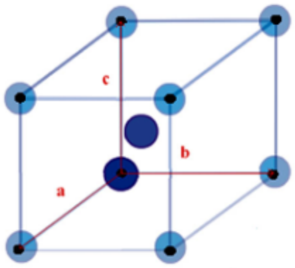
SVT - 1 EnSci Activité **C2_1**	Les propriétés d'une maille cristalline : le cristal de fer	Exemple

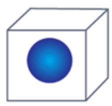
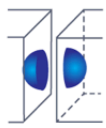
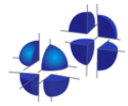
Objectifs de connaissance	Maille d'un cristal, multiplicité, masse volumique, compacité
Objectifs de capacités	Pour chaque réseau (cs et cfc) : représenter la maille en perspective cavalière ; déterminer la compacité dans le cas d'entités chimiques sphériques tangentes ; dénombrer les atomes par maille et calculer la masse volumique du cristal.

Un cristal est un assemblage d'atomes constitué par la répétition d'une maille élémentaire de structure géométrique. La maille d'un cristal possède des propriétés fondamentales qui ont des conséquences sur la structure et les propriétés du cristal. Nous allons déterminer les propriétés fondamentales d'une maille cristalline : le cristal de fer.

1. Dessin de la maille en perspective cavalière

Il s'agit d'une maille cubique centrée : un cube dont les sommets sont des atomes de fer avec un atome de fer en plus au centre (voir doc. 3 p.32 pour les noms des types de réseaux cristallins)



Emplacement de la sphère dans la maille	Nombre de mailles partageant la sphère	Contribution de la sphère à la maille
Au centre 	1	1
Sur une face 	2	$\frac{1}{2}$
Sur une arête 	4	$\frac{1}{4}$
Sur un sommet 	8	$\frac{1}{8}$

2. Calcul de la multiplicité de la maille

En utilisant le tableau page 34 (reproduit ci-contre), on peut préciser la contribution de chaque atome à la maille du cristal de fer :

- Les 8 atomes situés aux sommets du cube contribuent chacun pour 1/8ème (en effet, chacun d'eux est potentiellement partagé par 8 mailles)
- L'atome situé au centre du cube est entièrement inclus dans la maille : il contribue donc pour 1 atome.

Bilan : la multiplicité de la maille du cristal de fer est donc
$Z = 8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$

3. Calcul de la masse volumique de la maille

La maille du cristal de fer étant cubique, son volume est donné par la formule $V_{maille}=a^3$ avec a = arête de la maille cubique. Dans le cas du fer l'arête de la maille a une longueur de 0,287 nm soit $0{,}287.10^{-9}$m ou encore $0{,}287.10^{-7}$cm

Tous les atomes contenus dans la maille sont des atomes de fer de masse molaire M_{Fe} 55,8 g/mol. Or une mole contient par définition N atomes avec N (Nombre d'Avogadro) = $6{,}022.10^{23}$

La masse d'un atome de fer est donc $m_{Fe} = \frac{M_{Fe}}{N}$

Une maille contient Z atomes (Z est la multiplicité de la maille)
La masse de la maille est donc donnée par la formule $m_{maille} = Z \frac{M_{Fe}}{N}$

Finalement, la masse volumique ρ de la maille du cristal de fer est donnée par :
$\rho = \frac{m_{maille}}{V_{maille}} = \frac{Z\, M_{Fer}/N}{a^3}$

Application numérique :
$\rho = \frac{m_{maille}}{V_{maille}} = \frac{2 \text{ x } 55{,}8/(6{,}02.10^{23})}{(0{,}287.10^{-7})^3}$
soit
$\rho = \frac{m_{maille}}{V_{maille}} = \frac{18{,}53.10^{-23}}{0{,}0236.10^{-21}} = 785.10^{-2} g/m^3$

La masse volumique du cristal de fer est donc de **7,85 g.cm^{-3}**
(cela veut dire que dans ce cristal, la matière et 7,85 fois plus compacte que dans l'eau liquide !)

4. Calcul de la compacité de la maille

La compacité C de la maille mesure la proportion du volume total de la maille qui est occupée par les atomes (elle n'a pas d'unité et est comprise entre 0 et 1, ou 0% et 100%). Elle se calcule ainsi :
$C = \frac{\text{Volume occupé par les atomes situés dans la maille}}{\text{volume de la maille}}$

La maille du cristal de fer étant cubique, son volume est donné par la formule $V_{maille}=a^3$ avec a = arête du cube. Dans le cas du fer l'arête de la maille a une longueur de 0,287 nm soit $0{,}287.10^{-9}$m ou encore $0{,}287.10^{-7}$cm.

Le volume des atomes situés dans la maille est le volume de chaque atome multiplié par sa contribution à la maille. Dans notre cas, la maille ne contient que des atomes de fer.
Le volume occupé par un atome de fer (sphérique) entier est de $V_{atomeFer} = \frac{4}{3}\pi . {r_{fer}}^3$
Avec r_{fer} = rayon de l'atome de fer = 140 pm = 140.10^{-12}m = 140.10^{-10}cm

Les huit atomes situés aux sommets du cube ont une contribution de 1/8, le volume qu'ils occupent dans la maille est pour chacun de 1/8 x $V_{atomeFer}$
De même pour l'atome situé au centre de la maille, son volume est de 1 x $V_{atomeFer}$
Finalement :
$C = \frac{8 \text{ x } \left(\frac{1}{8}\right)\frac{4}{3}\pi . {r_{fer}}^3 + 1 \text{ x } \frac{4}{3}\pi . {r_{fer}}^3}{\text{Vmaille}} = \frac{\frac{8}{3}\pi . {r_{fer}}^3}{a^3}$

Application numérique :

$C = \frac{\frac{8}{3} 3{,}14 \text{ x } 140^3.10^{-30}}{0{,}287^3.10^{-21}} = \frac{22{,}97.10^{-24}}{0{,}0236.10^{-21}} = 973.10^{-3} = 0{,}97$

La compacité du cristal de fer est de **0,97**
Cela signifie que les atomes occupent 97% du volume de la maille.