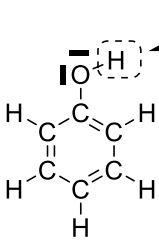
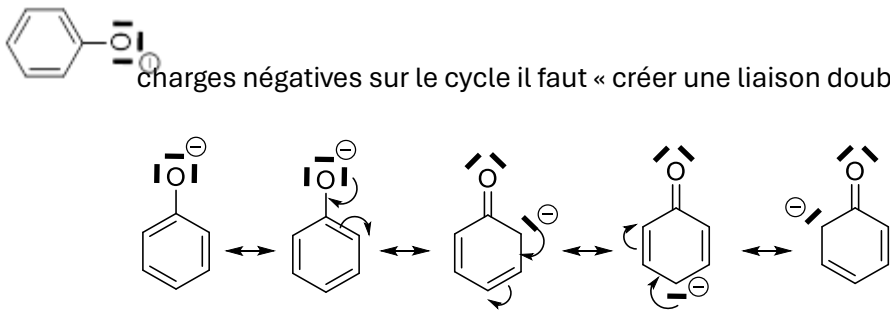
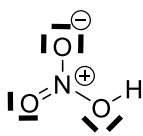

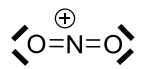
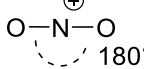
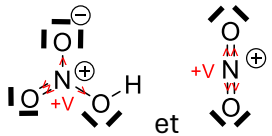
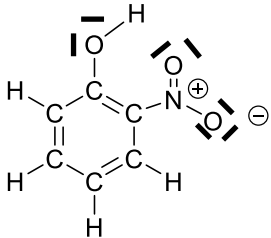
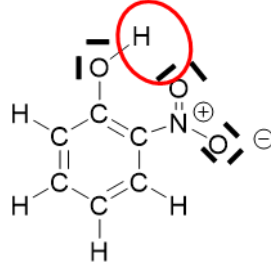
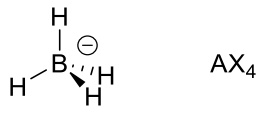
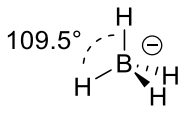
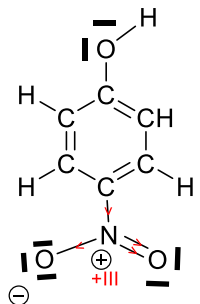
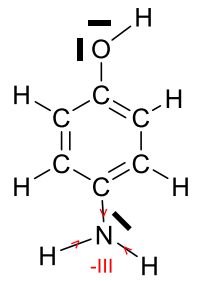
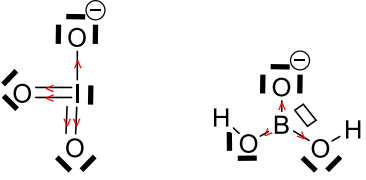
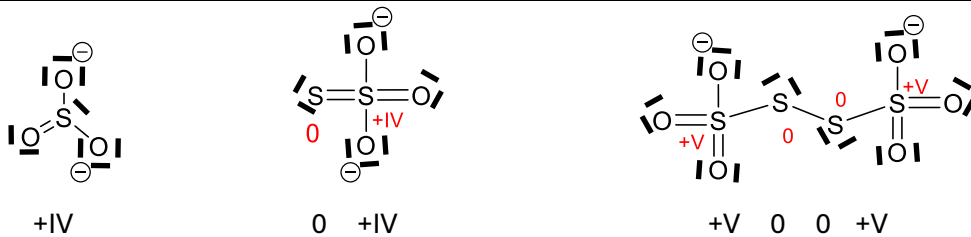
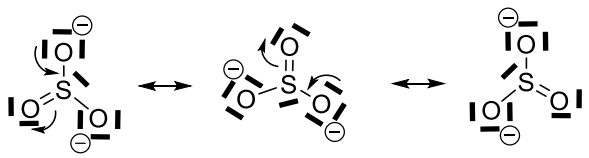
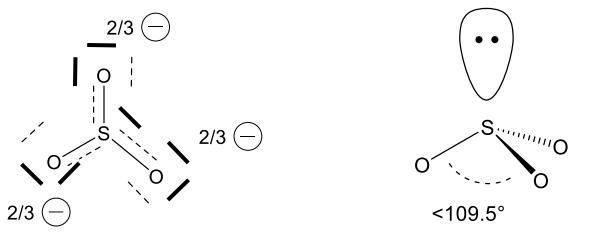
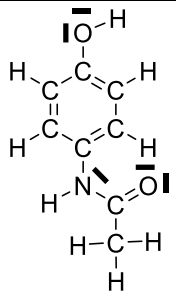


Exercice 1. Synthèse du Paracétamol (20 pts)	
1.	<div>  <p>Seul atome pouvant s'inscrire en dehors du plan. Les carbones sont tous <math>sp^2</math> donc avec une géométrie plane</p> </div> <p>Formule de lewis :</p> <p>Justification : tous les atomes de carbone du cycle sont hybridés <math>sp^2</math>. Ils sont donc tous coplanaires. Pour le groupe C-OH, la liaison C-O reste coplanaire au cycle cependant la libre rotation autour de l'axe C-O permet à l'hydrogène de ne plus être aligné à un instant t (forme en V de C-O-H).</p> <p>Méthodologie pour l'écriture des formules de Lewis : faire d'abord les schémas de Lewis des <u>atomes</u>, attribuer les charges de la formule s'il y en a, dessiner l'édifice moléculaire, placer les charges formelles si besoin, vérifier la règle de l'octet ou duet et précisez lorsqu'il y a extension</p>
2.	<p>Structure de lewis :</p> <div>  <p>Pour faire apparaître les charges négatives sur le cycle il faut « créer une liaison double entre le C-O ».</p> </div> <p>Rq. Cela pousse une double liaison du cycle sur un des atomes de carbone (c'est l'effet mésomère). On notera qu'avec cette délocalisation des électrons <math>\pi</math> du cycle sur les carbones, seulement trois atomes de carbone peuvent devenir négatifs. On obtient ainsi les trois formules mésomères.</p>
3.	<div> <div> <p>Formule de Lewis de l'acide nitrique :</p>  <p>Il existe une formule mésomère avec une délocalisation de la charge négative sur le second O qui est doublement lié à N dans le dessin ci-dessus</p> </div> <div> <p>l'ion nitronium (<math>NO_2^+</math>)</p>  <p>VSEPR : Azote comme élément central soit AX2 : molécule linéaire <math>\alpha = 180^\circ</math></p> <div>  <p>AX<sub>2</sub></p>  <p>Pas de forme mésomère</p> </div> </div> </div>
