

DEVOIR SURVEILLE de CHIMIE

Année : 2024

Date du D.S. : jeudi 27 Mars 2025

1^{ère} année STPI.

Durée : 1 heure 30.

CODE BARRE*Aucun document n'est autorisé.**Les calculatrices STPI type collège sont autorisées.**Vous répondrez directement sur le sujet.*

Nombre total de pages : 8

Vous disposez à la fin du sujet des données nécessaires à ce sujet de DS**Exercice 1 : (Questions de cours, 6 points)**

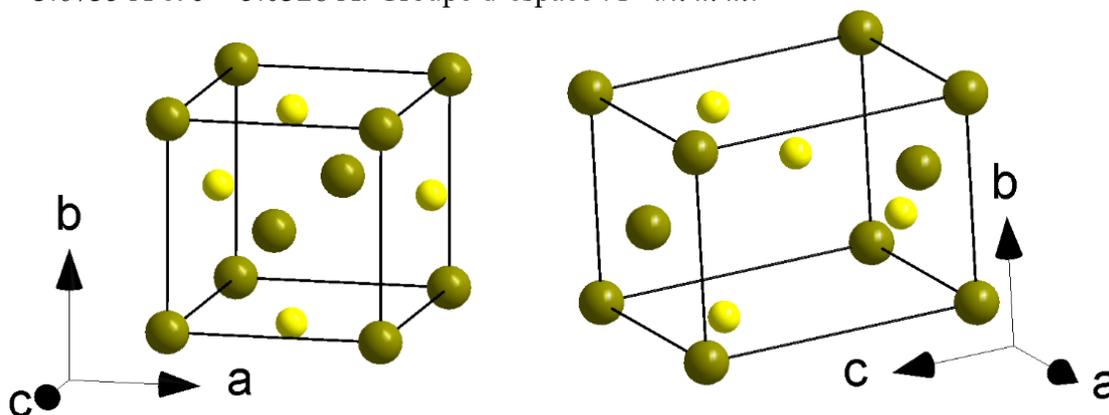
1) Qu'est-ce qu'une maille ?

2) Qu'est-ce qu'un composé ionique ?

3) Quelles sont les deux structures métalliques les plus compactes ?

Exercice 2 : Etude de la Mackinawite (20 points)

Ce composé est un sulfure métallique constitué de fer (Fe) et de soufre (S).

La structure est présentée ci-dessous (deux vues différentes de la même structure) avec les atomes de fer (grosses sphères grises) et les atomes de soufre (petites sphères blanches), $a = 3.6735 \text{ \AA}$ et $c = 5.0328 \text{ \AA}$. Groupe d'espace : $P 4/n m m$.

1) Déterminer le motif et le nombre de motif dans la maille via la structure ci-dessus.

2) Calculer les distances Fe-Fe et Fe-S les plus courtes dans cette structure.

3) Quel est le système cristallin ? Justifier.

4) Quel est le mode de réseau ? Justifier.

5) Cette structure présente des miroirs m . Que deviennent les coordonnées (x, y, z) à travers un miroir selon le plan (ac) ?

6) Le fer et le soufre sont respectivement en position de Wyckoff $2a$ et $2c$ (*extrait Position Wyckoff ci-dessous*). Est-ce en accord avec la définition du motif et du nombre de motif de la question 1 ? Justifier.

4	d	$\dots 2/m$	$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0$	$\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 0$	$\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, 0$	$\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, 0$
2	c	$4 m m$	$0, \frac{1}{2}, z$	$\frac{1}{2}, 0, \bar{z}$		
2	b	$\bar{4} m 2$	$0, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$		
2	a	$\bar{4} m 2$	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$		

7) Le fer et le soufre sont-ils en positions générales ? Particulières ? Justifier.

8) Quelle est la coordinence et la géométrie autour des atomes de Fe (prendre un atome au sommet de la maille) ?

9) Calculer la compacité de cette structure.

10) Calculer la masse volumique de cette structure.

11) Existe-t-il des conditions d'extinction en lien avec le mode de réseau ? quelle sera la première famille de plans hkl observée sur un diagramme de poudre ? Justifier.

