

DEVOIR SURVEILLE de CHIMIE1^{ère} année de 1^{er} cycle

Durée : 1h30

Date du D.S. : **lundi 13 mars 2023**

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

Exercice 1

Un composé cristallise en P-1 (triclinique).

Quel élément de symétrie existe dans ce composé ?

1pt

Rappelez la loi de Bragg, qui lie l'angle de Bragg à la distance d_{hkl} .

2pts

Un composé cristallise dans le système quadratique. Montrez à l'aide d'un schéma qu'un axe C4 sera forcément orienté selon la direction z.

2pts

Exercice 2Considérons le composé organique $C_7H_6O_3$. Il cristallise en $P2_1/c$ (n°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

a) Y a-t-il des atomes en position particulière ?

1 pt

b) Quel est le motif ?

1 pt

c) Calculez la masse volumique cristallographique.

2 pts

Exercice 3

Soient 2 oxydes de fer, la wustite et la magnétite. Les deux phases sont cubiques,

 $a = 4.311 \text{ \AA}$ (n° 225) pour la première avec Fe en (0 0 0) et O en ($\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$)

et $a = 8.395 \text{ \AA}$ (n° 227) pour la seconde avec

Fe1	($\frac{1}{8}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{8}$)
Fe2	($\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$)
O	(0.2546	0.2546	0.2546).

1 – Donnez le motif et le nombre de motifs par maille des 2 composés.

1pt

2 – Quelle taille maximale aurait un ion inséré dans les sites tétraédriques de la wustite ?

Démontrez-le.

3 pts

Exercice 4

Un oxyde de titane (Ti) et de baryum (Ba) cristallise dans le système cubique. On y trouve un atome de baryum à chaque sommet du cube, un atome de titane au centre et un atome d'oxygène au centre de chaque face du cube, sa masse volumique est 6.02g.cm^{-3} .

- a) Donnez la formule chimique du composé 1pt
- b) Donnez la coordinence du titane et du baryum 2pts

Un fluorure de manganèse (Mn) et de potassium (K) cristallise dans le système cubique. La coordinence du potassium est 12 et celle du manganèse est 6. On trouve un atome de manganèse à chaque sommet du cube, un atome de fluor (F) au milieu de chaque arête du cube, sa masse volumique est 3.41g.cm^{-3} .

- c) Donnez la position du potassium 1pt
- d) Montrez que le paramètre de maille de ces 2 structures est le même à 5% près 3pts

Données

$N_A = 6.02 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$; $e = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$; $\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12} \text{ F.m}^{-1}$

Rayons : $r(\text{Fe}) = 0.126 \text{ nm}$; $r(\text{Fe}^{\text{II}}) = 0.076 \text{ nm}$; $r(\text{Fe}^{\text{III}}) = 0.064 \text{ nm}$; $r(\text{O}) = 0.060 \text{ nm}$; $r(\text{O}^{\text{II}}) = 0.140 \text{ nm}$

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 : $d = \sin \beta / \sqrt{(\frac{h^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} + \frac{k^2}{b^2} \sin^2 \beta - 2hl \frac{\cos \beta}{ac})}$

$P2_1/c$

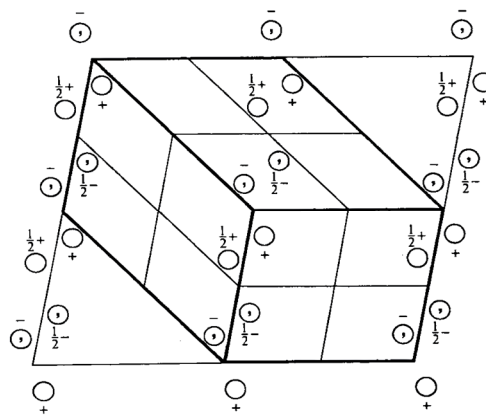
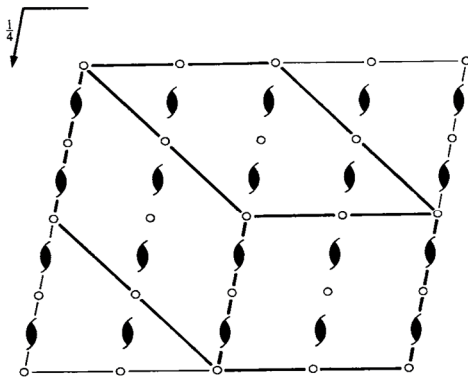
C_{2h}^5

$2/m$

Monoclinic

No. 14

UNIQUE AXIS b , DIFFERENT CELL CHOICES



Origin 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) $x, \bar{y} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$

General:

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

Special: as above, plus

$hkl : k + l = 2n$

$hkl : k + l = 2n$

$hkl : k + l = 2n$

$hkl : k + l = 2n$

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 $\bar{1}$ $0, 0, 0$ $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

$Fm\bar{3}m$ O_h^5 $m\bar{3}m$

Cubic

No. 225

 $F 4/m \bar{3} 2/m$ Patterson symmetry $Fm\bar{3}m$ **Positions**Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

 $(0,0,0)+ (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})+ (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})+ (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)+$

Reflection conditions

 h, k, l permutable

(...)