4.	<p>Pour justifier du couple redox il faut trouver quel élément appartenant aux deux composés a son degré d'oxydation qui peut varier. L'oxygène, élément le plus électronégatif des composés et non relié à lui-même, reste toujours à -II. Calculons les degrés d'oxydation sur l'azote, pour cela on peut redessiner les ions et indiquer le sens d'attraction des électrons autour de N (de N <math>\rightarrow</math> O)</p> <div>  <p>Les deux composés ont donc le même degré d'oxydation +V pour l'azote: Pas de couple RedOx</p> </div>

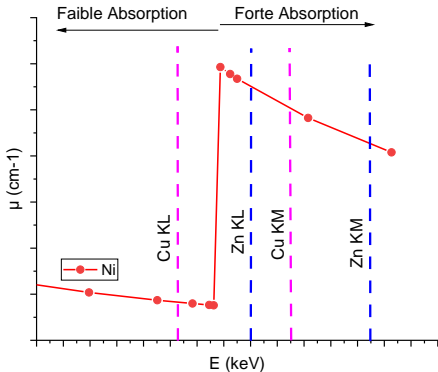
5.	<p>Selon Lewis, il faut localiser les charges formelles ainsi que les doublets (et le cas échéant les électrons célibataires)</p> 
6.	<p>Pour attribuer les températures de fusion, il faut envisager la masse molaire des composés. Pour B et C, elles sont identiques. Une différence viendra donc de possibles liaisons intermoléculaires qui renforceront la cohésion des molécules entre elles et feront augmenter la température de fusion.</p> <p>Les groupes pouvant participer des liaisons intermoléculaires sont <math>-NO_2</math> et <math>-OH</math></p> <p>Dans le cas de la molécule C les deux groupes sont proches et peuvent favoriser une liaison intramoléculaire (liaison H : force impliquant un atome d'hydrogène et le doublet non liant d'un atome électronégatif comme l'oxygène, l'azote et le fluor)</p> <p>Les interactions <u>entre les molécules</u> C sont donc faibles =&gt; température de fusion faible (<math>43^\circ C</math>)</p> <p>Pour la molécule B, les groupes <math>-NO_2</math> et <math>-OH</math> sont éloignés. Ils vont donc interagir avec ceux d'autres molécules B environnantes. La quantité énergétique à fournir pour les séparer sera donc plus élevée. =&gt; température de fusion plus élevée (<math>113^\circ C</math>)</p> 
7.	<p>Dans cette structure de Lewis, même si le Bore est moins électronégatif que l'hydrogène, il portera la charge négative car celle-ci ne peut pas être portée par un hydrogène.</p>  <p>AX<sub>4</sub></p>  <p>109.5°</p>
8.	<p>Pour calculer les degrés d'oxydation il faut se reporter aux électronégativités : (<math>\chi_B &lt; \chi_H</math>)</p> <p>Ce qui signifie que le B est +III dans <math>BH_3</math> et B est +III dans <math>BH_4^-</math></p> <p>Ainsi il faut considérer l'hydrogène : il sera -I dans <math>BH_3</math>, -I dans <math>BH_4^-</math> mais +I dans <math>H^+</math></p> <p>La forme oxydée sera <math>H^+</math> et la forme réduite sera <math>BH_4^-</math></p>
