

DEVOIR SURVEILLE de CHIMIE

Année : 2026

Date du D.S. : jeudi 26 Mars 2026

1^{ère} année STPL

Durée : 1 heure 30.

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

Nombre total de pages : 12 (dont Fiches et tableau périodique)

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

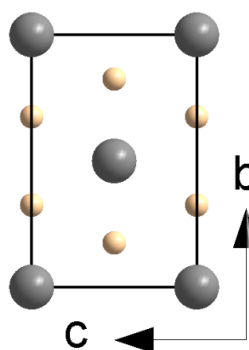
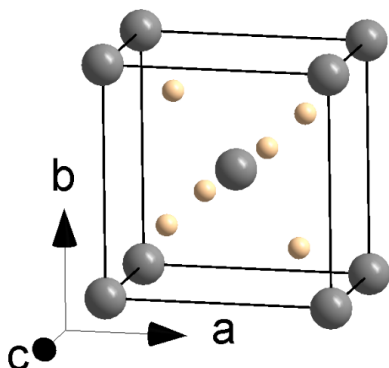
1) Qu'est-ce qu'une unité asymétrique ?

2) Qu'est-ce qu'un composé covalent ?

3) Quels sont les points communs et les différences entre le graphite et le diamant ?

Exercice 2 : Etude de l'Hydrophilite (20 points)

Ce composé est un chlorure de calcium constitué d'ions calciums (Ca) et d'ions chlorures (Cl). La structure est présentée ci-dessous (2 vues différentes) avec les ions calciums (grosses sphères grises) et les ions chlorures (petites sphères blanches). Les ions chlorures sont soit dans la maille soit sur une face. Paramètres de maille : $a = 6.24 \text{ \AA}$, $b = 6.43 \text{ \AA}$, et $c = 4.20 \text{ \AA}$, Groupe d'espace : $P n n m$. La fiche du groupe d'espace est fournie à la fin du sujet.



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

2) Quels sont les nombres d'oxydation de l'ion calcium et de l'ion Chlorure ?

3) Quelles sont les coordinences respectives d'un ion calcium et d'un ion chlorure ?
Quelles sont les géométries autour d'un ion calcium et d'un ion chlorure ?

4) Calculer la distance calcium-chlorure (Ca-Cl) la plus courte dans cette structure.

5) Quel est le système cristallin ? Justifier.

6) Quel est le mode de réseau ? Justifier.

7) Une position indépendante est fournie pour chacun des ions :

	x	y	z
Ca	0	0	0
Cl	0.275	0.325	0

Sur quelles positions de Wickoff se situent ces ions ? Est-ce en accord avec la définition du motif et du nombre de motif de la question 1 ? Justifier.

8) Les ions calciums et chlorures sont-ils en positions générales ? Particulières ? Justifier.

9) Calculer la compacité de cette structure.

10) Calculer la masse volumique de cette structure.

11) Quelles sont les conditions d'extinctions en lien avec cette structure ? Justifier.

12) On mesure le diagramme de poudre avec une anode au cuivre $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$. Quelles seront les valeurs 2θ pour la famille de plans 110 et 020 sachant que dans cette structure, la distance inter-réticulaire est égale à $d = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$?

Plans 110 :

Plans 020 :

13) Si on change la longueur d'onde d'irradiation et qu'on utilise une anode de fer $\lambda = 1.9361 \text{ \AA}$. Quel sera l'effet sur les pics de diffraction en 2θ (°) ?

Exercice 3 : Etude de l'anhydrite (14 points)

Ce composé est un composé iono-covalent qui cristallise dans le Groupe d'espace : $C 2 2 2$ (n°21) avec les paramètres de mailles : $a = 12.0777 \text{ \AA}$, $b = 6.9723 \text{ \AA}$ et $c = 6.3040 \text{ \AA}$. La fiche du groupe d'espace est fournie à la fin du sujet. Les atomes indépendants sont fournis :

	x	y	z
Ca	1/4	1/4	0.666
Ca	0	0	0
S	0	0	1/2
S	1/4	1/4	0.165
O	0.071	0.884	0.355
O	0.227	0.415	0.305
O	0.349	0.274	0.029

1) Sur quels axes cristallographiques se situent les axes 2 ?

