

Architecture de la matièreExercice 1 : extrait de la banque PT 2003**I. Etude cristallographique d'un oxyde de nickel NiO**

Le minerai extrait en Nouvelle Calédonie est la garniérîte. Il contient environ 2,5% en masse de Nickel sous forme d'oxyde. Cet oxyde de nickel NiO possède la même structure cristallographique que le chlorure de sodium (NaCl), pour lequel les ions Na^+ et Cl^- constituent deux structures cubiques à faces centrées, décalées de $a/2$ suivant un côté du cube (a étant l'arête du cube).

1. Faire une représentation de la maille élémentaire dans l'espace après l'avoir décrite (paramètre de la maille, nombre et position des sites cristallographiques, position des ions, nombre de motifs par maille, relation entre l'arête a et les rayons des ions).
2. Quelle est la coordinence de chacun des ions ?
3. Connaissant le numéro atomique de chacun des éléments, donner leur structure électronique et l'ion qu'ils sont le plus susceptible de former. Ce résultat corrobore-t-il la formule proposée pour l'oxyde ?
4. La masse volumique de l'oxyde de nickel vaut 6670 kg.m^{-3} . Déterminer le paramètre de la maille.
5. Démontrer les conditions minimale et maximale que doit satisfaire le rapport r^+/r^- (rapport inférieur à 1) pour qu'un cristal puisse adopter une structure type NaCl. On rappelle que la condition maximale d'existence de la structure NaCl est la même que la condition minimale d'existence de la structure CsCl (réseau cubique simple).
Ce rapport vaut 0,53 pour l'oxyde étudié. Les conditions sont-elles satisfaites ?
6. Calculer le rayon de l'ion nickel puis de l'ion oxyde. Calculer la compacité C de cet oxyde de nickel. Commenter le résultat.

Exercice 2 : extrait de la banque PT 2008**I – Le nickel****I-1. L'élément nickel**

I-1-a. Donner la configuration électronique, à l'état fondamental, de l'élément nickel.
Le nickel est un élément de transition. Justifier cette affirmation.

I-1-b. La masse molaire atomique du nickel figurant dans la littérature est : $M = 58,7 \text{ g.mol}^{-1}$. En admettant qu'à l'état naturel le nickel est un mélange de trois isotopes : ^{58}Ni , ^{60}Ni et ^{62}Ni , dont 68% (pourcentage molaire) de ^{58}Ni , calculer approximativement les pourcentages molaires des deux autres isotopes.

I-2. Le corps pur simple nickel.

Le nickel impur a une structure hexagonale ; **une fois purifié**, le nickel possède une **structure cubique à faces centrées**. **Dans la suite de cette étude, on ne s'intéresse qu'à cette structure cubique à faces centrées.**

I-2-a. Représenter une maille conventionnelle du nickel pur. Quelle est la coordinence d'un atome dans cette structure ?

I-2-b. Le paramètre de la maille est $a = 352 \text{ pm}$. En déduire le rayon atomique du nickel.

I-2-c. Calculer la masse volumique ρ puis la densité d du nickel.

I-2-d. Qu'appelle-t-on site octaédrique, site tétraédrique ?
Vérifier que dans la structure cubique à faces centrées, le nombre de sites octaédriques est la moitié du nombre de sites tétraédriques.