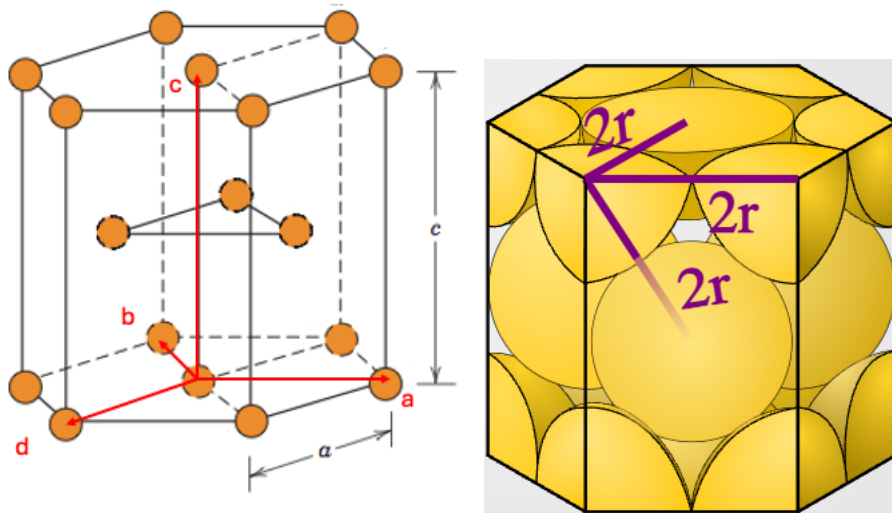


Exercice 1 : Plan de compacité

L'objectif de cet exercice est de comparer la compacité du plan $(0\ 0\ 0\ 1)$ et du plan $(0\ \bar{1}\ 1\ 0)$ d'un system hexagonale compact.



1) Dans le plan $(0\ 0\ 0\ 1)$:

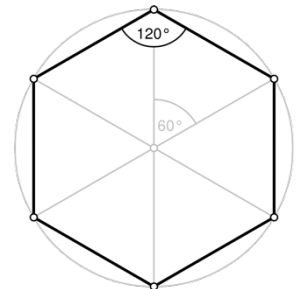
a. Calculer le nombre d'atome dans ce plan.

$$N = 6 \times \frac{1}{3} + 1 = 3$$

b. Calculer la surface du plan.

On a 6 triangles equilatéraux :

$$S_{plan} = 6 \times \left[\frac{1}{2} \times (2r)^2 \sin 60^\circ \right] = 6\sqrt{3}r^2$$



c. Calculer la compacité du plan.

$$c = \frac{N \times S_{atome}}{S_{plan}} = \frac{3\pi r^2}{6\sqrt{3}r^2} = 91\%$$

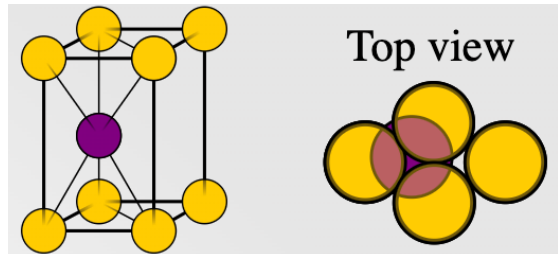
2) Dans le plan $(0\ \bar{1}\ 1\ 0)$:

a. Calculer le nombre d'atome dans ce plan.

$$N = 4 \times \frac{1}{4} = 1$$

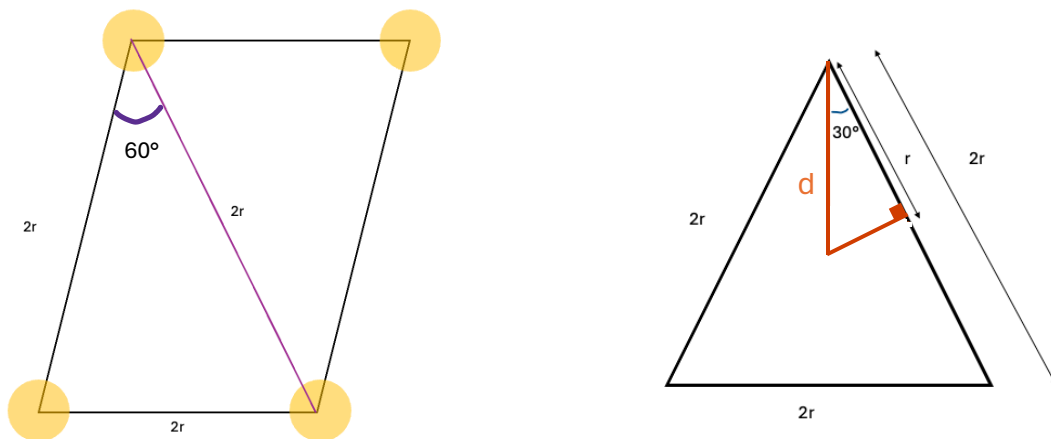
b. Calculer la surface du plan.

