

1) Les Composés de type ZnS (Sulfure de zinc –Blende)

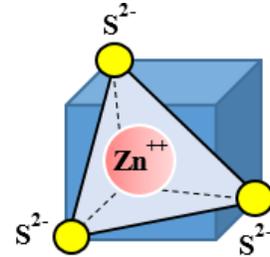
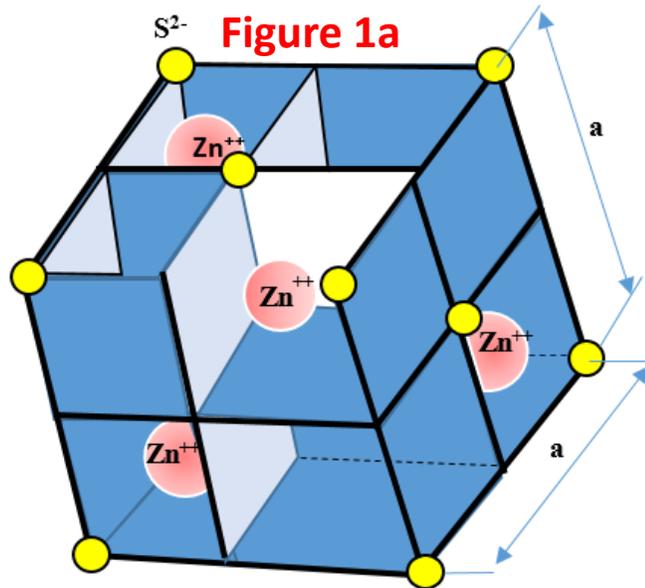


Figure 1b

Q: comment peut-on démontrer la coordination? Rep : Les ions (Zn²⁺) et (S²⁻) sont tg selon la diagonale d'un petit cube (arête = a/2). Considérer la moitié de cette diagonale: $a\sqrt{3}/4 = R_c + R_a$.

1- Description de la structure : Les ions S²⁻ occupent les sommets d'un réseau CFC, Les ions Zn²⁺ occupent la moitié des sites **T**étraédriques: les sites T sont les 8 petits cubes d'arêtes a/2. Chaque centre du site est délimité par 4 ions S²⁻

2- Réseau de Bravais F

3- Coordonnées réduites : (Origine Anion) :

S²⁻ : (000), (1/2 1/2 0), (1/2 0 1/2), (0 1/2 1/2)

Zn²⁺ : (3/4 1/4 1/4), (1/4 3/4 1/4), (1/4 1/4 3/4), (3/4 3/4 3/4)

Origine Cation : on fait une translation à tous les ions de (1/4 1/4 1/4)

