



Chapitre 3 : Les cristaux métalliques

1. Assemblages compacts et pseudo-compact

EX 1-1 : empilement compact

Le titane « Ti », de rayon $r_{Ti} = 0,148 \text{ nm}$, cristallise dans un empilement hexagonal compact (HC), stable à température et pression ordinaires.

- 1) Décrire cet empilement en termes d'empilement de couches compactes.
- 2) Représenter une projection cotée de la maille HC dans le plan (a,b).
- 3) En se limitant à une seule maille, représenter la trace des atomes sur le premier plan après celui de l'origine de la famille (002).
- 4) Etablir les expressions puis calculer :
 - i) les paramètres (en cm) et le volume (en cm^3) de maille HC,
 - ii) le volume molaire du titane dans cette structure.

On donne :

Masse molaire atomique : $M_{Ti} = 47,90 \text{ g.mol}^{-1}$.

Constante d'Avogadro : $N_A = 6,02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$.

Conversion : $1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$.

Ex 1-2 : projection d'une maille et de son contenu sur un plan réticulaire

Le cuivre et le zinc cristallise respectivement dans des structures cubique à faces centrées et hexagonale compacte supposé idéale.

- 1) Représenter ces deux structures en perspective et donner leur projection cotée sur le plan (002) le plus proche après celui de l'origine.
- 2) Sachant que les rayons atomiques du cuivre et du zinc sont respectivement $1,28 \text{ \AA}$ et $1,32 \text{ \AA}$, calculer les paramètres des deux mailles.

Ex 1-3 : maille CFC-sites-

A la température ambiante le calcium cristallise dans un réseau cubique à faces centrées. La valeur du paramètre de la maille « a » est $5,576 \text{ \AA}$.

- a) Donner les coordonnées réduites des atomes de calcium dans cette structure.
- b) Représenter la projection cotée de cette structure sur le plan (a,b).
- c) Déterminer le nombre d'atomes de calcium par maille.
- d) Donner l'expression puis calculer :
 - i) le rayon de l'atome de calcium.
 - ii) la compacité du calcium dans cette structure.
 - iii) la masse volumique.
- e) Rappeler les positions des sites octaédriques (sites (O)) dans cette structure.
 - i) En déduire leurs coordonnées réduites.
 - ii) Dénombrer ces sites (comparer ce résultat au nombre d'atomes de calcium par maille).
 - iii) Etablir l'expression puis calculer le rayon maximum de l'atome qui pourrait s'insérer dans un site (O) sans déformer le réseau.
- f) Représenter en perspective la maille et son contenu.
 - i) Hachurer la trace du plan (001) le plus proche de l'origine sur la maille dessinée.
 - ii) Quelle est, en fonction de « a », la distance la plus courte entre deux atomes appartenant à ce plan ?
 - iii) Ce plan est-il compact ? Justifier.
- g) Représenter en perspective une autre maille et son contenu et matérialiser le site tétraédrique dont l'un des sommets est l'atome situé à l'origine.
 - i) Sachant que l'atome situé à l'origine appartient à un plan d'une série (hkl), les trois autres appartiennent au plan suivant de la même famille de plans réticulaires. Préciser alors les indices de Miller de cette série de plans.
 - ii) Donner l'expression puis calculer la distance réticulaire séparant les plans de cette famille.

Données :

Masse molaire atomique : $M_{Ca} = 40 \text{ g.mol}^{-1}$.

Constante d'Avogadro : $N_A = 6,02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$.



2. Alliages

Ex 2-1 : alliage Ag-Au

L'argent métallique cristallise dans un réseau cubique à faces centrées. On peut envisager la formation des solutions solides d'insertion ou de substitution.

1) Déterminer la valeur maximale des rayons des atomes pouvant occuper les sites octaédriques et tétraédriques admissibles dans cette structure sans déformation.

On considère l'alliage argent-or de fraction massique $W_{Au} = 0,1$ sachant que :

$$W_{Au} = \frac{m_{Au}}{m_{Au} + m_{Ag}}$$

où m_i désigne la masse de « i ».

2) S'agit-il d'une solution solide d'insertion ou de substitution ? Justifier la réponse.

3) Quelle est la valeur de la fraction molaire x_{Au} ?

4) Calculer la masse volumique de cet alliage en admettant aucune déformation de la structure métallique de l'argent.

On donne :

Les rayons atomiques (pm) : Ag = 144, Au = 147.

Les masses molaires atomiques en (g.mol⁻¹) : Ag : 107,87, Au : 196,97.

Ex 2-2 : alliage Fe-Ti

L'alliage métallique FeTi est constitué d'une maille cubique avec un atome de titane à chaque sommet et un atome de fer au centre.

1) Donner une représentation en perspective de cette maille et de son contenu.

Dans les composés intermétalliques FeTi, seuls les sites formés par deux atomes de fer et quatre atomes de titane peuvent être occupés par des atomes d'hydrogène.

2) Représenter à partir d'une maille cubique simple d'atomes de titane, les positions des atomes de fer et les sites octaédriques susceptibles d'accueillir des atomes d'hydrogène.

3) En déduire la formule stœchiométrique de l'hydruure contenant le maximum théorique d'hydrogène.

Données :

Paramètre de la maille cubique FeTi : $a = 298$ pm.

Constante d'Avogadro : $N_A = 6,02 \times 10^{23}$ mol⁻¹.

Ex 2-3 : le carbure de zirconium

Le zirconium (Zr) possède une variété cubique à faces centrées stable au-dessus de 1150 K de paramètre $a = 4,53$ Å et de masse volumique $\rho = 6,55$ g.cm⁻³.

1) Établir l'expression puis calculer :

a) le rayon atomique du zirconium.

c) les rayons des sites interstitiels.

2) Un carbure de zirconium obtenu par insertion du carbone dans les interstices du réseau cubique contient 6,17% en masse de carbone.

a) Déterminer la formule de ce carbure.

b) Proposer une localisation des atomes de carbone dans le réseau de zirconium.

c) Déterminer le taux d'occupations des sites.

On donne :

Masses molaires (g.mol⁻¹) : Zr = 91,23 ; C = 12.

Rayon atomique du carbone : $r_C = 0,77$ Å.

Ex 2-4 : alliage cuivre-or

L'or pur (Au) cristallise dans un système compact. Le volume de sa maille est $V_{maille} = 68,9$ Å³ et sa masse volumique vaut 19,32 g.cm⁻³.

1) Calculer le nombre d'atomes par maille et en déduire le type d'empilement et le rayon atomique de ce métal.



2) L'or forme avec le cuivre (Cu) un alliage contenant 8,33% en masse de cuivre. Sachant que le rayon métallique du cuivre est de $1,28 \times 10^{-10} \text{ m}$, quelle serait la formule chimique de cet alliage dans le cas de chacun des deux mécanismes suivants :

- a) Insertion du cuivre dans la structure de l'or ?
- b) Substitution de l'or par le cuivre ?

3) Calculer la masse volumique pour chacun de ces mécanismes (on supposera négligeable la variation de l'arête de la maille en fonction de la quantité de cuivre si celle-ci reste inférieure à 30%). En déduire le mécanisme réel, sachant que la masse volumique expérimentale vaut $16,40 \text{ g.cm}^{-3}$.

4) Pouvait-on s'attendre à ce résultat sans faire de calcul ? Justifier votre réponse.

Données :

Masses molaires atomiques en (g.mol^{-1}) : Au = 197,0 et Cu = 63,5.

Constante d'Avogadro : $N_A = 6,02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$.

Conversions : $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m} = 10^{-8} \text{ cm}$.