9.	<p>Pour identifier les atomes qui changent de degré d'oxydation il faut représenter les formules de Lewis des deux composés.</p>   <p>On remarque que l'environnement chimique des N change. Pour la molécule B, l'azote est +III car <math>\chi(C) &lt; \chi(N) &lt; \chi(O)</math>. Pour la molécule C, l'azote est -III car <math>\chi(H) &lt; \chi(C) &lt; \chi(N)</math>.</p> <p>L'équation redox s'écrit avec <math>C_6H_5NO_3</math> comme forme oxydée et <math>C_6H_7NO</math> comme forme réduite</p>

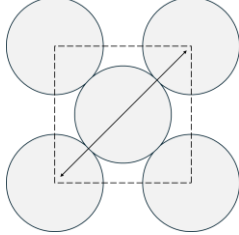
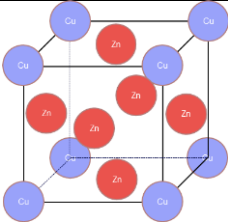
	$C_6H_5NO_3 + 6e^- + 6H^+ \rightleftharpoons C_6H_7NO + 2H_2O$ <p>Ou <math>C_6H_5NO_3 + 6e^- + 6H_3O^+ \rightleftharpoons C_6H_7NO + 8H_2O</math></p>
10.	<p>Pour écrire l'équation bilan, <math>C_6H_5NO_3</math> est la forme oxydée il faut donc l'associer à une forme réduite (voir la question 8.) soit <math>BH_4^-</math>.</p> <p>L'équation avec <math>C_6H_5NO_3</math> est issue de la question 9. Pour <math>BH_4^-</math> on reprend l'équation de la question 8 : <math>BH_4^- \rightleftharpoons BH_3 + 2e^- + H^+</math></p> <p>Ce qui donne : <math>C_6H_5NO_3 + 3BH_4^- + 3H^+ \rightleftharpoons C_6H_7NO + 3BH_3 + 2H_2O</math></p> <p>Ou <math>C_6H_5NO_3 + 3BH_4^- + 3H_3O^+ \rightleftharpoons C_6H_7NO + 3BH_3 + 5H_2O</math></p> <p>Pour déterminer le nombre de mole d'électron échangé par mole de B, il faut reprendre l'équation de la question 8, soit 6 moles d'électrons pour 1 mole de B</p>
11.	<p>Formules de Lewis</p> <div style="text-align: center;">  </div> <p>Rq. Pour le B dans <math>OB(OH)_2^-</math> il faut délocaliser 1 électron de la <math>2s^2</math> sur une case vide en 2p pour avoir 3 électrons célibataire permettant la formation de 3 liaisons (B-O). Dans cette configuration, il reste sur le Bore une case quantique vide (lacune électronique) qui doit être indiquée sur le schéma de Lewis</p>
12.	<p>Il faut trouver le couple RedOX entre <math>IO_3^-</math> et <math>I^-</math> soit : no(I dans <math>IO_3^-</math>) = +V, et no(I dans <math>I^-</math>) = -I</p> <p>L'équation RedOx en milieu acide s'écrit : <math>IO_3^- + 6e^- + 6H^+ \rightleftharpoons I^- + 3H_2O(acide)</math></p> <p>Cependant le texte indique que la réaction s'effectue en milieu basique donc :</p> $IO_3^- + 6e^- + 3H_2O \rightleftharpoons I^- + 6OH^-(basique)$ <p>Rq. Pour écrire une réaction en milieu basique, il peut être facile de l'écrire en milieu acide en premier. Ensuite il faut rajouter de part et autre (réactifs et produits) autant de <math>OH^-</math> qu'il y a de <math>H^+</math> dans l'équation. Puis de rassembler : <math>H^+ + OH^- \rightarrow H_2O</math>.</p>
