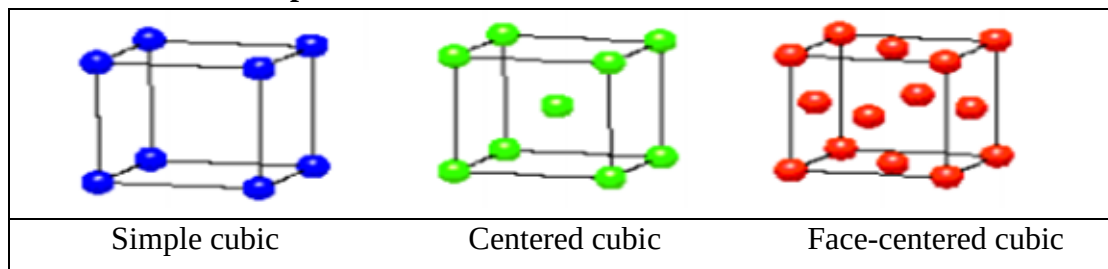


Tutorial Series No. 2

Exercise 1: Multiplicity

Find the number of atoms per unit cell (the multiplicity of the cell) for the three different crystalline structures: **simple cubic**, **centered cubic**, and **face-centered cubic**.



Exercise 2: Density, Packing Factor, and Packing Rate of Pure Iron

When pure iron crystallizes, it adopts a **centered cubic (CC)** structure ($a = b = c$ and $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$) with **2 atoms per unit cell**.

Given data: $M_{\text{Fe}} = 55,85 \text{ g/mol}$; $a = 2,86 \times 10^{-10} \text{ m}$; $r = 1,24 \text{ \AA}$; $N_A = 6,023 \times 10^{23}$.

1. Calculate the density (ρ) of pure iron.
2. Calculate the packing factor (C) of pure iron.
3. Calculate the packing rate (τ).

Exercise 3: Density, Packing Factor, and Packing Rate of a Fe–Ni Alloy

The alloy contains **80% iron and 20% nickel by mass**, with a **centered cubic (CC)** crystal structure.

Both elements are uniformly distributed in the lattice.

Given data:

Fer	Nickel	$N_A = 6,023 \times 10^{23}$
$M_{\text{Fe}} = 55,85 \text{ g/mol}$	$M_{\text{Fe}} = 58,69 \text{ g/mol}$	
$r_{\text{Fe}} = 1,24 \text{ \AA}$	$r_{\text{Fe}} = 1,25 \text{ \AA}$	

1. Calculate the density (ρ) of the Fe–Ni alloy.
2. Calculate the packing factor (C) for the Fe–Ni alloy.
3. Calculate the packing rate (τ) for the Fe–Ni alloy.

Exercise 4: Relationship Between the Lattice Edge Length (a) and Atomic Radius (r)

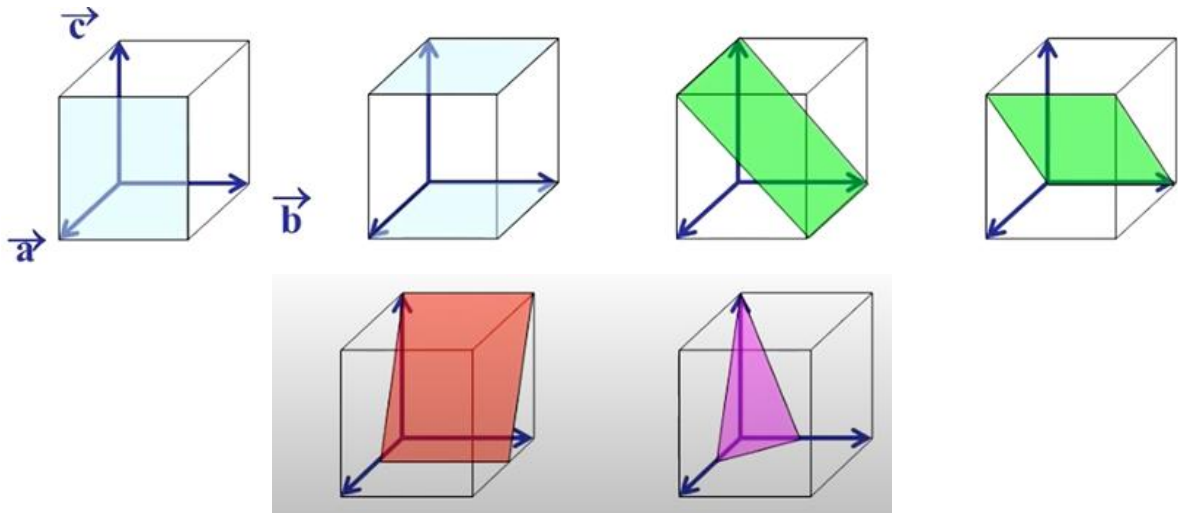
Consider a metallic crystal that can be modeled by one of the three cubic structures: **simple cubic (SC)**, **face-centered cubic (FCC)**, or **centered cubic (CC)**.

