

Cristaux ioniques I

Position des ions	Stœchiométrie	Contact anion / cation	Critère r^+ / r^-	Coordinnance	Masse volumique	Compacité / Porosité
On place généralement les cations aux sommets. La position des anions dépend du type de cristal.	C'est le nombre moyen de cations (n) et d'anions (m) par maille. Stœchiométrie n:m	Le contact s'effectue sur l'arête, sur la diagonale de face ou sur la diagonale du cube, selon.	La valeur de r^+ / r^- permet souvent de savoir quel est le type cristallin	C'est le nombre d'ions de charge opposée les plus proches d'un ion donné. Coordinnance x-y	$\rho = \frac{m_{\text{maille}}}{V_{\text{maille}}}$ $\rho = \frac{n \times M(+)+m \times M(-)}{V \times N_A}$	La compacité ζ est le rapport du volume occupé par les ions sur le volume de la maille : $\zeta = \frac{V_{\text{occupé}}}{V_{\text{maille}}}$ $\zeta = \frac{4}{3} \pi \frac{n \times r^{+3} + m \times r^{-3}}{V}$ Porosité : $1 - \zeta$

Cubique simple, type CsCl.

Position des ions	Stœchiométrie	Contact anion / cation	Critère r^+ / r^-	Coordinnance	Masse volumique
8 cations aux sommets, 1 anion au centre.	8 cations aux sommets : $8 \times \frac{1}{8} = 1$ cation par maille. 1 anion au centre : $1 \times 1 = 1$ anion par maille. Stœchiométrie 1:1	Contact sur la diagonale du cube : $r^+ + r^- = a \frac{\sqrt{3}}{2}$	Valeur maximale si $r^+ = r^-$: $\left(\frac{r^+}{r^-}\right)_{\text{max}} = 1$ Valeur minimale si contact entre anions : $a = 2r^-$ $\left(\frac{r^+}{r^-}\right)_{\text{min}} = \sqrt{3} - 1 = 0,732$	Cations : 8 anions proches à $a \frac{\sqrt{3}}{2}$. Anions : 8 cations proches à $a \frac{\sqrt{3}}{2}$. Coordinnance 8-8	$\rho = \frac{M(+)+M(-)}{a^3 \times N_A}$ Compacité $\zeta = \frac{4}{3} \pi \frac{r^{+3} + r^{-3}}{a^3}$
EXEMPLE		$r(\text{Cs}^+) = 169 \text{ pm}$ $r(\text{Cl}^-) = 181 \text{ pm}$ $a = 404 \text{ pm}$	$\rho_{\text{CsCl}} = \frac{[132,9 + 35,45]}{(404 \times 10^{-12})^3} \cdot \frac{1}{6,02 \times 10^{23}} = 4,2 \text{ g.cm}^{-3}$	$\zeta_{\text{CsCl}} = \frac{4}{3} \pi \frac{169^3 + 181^3}{404^3} = 68\%$	

Cubique faces centrées, type NaCl.

Position des ions	Stœchiométrie	Contact anion / cation	Critère r^+ / r^-	Coordinnance	Masse volumique
8 cations aux sommets, 6 cations aux centres des faces, 12 anions au milieu des arêtes, 1 au centre.	$8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ cations par maille : $n = 4$. $12 \times \frac{1}{4} + 1 = 4$ anions par maille : $m = 4$. Stœchiométrie 4:4	Contact sur l'arête : $r^+ + r^- = \frac{a}{2}$	Valeur maximale si système cubique simple : $\left(\frac{r^+}{r^-}\right)_{\text{max}} = \sqrt{3} - 1$ Valeur minimale si contact entre anions : $2r^- = a \frac{\sqrt{2}}{2}$ $\left(\frac{r^+}{r^-}\right)_{\text{min}} = \sqrt{2} - 1 = 0,414$	Cations : 6 anions proches à $\frac{a}{2}$. Anions : 6 cations proches à $\frac{a}{2}$. Coordinnance 6-6	$\rho = \frac{4 \times [M(+)+M(-)]}{a^3 \times N_A}$ Compacité $\zeta = \frac{4}{3} \pi \frac{4 \times [r^{+3} + r^{-3}]}{a^3}$
EXEMPLE		$r(\text{Na}^+) = 95 \text{ pm}$ $r(\text{Cl}^-) = 181 \text{ pm}$ $a = 552 \text{ pm}$	$\rho_{\text{NaCl}} = \frac{4 \times [22,99 + 35,45]}{(552 \times 10^{-12})^3} \cdot \frac{1}{6,02 \times 10^{23}} = 2,3 \text{ g.cm}^{-3}$	$\zeta_{\text{NaCl}} = \frac{4}{3} \pi \frac{4 \times [95^3 + 181^3]}{552^3} = 68\%$	

