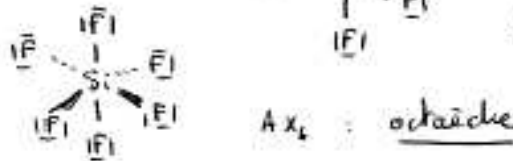
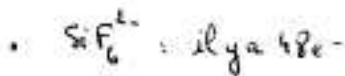
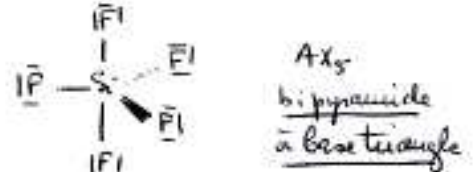
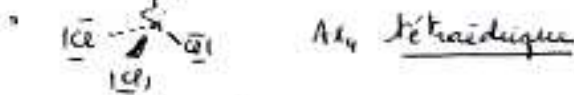
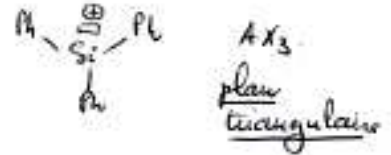
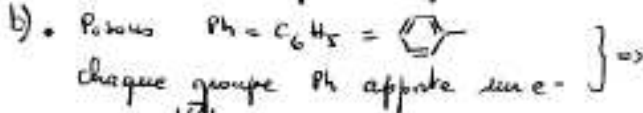
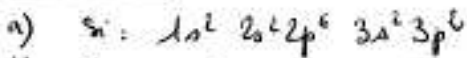


X-ESPCI 2002 : corrigé

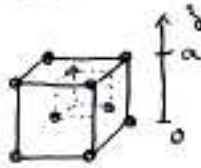
I Etude structurale

1 le silicium



c) maille diamant = cfc avec occupation de la moitié des sites tétraédriques

seuls les atomes visibles sont représentés



plan $z=0$ et $z=a$



plan $z = \frac{a}{4}$



plan $z = \frac{a}{2}$



plan $z = \frac{3a}{4}$



d) Compacité $C_b = \frac{\text{Volume matière}}{\text{Volume maille}}$

Dans une maille, il y a $Z = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} + 4 = 8$ atomes.

Volume matière = $Z \times \frac{4}{3} \pi r_{Si}^3$

Volume maille = a^3

$a \times \frac{1}{4} a \sqrt{3} = 2r_{Si}$

donc $C_b = \frac{\sqrt{3}}{8} \frac{\pi}{2} = 34\%$

sites tétraédriques situés au centre des sous-cubes d'arête $\frac{a}{2}$

$\frac{1}{4} a \sqrt{3} = r_T + r_{Si}$ $a \times \frac{1}{4} a \sqrt{3} = 2r_{Si} \Rightarrow r_T = r_{Si}$

sites octaédriques situés au milieu des arêtes et au centre de la maille

$a = 2r_{Si} + 2r_O \Rightarrow r_O = \left(\frac{4}{\sqrt{3}} - 1\right) r_{Si}$

AN $r_+ \approx 110 \text{ pm}$ et $r_0 = 1,3 r_- \approx 156 \text{ pm}$

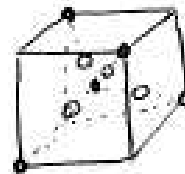
c) Si SiC est un composé d'insertion, le paramètre de maille ne varie pas donc SiC est un composé de covalence.

Il y a des liaisons covalentes entre Si et C.

La silice

a) Dans une maille de silicium il y a 4 atomes Si appartenant en propre à la maille, liés à 4 voisins. Donc dans SiO_2 , ces 4 atomes sont liés à 4 atomes d'oxygène.

En tout par maille : 8 atomes Si et $4 \times 4 = 16$ atomes O
soit 8 motifs SiO_2



b) Dans un cube d'arête $\frac{a'}{2}$

$$\frac{1}{2} \sqrt{3} \frac{a'}{2} = 2r_{\text{Si}} + 2r_{\text{O}}$$

$$\text{donc } \boxed{r_{\text{Si}} + r_{\text{O}} = \frac{\sqrt{3}}{8} a'}$$

c) Le calcul précédent suppose que les atomes Si et O (ou mieux les ions Si^{4+} et O^{2-}) sont des sphères dures tangentes entre elles et alignées.

Si il y a une liaison covalente $d_{\text{SiO}} < r_{\text{Si}} + r_{\text{O}}$ et les 3 atomes ne sont plus alignés



d) Si le cristal était moléculaire, chaque motif SiO_2 serait lié à ses voisins par des interactions de faibles énergies de type Van der Waals et μ_f serait basse ce que n'est pas le cas. Cela confirme la question c), il y a une liaison covalente et μ_f est élevée.