4- Groupement Formulaire Z=4

8 anions S²⁻ aux sommets : $8 \times 1/8 = 1$

6 anions aux centres des faces : $6 \cdot 1/2 = 3$

4 S²⁻ /maille

4 Cations Zn²⁺ : $4 \cdot 1 = 4$ Zn²⁺ /maille

4(S²⁻) + 4(Zn²⁺) = 4 mailles ZnS donc Z=4

5- Coordination 4:4 Tétraédrique

Chaque (Zn²⁺) est entouré de 4 (S²⁻) à la distance $(a\sqrt{3})/4$

Chaque (S²⁻) est entouré de 4 (Zn²⁺) à la distance $(a\sqrt{3})/4$

6- Compacité

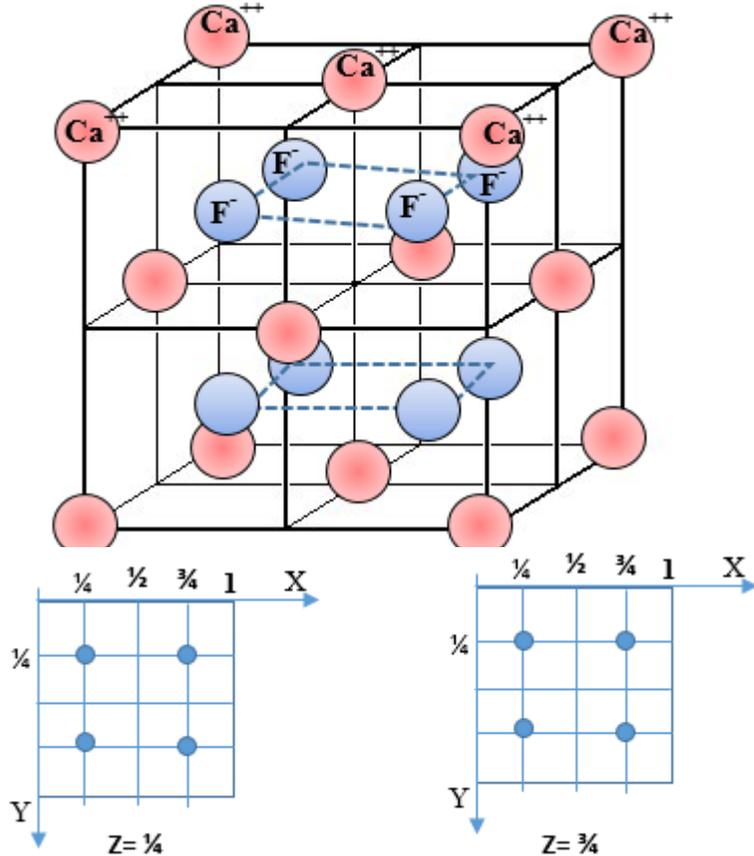
$$C = \frac{Z \cdot V_{\text{motif}}}{V_{\text{maille}}} = 4 \cdot \left(\frac{4}{3}\right) \cdot \pi \left[(R_A)^3 + (R_C)^3 \right] \cdot \left(\frac{1}{a^3}\right)$$

7- Condition de stabilité de la structure

$$0.225 \leq \frac{R_c}{R_A} = \frac{R^+}{R^-} \leq 0.414$$

I- Les cristaux ioniques de type AB₂

Les Composés de type CaF₂ (Fluorine)



Coordonnées (Origine cation)

Ca⁺⁺ : 000), (1/2 1/2 0), (0 1/2 1/2), (1/2 0 1/2) selon CFC

F⁻ : Position des sites T

(1/4 1/4 1/4), (1/4 3/4 1/4), (3/4 1/4 1/4), (3/4 3/4 1/4)

(1/4 1/4 3/4), (1/4 3/4 3/4), (3/4 1/4 3/4), (3/4 3/4 3/4)

1- Description de la structure : la maille est cubique mais la position des anions et des cations ne sont pas équivalentes.

Ca⁺⁺ sont disposés selon un réseau CFC et les F⁻ occupent tous les sites tétraédriques

2- Groupement Formulaire Z=4

8 cations Ca⁺⁺ aux sommets : $8 \times 1/8 = 1$

6 anions Ca⁺⁺ aux centres des faces: $6 \cdot 1/2 = 3$

4 Ca⁺⁺/maille

8 Anion F⁻ dans les sites T : $8F^-/maille = 4 \cdot (F^-)_2$

$4(Ca^{++}) + 4(F^-)_2 = 4$ mailles CaF₂/maille

3- Coordination = 8:4

Ca⁺⁺ est entourée de 8 F⁻ à la distance $(a\sqrt{3})/4$

Mais F⁻ est entouré de 4 Ca⁺⁺ à la distance $(a\sqrt{3})/4$

4- Condition de stabilité:

- Le plan de densité max est le plan diagonal de la maille (quel sont les indices de ce plan?)

-L'anion et le cation sont tg selon la diagonale du petit cube

$R_A + R_C = (a\sqrt{3})/4$; les anions ne doivent pas amputer l'un sur l'autre (se toucher)

$2 R_A \leq a/2$

$$0.732 \leq \frac{R_c}{R_A} = \frac{R^+}{R^-} \leq 1 \text{ (car anion } > \text{ cation)}$$