

Examen de Chimie Inorganique I
Introduction à la cristallographie

Durée : 2 h

Calculatrice conseillée. Toute réponse doit être justifiée.
Il sera tenu compte de la présentation et de la rédaction.

Problème 1

Le sulfure de zinc cristallise selon la structure cubique. Les coordonnées réduites des ions dans la maille sont les suivantes :

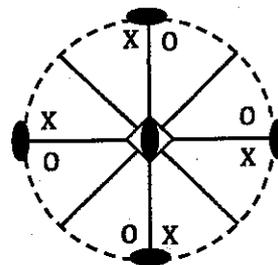
S^{2-} :	0 0 0	$\frac{1}{2}$ 0 $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ 0	0 $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$
Zn^{2+} :	$\frac{3}{4}$ $\frac{1}{4}$ $\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$ $\frac{3}{4}$ $\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$ $\frac{1}{4}$ $\frac{3}{4}$	$\frac{3}{4}$ $\frac{3}{4}$ $\frac{3}{4}$

- 1 – Représenter la maille avec ses ions en perspective.
- 2 – Quelle est la multiplicité de cette maille ?
- 3 – Représenter la projection de cette maille dans le plan (100). Pour les Zn^{2+} , on indiquera la coordonnée réduite selon l'axe x à côté de l'ion.
- 4 – Quelle est la coordinance des cations Zn^{2+} vis-à-vis des anions sulfures ?
- 5 – Cette maille possède-t-elle un centre d'inversion ?
- 6 – Cette maille possède des axes d'inversion-rotatoire d'ordre 4. Les représenter dans la maille en perspective et sur la maille projetée dans le plan (100). Combien y en a-t-il ?

Problème 2

La figure ci-contre représente la projection stéréographique des points équivalents obtenus par action d'un groupe ponctuel.

- 1 - Enumérer tous les opérateurs de symétrie que possède ce groupe ponctuel
- 2 – Quel est ce groupe ponctuel ?



Problème 3

On cherche à caractériser un matériau par diffraction des rayons X. Le diffractogramme obtenu avec, comme source de rayons X, la raie K_{α} du cuivre de longueur d'onde $\lambda = 0,1542$ nm est donné en annexe. On sait que ce matériau cristallise dans la structure cubique et peut être soit du fer, soit du potassium. Par ailleurs, on sait que la maille n'est pas primitive.

- 1 – Indexer le diffractogramme c'est-à-dire déterminer si le mode de réseau est I ou F et donner pour chaque raie de diffraction les indices (hkl) correspondants.
- 2 – Représenter dans une ou plusieurs mailles en perspective chacun de ces plans (hkl).
- 3 – Déterminer les valeurs des paramètres de maille.
- 4 – En déduire alors, à l'aide d'un calcul approprié, si il s'agit de fer ou de potassium.

Problème 4

Le magnésium cristallise dans la structure hexagonale compacte. Les paramètres de maille sont les suivants :

$$a = 3,21 \text{ \AA} \qquad c = 5,21 \text{ \AA} \qquad \gamma = 60^\circ$$

Le motif est le suivant : un atome Mg à l'origine du repère aux coordonnées réduites 0 0 0 ; un atome Mg aux coordonnées réduites $1/3 \ 1/3 \ 1/2$.

- 1 - Représenter la maille élémentaire en perspective.
- 2 - Représenter la projection de la maille dans le plan (001).
- 3 - Calculer la masse volumique en g.cm^{-3} du magnésium.

Données

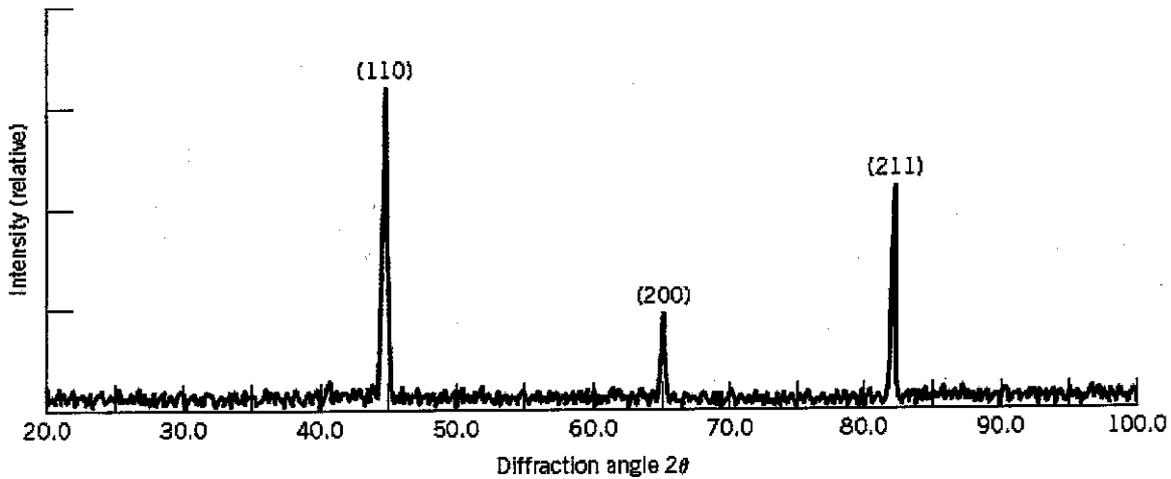


Diagramme de diffraction X du fer ($\lambda = 0,1542 \text{ nm}$).

Tableau 2.2 Quelques valeurs de $(h^2 + k^2 + l^2)$ pour les réseaux cubiques

Nombres interdits	Primitif P	Faces centrées F	Centré I	Valeurs de hkl correspondantes
	1			100
	2		2	110
	3	3		111
	4	4	4	200
	5			210
	6		6	211
7	8	8	8	220
	9			221, 300
	10		10	310
	11	11		311
	12	12	12	222
	13			320
	14		14	321
15	16	16	16	400

Rayon atomique du fer : 140 pm

Rayon atomique du potassium : 220 pm

Masse atomique du magnésium : 24,31