

Grandeurs caractéristiques cristallines

* Les mailles cristallines ont un grand nombre de grandeurs par les caractérisées (Casalot p49 @ Prepa)

* Population: nombre de motifs présents dans une maille

↳ Elle permet de donner la formule du cristal

↳ si elle vaut 1 \Rightarrow maille primitive

↳ si elle est $> 1 \Rightarrow$ maille multiple

• Exemple: cf = "Structure NaCl"

⚠ \pm Il faut faire attention au poids de chaque nœud (Sommet = $1/8$)

* Paramètre de maille

• c'est la longueur des arêtes de la maille

• et les angles entre ces trois arêtes

↳ on peut les déterminer par "diffraction aux rayons X"

* Coordination: nombre de plus proche voisins pour un atome

↳ elle peut changer en fonction de la position

↳ pour NaCl elle vaut 6

* Masse volumique:

$$\mu = \frac{m}{V} = \frac{4 \times M_{Na} + 4 \times M_{Cl}}{V_{maille} \times cPa} = 4 \cdot \frac{M_{Na} + M_{Cl}}{a^3 \cdot cPa} = 2,163 \text{ kg} \cdot \text{L}^{-1}$$

$564 \cdot 10^{-10} \text{ m}$

• Elle est beaucoup plus grande pour les métaux

* Compacité :

- C'est le volume occupé par les atomes

$$C = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi \cdot r_{Na}^3 + \frac{4}{3} \pi r_{Cl}^3}{a^3} = 0,64$$

- La compacité maximale est de 0,73, c'est celle qu'on obtient par des métaux en cfc ou hexagonal compact.

$$\hookrightarrow C = 4 \times \frac{4}{3} \pi \frac{r^3}{a^3}$$

Or il y a tangence par $4r = a\sqrt{2}$ (diagonale face)

$$\Rightarrow C = \frac{\pi\sqrt{2}}{6} = 0,73$$

* Par les solides métalliques on peut avoir tangence avec n'importe quel atome,

* Par les solides ioniques, il y a tangence entre un anion et un cation.

↳ deux ions du même signe ne peuvent pas se toucher.

• Par NaCl: tangence sur une arête:

$$\hookrightarrow 2(r_{Na} + r_{Cl}) = a$$

Non tangence sur une diagonale

$$\hookrightarrow 4r_{Cl} < a\sqrt{2} \Leftrightarrow a/r_{Cl} > 4/\sqrt{2}$$

$$\Rightarrow \frac{r_{Na}}{r_{Cl}} + 1 = \frac{1}{2} a/r_{Cl} \Rightarrow \frac{r_{Na}}{r_{Cl}} > \frac{1}{2} \frac{4}{\sqrt{2}} - 1 = \sqrt{2} - 1 = 0,41$$