Given: $r = 0.128 \text{ nm}$

1. Calculate the lattice edge length (a) for the three cubic structures.
2. Calculate the packing factor for each cubic structure.
3. Compare the packing factors of the three structures and draw a conclusion.

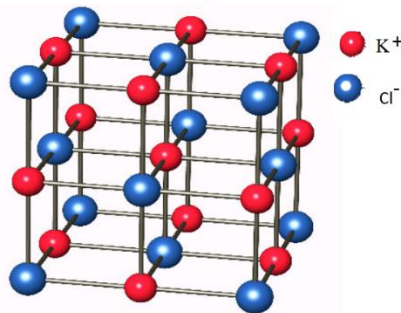
Exercise 5: Miller Indices

1. What are the indices of the crystallographic **direction** passing through the lattice node with coordinates: **(-4, 6, 2)**?
2. What are the **Miller indices** of the lattice plane that intersects the x, y, z axes at **4a**, **-6b**, and **2c**, respectively?
3. Sketch (represent) the lattice planes: **(111)**, **(110)**, **(321)** and **(131)**.
4. Determine the Miller indices of the following planes:



Exercise 6

Consider the crystal structure of potassium chloride (KCl).



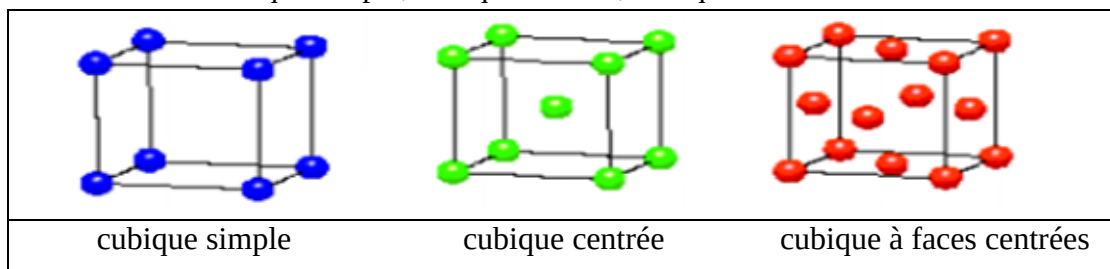
Given: $r^+ = 0.130 \text{ nm}$; $r^- = 0.181 \text{ nm}$; $V_{\text{KCl}} = 0.144 \text{ nm}^3$.

1. What is the nature of the bonds between K and Cl atoms?
2. What Bravais lattice is formed by the Cl atoms?
3. What type of lattice sites do the K atoms occupy in this lattice?
4. Verify the electrical neutrality of the KCl crystal.
5. Calculate the coordination number of each ion.
6. What is the packing factor (compacity) of the KCl unit cell?
7. Calculate the theoretical density (mass per unit volume) of KCl in $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$.

Série de TD N°2

Exercice 1 : Multiplicité

Trouvez le nombre d'atomes par maille (la multiplicité de la maille) pour les trois différentes structures cristallines : cubique simple, cubique centrée, cubique à faces centrées.



Exercice 2 : Masse volumique, Compacité et Taux de compacité du fer pur

Le fer pur quand il cristallise, il prend une structure cubique centrée ($a=b=c$ et $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$).

Avec nombre d'atomes par maille : 2

Données :

$M_{\text{Fe}}=55,85 \text{ g/mol}$; $a= 2,86 \times 10^{-10} \text{ m}$; $r= 1,24 \text{ \AA}$; $N_A=6,023 \times 10^{23}$.

1. Calculez la masse volumique d'un atome du fer pur (ρ)
2. Calculez la compacité d'un atome du fer pur (C)
3. Calculez le taux de compacité (τ)

Exercice 3 : masse volumique, compacité et taux de compacité d'un alliage Fer-Nickel (Fe-Ni)

L'alliage contient 80% de fer et 20% de nickel en pourcentage massique, avec une structure cristalline cubique centrée. Les deux éléments sont répartis de manière homogène dans la maille.

