

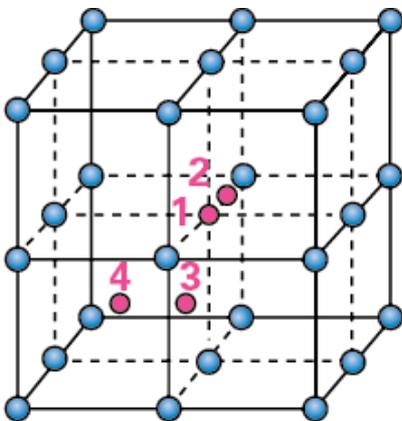
Structure et propriétés des cristaux cubiques

La structure microscopique d'un cristal conditionne certaines de ses propriétés macroscopiques, dont sa masse volumique. Pour calculer celle-ci, il faut déterminer quelques caractéristiques de la maille.

I Nombre d'entités par maille

Le réseau cristallin étant la répétition d'une maille élémentaire dans toutes les directions de l'espace, les entités constituant la maille sont pour la plupart partagées avec les mailles voisines : il faut en tenir compte afin de comptabiliser leur nombre effectif dans chaque maille.

Doc1 Réseau cristallin à maille cubique avec localisation de quatre sites



Dans l'exemple du document 1, les entités situées :

- au sommet de la maille (1) sont partagées par les huit mailles voisines : elles comptent pour $1/8$ par maille ;
- au milieu d'une arête (2) sont partagées par quatre mailles : elles comptent pour $1/4$ par maille ;
- au centre d'une face (3) sont partagées par deux mailles : elles comptent pour $1/2$ par maille ;
- au centre d'une maille (4) ne sont pas partagées, elles comptent pour 1 entité par maille.

Si on applique ce principe à la maille du chlorure de sodium (doc. 3c de la), la maille est constituée de $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ ions Cl^- par maille et de $12 \times \frac{1}{4} + 1 = 4$ ions Na^+ par maille. On a donc autant d'ions

sodium que d'ions chlorure, ce qui correspond à la formule NaCl. Le cristal ionique est bien électriquement neutre.

Pour une maille cubique simple, le nombre d'entités par maille est de $8 \times \frac{1}{8}$, soit 1.

II Compacité d'une maille

Repère
À noter

Comme les entités sont assimilables à des sphères de rayon r , leur volume est de $\frac{4}{3} \pi r^3$ (multiplié par le nombre d'entités par maille).

La **compacité** d'une maille correspond au rapport entre le volume de l'ensemble des entités et le volume de la maille. Plus la compacité est grande, moins la maille comporte de vide. Pour déterminer la compacité d'une structure, il faut calculer :

- le volume occupé par les entités ;
- le volume V de la maille, c'est-à-dire le volume d'un cube de côté a , soit a^3 .

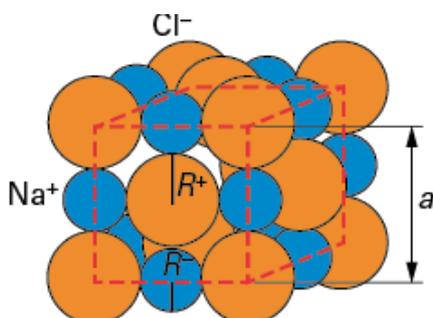
Appliquons ce calcul au chlorure de sodium dont l'arête de la maille cubique est $a = 556$ pm (1 picomètre = 10^{-12} m) et en considérant que les ions Cl^- ont un rayon R^+ de 181 pm et ceux de Na^+ un rayon R^- de 102 pm.

Le volume des entités par maille est :

$$V_{\text{entités}} = 4 \times \frac{4}{3} \times \pi \times (181 \times 10^{-12})^3 + 4 \times \frac{4}{3} \times \pi \times (102 \times 10^{-12})^3 = 1,17 \times 10^{-28} \text{ m}^3.$$

$$\text{Le volume de la maille est : } V_{\text{maille}} = (556 \times 10^{-12})^3 = 1,72 \times 10^{-28} \text{ m}^3.$$

D'où une compacité $\frac{V_{\text{entités}}}{V_{\text{maille}}}$ de 0,68 ou 68 %, soit 32 % de vide.



Doc2 Disposition des entités dans la maille du chlorure de sodium

III Masse volumique d'une maille

Repère
À noter

Pensez à convertir les masses en kg et les volumes en m³.

La **masse volumique** (ρ) d'une maille est le rapport entre sa masse sur le volume de celle-ci. Elle est exprimée généralement en kg par m^3 .

La masse d'une maille correspond au nombre d'entités par maille multiplié par la masse de chaque entité. Cette dernière est déterminée à partir de la masse molaire divisée par le nombre d'Avogadro $N_A = 6,02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ (nombre d'entités élémentaires constituant une mole de matière).

Appliqué à la maille du chlorure de sodium (doc. 2) dont la masse molaire des ions $\text{Cl}^- \text{MCl} = 35,4 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ et celle des ions $\text{Na}^+ \text{MNa} = 23 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$:

– la masse de la maille est : $4 \times \frac{M_{\text{Na}}}{N_A} + 4 \times \frac{M_{\text{Cl}}}{N_A}$;

– le volume de la maille est $V_{\text{maille}} = 556^3$.

D'où une masse volumique de $\rho = 2\,257 \text{ kg par m}^3$, soit une densité $d = \frac{\rho}{\rho_{\text{eau}}}$ de 2,26.