4 b $m\bar{3}m$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

no extra conditions

4 a $m\bar{3}m$ 0,0,0

no extra conditions

 $Fd\bar{3}m$ O_h^7 $m\bar{3}m$

Cubic

No. 227

 $F 4_1/d \bar{3} 2/m$ Patterson symmetry $Fm\bar{3}m$ Origin at centre ($\bar{3}m$), at $\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}$ from $\bar{4}3m$ **Positions**Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

 $(0,0,0)+ (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})+ (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})+ (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)+$

Reflection conditions

 h, k, l permutable

General:

(...)

96	g	$\dots m$	x, x, z	$\bar{x} + \frac{3}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}, z + \frac{1}{2}$	$\bar{x} + \frac{1}{4}, x + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{3}{4}$	$x + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{3}{4}, \bar{z} + \frac{1}{4}$	no extra conditions
			z, x, x	$z + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{3}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}$	$\bar{z} + \frac{3}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}, x + \frac{1}{2}$	$\bar{z} + \frac{1}{4}, x + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{3}{4}$	
			x, z, x	$\bar{x} + \frac{1}{4}, z + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{3}{4}$	$x + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{3}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}$	$\bar{x} + \frac{3}{4}, \bar{z} + \frac{1}{4}, x + \frac{1}{2}$	
			$x + \frac{3}{4}, x + \frac{1}{4}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \bar{x}, \bar{z}$	$x + \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{1}{2}, z + \frac{3}{4}$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{3}{4}, z + \frac{1}{4}$	
			$x + \frac{3}{4}, z + \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{1}{2}$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, z + \frac{3}{4}, x + \frac{1}{4}$	$\bar{x}, \bar{z}, \bar{x}$	$x + \frac{1}{4}, \bar{z} + \frac{1}{2}, x + \frac{3}{4}$	
			$z + \frac{3}{4}, x + \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{1}{2}$	$z + \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{3}{4}$	$\bar{z} + \frac{1}{2}, x + \frac{3}{4}, x + \frac{1}{4}$	$\bar{z}, \bar{x}, \bar{x}$	

48	f	$2 \dots mm$	$x, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}$	$\bar{x} + \frac{3}{4}, \frac{1}{8}, \frac{5}{8}$	$\frac{1}{8}, x, \frac{1}{8}$	$\frac{5}{8}, \bar{x} + \frac{3}{4}, \frac{1}{8}$	$\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, x$	$\frac{1}{8}, \frac{5}{8}, \bar{x} + \frac{3}{4}$	$hkl : h = 2n + 1$
			$\frac{7}{8}, x + \frac{1}{4}, \frac{3}{8}$	$\frac{7}{8}, \bar{x}, \frac{7}{8}$	$x + \frac{3}{4}, \frac{3}{8}, \frac{3}{8}$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, \frac{7}{8}, \frac{3}{8}$	$\frac{7}{8}, \frac{3}{8}, \bar{x} + \frac{1}{2}$	$\frac{3}{8}, \frac{3}{8}, x + \frac{3}{4}$	or $h + k + l = 4n$

32	e	$\dots 3m$	x, x, x	$\bar{x} + \frac{3}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}, x + \frac{1}{2}$	$x + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{3}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}$	$\bar{x}, \bar{x}, \bar{x}$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{3}{4}, x + \frac{1}{4}$	no extra conditions
			$\bar{x} + \frac{1}{4}, x + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{3}{4}$	$x + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{3}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}$				
			$x + \frac{3}{4}, x + \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \bar{x}, \bar{x}$				
			$x + \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{3}{4}$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{3}{4}, x + \frac{1}{4}$				

16	d	$\dots \bar{3}m$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, 0$	$\frac{3}{4}, 0, \frac{1}{4}$	$0, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$	} $hkl : h = 2n + 1$ or $h, k, l = 4n + 2$ or $h, k, l = 4n$
16	c	$\dots \bar{3}m$	0,0,0	$\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}$	$\frac{1}{2}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}$	

8	b	$\bar{4}3m$	$\frac{3}{8}, \frac{3}{8}, \frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}, \frac{5}{8}, \frac{1}{8}$	} $hkl : h = 2n + 1$ or $h + k + l = 4n$
8	a	$\bar{4}3m$	$\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}$	$\frac{7}{8}, \frac{3}{8}, \frac{3}{8}$	