Données :

Fer	Nickel	$N_A=6,023 \times 10^{23}$
$M_{\text{Fe}}= 55,85 \text{ g/mol}$	$M_{\text{Fe}}= 58,69 \text{ g/mol}$	
$r_{\text{Fe}}= 1,24 \text{ \AA}$	$r_{\text{Fe}}= 1,25 \text{ \AA}$	
		$a= 2,86 \text{ \AA}$
		$z= 2$

1. Calculez la masse volumique du l'alliage Fe-Ni (ρ)
2. Calculez la compacité pour l'alliage Fe-Ni (C)
3. Calculez le taux de compacité pour l'alliage Fe-Ni (τ)

Exercice 4 : Relation entre la longueur de l'arête de la maille (a) et rayon atomique

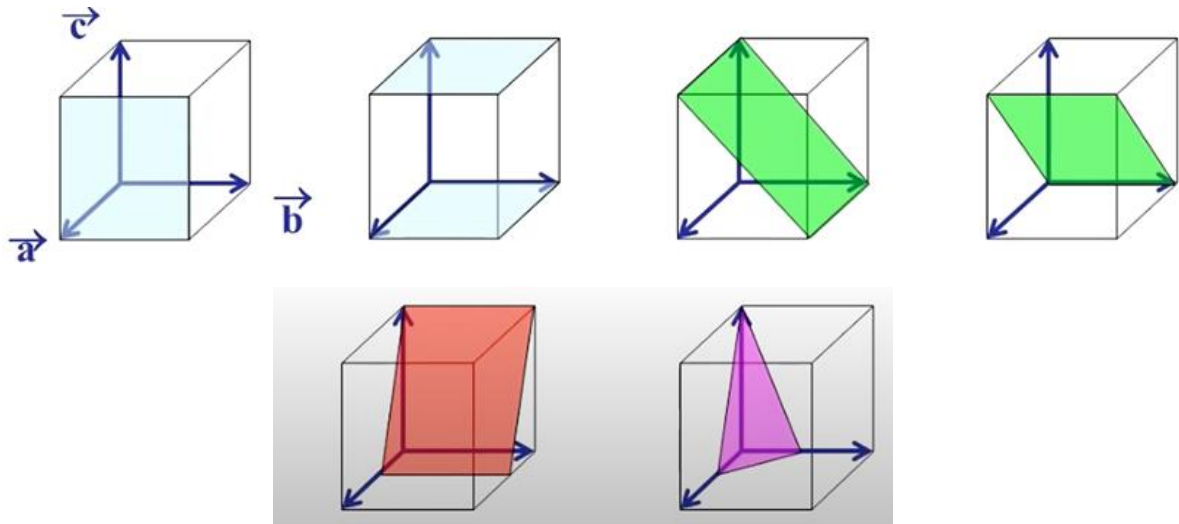
Considérez un cristal métallique qui peut être modélisé par une des trois structures cubique : simple, à faces centrées et centré.

On donne $r= 0,128 \text{ nm}$.

1. Calculez la longueur de l'arête de la maille pour les trois structures cubiques.
2. Calcul la compacité de chaque structure cubique
3. Comparez les compacités des trois structures, que concluez-vous.

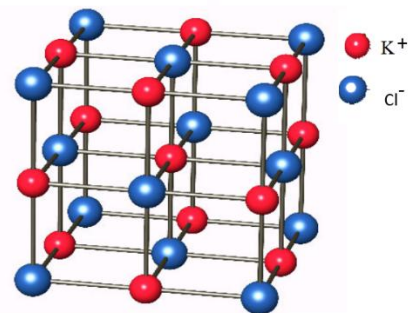
Exercice 5 : Indices de Miller

1. Quels sont les indices de la direction cristallographique passant par le nœud de coordonnées : -4, 6, 2 ?
2. Quels sont les indices de Miller du plan réticulaire coupant les axes x, y, z respectivement en 4a, -6b, 2c ?
3. Représenter les plans réticulaires : (111), (110), (321) et (131)
4. Déterminer les indices de mailler des plans suivant :



Exercice 6 :

Considérez la structure cristalline du chlorure de sodium **KCl**



1. Quelle est la nature des liaisons existant entre les atomes de **K** et de **Cl** ?
2. Quel est le réseau de Bravais formé par les atomes de **Cl** ?
3. Quel type de site occupent les atomes de **K** dans ce réseau ?
4. Vérifier la neutralité de cristal KCl
5. Calculez la coordinance de chacun des ions
6. Quelle est la compacité de la maille de **KCl** ?
7. Calculez la masse volumique théorique (en kg/m³) du **KCl**.

Donne : $r^+ = 0,130 \text{ nm}$; $r^- = 0,181 \text{ nm}$; $V_{\text{KCl}} = 0,144 \text{ nm}^3$.