Vous pouvez diviser la structure hexagonale en 3 pseudo-maille comme celle illustrée ci-dessous.



Pour connaître la hauteur du plan, vous pouvez utiliser la distance entre l'atome du milieu de la pseudo-maille et la face supérieure ou inférieure.

D'après la vue du dessus, on remarque que l'atome du milieu de maille est centré entre 3 atomes formant un triangle équilatéral. On isole le triangle équilatéral et on calcule d , la mi-hauteur de ce triangle :



$$\cos 30^\circ = \frac{r}{d}$$

$$d = \frac{2}{\sqrt{3}}r$$

Nous pouvons maintenant calculer h , la mi-hauteur :

$$(2r)^2 = d^2 + h^2$$

$$h = \sqrt{4r^2 - d^2} = \sqrt{4r^2 - \frac{4}{3}r^2} = \sqrt{\frac{8}{3}}r$$

Donc :

$$S_{plan} = 2h \times 2r = 8 \sqrt{\frac{2}{3}}r^2$$

c. Calculer la compacité du plan.

$$c = \frac{N \times S_{\text{atome}}}{S_{\text{plan}}} = \frac{\pi r^2}{8\sqrt{\frac{2}{3}}r^2} = 48\%$$

3) Comparer la compacité des 2 plans.

Exercice 2.

A) Le tableau présente les paramètres pour les réseaux cubiques centrés sur les faces de différents atomes, ainsi que les dimensions de ces atomes. Calculez la compacité de ces structures et expliquez pourquoi la compacité du diamant et du silicium est bien inférieure à la compacité maximale du réseau à facettes, tandis que la compacité des métaux est proche du maximum.

Pour calculer la compacité, nous utiliserons la formule suivante :

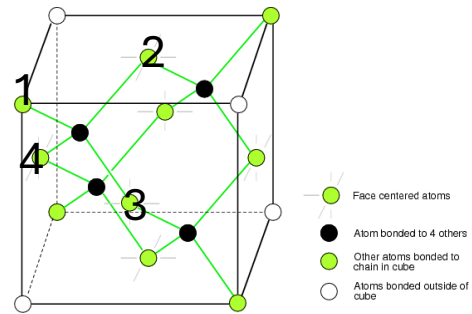
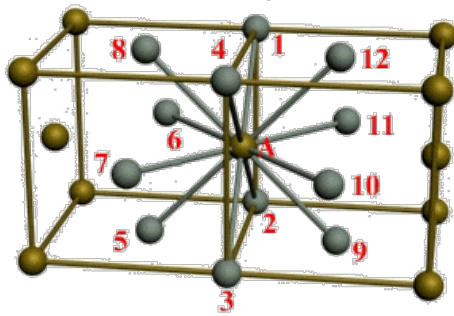
$$\text{Compacité, \%} = \frac{V_{\text{atome}} \cdot N_{\text{atomes}}}{V_{\text{cellule}}} \cdot 100\% = \frac{\frac{4}{3}\pi R^3 \cdot N_{\text{atomes}}}{a^3} \cdot 100\%$$

	Paramètre de réseau, nm	Rayon atomique, nm	Nombre d'atomes dans une cellule	Compacité, %
Cu	0.363	0.128	4	73.4
Al	0.405	0.143	4	73.8
C (diamant)	0.357	0.077	8	33.6
Si	0.543	0.115	8	31.8

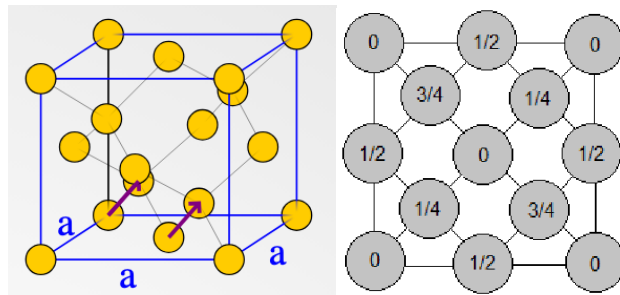
La dernière fois (Exercice 3, point 2.1), nous avons calculé que la compacité maximale d'un réseau à faces centrées est de 74%.