Symmetry of special projectionsAlong [001] $p4mm$ $\mathbf{a}' = \frac{1}{4}(\mathbf{a} - \mathbf{b})$ $\mathbf{b}' = \frac{1}{4}(\mathbf{a} + \mathbf{b})$ Origin at $\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, z$ Along [111] $p6mm$ $\mathbf{a}' = \frac{1}{6}(2\mathbf{a} - \mathbf{b} - \mathbf{c})$ $\mathbf{b}' = \frac{1}{6}(-\mathbf{a} + 2\mathbf{b} - \mathbf{c})$ Origin at x, x, x Along [110] $c2mm$ $\mathbf{a}' = \frac{1}{2}(-\mathbf{a} + \mathbf{b})$ $\mathbf{b}' = \mathbf{c}$ Origin at $x, x, 0$

TABLEAU PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENTS

1 H hydrogène 1.00794	2 He hélium 4.002602 2											18																
3 Li lithium 6.941	4 Be béryllium 9.012182											17																
5 Na sodium 22.98976 11	6 Mg magnésium 24.3050 12											16																
7 K potassium 39.0983 19	8 Ca calcium 40.078 20	9 Sc scandium 44.95591 21	10 Ti titane 47.867 22	11 V vanadium 50.9415 23	12 Cr chrome 51.9962 24	13 Mn manganèse 54.93804 25	14 Fe fer 55.845 26	15 Ni nickel 58.6934 28	16 Cu cuivre 63.546 29	17 Zn zinc 65.38 30	18 Ga gallium 69.723 31	19 Ge germanium 72.64 32	20 As arsenic 74.92160 33	21 Se sélénium 78.96 34	22 Br brome 79.904 35	23 Kr krypton 83.798 36												
24 Rb rubidium 85.4678 37	25 Sr strontium 87.62 38	26 Y yttrium 88.90585 39	27 Zr zirconium 91.224 40	28 Nb niobium 92.90638 41	29 Mo molybdène 95.96 42	30 Tc technétium 98 43	31 Ru ruthénium 101.07 44	32 Rh rhodium 102.9055 45	33 Pd palladium 106.42 46	34 Ag argent 107.8682 47	35 Cd cadmium 112.411 48	36 In indium 114.818 49	37 Sn étain 118.710 50	38 Sb antimoine 121.760 51	39 I iode 126.9044 53	40 Xe xénon 131.293 54												
41 Cs césium 132.9054 55	42 Ba barium 137.327 56	lanthanides 57-71		43 Ta tantalum 180.9478 73	44 W tungstène 183.84 74	45 Re rhenium 186.207 75	46 Os osmium 190.23 76	47 Pt platine 195.084 78	48 Au or 196.9665 79	49 Hg mercure 200.59 80	50 Tl thallium 204.3833 81	51 Pb plomb 207.2 82	52 Bi bismuth 208.9804 83	53 Po polonium 210 84	54 At astate 210 85	55 Rn radon 222 86												
56 Fr francium 223 87	57 Ra radium 226 88	actinides 89-103		58 Ce cérium 140.116 58	59 Pr praseodyme 140.9076 59	60 Nd néodyme 144.242 60	61 Pm prométhium 145 61	62 Eu europium 151.964 63	63 Gd gadolinium 157.25 64	64 Tb terbium 158.9253 65	65 Dy dysprosium 162.500 66	66 Ho holmium 164.9303 67	67 Er erbium 167.259 68	68 Tm thulium 168.9342 69	69 Yb ytterbium 173.054 70	70 Lu lutécium 174.9668 71												
71 La lanthane 138.9054 57	72 Ce cérium 140.116 58	73 Pr praseodyme 140.9076 59	74 Nd néodyme 144.242 60	75 Pm prométhium 145 61	76 Eu europium 151.964 63	77 Gd gadolinium 157.25 64	78 Tb terbium 158.9253 65	79 Dy dysprosium 162.500 66	80 Ho holmium 164.9303 67	81 Er erbium 167.259 68	82 Tm thulium 168.9342 69	83 Yb ytterbium 173.054 70	84 Lu lutécium 174.9668 71	85 Ac actinium 227 89	86 Th thorium 232.0380 90	87 Pa protactinium 231.0358 91	88 U uranium 238.0289 92	89 Np neptunium 237 93	90 Pu plutonium 244 94	91 Am américium 243 95	92 Cm curium 247 96	93 Bk berkélium 247 97	94 Cf californium 251 98	95 Es einsteinium 252 99	96 Fm fermium 257 100	97 Md mendélévium 258 101	98 No nobélium 259 102	99 Lr lawrencium 262 103

Masse atomique → 55.845 ← Numéro atomique
(nombre de protons dans le noyau)

→ **Fe** →
Symbole chimique →
Nom → fer

- métaux alcalins
- alcalino-terreux
- métaux pauvres
- métaux de transition
- métalloïdes
- non-métaux
- halogènes
- gaz rares

Sources : IUPAC, Wikimedia Commons