12) On enregistre le diagramme de poudre sous irradiation au cuivre $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$. Quelles seront les valeurs 2θ pour la famille de plans 011 et 002 sachant que dans cette structure, la distance inter-réticulaire est égale à $d = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2\left(\frac{a^2}{c^2}\right)}}$?

Plans 011 :

Plans 002 :

Exercice 3 : Etude de la Troilite (14 points)

Ce composé est aussi un sulfure métallique constituée de fer (Fe) et de soufre (S). $a = 5.9680 \text{ \AA}$ $c = 11.7400 \text{ \AA}$, $\gamma = 120^\circ$. Groupe d'espace : $P \bar{6} 2 c$ (n°190). La fiche du groupe d'espace est fournie à la fin du sujet.

1) Quel est le système cristallin et le mode de réseau de ce composé ? Justifier.

- 2) Il y a un fer indépendant Fe (0.3600, 0.0400, 0.1255) et 3 sulfures indépendants S_1 (0, 0, 0), S_2 (1/3, 2/3, 0.016) et S_3 (x, y, 1/4). Définir le motif et le nombre de motif de la Troilite.

--

- 3) Sur quel élément de symétrie se trouvent les sulfures indépendants S_2 (1/3, 2/3, 0.016) et S_3 (x, y, 1/4) ?

S_2 (1/3, 2/3, 0.016) :	S_3 (x, y, 1/4) :
---------------------------	---------------------

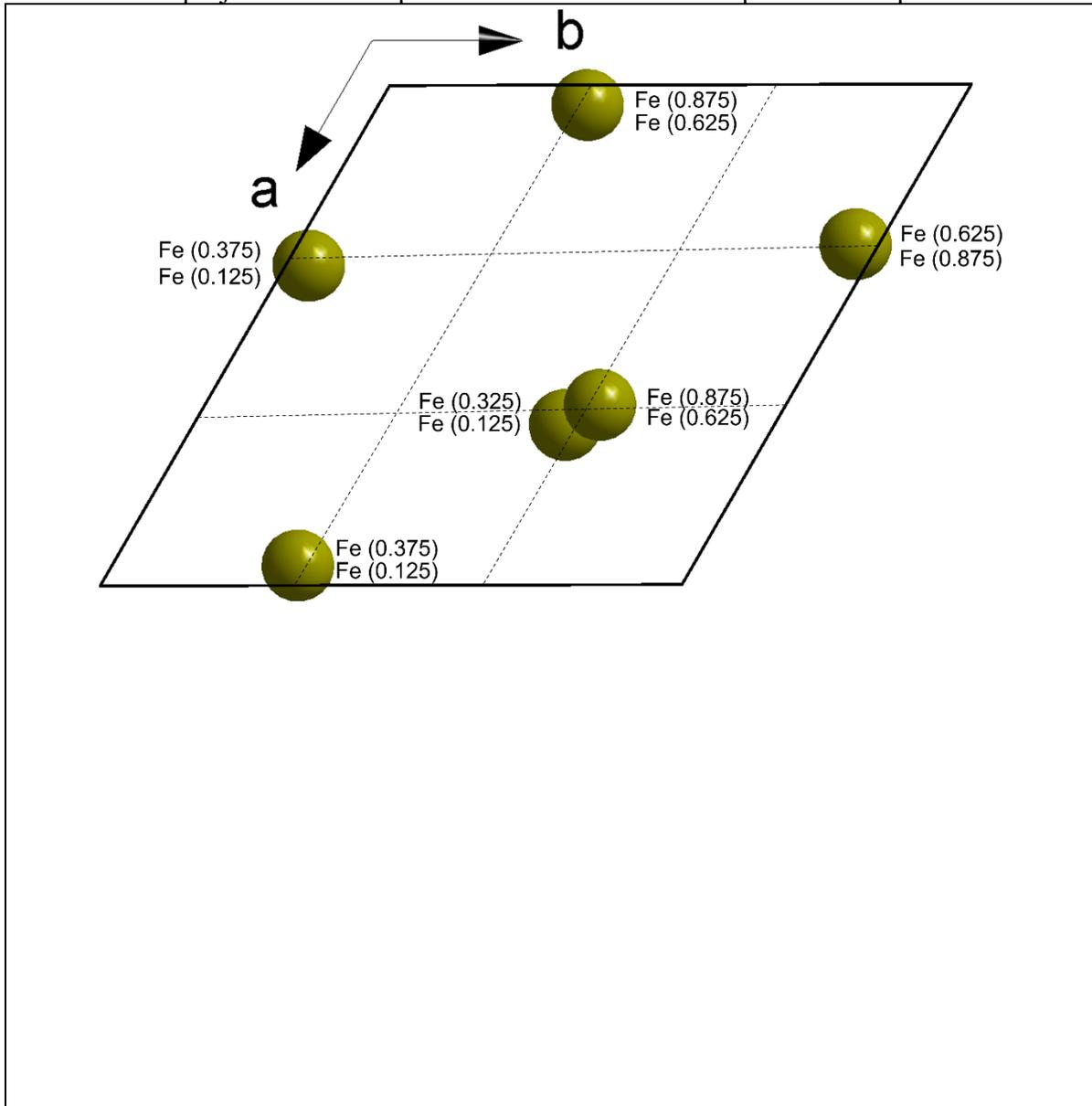
- 4) Calculer la compacité de cette structure.

