

I) Le silicium

Le silicium (Si) est l'élément situé à la 3ème ligne et 14ème colonne de la classification périodique à 18 colonnes.

1. Etablir la configuration électronique de l'atome de silicium dans son état fondamental en rappelant les règles appliquées. Quel est le nombre d'électrons de valence de l'atome de silicium ?

Solution: La configuration électronique est : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$.

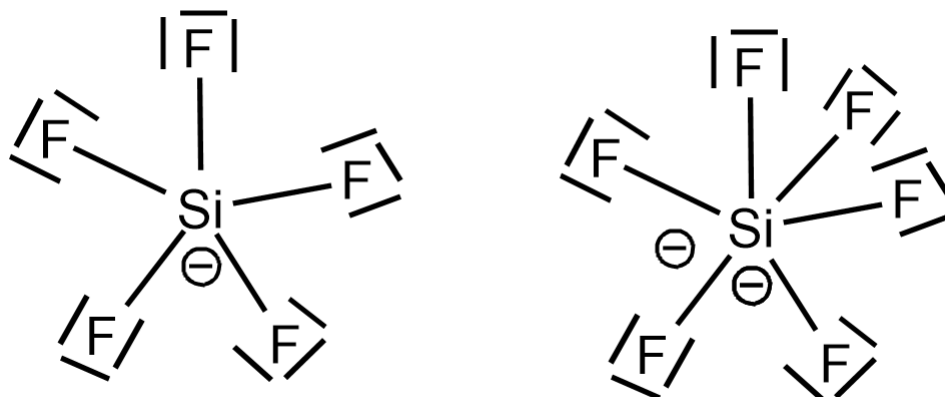
On utilise le principe de Pauli et la règle de Klechkowski pour effectuer le remplissage.

L'atome possède 4 électrons de valence.

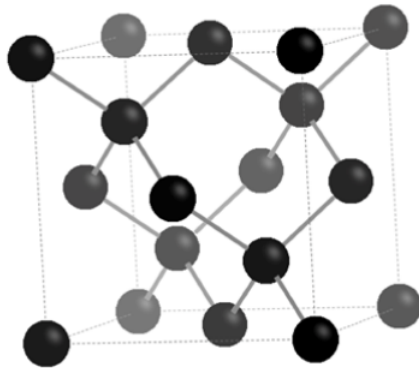
Certaines molécules à base de silicium peuvent être hypervalentes, c'est-à-dire que leur valence est supérieure à celle attendue. C'est le cas par exemple de $[\text{SiF}_5]^-$ et $[\text{SiF}_6]^{2-}$.

2. Donner la représentation de Lewis de ces 2 molécules.

Solution:



Le silicium cristallise selon la structure diamant rappelée ci-après. Les atomes sont disposés en structure cubique à faces centrées avec occupation d'un site tétraédrique sur deux. Dans la représentation les nuances de gris traduisent un effet de relief, les atomes les plus en avant étant les plus foncés.



3. Rappeler la définition de la coordinence et la donner dans cette structure. Donner le nombre d'atomes dans la maille représentée.

Solution: La coordinence représente le nombre de plus proches voisins autour d'une particule étudiée. Ici elles vaut 4.

La maille contient 8 atomes.

4. Calculer la valeur du paramètre de maille en expliquant la méthode.

Solution: Il y a tangence des atomes selon la diagonale du cube : $a \frac{\sqrt{3}}{4} = 2.r_{Si}$.

On en déduit le paramètre de maille : $a = \frac{8.r_{Si}}{\sqrt{3}} = 545 \text{ pm}$.

5. Calculer la masse volumique du silicium.

Solution: La masse volumique du silicium s'écrit :

$$\rho = \frac{8.M(Si).10^{-3}}{N_A.a^3} = 2300 \text{ kg/m}^3.$$

Données :

- Constante d'Avogadro : $N_A = 6,02.10^{23} \text{ mol}^{-1}$.
- Constante des gaz parfaits : $R = 8,314 \text{ J.K}^{-1}.\text{mol}^{-1}$.
- Rayon atomique du silicium: $r_{Si} = 118 \text{ pm}$
- $M(Si) = 28 \text{ g/mol}$.

II) Le cristal ZnO

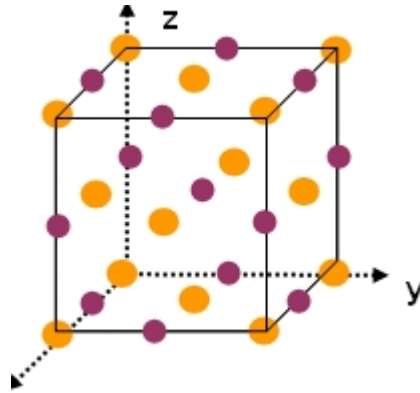
ZnO est un cristal ionique qui peut exister selon la pression, sous trois structures cristallines différentes : l'hexagonale Würtzite stable à pression atmosphérique, la cubique Blende existant à des pressions élevées et la cubique Rocksalt existant à des pressions très élevées.

On s'intéresse par la suite à la structure Rocksalt :

- les ions oxyde O^{2-} occupent les sommets du cube et le centre de chaque face ;
- les ions zinc (II) Zn^{2+} occupent tous les sites octaédriques du cube.

6. Représenter la maille élémentaire de ZnO.

Solution: La maille est :



7. Déterminer le nombre d'ions Zn^{2+} et O^{2-} contenus dans une maille élémentaire.

Solution: Il y a 4 entités ZnO par maille.

8. A l'aide des rayons ioniques, déterminer le paramètre de maille a .

Solution: Il y a tangence des ions selon une arête :

$$a = 2.r(Zn^{2+}) + 2.r(O^{2-}).$$

L'application numérique donne $a = 424$ pm.

9. Déterminer la masse volumique de l'édifice en $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$.

Solution: La masse volumique s'écrit :

$$\rho = \frac{4 \cdot M(\text{ZnO})}{N_A \cdot a^3}.$$

L'application numérique donne $\rho = 7100 \text{ kg/m}^3$.

Données numériques générales

- Masses molaires atomiques (g/mol) : Zn : 65,4 ; O : 16,0
- Constante d'Avogadro : $N_A = 6,02 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
- Rayons ioniques : $r(\text{Zn}^{2+}) = 72 \text{ pm}$; $r(\text{O}^{2-}) = 140 \text{ pm}$
- Masse volumique du zinc : $\rho(\text{Zn}) = 7,14 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$