2) Un atome/ion est situé en coordonnées (x, y, z), que deviennent ses coordonnées à travers un axe 2 selon l'axe x ?

3) Quel sont le système cristallin et le mode de réseau de ce composé ? Justifier.

4) Définir le motif et le nombre de motif de l'anhydrite.

5) Justifier le fait que ce composé est iono-covalent.

6) Déterminer l'ensemble des positions générées pour les calcium et soufres indépendants. Veuillez compléter la projection suivante selon Oy (selon plan ac) en positionnant les calciums et les soufres (pas les oxygènes).

7) Calculer la masse volumique de cette structure.

Données :

$r_{Ca} = 1.97 \text{ \AA}$; $r_{Ca^{2+}} = 0.99 \text{ \AA}$; $r_{Cl} = 0.99 \text{ \AA}$ et $r_{Cl^-} = 1.81 \text{ \AA}$.

$V = \sqrt{a^2 b^2 c^2 (1 - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\beta) - \cos^2(\gamma) + 2 \cos(\alpha) \cos(\beta) \cos(\gamma))}$.

$N_A = 6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$.

$Pnnm$

D_{2h}^{12}

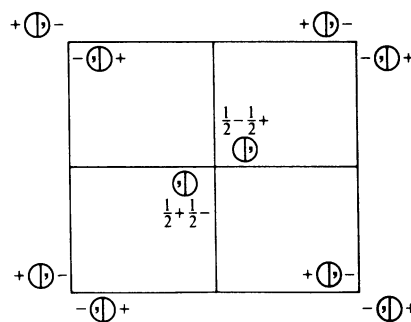
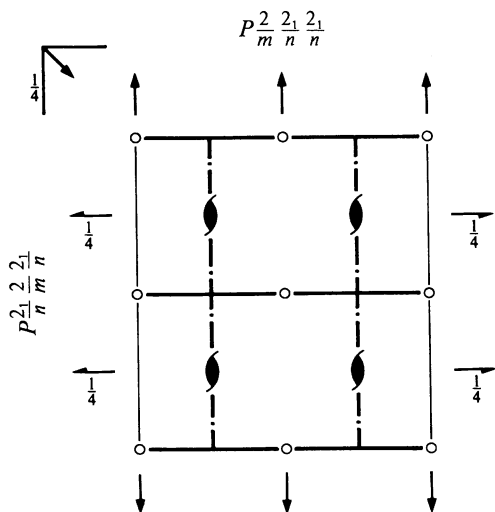
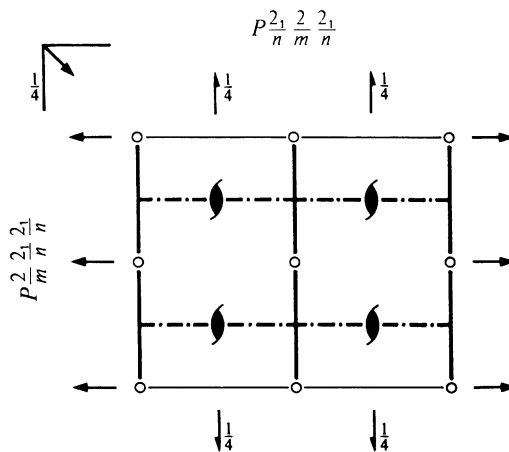
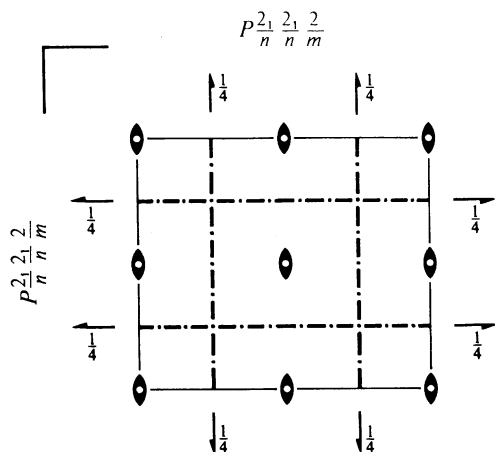
mmm

Orthorhombic

No. 58

$P 2_1/n 2_1/n 2/m$

Patterson symmetry $Pmmm$



Origin at centre ($2/m$)

