

Interrogation N°2
de chimie inorganique

Exercice : L'alliage le plus utilisé dans l'industrie aéronautique a pour formule $Al_xNi_yTi_z$. Le système cristallographique du titane est CFC, les atomes d'aluminium occupent la totalité des sites octaédriques et ceux de nickel occupent tous les sites tétraédriques. Le paramètre réel de la maille ainsi formée vaut $a = 0,589$ nm.

- 1) Représenter la maille en perspective.
- 2) Donner les coordonnées réduites des atomes
- 3) Déterminer la formule de l'alliage.
- 4) Déterminer la masse volumique et la compacité réelle (**C**) de cet alliage.
- 5) À partir du rayon atomique **R(Ti)** dans le tableau de données ci-dessous, déterminer quel serait le paramètre de maille **a'** si l'empilement du titane était compact. Comparer au paramètre réel a et commenter. Calculer la compacité (**C'**).

Atome	Rayon atomique (nm)	Masse molaire ($g \cdot mol^{-1}$)
Ti	0,147	47,90
Al	0,143	26,98
Ni	0,124	58,70

Corrigé de l'intérog N°2
de Chimie Inorganique

On a la formule de l'alliage: $Al_4Ni_8Ti_4$

Ti \rightarrow CFC les sommets + les centres des faces.

Al \rightarrow la totalité des sites ~~tetra~~ Octa.

Ni \rightarrow tous les sites tétraédrique

$a = 0,589 \text{ nm}$ (paramètre de la maille).

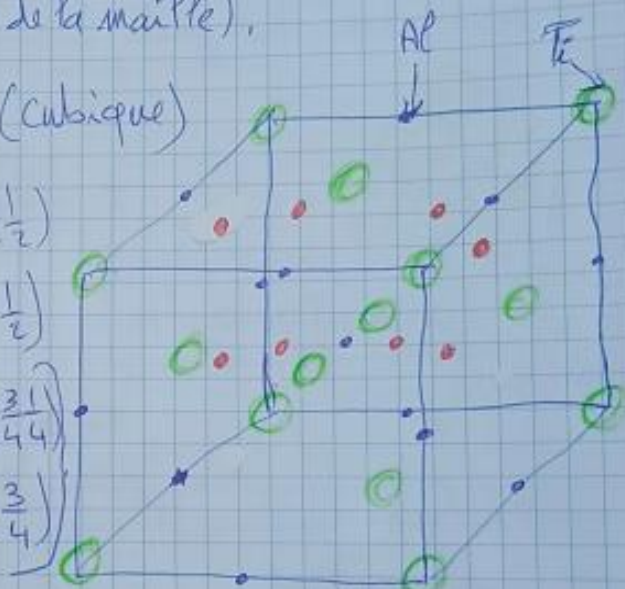
1) la maille en perspective (cubique)

2) $\bullet \rightarrow Ti$ $(000), (\frac{1}{2}\frac{1}{2}0), (\frac{1}{2}0\frac{1}{2}), (0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$

$\bullet \rightarrow Al$ $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}), (\frac{1}{2}00), (0\frac{1}{2}0), (00\frac{1}{2})$

$\bullet \rightarrow Ni$ $(\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}), (\frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}), (\frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}), (\frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4})$

$(\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4}), (\frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4}), (\frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4}), (\frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4})$



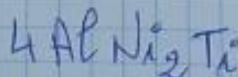
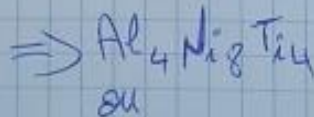
maille en perspective.

3) la formule de l'alliage.

$$ZC = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4 \text{ Al/maille}$$

$$Y = 4 \text{ Ni/maille}$$

$$Z = 8 \text{ Ti/maille}$$



4) la masse volumique (ρ): $\rho = \frac{m_{\text{maille}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{4 \cdot M_{\text{alliage}}}{W_A a^3} = \frac{4 \cdot [26,98 + 2 \cdot 58,7 + 47,9]}{6,02 \cdot 10^{23} [0,589 \cdot 10^{-7}]^3}$

$$= \frac{4 \cdot [26,98 + 2 \cdot 58,7 + 47,9]}{6,02 \cdot 10^{23} [0,589 \cdot 10^{-7}]^3} = 624,93 \cdot 10^{-2} \approx 6,25 \text{ g/cm}^3$$

$$\rho = 6,25 \text{ g/cm}^3$$

la compacité : $C = \frac{V_{\text{atomes}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi (R_{\text{Al}}^3 + 2R_{\text{Ni}}^3 + R_{\text{Ti}}^3)}{3 (0,589)^3}$

$$C = \frac{16 \pi (0,143)^3 + 2(0,124)^3 + (0,147)^3}{3 (0,589)^3} \approx 0,81 = 81\%$$

$$C = 81\%$$

Les atomes occupent 81% du volume total de la maille.

5) Si l'empilement du titane était compact (\Leftrightarrow) les atomes de Ti sont en contact selon la diagonale de la face.

$$d = 4 R_{\text{Ti}}$$

$$d^2 = a^2 + a^2 = 2a^2 \Rightarrow d = a\sqrt{2}$$

$$4 R_{\text{Ti}} = a\sqrt{2} \Rightarrow a' = \frac{4 R_{\text{Ti}}}{\sqrt{2}} =$$

$$a' = \frac{4(0,147)}{\sqrt{2}} \approx 0,408 \text{ nm}$$

$$a' = 0,408 \text{ nm}$$



donc $a' < a$

la compacité C' : $C' = \frac{16 \pi (R_{\text{Al}}^3 + 2R_{\text{Ni}}^3 + R_{\text{Ti}}^3)}{3 (a')^3}$ une valeur supérieure $\Rightarrow \bar{a} > 1$

donc ~~imp~~ l'empilement du titane ne peut être compact.