

Modèle du cristal parfait

Slim

13 avril 2025

Résumé

1 Introduction

Leçon de Limonet et Usala, ENS

2 Déroutement de la leçon

- Maille élémentaire
- Nombre de motifs et masse volumique. Établir la formule pour la masse volumique $\rho = \frac{NM_{molaire}}{N_a a^3}$
- Coordinence, calculer pour le cas du CFC. Il faut démontrer que les 12 centres des atomes qui entourent un atome sont à $\frac{\sqrt{2}a}{4}$, c'est à dire qu'ils sont en contact. On parle ici d'un cristal avec des liaisons métalliques (partage des électrons). On a des sphères dures en contact. On illustre dans un deuxième temps avec le logiciel et les modèles 3D.
- Compacité. On calcule pour le CFC, $C = \frac{\sqrt{2}\pi}{6} = 0,74$
- Sites interstitiels. On parle d'abord du site tétraédrique et on illustre avec le diamant. Avec le logiciel 3D on montre que c'est un CFC avec la moitié des sites tétraédriques occupés. On a que des atomes de carbone avec des liaisons covalentes ; 4 liaisons par carbone. Attention, ce n'est pas une maille CFC. Le cristal de diamant est moins compacte que le CFC.
- On parle ensuite des sites octaédriques dans le CFC. On illustre avec le cristal de NaCl dont les Cl^- sont au centre d'un octaèdre de Na^+ et réciproquement. On peut noter au passage que la coordinence est de 6 pour les Na^+ et aussi de 6 pour les Cl^- . On est plus dans le cas d'un CFC. On a deux mailles CFC enchevêtrées. Le NaCl est un cristal ionique.
- On note les limites du modèle. Notamment le fait de considérer des sphères solides pour les atomes ce qui est acceptable pour les exemples donnés mais devient vite faux.
- Mesure de la densité du cuivre qui confirme l'adéquation entre la masse volumique et la structure CFC. Si on considère que 4 est donné par la mesure de cristallographie, on est obligé d'avoir une compacité de 0,74 (ou 4 atomes par mailles) pour être en accord avec les mesures de densité.
- En conclusion, on peut rappeler qu'on a vu 3 formes de liaisons dans le cristal, la 4ème étant les forces moléculaires (cf slide en bonus). un modèle fonctionne bien pour les liaisons métalliques et certaines covalentes et ioniques.

3 Manipe

Mesure de la masse volumique du cuivre. (F. Dunac, JF Le Maréchal, "Expériences de chimie, aspects pédagogiques et séquences d'enseignement, Dunod 2019, page 129)

On mesure le volume du cuivre dans une fiole jaugée.

- peser le morceau de cuivre
- Peser une fiole jaugée de 50 ou 100ml pleine d'eau distillée.
- peser la fiole pleine d'eau avec le cuivre dedans

On a la relation suivante

$$\begin{aligned} \rho_{Cu} &= \frac{M_{Cu}}{V_{Cu}} = \frac{M_{Cu}}{V_{eau-avant} - V_{eau-apres}} = \rho_{eau} \frac{M_{Cu}}{M_{eau-avant} - M_{eau-apres}} \\ &= \rho_{eau} \frac{M_{Cu}}{M_{eau+fiote} - M_{fiote} - (M_{eau+fiote+cuivre} - M_{fiote} - M_{cuivre})} \\ &= \rho_{eau} \frac{M_{Cu}}{M_{eau+fiote} - M_{eau+fiote+cuivre} + M_{cuivre}} \end{aligned}$$

Faire la manipe avec 3 ou 4 fioles pour faire une statistique des résultats ou un calcul d'incertitude.

Matériel

- 4 fiole jaugées de 100ml
- 4 bâtonnets de cuivre (environ 14g)
- une pipette pasteur
- une balance de précision
- un ordinateur

4 Commentaires

- Faire les dessins au tableau puis illustrer avec les modèles 3D en plastique et sur l'ordi.
- Maîtriser le développement des calculs de base. Cela doit sortir comme une poésie. Dans cette leçon il s'agit de la compacité du CFC et du lien entre masse volumique et côté a de la maille.
- On peut garder sous le coude le discussion sur la transition de phase des deux formes allotropiques du fer γ en CFC à chaud et α en CC à température ambiante ([slide ici](#)).
- Ne pas parler de la maille HC et de sa compacité équivalente à celle du CFC.
- Ne pas faire les 2 chapitre modèle et liaison. Introduire les différentes liaisons en exemples dans la description des cristaux. On prendra l'exemple du diamant pour pour illustrer les sites tétraédriques et les liaisons covalentes et le NaCl pour illustrer les sites octaédriques et les liaisons ioniques. La liaison métallique est illustrée les le CFC du Cu.
- Ne pas oublier de préciser les limitation du modèle à ls fin et pas au début. Parmi celles-ci, ne pas oublier qu'on considère des sphères solides. C'est valide pour les métaux (cristal métallique Cu en CFC et Mg en CC). C'est encore vrai pour le cristal ionique (NaCl) mais cela n'est plus correct avec de plus grosse molécules ioniques ou covalentes ou les orbitales moléculaires ne sont plus des sphères.
- Augmenter les marge d'erreur sur les mesures de masses pour que cela soit cohérent avec la valeur théorique de la densité de Cu. Prendre la caleur de Cu de la littérature qui nous arrange.

5 Biblio

- Logigicel 3D [Vesta](#)
- [Base de donnée pour les cristaux](#)