13	<p>a) <math>IO_3^- / I_2 \Rightarrow \text{Nox(I)} = +V / \text{Nox(I)} = 0 \Rightarrow 10 \text{ électrons échangés au total pour les 2 atomes d'iode à mettre en jeu}</math></p> $2IO_3^- + 10e^- + 12H^+ \rightleftharpoons I_2 + 6H_2O$ <p>Ou <math>2IO_3^- + 10e^- + 12H_3O^+ \rightleftharpoons I_2 + 18H_2O</math></p> <p><math>I_2 / I^- \Rightarrow \text{Nox(I)} = 0 / \text{Nox(I)} = -I \Rightarrow 2 \text{ électrons échangés au total pour les 2 atomes d'iode à mettre en jeu}</math></p>

	$I_2 + 2e^- \rightleftharpoons 2I^-$ <p>b) Equation bilan:</p> $IO_3^- + 5I^- + 6H^+ \rightleftharpoons 3I_2 + 3H_2O$ <p>Ou <math>IO_3^- + 5I^- + 6H_3O^+ \rightleftharpoons 3I_2 + 9H_2O</math></p>
14.	<p>a) 3ème ligne/16ème colonne</p> <p>b) sur une colonne qd Z augmente Ei diminue donc <math>E_i(O) &gt; E_i(S)</math></p> <p>c) S gagne 2 électrons soit : <math>S^{2-}</math> car il se situe sur la droite du tableau périodique, soit des éléments qui attirent des électrons pour stabiliser leur couche électronique externe.</p>
15.	 <p>Rq. Pour écrire ces structures, il faut considérer l'extension de la règle de l'octet pour le soufre</p>
16.	<p>Pour trouver des formules mésomères il faut vérifier la présence de liaisons conjuguées ou l'alternance de liaisons simples avec des doublets non liants. Il faut également vérifier qu'il y a un élément pouvant porter la charge négative qui se délocalise (ici un oxygène sans charge formelle au départ).</p>  <p>Pour la géométrie VSEPR : AX3E1</p> 
17.	$S_4O_6^{2-} + 2e^- \rightleftharpoons 2S_2O_3^{2-}$ $I_2 + 2S_2O_3^{2-} \rightleftharpoons 2I^- + S_4O_6^{2-}$

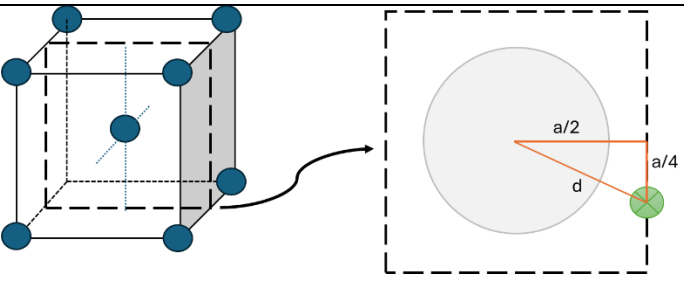
18.	<p>Il faut localiser les doublets non liants sur la structure de Lewis (sur N et O)</p> 
19.	<p>Atome 1 : <math>sp^3</math> (cet atome est sous la forme <math>-CH_3</math> dont 4 liaisons <math>\sigma</math>)  Atome 2, 3, 4, 5 : <math>sp^2</math>. Ces atomes présentent 3 liaisons <math>\sigma</math> et 1 liaison <math>\pi</math>.</p>
20.	<p>Liaison a : C(<math>sp^3</math>)-C(<math>sp^2</math>), recouvrement axial <math>\sigma</math>  Liaison b : C(<math>sp^2</math>)-O(<math>sp^2</math>), recouvrement axial <math>\sigma</math>  C(px)-O(px), recouvrement latéral <math>\pi</math> (avec recouvrement sur orbitales px-px, par exemple)  Liaison c et d : C(<math>sp^2</math>)-C(<math>sp^2</math>), recouvrement axial <math>\sigma</math>  C(pz)-C(pz), recouvrement latéral <math>\pi</math> (avec recouvrement sur orbitales pz-pz, par exemple)</p>
21.	<p>Dist(a) &gt; dist(c)=dist(d)  <i>Rq. Le cycle de carbone (benzène) présente une délocalisation continue des doubles liaisons. A un instant t, la liaison est simple (<math>\sigma</math>) et au temps t+1 la liaison devient double (<math>\sigma \pm \pi</math>). Les distances c et d sont donc identiques.</i></p>