Asymmetric unit $0 \leq x \leq \frac{1}{2}; 0 \leq y \leq \frac{1}{2}; 0 \leq z \leq \frac{1}{2}$

Symmetry operations

- | | | | |
|---------------------------|---------------------|--|--|
| (1) 1 | (2) $2 \quad 0,0,z$ | (3) $2(0,\frac{1}{2},0) \quad \frac{1}{4},y,\frac{1}{4}$ | (4) $2(\frac{1}{2},0,0) \quad x,\frac{1}{4},\frac{1}{4}$ |
| (5) $\bar{1} \quad 0,0,0$ | (6) $m \quad x,y,0$ | (7) $n(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}) \quad x,\frac{1}{4},z$ | (8) $n(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}) \quad \frac{1}{4},y,z$ |

Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; (2); (3); (5)

Positions

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry		Coordinates				Reflection conditions
						General:
8	<i>h</i> 1	(1) x, y, z (5) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$	(2) $\bar{x}, \bar{y}, z$ (6) $x, y, \bar{z}$	(3) $\bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$ (7) $x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$	(4) $x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$ (8) $\bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$	$0kl : k + l = 2n$ $h0l : h + l = 2n$ $h00 : h = 2n$ $0k0 : k = 2n$ $00l : l = 2n$
						Special: as above, plus
4	<i>g</i> .. <i>m</i>	$x, y, 0$	$\bar{x}, \bar{y}, 0$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	no extra conditions
4	<i>f</i> .. 2	$0, \frac{1}{2}, z$	$\frac{1}{2}, 0, \bar{z} + \frac{1}{2}$	$0, \frac{1}{2}, \bar{z}$	$\frac{1}{2}, 0, z + \frac{1}{2}$	$hkl : h + k + l = 2n$
4	<i>e</i> .. 2	$0, 0, z$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	$0, 0, \bar{z}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$	$hkl : h + k + l = 2n$
2	<i>d</i> .. $2/m$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, 0$			$hkl : h + k + l = 2n$
2	<i>c</i> .. $2/m$	$0, \frac{1}{2}, 0$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$			$hkl : h + k + l = 2n$
2	<i>b</i> .. $2/m$	$0, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$			$hkl : h + k + l = 2n$
2	<i>a</i> .. $2/m$	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$			$hkl : h + k + l = 2n$

Symmetry of special projections

Along $[001]$ $p2gg$
 $\mathbf{a}' = \mathbf{a}$ $\mathbf{b}' = \mathbf{b}$
 Origin at $0, 0, z$

Along $[100]$ $c2mm$
 $\mathbf{a}' = \mathbf{b}$ $\mathbf{b}' = \mathbf{c}$
 Origin at $x, 0, 0$

Along $[010]$ $c2mm$
 $\mathbf{a}' = \mathbf{c}$ $\mathbf{b}' = \mathbf{a}$
 Origin at $0, y, 0$

Maximal non-isomorphic subgroups

I	[2] $Pnn2$ (34)	1; 2; 7; 8
	[2] $Pn2_1m$ ($Pmn2_1$, 31)	1; 3; 6; 8
	[2] $P2_1nm$ ($Pmn2_1$, 31)	1; 4; 6; 7
	[2] $P2_12_12$ (18)	1; 2; 3; 4
	[2] $P12_1/n1$ ($P2_1/c$, 14)	1; 3; 5; 7
	[2] $P2_1/n11$ ($P2_1/c$, 14)	1; 4; 5; 8
	[2] $P112/m$ ($P2/m$, 10)	1; 2; 5; 6

IIa none

IIb none

Maximal isomorphic subgroups of lowest index

IIc [3] $Pnnm$ ($\mathbf{a}' = 3\mathbf{a}$ or $\mathbf{b}' = 3\mathbf{b}$) (58); [3] $Pnnm$ ($\mathbf{c}' = 3\mathbf{c}$) (58)

Minimal non-isomorphic supergroups

I	[2] $P4/mnc$ (128); [2] $P4_2/mnm$ (136)
II	[2] $Amam$ ($Cmcm$, 63); [2] $Bbmm$ ($Cmcm$, 63); [2] $Cccm$ (66); [2] $Immm$ (71); [2] $Pncm$ ($\mathbf{a}' = \frac{1}{2}\mathbf{a}$) ($Pmna$, 53); [2] $Pcnm$ ($\mathbf{b}' = \frac{1}{2}\mathbf{b}$) ($Pmna$, 53); [2] $Pbam$ ($\mathbf{c}' = \frac{1}{2}\mathbf{c}$) (55)

