

Chapitre 3 – Architecture atomique

EXERCICE 3-10

a) Nature des liaisons dans NaCl:

Comme l'indique le paragraphe 3.3.3 du livre « *Des Matériaux* », les liaisons dans le NaCl sont de nature **IONIQUES**, l'atome de Na ayant perdu son seul électron de valence pour former un **ion positif Na⁺**, alors que l'atome de Cl a gagné cet électron pour compléter sa couche électronique externe à 8 électrons et devenir ainsi un **ion négatif Cl⁻**.

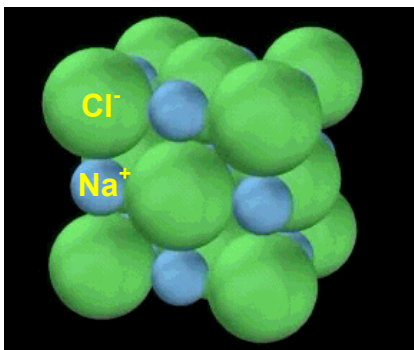
Liaisons ioniques

b) Réseau de Bravais du NaCl :

Les ions Cl⁻ étant plus gros que les ions Na⁺, on choisit donc ces ions pour définir le réseau de Bravais du NaCl. On constate aisément que les ions Cl⁻ sont centrés aux nœuds d'un réseau Cubique à Faces Centrées (CFC). Les figures 3.15 et 3.23 du livre « *Des Matériaux* » illustrent cette maille CFC du NaCl.

Réseau CFC

c) Type de site occupés par les ions Na⁺ :



On constate que les ions Na⁺ sont localisés au milieu des arêtes de la maille CFC ainsi qu'au centre de cette maille. Or ces positions sont exactement celles des sites octaédriques définis dans cette maille, comme l'illustre la figure 3.16a du livre « *Des Matériaux* ».

Sites octaédriques

d) Compacité de la maille de NaCl :

La compacité **C** étant égale au rapport du volume **V_i** occupés par les ions appartenant en propre à la maille au volume **V_m** de cette maille, il faut donc, dans un premier temps, calculer le nombre d'ions Na⁺ et Cl⁻ appartenant en propre à la maille CFC.

$$\text{Nombres d'ions } N_{\text{Cl}} \text{ en propre : } N_{\text{Cl}} = \left(8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2}\right) = 4$$

$$\text{Nombres d'ions } N_{\text{Na}} \text{ en propre : } N_{\text{Na}} = \left(12 \times \frac{1}{4} + 1\right) = 4$$

Remarque : on notera que les nombres d'ions en propre N_{Cl} et N_{Na} sont dans les mêmes proportions que dans la formule chimique de NaCl. C'est un moyen utile pour vérifier que le calcul du nombre d'ions en propre de la maille est exact.

$$\text{Le volume } V_i \text{ des ions en propre est donc égal à : } V_i = 4(V_{\text{Na}} + V_{\text{Cl}}) = 4 \left[\frac{4}{3} \pi (r_{\text{Na}}^3 + r_{\text{Cl}}^3) \right],$$

où r_{Na} et r_{Cl} est respectivement le rayon de l'ion Na⁺ et de l'ion Cl⁻.

Avec les valeurs numériques données à la figure 3.23 du livre « *Des Matériaux* », on obtient ainsi la valeur du volume V_i des ions en propre :

$$V_i = 4 \left[\frac{4}{3} \pi (r_{\text{Na}}^3 + r_{\text{Cl}}^3) \right] = \left[\frac{16}{3} \pi (0,098^3 + 0,181^3) \right] \text{ nm}^3 = 0,1151 \text{ nm}^3$$

Le volume V_m de la maille est égal à : $V_m = a^3$, où a est le paramètre de la maille (arête du cube). Comme les ions Na^+ et Cl^- se touchent le long de l'arête de la maille, on en déduit que $a = (d_{\text{Cl}} + d_{\text{Na}})$, où d_{Cl} et d_{Na} sont les diamètres respectifs des ions Na^+ et Cl^- .

Avec les valeurs numériques données à la figure 3.23 du livre « *Des Matériaux* », on obtient ainsi la valeur de $a = 0,558 \text{ nm}$ et celle du volume V_m de la maille :

$$V_m = a^3 = (d_{\text{Cl}} + d_{\text{Na}})^3 \text{ nm}^3 = 0,1737 \text{ nm}^3$$

La compacité C du NaCl est donc égale à : $C = V_i/V_m = 0,1151/0,1737 = 0,665 = 66,25 \%$

$$C = 66,25 \%$$

Remarque : on notera que la compacité du NaCl est plus faible que celle du cuivre ou de l'aluminium qui ont aussi un réseau de Bravais CFC (compacité $C = 74 \%$). Ceci vient du fait que les ions Na et Cl n'ont pas le même diamètre, alors que les atomes sont identiques dans ces deux métaux.

e) Masse volumique du NaCl :

La masse volumique théorique ρ du NaCl est égale au rapport de la masse M_i des ions en propre au volume V_m de la maille. La masse M_i est égale à :

$$M_i = 4(m_{\text{Na}} + m_{\text{Cl}}) = \frac{4(A_{\text{Na}} + A_{\text{Cl}})}{N_A}$$

où m présente la masse d'un atome de l'élément considéré (Na ou Cl), A la masse atomique de cet élément et N_A est le nombre d'Avogadro.

Avec les valeurs de $A_{\text{Na}} = 23 \text{ g/mole}$, $A_{\text{Cl}} = 35,45 \text{ g/mole}$, $N_A = 6,022 \times 10^{23} \text{ mole}^{-1}$ (voir Appendices du livre « *Des Matériaux* ») et la valeur de V_m trouvée ci-dessus et exprimée en cm^3 , on obtient ainsi la masse volumique théorique ρ du NaCl :

$$\rho = \frac{M_i}{V_m} = \frac{4(A_{\text{Na}} + A_{\text{Cl}})}{N_A V_m} = 2,235 \text{ g/cm}^3$$

$$\rho = 2,235 \text{ g/cm}^3$$