<b>Rayons X (15 pts)</b>	
1.	<p>Zinc : 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>6</sup> 3s<sup>2</sup> 3p<sup>6</sup> 3d<sup>10</sup> 4s<sup>2</sup>  Cuivre : 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>6</sup> 3s<sup>2</sup> 3p<sup>6</sup> 3d<sup>10</sup> 4s<sup>1</sup></p>
2.	<p>Couche de valence du zinc : 4s<sup>2</sup>  n = 4, l=0, ml=0, j=1/2 et s=1/2 et n = 4, l=0, ml=0, j=1/2 et s=-1/2  Niveau N1</p>
3.	<p>Cu et Zn dans le bloc d =&gt; donc liaison métallique  Forte énergie de liaison (e- de valence délocalisés, mer/gaz d'électrons)  Réponses possibles :  Propriétés : conduction électrique / conduction thermique élevée/ Ductile/ malléable / réflexion de la lumière / etc.</p>
4.	<p>C : bande de valence  D : bande de conduction  (a) Conducteur électrique (métal)  (b) Isolant électrique (isolant)</p>
5.	<p>Pour observer des raies KL et/ou KM, il faut que <math>E_{\text{cinétique, e incident}}</math> soit au moins égale à <math>E_K(\text{Cu})</math> <b>et de</b> <math>E_K(\text{Zn})</math>. <math>E_K(\text{Cu})</math> est connue par les données du tableau (-8992 eV).  Il faut chercher <math>E_K(\text{Zn})</math> avec Moseley avec Ni et Cu</p>

	$\frac{\sqrt{-E_{K,Cu}} - \sqrt{-E_{K,Cr}}}{Z_{Cu} - Z_{Cr}} = \frac{\sqrt{-E_{K,Zn}} - \sqrt{-E_{K,Cr}}}{Z_{Zn} - Z_{Cr}}$ Soit $E_{K,Zn} = -9677 \text{ eV}$ Comme $ E_{K,Zn}  >  E_{K,Cu} $ alors il faut considérer le niveau énergétique le plus élevé. Avec la relation $E_{eV} = e \cdot U_V$ soit $1eV = (1e) \times (1V)$ on trouve 9677 V. On aura l'émission des raies $E_{KL}(Cu)$ et $E_{KL}(Zn)$ si la tension minimale à appliquer est de 9677 V
6.	On utilise la formule de l'énergie cinétique : $E_{c,Joule} = \frac{1}{2} m v^2 = 4.677 \times 10^{-23} J$ Comme $E_{eV} = \frac{E_{c,Joule}}{1,61 \times 10^{-19}} = 29\,837 \text{ eV}$ soit une tension de 29 837 V
7.	Le fond continu résulte de la transformation de l'énergie cinétique en d'autres formes d'énergies (énergie rayonnante), lorsque les électrons incidents sont brusquement freinés dans le champ électrique des atomes de la cible. Soit : $E_{e \text{ incidents}} \geq E_{\text{photon émis}}$ L'énergie $h\nu/e$ des rayons X produits à la limite du fond continu est égale à l'énergie des électrons incidents ( $E_{cin}$ ) Soit $\frac{hc}{\lambda e} \leq U$ ou bien $\lambda \geq \left(\frac{hc}{eU}\right) \geq 0.413 \text{ \AA}$
