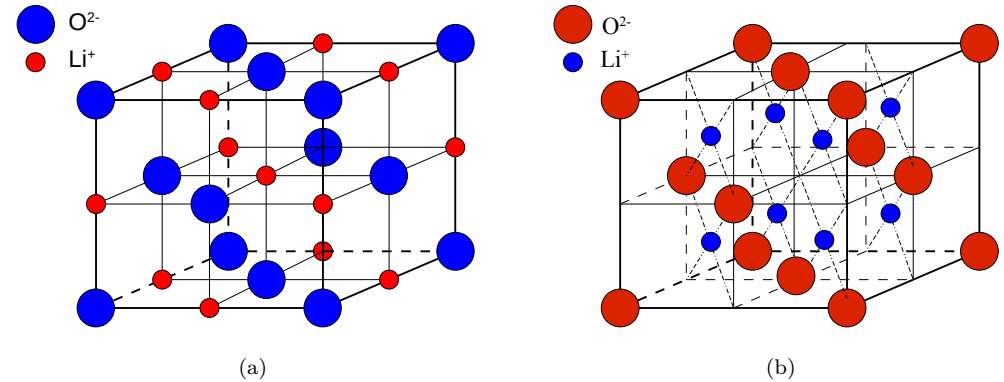


FIGURE 2 – Structures cristallines proposées pour l'oxyde de lithium

- 3.1 Quelle est la seule structure cristalline envisageable parmi les deux proposées ? Donner alors la formule statistique de l'oxyde de lithium.
- 3.2 Dans la structure cristalline retenue, quel réseau forme les ions O^{2-} ?
- 3.3 Comment se nomment les sites occupés par les ions Li^+ ?
- 3.4 En supposant le contact anion-anion, déterminer la taille des sites occupés par les ions Li^+ . Les ions O^{2-} sont-ils en contact ?

CH2 – Alliage Titane-Aluminium-Nickel

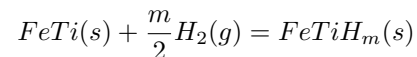
Un considère l'alliage de formule de statistique $Al_xNi_yTi_z$. Le titane y cristallise suivant le réseau cubique faces centrées. Le paramètre de maille du cristal vaut $a = 589$ pm.

Atome	Rayon atomique en pm	Masse molaire en $g \cdot mol^{-1}$
Ti	147	47,90
Al	143	26,98
Ni	124	58,70

1. Représenter la maille du réseau, les nœuds ainsi que les atomes de titane appartenant à cette maille.
2. Y-a-t-il contact entre atomes de titane plus proches voisins ?
3. Montrer qu'il est envisageable que les atomes d'aluminium et de nickel occupent les sites interstitiels du réseau.
4. Compléter alors la maille en supposant que tous les sites sont occupés et donner la formule statistique de l'alliage.
5. Dans l'aéronautique, cet alliage se substitue à l'acier ordinaire de masse volumique $\rho = 7800$ $kg \cdot m^{-3}$. Proposer une explication.

CH3 – Stockage du dihydrogène

Le composé intermétallique $FeTi$ peut-être utilisé pour stocker du dihydrogène par adsorption :



L'alliage $FeTi$ a une structure cubique simple : la maille élémentaire est cubique et comporte un atome de titane à chaque sommet du cube et un atome de fer au centre du cube.

- Masses molaires atomique en $g \cdot mol^{-1}$: $H : 1,0$, $Fe : 55,8$, $Ti : 47,9$.
- Paramètre de la maille cubique du $FeTi$: $a = 298$ pm.

1. Représenter cette maille élémentaire.
2. Localiser les sites pouvant accepter un atome d'hydrogène sachant que la coordinence H/Fe vaut 2 et la coordinence H/Ti vaut 4.
3. Donner alors la formule stœchiométrique de l'hydrure $FeTiH_m$ contenant un maximum théorique d'hydrogène.

4. En réalité, l'adsorption maximale conduit à l'hydrure $FeTiH_{1,9}$. En admettant que la maille reste cubique, calculer alors la capacité volumique d'absorption de dihydrogène par le composé intermétallique $FeTi$ en kg d'hydrogène par m^3 d'hydrure.

CH4 – La glace (I)

La glace ordinaire, variété stable à 273 K et sous 1 bar, est la glace (I). Sa structure est hexagonale. Les atomes d'oxygène des molécules d'eau occupent les nœuds du réseau hexagonal compact mais ne sont pas tangents entre eux. Par ailleurs un site tétraédrique sur deux est occupé par un atome d'oxygène de la molécule d'eau. La structure est représenté fig.3.

Données :

- longueur de la liaison $O - H$: $d_{O-H} = 98$ pm,
- masse molaire de l'eau : $M_{H_2O} = 18,0$ $g \cdot mol^{-1}$,
- nombre d'Avogadro : $N_A = 6,02 \times 10^{23}$.

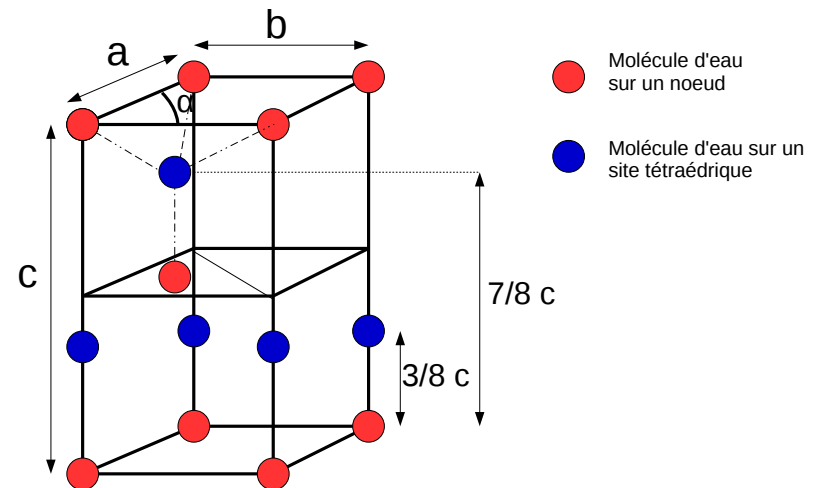


FIGURE 3 – Glace (I). $a = b = 451$ pm, $c = 736$ pm et $\alpha = 60^\circ$.

1. Déterminer la population de la maille.
2. Calculer la masse volumique de la glace (I). Commenter.
3. Déterminer la distance r_{H_2O} entre une molécule d'eau et ses plus proches voisines.
4. Sachant que dans la glace les molécules d'eau sont liées par des liaisons hydrogène :
 - 4.1 Expliquer la température de fusion de la glace (I).
 - 4.2 Représenter deux molécules d'eau plus proches voisines et en déduire la longueur l des liaisons hydrogènes dans la glace(I). Commenter.