Pour le diamant et le silicium, la compacité est une valeur plus de 2 fois inférieure au maximum. Cela s'explique par le fait que les atomes de carbone du diamant sont reliés par des liaisons covalentes : chaque atome utilise ses 4 électrons de valence (hybridation sp^3) pour former des liaisons sigma covalentes avec 4 voisins. Les métaux sont caractérisés par une autre liaison, la liaison métallique, qui est formée par l'interaction d'un gaz d'électrons composé d'électrons de valence avec des ions métalliques chargés positivement, qui sont en équilibre dynamique avec des atomes non chargés. Ainsi, les métaux ont un nombre de coordination élevé (12 pour le cuivre et l'aluminium, figure à

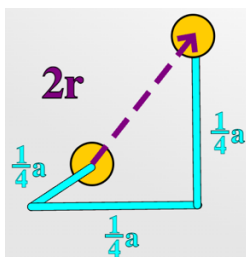
gauche) par rapport au carbone (4, figure à droite), ce qui explique la compacité élevée du métal, proche de la valeur maximale de 74 %.



B) En réponse à la question A), considérons le schéma de réseau ci-dessous pour la structure cristalline d'un diamant cubique, dont la base est composée de deux atomes avec les coordonnées (0, 0, 0) et (1/4, 1/4, 1/4) qui se touchent (la direction violette). Calculez la compacité théorique pour une structure donnée.



Solution :



$$1. \quad 2r = \sqrt{\left(\frac{a}{4}\right)^2 + \left(\frac{a}{4}\right)^2 + \left(\frac{a}{4}\right)^2}$$

$$2. \quad r = \frac{a\sqrt{3}}{8} \Rightarrow a = \frac{8r}{\sqrt{3}}$$

$$3. \quad \text{Compactness} = \frac{V_{\text{atome}} \cdot N_{\text{atomes}}}{V_{\text{cellule}}} \cdot 100\% = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3 \cdot 8}{a^3} \cdot 100\% = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3 \cdot 8}{\left(\frac{8r}{\sqrt{3}}\right)^3} \cdot 100\% = 34\%$$

Exercice 3 : Diagramme de phase

- 1) Donner une définition du mot « phase ».

Une phase est une partie d'un système thermodynamique avec la même composition chimique et le même état physique.

- 2) Quelles sont les variables présentes sur un diagramme de phase ?

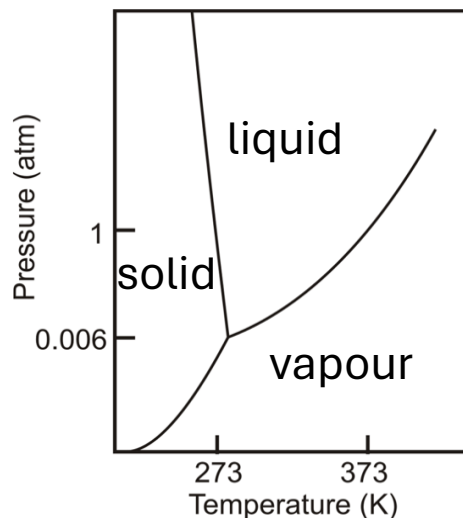
Les variables sont la température (T), la pression (P) et la composition du système (X).

- 3) Combien des constituants et de phases, y a-t-il dans ces systèmes :

- L'eau sucrée : *Il y a deux constituants, l'eau et le saccharose, et une phase, la solution de saccharose et eau.*
- Une solution super saturée de sel : *Il y a trois constituants (eau, sodium, chlore) et deux phases (la solution d'eau contenant les ions de sodium, le chlore et le chlorure de sodium solide).*
- L'eau à 0.01 °C et 0.006 atm : *A ces valeurs de pression et de température, l'eau est à son point triple, ça veut dire qu'il y a la coexistence de ces trois états : solide, liquide et gazeuse. Donc, il y a un constituant (l'eau) et trois états.*

- 4) A quelle substance peut être associé le diagramme de phase ci-dessous ?

Indiquer les phases de chaque zone et les points principaux : Le diagramme montré est le diagramme de phase de l'eau. Il est clair que la dérivée est négative pour la courbe de fusion/solidification et positive pour la courbe de solidification/vaporisation à 1 atm.



- 5) Énoncé la règle de Gibbs à propos des degrés de liberté.

$$N_{DL} = 2 + N_C - N_P$$

(T, p)

Le nombre de degrés de liberté N_{DL} d'un système est égal à 2 (pression et température), plus le nombre N_C des constituants, moins le nombre de phases présentes N_P .

Exercice 4 : Diagramme de phase d'un système binaire

Le graph ci-dessous montre un diagramme de phase Au-Si.

- 1) En partant du point X, expliquer ce qu'il passe lorsque le système refroidit jusqu'à 300°C.
- 2) En partant du point Y, expliquer ce qu'il passe lorsque le système refroidit jusqu'à 300°C.
- 3) En partant du point Z, expliquer ce qu'il passe lorsque le système chauffe jusqu'à 1100°C.