8.	On part de la relation générale : $\Delta E_{KL} = \Delta E_{L \rightarrow K} = E_K - E_L < 0$ car émission Pour le cuivre : $\Delta E_{KL}^{Cu} = E_K - E_L = -8051 \text{ eV}$ soit $\lambda_{KL} = 1.54 \text{ \AA}$ (tableau 1) $\Delta E_{KM}^{Cu} = -8907 \text{ eV}$ soit $\lambda_{KM} = 1.39 \text{ \AA}$ (données tableau 1) Pour le Zinc $\Delta E_{KL}^{Zn} = E_K - E_L = -8646 \text{ eV}$ soit $\lambda_{KL} = 1.43 \text{ \AA}$ $\Delta E_{KM}^{Zn} = -9572 \text{ eV}$ soit $\lambda_{KM} = 1.29 \text{ \AA}$ (données tableau 1)
9.	On calcul tout d'abord, les valeurs énergétiques des raies $KL_{2,3}$ du cuivre et du zinc Soit $\Delta E_{KL_{2,3}}(Cu) = -8051 \text{ eV}$ et $\Delta E_{KL_{2,3}}(Zn) = -8646 \text{ eV}$ On identifie les transitions énergétiques pour les éléments des écrans (relatives au niveau $E_K$ de chaque métal considéré : $ E_K^{Co}  = 7750 \text{ eV},  E_K^{Ni}  = 8300 \text{ eV},  E_K^{Cu}  = 9000 \text{ eV}$ et $ E_K^{Zn}  = 9677 \text{ eV}$ Pour que l'absorption soit maximale il faut que la valeur énergétique de chaque raie $E_{KL}$ (Cu et Zn) se situe dans une zone d'absorption maximale du filtre (soit $\mu$ très grand)  Comme $ E_K^{Co}  = 7750 \text{ eV} <  \Delta E_{KL_{2,3}}(Cu, Zn) $ alors $\mu$ grand pour Cu et Zn Comme $ E_K^{Ni}  = 8300 \text{ eV} <  \Delta E_{KL_{2,3}}(Zn) $ alors $\mu$ grand pour Zn Comme $ E_K^{Cu}  = 9000 \text{ eV} >  \Delta E_{KL_{2,3}}(Cu, Zn) $ alors $\mu$ faible pour Cu, Zn Comme $ E_K^{Zn}  = 9677 \text{ eV} >  \Delta E_{KL_{2,3}}(Cu, Zn) $ alors $\mu$ faible pour Cu, Zn Seul Co présente un $\mu$ grand pour les deux transitions KL => Choix Co

10.	<p>Raie de plus faible longueur d'onde <math>\lambda(\text{Zn}) = 1.43\text{\AA}</math> soit <math>\Delta E_{KL2,3}(\text{Zn}) = -8646\text{ eV}</math> soit <math>E_{KL(\text{Zn})}^{\text{photon}} = 8646\text{ eV}</math></p> <p>Figure 1 : <math>E_{KL(\text{Zn})}^{\text{photon}} = 8646\text{ eV}</math> correspond à <math>\mu(\text{Cu}) \approx 375\text{ cm}^{-1}</math></p> $\mu(\text{Cu}) \approx 375\text{ cm}^{-1} \Rightarrow \frac{5}{100} = \exp(-375 \times x)$ <p>soit <math>x(\text{Cu}) \approx 80\text{ }\mu\text{m}</math></p>
11.	<p>Ici on cherche un filtre dont seulement une raie KL puisse se trouver dans une zone de <math>\mu</math> faible.</p> <p>On trouve : qu'avec le filtre de Nickel seule la raie KL du cuivre est associée à une <math>\mu</math> petit.</p> 