--

- 5) Calculer la masse volumique de cette structure.

--

- 6) Voici une projection partielle selon Oz (selon plan ab) ou sont placés les atomes de fer. Déterminer l'ensemble des positions générées pour les 3 atomes de soufres indépendants S_1 , S_2 et S_3 . Pour S_3 , on prendra $x=2/3$ et $y=0$. Rajouter tous les soufres dans la projection en indiquant leurs coordonnées manquantes entre parenthèses.



- 7) On enregistre le diagramme de poudre sous irradiation au cuivre $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$. Quelle sera la valeur 2θ pour la famille de plans 114 (raie la plus intense) sachant que dans cette structure, la distance inter-réticulaire est égale à $d = \frac{a}{\sqrt{\left(\frac{4}{3}(h^2+k^2+hk)+l^2\left(\frac{a^2}{c^2}\right)\right)}}$.

Rappels et données :

$r_S = 1.04 \text{ \AA} ; r_{Fe} = 1.24 \text{ \AA}$

TABLEAU PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENTS

GROUPE		PÉRIODE															
1 IA												18 VIIIA					
1												2					
H												He					
HYDROGÈNE												Hélium					
3												10					
Li												Ne					
LITHIUM												Néon					
4												18					
Be												Ar					
Béryllium												Argon					
11												36					
Na												Kr					
Sodium												Krypton					
3												54					
Mg												Xe					
Magnésium												Xénon					
19												86					
K												Rn					
Potassium												Radon					
4												118					
Ca												Og					
Calcium												Oganesson					
37												118					
Rb												Og					
Rubidium												Oganesson					
55												118					
Cs												Og					
Césium												Oganesson					
87												118					
Fr												Og					
Francium												Oganesson					
1												18					
IA												VIIIA					
2												18					
IIA												VIIIA					
3												18					
IIIB												VIIIA					
4												18					
IVB												VIIIA					
5												18					
VB												VIIIA					
6												18					
VIB												VIIIA					
7												18					
VIIB												VIIIA					
8												18					
VIII												VIIIA					
9												18					
VIII												VIIIA					
10												18					
VIII												VIIIA					
11												18					
IB												VIIIA					
12												18					
IIB												VIIIA					
13												18					
IIIA												VIIIA					
5												10					
B												Ne					
Bore												Néon					
6												18					
C												Ar					
Carbone												Argon					
7												36					
N												Kr					
Azote												Krypton					
8												54					
O												Xe					
Oxygène												Xénon					
9												86					
F												Rn					
Fluor												Radon					
10												118					
Ne												Og					
Néon												Oganesson					
11												118					
Al												Og					
Aluminium												Oganesson					
12												118					
Si												Og					
Silicium												Oganesson					
13												118					
P												Og					
Phosphore												Oganesson					
14												118					
S												Og					
Soufre												Oganesson					
15												118					
Cl												Og					
Chlore												Oganesson					
16												118					
Br												Og					
Brome												Oganesson					
17												118					
I												Og					
Iode												Oganesson					
18												118					
Xe												Og					
Xénon												Oganesson					
		LANTHANIDES															
		ACTINIDES															



www.periodni.com

(1) Atomic weights of the elements 2013, Pure Appl. Chem., 88, 265-291 (2016)

Copyright © 2017 Enl Generatic