

DEVOIR SURVEILLE de CHIMIE

Année : 2014

1^{ère} année de 1^{er} cycle

Date du D.S. : mercredi 19 mars 2014

Durée : 1h30

Aucun document supplémentaire n'est autorisé. Les étudiants étrangers peuvent consulter un dictionnaire de traduction (électronique ou papier).

Exercice 1 :

Un composé cristallise en P-1 (triclinique).

Citez le seul élément de symétrie existant dans ce composé.

1 point

Le calcul de son énergie réticulaire est réalisé à l'aide de la formule de Born-Landé. Le résultat est le même en faisant le calcul avec un cycle de Born-Haber. Y a-t-il majoritairement des liaisons ioniques ou covalentes au sein de ce composé ?

1 point

Exercice 2 :

Il existe 7 systèmes cristallins.

Citez-en 3 qui peuvent admettre un axe C_3 .

3 points

Exercice 3 :

On considère un empilement cubique faces centrées d'anions (rayon anionique 1,40 Å).

Quelle est la taille maximale du cation que l'on peut insérer dans les sites tétraédriques sans modifier la maille ?

2 points

Exercice 4 :Le polonium peut cristalliser dans le système cubique ($a = 3,345$ Å).

Il n'y a qu'un atome indépendant en (0 ; 0 ; 0). La masse molaire d'une maille est de 209g/mol.

- Donnez le mode de réseau et le motif de ce composé. 2 points
- Calculez la masse volumique cristallographique de ce composé. 2 points

Une étude par diffraction des rayons X est réalisée (anticathode de Cu : $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$).

c) De mémoire ou à l'aide d'un schéma, citez la loi de Bragg 1 point

d) Listez les 4 premiers plans (hkl) susceptibles de diffracter (inutile de lister les indices négatifs ni de donner toutes les permutations de position possibles) et calculez les angles de diffraction θ correspondants. 4 points

Exercice 5 :

Considérons le composé organique $C_7H_6O_3$. Il cristallise en $P2_1/c$ ($n^\circ 14$).

Les paramètres de maille sont $a = 11,520 \text{ \AA}$; $b = 11,210 \text{ \AA}$; $c = 4,920 \text{ \AA}$; $\beta = 90,83^\circ$.

Liste des positions des atomes indépendants :

C1 0.08361 0.19261 -0.49399	H2 0.20960 0.02130 -0.45510
C2 0.18470 0.16977 -0.64129	H3 0.29360 0.23800 -0.93260
C3 0.22036 0.25058 -0.83534	H4 0.18010 0.41230 -1.03380
C4 0.15721 0.35264 -0.88626	H5 0.00850 0.43650 -0.78610
C5 0.05729 0.37610 -0.74258	H6 -0.05110 0.30940 -0.45110
C6 0.02141 0.29689 -0.54988	O1 -0.05050 0.13729 -0.16203
C7 0.04504 0.10881 -0.28740	O2 0.09881 0.01676 -0.22973
H1 -0.06920 0.07810 -0.01720	O3 0.25092 0.07103 -0.60079

La fiche du groupe $P2_1/c$ vous est fournie.

- a) Y a-t-il des atomes en position particulière ? 1 point
- b) Quel est le motif ? 1 point
- c) Calculez la masse volumique cristallographique. 2 points

$M(C) = 12\text{g/mol}$; $M(O) = 16\text{g/mol}$; $M(H) = 1\text{g/mol}$; $M(\text{Polonium}) = 209\text{g/mol}$

Pour le système triclinique : $V = \sqrt{a^2 b^2 c^2 (1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma)}$

Pour le système monoclinique : $d_{hkl} = \sin \beta / \sqrt{\left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} + \frac{k^2}{b^2} \sin^2 \beta - 2hl \frac{\cos \beta}{ac}\right)}$

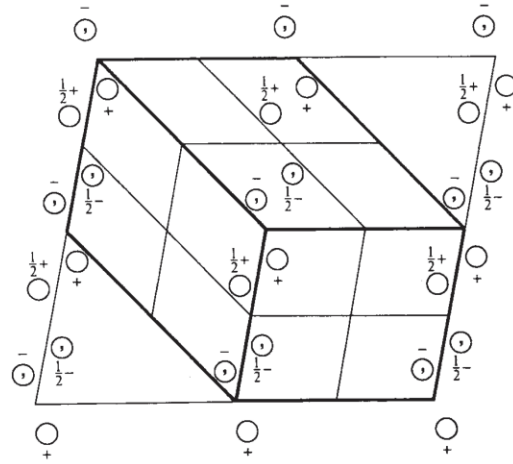
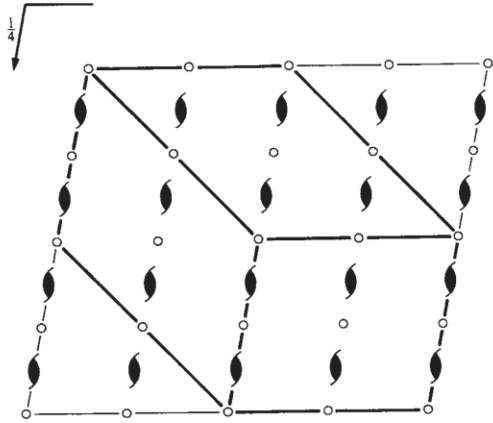
Condition d'existence de la diffraction en cubique, réseau F : h, k et l de même parité

Condition d'existence de la diffraction en cubique, réseau I : somme h + k + l paire

$P2_1/c$ C_{2h}^5 $2/m$

Monoclinic

No. 14

UNIQUE AXIS b , DIFFERENT CELL CHOICESOrigin at $\bar{1}$ Asymmetric unit $0 \leq x \leq 1; 0 \leq y \leq \frac{1}{4}; 0 \leq z \leq 1$ Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; (2); (3)**Positions**Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

Reflection conditions

4 e 1 (1) x, y, z (2) $\bar{x}, y + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$ (3) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$ (4) $x, \bar{y} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ 2 d $\bar{1}$ $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$ 2 c $\bar{1}$ $0, 0, \frac{1}{2}$ $0, \frac{1}{2}, 0$ 2 b $\bar{1}$ $\frac{1}{2}, 0, 0$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ 2 a $\bar{1}$ $0, 0, 0$ $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

General:

 $h0l : l = 2n$ $0k0 : k = 2n$ $00l : l = 2n$

Special: as above, plus

 $hkl : k+l = 2n$ $hkl : k+l = 2n$ $hkl : k+l = 2n$ $hkl : k+l = 2n$