12.	<p>Ici on travaille avec le filtre de Ni et seulement avec l'élément Cuivre</p> <p>Filtre Ni avec une épaisseur de <math>10\text{ }\mu\text{m}</math> et KL du Cuivre</p> <p>(i) Pour le Cuivre : <math>\frac{I_{KL}}{I_{KL}^0} = \exp(-410 \times 10 \cdot 10^{-4}) = 0.66 &gt; 0.6 \Rightarrow \text{Ok}</math></p> <p>(ii) <math>\frac{I_{KL}}{I_{KM}} = \frac{I_{KL}^0}{I_{KM}^0} \exp[(\mu_{KM} - \mu_{KL})x] = 10 \exp [(2125 - 410) \times 10 \cdot 10^{-4}] = 55.5 &gt; 50 \Rightarrow \text{Ok}</math></p> <p>2 critères vérifiés : monochromatisation satisfaisante.</p>
13.	<p>Pour cette analyse, il faut se rapporter à la figure 3.</p> <p>L'intensité du pic est directement proportionnelle au pourcentage massique de l'élément dans l'alliage analysé.</p> <p>Il faut donc attribuer un élément à chaque pic en utilisant <math>E = 12400/\lambda</math>.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Élément 1, <math>\lambda = 2.29\text{ \AA}</math> soit <math>\Delta E = 5403\text{ eV} \Rightarrow \text{Chrome}</math></li> <li>- Élément 2, <math>\lambda \approx 1.66\text{ \AA}</math> soit <math>\Delta E \approx 7455\text{ eV} \Rightarrow \text{Nickel}</math></li> <li>- Élément 3, <math>\lambda \approx 44.6\text{ \AA}</math> soit <math>\Delta E \approx 272\text{ eV} \Rightarrow \text{Carbone}</math></li> <li>- Élément 4, <math>\lambda \approx 1.94\text{ \AA}</math> soit <math>\Delta E \approx 6385\text{ eV} \Rightarrow \text{Fer}</math></li> </ul> <p>Soit <b>Cr = 17%, Ni = 11%, C=0.1 % et Fer = 71.9 %</b></p>
<b>Cristallographie (25 pts)</b>	
1.	Pour un CFC, nombre de motif = $1/8 \times 8 + 6 \times 1/2 = \mathbf{4\text{ motifs/maille}}$
2.	<p>Pour déterminer la composition du motif utilisation de l'expression de la masse volumique :</p> $\rho = \frac{nb_{\text{atomes}} \times M_{\text{Cu}}}{N_A x a^3}$

	<p>Puis calcul de <math>nb_{atomes} = \frac{8,96 \times 6,022 \cdot 10^{23} (3,61 \cdot 10^{-8})^3}{(63,546)} = 3,9947</math></p> <p>soit <b>4 atomes/maille</b></p> <p>Le <b>motif</b> est donc composé de <b>1 atome de cuivre</b></p>
3.	<p>En CFC un atome est tangent à 12 autres</p> <p>Faire un schéma, par exemple un atome du sommet possède les 4 atomes des faces autour de lui dans un même plan, donc en 3D , 3 plans de 4 atomes autour de lui.</p> <p>La coordinance est donc de <b>12</b></p>
4.	<p>Les atomes de cuivre sont tangents suivant la diagonale d'une face, on déduit donc</p> $4r_{Cu} = a\sqrt{2} \text{ soit}$ $r_{Cu} = \frac{a\sqrt{2}}{4} = \frac{3,610 \cdot 10^{-10} \sqrt{2}}{4} = \mathbf{1,276 \text{ \AA}}$ 
5.	$C = \frac{4x(V_{Cu})}{a^3} = \frac{4x \frac{4\pi}{3} (1,276 \cdot 10^{-10})^3}{3,610 \cdot 10^{-10}^3} = (\text{ou } \frac{\pi\sqrt{2}}{6}) = \mathbf{0,74} \text{ soit } 74\% \Rightarrow \text{structure compacte}$
6.	
