

## Chapitre 3 – Architecture atomique

### EXERCICE 3-12

#### a) Réseau de Bravais du fluorure de calcium

Le réseau de Bravais est défini à partir des ions Ca qui occupent les sommets et les centres des faces du cube. C'est donc un réseau Cubique à Faces Centrées (CFC).

**C.F.C.**

#### b) Type de site occupé par les ions F

Les ions F occupent les sites tétraédriques de la maille C.F.C. défini par les ions Ca.

**Tétraédriques**

#### c) Formule chimique du fluorure de calcium

On dénombre les ions **Ca** et **F** appartenant en propre à la maille C.F.C :

$$\text{Ions Ca : } (8 \times 1/8) + (6 \times 1/2) = 4 \quad \text{Ions F : } 8 \times 1 = 8$$

Il y a donc deux fois plus d'ions **F** que d'ions **Ca**. Les valeurs de **X** et de **y** dans la formule chimique sont donc respectivement égales à **1** et **2**.

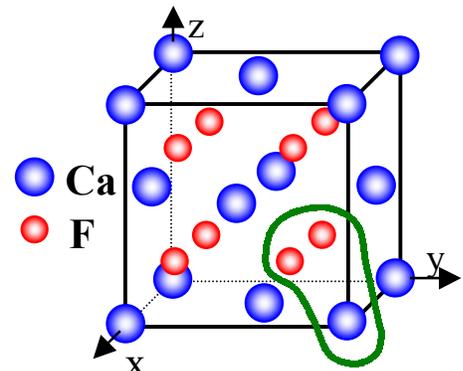
$$X = 1$$

$$Y = 2$$

La formule chimique est donc **CaF<sub>2</sub>**.

#### d) Atomes constitutifs du motif

Le motif est constitué d'un ensemble d'ions dont les proportions doivent correspondre à celles de la formule chimique. Ici, **le motif sera constitué de 1 ion Ca et de deux ions F**, tel que l'ensemble d'ions encerclé ci-contre.



#### e) Densités surfaciques d'ions F et d'ions Ca

La densité surfacique est égale au rapport du nombre d'ions, appartenant à une maille plane du plan considéré, à la surface de cette maille.

Sur le plan (010), qui est parallèle aux axes x et z et passe par y = 1 (face du cube perpendiculaire à l'axe y), on constate qu'il n'y a que des ions Ca occupant les sommets et le centre de la maille plane carrée de ce plan. Le nombre d'ions Ca appartenant en propre à cette maille carrée de surface  $a^2$  est égal à :  $(4 \times 1/4) + 1 = 2$ . La densité surfacique est donc égale à  $2/a^2$ .

Le plan  $(1\bar{1}0)$  est parallèle à l'axe z et passe par x = 1 et y = -1 (voir figure ci-dessus). Sa maille plane est un rectangle qui a pour surface  $a^2\sqrt{2}$ . Dans cette maille plane, il y a 4 ions Ca aux sommets et 2 ions Ca au milieu des grands côtés du rectangle, donc  $(4 \times 1/4 + 2 \times 1/2) = 3$  ions Ca en propre. On remarque qu'il y a 4 ions F qui sont situés à l'intérieur de la maille plane rectangulaire, donc 4 ions F en propre. On en déduit ainsi la densité surfacique d'ions Ca et d'ions F dans ce plan :

	Ca	F
(010)	$2/a^2$	0
$(1\bar{1}0)$	$\sqrt{2}/a^2$	$2\sqrt{2}/a^2$