$C222$

No. 21

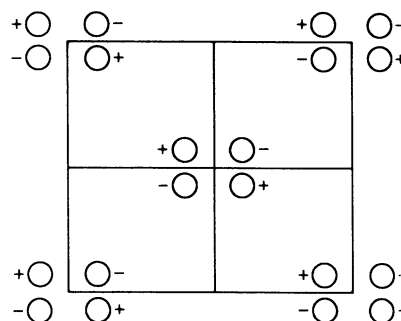
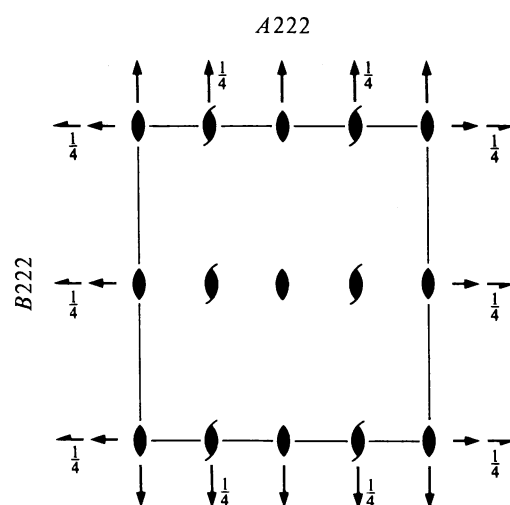
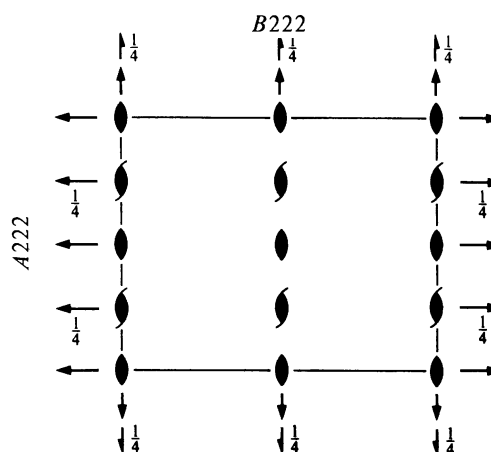
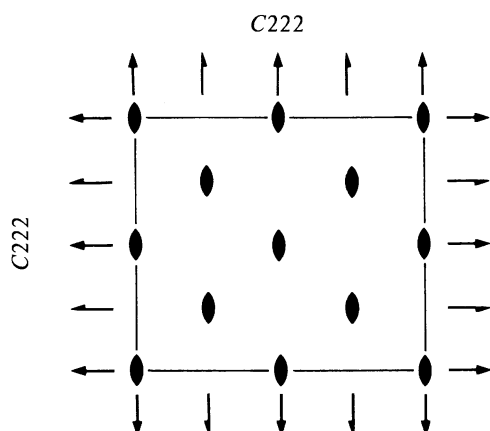
D_2^6

$C222$

222

Orthorhombic

Patterson symmetry $Cmmm$



Origin at 222

Asymmetric unit $0 \leq x \leq \frac{1}{4}; 0 \leq y \leq \frac{1}{2}; 0 \leq z \leq 1$

Symmetry operations

For $(0,0,0)+$ set

- (1) 1 (2) 2 $0,0,z$ (3) 2 $0,y,0$ (4) 2 $x,0,0$

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

- (1) $t(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$ (2) 2 $\frac{1}{4},\frac{1}{4},z$ (3) $2(0,\frac{1}{2},0) \frac{1}{4},y,0$ (4) $2(\frac{1}{2},0,0) x,\frac{1}{4},0$

Generators selected $(1); t(1,0,0); t(0,1,0); t(0,0,1); t(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0); (2); (3)$