7.	<p>Pour le laiton alpha on a la formule :</p> <p>Cuivre aux sommets : <math>1/8 \times 8 = 1</math></p> <p>Zinc sur les faces : <math>1/2 \times 6 = 3</math></p> <p>Soit la formule <b>Cu<sub>1</sub>Zn<sub>3</sub></b></p>
8.	<p>Avec les conditions de tangence selon une face du cube:</p> $2r_{Cu} + 2r_{Zn} = a\sqrt{2} \text{ soit } r_{Zn} = \frac{a\sqrt{2} - 2r_{Cu}}{2}$ $\text{Soit } r_{Zn} = \frac{3,696\sqrt{2} - 2 \times 1,276}{2} = \mathbf{1,337 \text{ \AA}}$
9.	$C = \frac{\frac{4\pi}{3}(r_{Cu}^3 + 3r_{Zn}^3)}{a^3} = \frac{\frac{4\pi}{3}((1,276 \cdot 10^{-10})^3 + 3(1,337 \cdot 10^{-10})^3)}{3,696 \cdot 10^{-10}^3} = \mathbf{0,767 \text{ soit } 77\%}$
10.	<p>Motif = CuZn</p> <p>Mode de réseau primitif</p>
11.	<p>On utilise la masse volumique (<math>\rho = 7,796 \text{ g/cm}^3</math>) ou la tangence suivant <math>a\sqrt{3}</math></p> $a\beta = \sqrt[3]{\frac{M_{Cu} + M_{Zn}}{N_A \cdot \rho}} = 3,017 \text{ \AA}$ <p>Rq. Il est possible aussi d'utiliser les valeurs de rayons du Cu et du Zn ainsi que la condition de tangence entre eux.</p>



12.	<p>Les sites octaédriques se situent au <b>centre des arêtes</b> et au <b>centre des faces</b>.</p> <p>Il y a donc <math>6 \times 1/2 + 12 \times 1/4 = 6</math> <b>sites Octaédriques</b></p> <p>Ils ont pour coordonnées réduites :</p> <p><math>(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)</math> <math>(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2})</math> <math>(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2})</math> <math>(\frac{1}{2} 0 0)</math> <math>(0 \frac{1}{2} 0)</math> <math>(0 0 \frac{1}{2})</math></p>
13.	<p>Les sites tétraédriques se situent à mi-distance entre le <b>milieu d'une arête</b> et le <b>milieu de la face</b></p> <p>Il y a donc <math>6 \times 4 \times 1/2 = 12</math> <b>sites tétraédriques</b></p> <p><math>(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{4})</math> <math>(0 \frac{1}{2} \frac{1}{4})</math> <math>(\frac{1}{2} \frac{1}{4} 0)</math></p> <p><math>(\frac{1}{4} 0 \frac{1}{2})</math> <math>(0 \frac{1}{4} \frac{1}{2})</math> <math>(\frac{1}{4} \frac{1}{2} 0)</math></p> <p><math>(\frac{1}{2} 0 \frac{3}{4})</math> <math>(0 \frac{1}{2} \frac{3}{4})</math> <math>(\frac{1}{2} \frac{3}{4} 0)</math></p> <p><math>(\frac{3}{4} 0 \frac{1}{2})</math> <math>(0 \frac{3}{4} \frac{1}{2})</math> <math>(\frac{3}{4} \frac{1}{2} 0)</math></p>
14.	<p>Distance1 = <math>a_\beta/2</math></p> <p>Distance2 = <math>a_\beta\sqrt{2}/2</math></p>
15.	 $d^2 = \left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{4}\right)^2$ <p>Distance = <math>(a_\beta \sqrt{5})/4</math> (indépendant du choix des atomes Zn-Zn ou Cu-Cu du tétraédre)</p>
16.	<p><u>Site octaédrique</u> on cherche la plus petite distance :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Site Octa d'une face</li> </ul> <p>Soit <math>R_{Cu} + R_{oct} = a_\beta\sqrt{2}/2 \Rightarrow R_{octa} = 0.857 \text{ \AA}</math></p> <p>Soit <math>R_{Zn} + R_{oct} = a_\beta/2 \Rightarrow R_{octa} = \mathbf{0.171 \text{ \AA}}</math></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Site Octa d'une arête</li> </ul> <p>Soit <math>R_{Zn} + R_{oct} = a_\beta\sqrt{2}/2 \Rightarrow R_{octa} = 0.796 \text{ \AA}</math></p> <p>Soit <math>R_{Cu} + R_{oct} = a_\beta/2 \Rightarrow R_{octa} = \mathbf{0.232 \text{ \AA}}</math></p> <p>Site tetraedrique on cherche la plus petite distance en tenant compte donc du rayon du Zn uniquement :</p> $\left(\frac{a_\beta}{2}\right)^2 + \left(\frac{a_\beta}{4}\right)^2 = (rtetra + rZn)^2 \text{ avec } \frac{a_\beta^2}{4} + \frac{a_\beta^2}{16} = \frac{5a_\beta^2}{16}$ <p>D'où <math>rZn + r_{max}^{tetra} = \frac{a_\beta}{4}\sqrt{5}</math> soit</p> $r_{max}^{tetra} = \frac{a_\beta}{4}\sqrt{5} - rZn = \mathbf{0,349 \text{ \AA}}$