Cristaux ioniques II

ZnS structure type blende					
Position des ions	Stœchiométrie	Contact anion / cation	Critère r^+ / r^-	Coordinance	Masse volumique
8 cations aux sommets, 6 cations aux centres des faces, 4 anions au centre de 4 des 8 tétraèdres issus des 8 sommets.	$8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ cations par maille : $n = 4$. 4 anions par maille : $m = 4$ Stœchiométrie 4:4	Contact sur la diagonale du cube : $r^+ + r^- = a \frac{\sqrt{3}}{4}$	Valeur maximale si système cubique faces centrées : $\left(\frac{r^+}{r^-}\right)_{\max} = \sqrt{2} - 1$ Valeur minimale si contact entre anions : $2r^- = a \frac{\sqrt{2}}{2}$ $\left(\frac{r^+}{r^-}\right)_{\min} = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} - 1 = 0,225$	Cations : 4 anions proches à $a \frac{\sqrt{3}}{4}$. Anions : 4 cations proches à $a \frac{\sqrt{3}}{4}$. Coordinance 4-4	$\rho = \frac{4 \times [M(+)+M(-)]}{a^3 \times N_A}$ Compacité $\zeta = \frac{4}{3} \pi \frac{4 \times [r^{+3} + r^{-3}]}{a^3}$
EXEMPLE	$r(\text{Zn}^{2+}) = 67 \text{ pm}$ $r(\text{S}^{2-}) = 175 \text{ pm}$ $a = 559 \text{ pm}$				
			$\rho_{\text{ZnS}} = \frac{4 \times [65,41 + 32]}{(559 \times 10^{-12})^3} \cdot \frac{1}{6,02 \times 10^{23}} = 3,7 \text{ g.cm}^{-3}$	$\zeta_{\text{ZnS}} = \frac{4}{3} \pi \frac{4 \times [67^3 + 175^3]}{559^3} = 54\%$	

Structure type fluorine, type CaF₂					
Position des ions	Stœchiométrie	Contact anion / cation	Critère r^+ / r^-	Coordinance	Masse volumique
8 cations aux sommets, 6 cations aux centres des faces, 8 anions au centre des 8 tétraèdres issus des 8 sommets.	$8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ cations par maille : $n = 4$. 8 anions par maille : $m = 8$ Stœchiométrie 4:8	Contact sur la diagonale du cube : $r^+ + r^- = a \frac{\sqrt{3}}{4}$	Valeur minimale si contact entre anions : $a = 4r^-$ $\left(\frac{r^+}{r^-}\right)_{\min} = \sqrt{3} - 1 = 0,732$	Cations : 8 anions proches à $a \frac{\sqrt{3}}{4}$. Anions : 4 cations proches à $a \frac{\sqrt{3}}{4}$. Coordinance 8-4	$\rho = \frac{4M(+)+8M(-)}{a^3 \times N_A}$ Compacité $\zeta = \frac{4}{3} \pi \frac{4r^{+3} + 8r^{-3}}{a^3}$
EXEMPLE	$r(\text{Ca}^{2+}) = 99 \text{ pm}$ $r(\text{F}^-) = 133 \text{ pm}$ $a = 536 \text{ pm}$				
			$\rho_{\text{CaF}_2} = \frac{4 \times 40,1 + 8 \times 19}{(536 \times 10^{-12})^3} \cdot \frac{1}{6,02 \times 10^{23}} = 2,6 \text{ g.cm}^{-3}$	$\zeta_{\text{CaF}_2} = \frac{4}{3} \pi \frac{4 \times 99^3 + 8 \times 133^3}{536^3} = 62\%$	