Positions

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry			Coordinates				Reflection conditions	
			$(0,0,0)+ \quad (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)+$				General:	
8	<i>l</i>	1	(1) x,y,z	(2) $\bar{x},\bar{y},z$	(3) $\bar{x},y,\bar{z}$	(4) $x,\bar{y},\bar{z}$	$hkl : h+k=2n$ $0kl : k=2n$ $h0l : h=2n$	$hk0 : h+k=2n$ $h00 : h=2n$ $0k0 : k=2n$
							Special: as above, plus	
4	<i>k</i>	. . 2	$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, z$	$\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \bar{z}$			$hk0 : h=2n$	
4	<i>j</i>	. . 2	$0, \frac{1}{2}, z$	$0, \frac{1}{2}, \bar{z}$			no extra conditions	
4	<i>i</i>	. . 2	$0, 0, z$	$0, 0, \bar{z}$			no extra conditions	
4	<i>h</i>	. 2 .	$0, y, \frac{1}{2}$	$0, \bar{y}, \frac{1}{2}$			no extra conditions	
4	<i>g</i>	. 2 .	$0, y, 0$	$0, \bar{y}, 0$			no extra conditions	
4	<i>f</i>	2 . .	$x, 0, \frac{1}{2}$	$\bar{x}, 0, \frac{1}{2}$			no extra conditions	
4	<i>e</i>	2 . .	$x, 0, 0$	$\bar{x}, 0, 0$			no extra conditions	
2	<i>d</i>	2 2 2	$0, 0, \frac{1}{2}$				no extra conditions	
2	<i>c</i>	2 2 2	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$				no extra conditions	
2	<i>b</i>	2 2 2	$0, \frac{1}{2}, 0$				no extra conditions	
2	<i>a</i>	2 2 2	$0, 0, 0$				no extra conditions	

Symmetry of special projections

Along $[001]$ $c2mm$
 $\mathbf{a}' = \mathbf{a}$ $\mathbf{b}' = \mathbf{b}$
 Origin at $0, 0, z$

Along $[100]$ $p2mm$
 $\mathbf{a}' = \frac{1}{2}\mathbf{b}$ $\mathbf{b}' = \mathbf{c}$
 Origin at $x, 0, 0$

Along $[010]$ $p2mm$
 $\mathbf{a}' = \mathbf{c}$ $\mathbf{b}' = \frac{1}{2}\mathbf{a}$
 Origin at $0, y, 0$

Maximal non-isomorphic subgroups

I	[2] $C121$ ($C2, 5$)	$(1; 3)+$
	[2] $C211$ ($C2, 5$)	$(1; 4)+$
	[2] $C112$ ($P2, 3$)	$(1; 2)+$
IIa	[2] $P2_1 2_1 2$ (18)	$1; 2; (3; 4) + (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$
	[2] $P2_1 2_2 (P222_1, 17)$	$1; 3; (2; 4) + (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$
	[2] $P22_1 2 (P222_1, 17)$	$1; 4; (2; 3) + (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$
	[2] $P222$ (16)	$1; 2; 3; 4$
IIb	[2] $I2_1 2_1 2_1$ ($\mathbf{c}' = 2\mathbf{c}$) (24); [2] $I222$ ($\mathbf{c}' = 2\mathbf{c}$) (23); [2] $C222_1$ ($\mathbf{c}' = 2\mathbf{c}$) (20)	

Maximal isomorphic subgroups of lowest index

IIc [2] $C222$ ($\mathbf{c}' = 2\mathbf{c}$) (21); [3] $C222$ ($\mathbf{a}' = 3\mathbf{a}$ or $\mathbf{b}' = 3\mathbf{b}$) (21)

Minimal non-isomorphic supergroups

I	[2] $Cmmm$ (65); [2] $Cccm$ (66); [2] $Cmme$ (67); [2] $Ccce$ (68); [2] $P422$ (89); [2] $P4_2 2$ (90); [2] $P4_2 22$ (93); [2] $P4_2 2_1 2$ (94);	
	[2] $P\bar{4}m2$ (115); [2] $P\bar{4}c2$ (116); [2] $P\bar{4}b2$ (117); [2] $P\bar{4}n2$ (118); [3] $P622$ (177); [3] $P6_2 22$ (180); [3] $P6_4 22$ (181)	
II	[2] $F222$ (22); [2] $P222$ ($\mathbf{a}' = \frac{1}{2}\mathbf{a}, \mathbf{b}' = \frac{1}{2}\mathbf{b}$) (16)	

