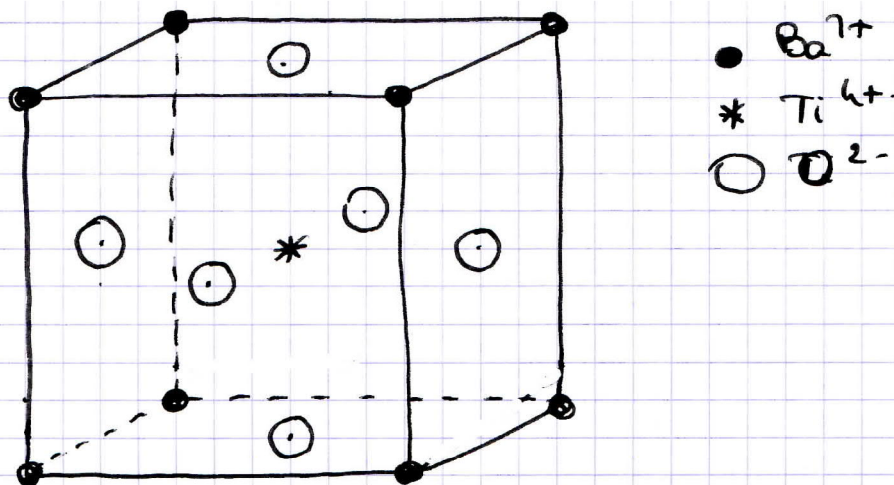
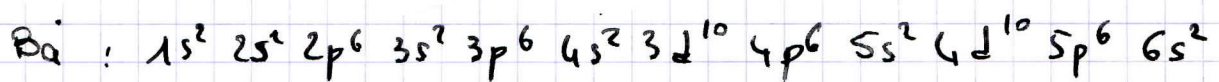
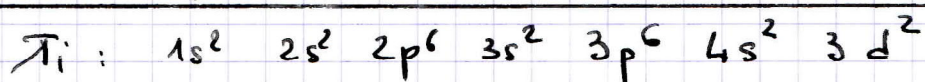


II- STRUCTURE DU TITANATE DE BARYUM

24-

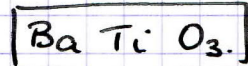


25-



$\Rightarrow$ 6^e période, 2^e colonne.

26-

 $8 \times \frac{1}{8}$ ion Ba^{2+} soit 1 ion Ba^{2+} 1 ion Ti^{4+} $6 \times \frac{1}{2} = 3$ ions O^{2-} 

$$1 \times 2 + 1 \times 4 + 3 \times -2 = 0$$

$$\Rightarrow \text{NEUTRE.}$$

27-

 Ti^{4+} a 6 ions O^{2-} plus proches voisins Ba^{2+} a 12 ions O^{2-} plus proches voisins.

28-

le paramètre de maille
de contact cation / anion :

est fixé par 2 relations

$$2r_{\text{Ti}^{4+}} + 2r_{\text{O}^{2-}} = a$$

$$\text{et } 2r_{\text{Ba}^{2+}} + 2r_{\text{O}^{2-}} = a\sqrt{2}$$

$$\Rightarrow 2r_{\text{Ba}^{2+}} + 2r_{\text{O}^{2-}} = 2\sqrt{2}r_{\text{Ti}^{4+}} + 2\sqrt{2}r_{\text{O}^{2-}}$$

$$\Rightarrow \boxed{2\sqrt{2}r_{\text{Ti}^{4+}} + 2(\sqrt{2}-1)r_{\text{O}^{2-}} - 2r_{\text{Ba}^{2+}} = 0}$$

$$\text{or } 2\sqrt{2} \times 68 + 2(\sqrt{2}-1) \times 140 - 2 \times 135 = 38 \text{ pm.} \neq 0.$$

Ce n'est pas une perovskite parfaite.

Supposons a fixé par le contact Titane oxygène

$$\Rightarrow a = 2 \times r_{\text{Ti}^{4+}} + 2r_{\text{O}^{2-}} = 2 \times 68 + 2 \times 140$$

$$\Rightarrow \boxed{a = 416 \text{ pm.}}$$

Il faut alors que $2r_{\text{Ba}^{2+}} + 2r_{\text{O}^{2-}} < a\sqrt{2}$.

$$2 \times 135 + 2 \times 140 < 416 \times \sqrt{2}$$

$$550 < 588 \quad \text{propriété vérifiée}$$

C'est donc bien le contact Titane / oxygène qui fixe le paramètre de maille. $\boxed{\text{Ti}^{4+} \text{ et } \text{O}^{2-} \text{ sont tangents}}$

Supposons a fixé par le contact Baryum / oxygène

$$\Rightarrow a = \frac{2r_{\text{Ba}^{2+}} + 2r_{\text{O}^{2-}}}{\sqrt{2}} = 389 \text{ pm.}$$

$$\frac{(137,3 + 47,9 + 3 \times 16)}{(416 \cdot 10^{-10})^3 \cdot 6,02 \cdot 10^{23}}$$

Il faut alors que $2r_{\text{Ti}^{4+}} + 2r_{\text{O}^{2-}} < a$

$$= 5,38 \text{ g.cm}^{-3}$$

$$416 \not< 389 \quad \text{NON vérifié}$$

C'est donc bien le contact Ti / oxygène qui fixe a.