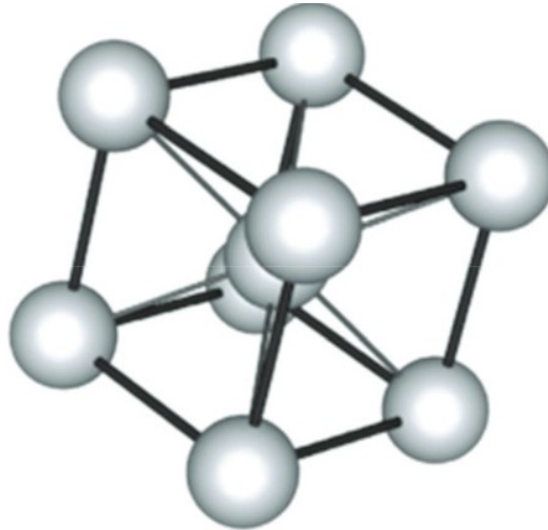


## DM 01 : Cristallographie

A rendre le vendredi 09/09/2016

### I ) Le fer

Le fer, sous sa forme allotropique  $\alpha$ , cristallise à pression normale et en dessous de 910 °C, dans une structure cubique centrée.



1 ) Combien y-a-t-il d'atomes par maille ? On rappelle que le paramètre de maille, noté  $a$ , correspond à la longueur d'une arête de la maille. En déduire la relation entre  $a$  et le rayon atomique du fer  $R$ .

2 ) Soit  $M$  la masse molaire du fer,  $N_A$  la constante d'Avogadro et  $\rho$  la masse volumique du fer. Déterminer la relation entre  $M$ ,  $R$ ,  $N_A$  et  $\rho$ . L'application numérique donne  $\rho = 7,9 \cdot 10^n \text{ kg/m}^3$ . Préciser l'ordre de grandeur de  $\rho$  en donnant simplement la valeur numérique de l'exposant entier  $n$ .

### II ) Les olivines

Les olivines ferro-magnésiennes sont, sous diverses formes, le composant majeur du manteau terrestre. Mais cet assemblage chimique ne conserve pas la même structure cristallographique selon la profondeur à laquelle il se situe car cette structure dépend des conditions de température et de pression. Ainsi, vers 660 km de profondeur, sous une température de 1 830 K, l'olivine (phase  $\gamma$ ) ou ringwoodite se transforme en silicate de magnésium  $\text{MgSiO}_3$  de structure perovskite et en magnésio-wüstite assimilable à l'oxyde de magnésium  $\text{MgO}$ .

La magnésio-wüstite  $\text{MgO}$  possède la même structure cristallographique que le chlorure de sodium  $\text{NaCl}$ . Les ions seront assimilés à des sphères parfaites.

## Données :

— rayons ioniques

Ions	Mg <sup>2+</sup>	O <sup>2-</sup>	Si <sup>4+</sup>
Rayons (pm)	70	140	41

1. Donner une représentation de la maille de la magnésio-wüstite MgO.
2. Déterminer la plus petite distance  $d$  entre deux ions de signes opposés ainsi que le paramètre de maille  $a_1$ .
3. Exprimer, en fonction des rayons ioniques, puis calculer la compacité de la structure.

La structure perovskite est la structure adoptée par le minéral du même nom, CaTiO<sub>3</sub>. Cette structure usuelle a donné son nom à un type structural adopté par de nombreux matériaux synthétiques de type ABX<sub>3</sub>. La structure cristallographique d'une perovskite parfaite peut être décrite de la façon suivante :

- le cation A occupe les sommets du cube ;
- le cation B occupe le centre du cube ;
- les anions X occupent les centres des faces du cube.

4. Représenter la structure cristallographique décrite ci-dessus.
5. La description de la maille est-elle en accord avec la formule proposée pour la perovskite résultant de la décomposition de la ringwoodite ?

Le facteur de tolérance de Goldschmidt  $t$  rend compte de l'influence des rayons ioniques sur la structure cristalline adoptée par les composés du type ABX<sub>3</sub>. Ce facteur exprime la condition de tangence simultanée :

- entre l'ion B au centre de la maille et l'ion X au centre d'une face ;
- entre l'ion A au sommet de la maille et ce même ion X.

Le facteur de tolérance  $t$  est un indicateur de stabilité pour les structures de type perovskite. Il est défini par :

$$t = \frac{r_A + r_X}{\sqrt{2} \times (r_B + r_X)}$$

6. Etablir les deux relations traduisant la condition de tangence en faisant intervenir le paramètre de maille  $a_2$  dans le cas d'une perovskite parfaite.
7. Quelle est la valeur de  $t$  dans le cas d'une perovskite parfaite ?
8. La structure de la perovskite MgSiO<sub>3</sub> est-elle parfaite ? Commenter la valeur de  $t$  obtenue en indiquant quels ions peuvent être éventuellement en contact.