

DEVOIR SURVEILLE de CHIMIE

Année : 2013

1^{ère} année de 1^{er} cycle

Date du D.S. : jeudi 6 juin 2013

Durée : 1h30

Aucun document supplémentaire n'est autorisé. Les étudiants étrangers peuvent consulter un dictionnaire de traduction (électronique ou papier). **à rédiger sur copies bleues ou roses**

Exercice 1 :

Le groupe d'espace n°3 a pour notation Hermann-Mauguin simplifiée C2.

C'est un système monoclinique.

Quelle est sa notation complète ? Expliquez succinctement (3 lignes max). 2 points

Exercice 2 :

Il existe 7 systèmes cristallins et 4 modes de réseau, pourtant leurs combinaisons conduisent à seulement 14 réseaux de Bravais. Pourquoi ? (3 lignes max)

Donnez un exemple illustrant votre explication. 3 points

Exercice 3 :

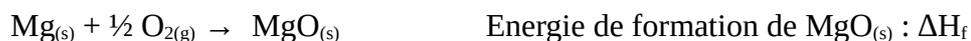
Soit un solide ionique cristallisé de structure type NaCl.

a) Quel est le mode de réseau de ce composé ? 1 point

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

b) Quelle est la taille maximale du cation que l'on peut insérer dans les sites octaédriques sans agrandir la maille ? 2 points

L'énergie réticulaire de ce solide est calculée à l'aide d'un cycle de Born-Haber.

c) Complétez l'égalité : $E_R = \Delta H_f - (\dots)$ 2 pointsExercice 4 :Considérons le fer (phase α) qui cristallise dans le système cubique, mode de réseau I.a = 2,886 Å et $M_{\text{motif}} = 55,85 \text{ g/mol}$.

a) Calculez la masse volumique cristallographique du composé. 2 points

b) Listez les 10 premiers plans (hkl) susceptibles de diffracter (inutile de lister les indices négatifs ni de donner toutes les permutations de position possibles) 2 points

Une étude par diffraction des rayons X est réalisée (anticathode de Cu : $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$).c) Calculez les 2 plus petits angles de diffraction θ 2 points

Exercice 5 :

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

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

- | | | |
|----|--|----------------|
| a) | Donnez le(s) site(s) de Wyckoff des atomes d'oxygène | <i>1 point</i> |
| b) | Quel est le nombre de motifs par maille ? | <i>1 point</i> |
| c) | Calculez le volume de la maille. | <i>1 point</i> |
| d) | Calculez la masse volumique cristallographique. | <i>1 point</i> |

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

Volume de maille en triclinique : $[a^2b^2c^2 (1 - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\beta) - \cos^2(\gamma) + 2\cos(\alpha) \cos(\beta) \cos(\gamma))]^{1/2}$

Distance inter-réticulaire en cubique : $d_{hkl} = a / (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$

Condition d'existence de la diffraction X en cubique, réseau F : $h + k = 2n$; $h + l = 2n$; $k + l = 2n$

Condition d'existence de la diffraction X en cubique, réseau I : $h + k + l = 2n$ (n entier)

Monoclinic $2/m$

$P 1 2_1/c 1$

No. 14

$P 2_1/c$
 C_{2h}^5

Origin at $\bar{1}$; unique axis b 2ND SETTING

Number of positions, Wyckoff notation, and point symmetry		Co-ordinates of equivalent positions	Conditions limiting possible reflections
4	<i>e</i>	1	<p>General:</p> <p>hkl: No conditions $h0l$: $l=2n$ $0k0$: $k=2n$</p>
2	<i>d</i>	$\bar{1}$	<p>Special: as above, plus</p> <p>hkl: $k+l=2n$</p>
2	<i>c</i>	$\bar{1}$	
2	<i>b</i>	$\bar{1}$	
2	<i>a</i>	$\bar{1}$	

Symmetry of special projections

(001) pgm ; $a' = a, b' = b$

(100) pgg ; $b' = b, c' = c$

(010) $p2$; $c' = c/2, a' = a$