

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 (6 points)

Un cristal présente un faisceau de normales aux faces dont les angles d'inclinaison θ et d'azimuth ϕ sont données dans le tableau ci-dessous.

Faces	a et a'	b et b'	c et c'	d et d'	e et e'	f et f'	g et g'	h et h'
ϕ	23°	113°	203°	293°	23°	113°	203°	293°
θ	65,29° 114,71°	65,29° 114,71°	65,29° 114,71°	65,29° 114,71°	47,38° 132,62°	47,38° 132,62°	47,38° 132,62°	47,38° 132,62°
Faces	i et i'	j et j'	k et k'	l et l'	m et m'			
ϕ	68°	158°	248°	338°	-			
θ	71,98° 108,02°	71,98° 108,02°	71,98° 108,02°	71,98° 108,02°	0° 180°			

1 – Reporter dans le canevas joint en annexe les angles θ et ϕ correspondant à chaque face du cristal. Expliquer ce que représente la figure ainsi obtenue ?

2 – Déterminer les opérateurs de symétrie que possède le cristal. Quel est son groupe ponctuel ?

3 – A quel système cristallin peut appartenir ce cristal ?

Problème 2 (6 points)

Soit le réseau de Bravais quadratique P.

1 – Rappeler les relations entre les paramètres de maille de ce réseau et dessiner la maille en perspective.

2 – Soit un axe hélicoïdal 2_1 (rotation d'ordre 2 et translation de $\frac{1}{2}$) orienté dans la direction $[010]$ et passant par le nœud de coordonnées relatives $\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}$. Représenter cet axe dans la maille.

3 – Représenter la projection de la maille dans les plans (001) et (010) . Représenter sur cette projection l'axe hélicoïdal 2_1 . Faire un dessin à l'échelle c'est-à-dire choisir un nombre de cm donné pour a, b et c.

4 – Soit un atome de coordonnées relatives $\frac{1}{4} 0 \frac{3}{4}$. Positionner cet atome dans chacune des projections de la maille.

5 – Représenter sur ces deux projections tous les atomes obtenus dans la maille par action de l'opérateur de symétrie rotation-translation 2_1 . On donnera pour chaque atome les coordonnées relatives x y z.

Problème (8 points)

On dispose d'un matériau référencé A qui peut être soit du chrome soit du molybdène. Pour savoir de quel métal il s'agit, on effectue une analyse par diffraction de rayons X. Le diffractogramme obtenu avec le rayonnement $K\alpha$ du cuivre ($\lambda = 0,1541 \text{ nm}$) est donné en annexe 2 (diffractions du premier ordre).

1 – Sachant que le chrome et le molybdène cristallisent dans le système cubique avec une maille multiple, indexer le diffractogramme, c'est-à-dire indiquer sur celui-ci à quelle famille de plans (hkl) correspond chaque pic de diffraction.

2 – Déterminer la valeur moyenne du paramètre de maille du matériau A (utiliser les trois premiers pics de diffraction).

3 – Identifier alors en quel métal est constitué le matériau A.

4 – Afin de conforter les analyses DRX, une mesure de densité par pycnométrie à l'hélium est réalisée sur le matériau A. Les résultats montrent que le volume occupé par 58,4 g de matériau A est de $8,937 \text{ cm}^3$. Ce résultat est-il en accord avec celui de l'analyse DRX ?

Données :

Masses molaires en $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$: $M(\text{Cr}) = 52$ $M(\text{Mo}) = 96$

Rayons atomiques en pm : $R_{\text{Cr}} = 129$ $R_{\text{Mo}} = 140$

Nombre d'Avogadro : $N = 6,02 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

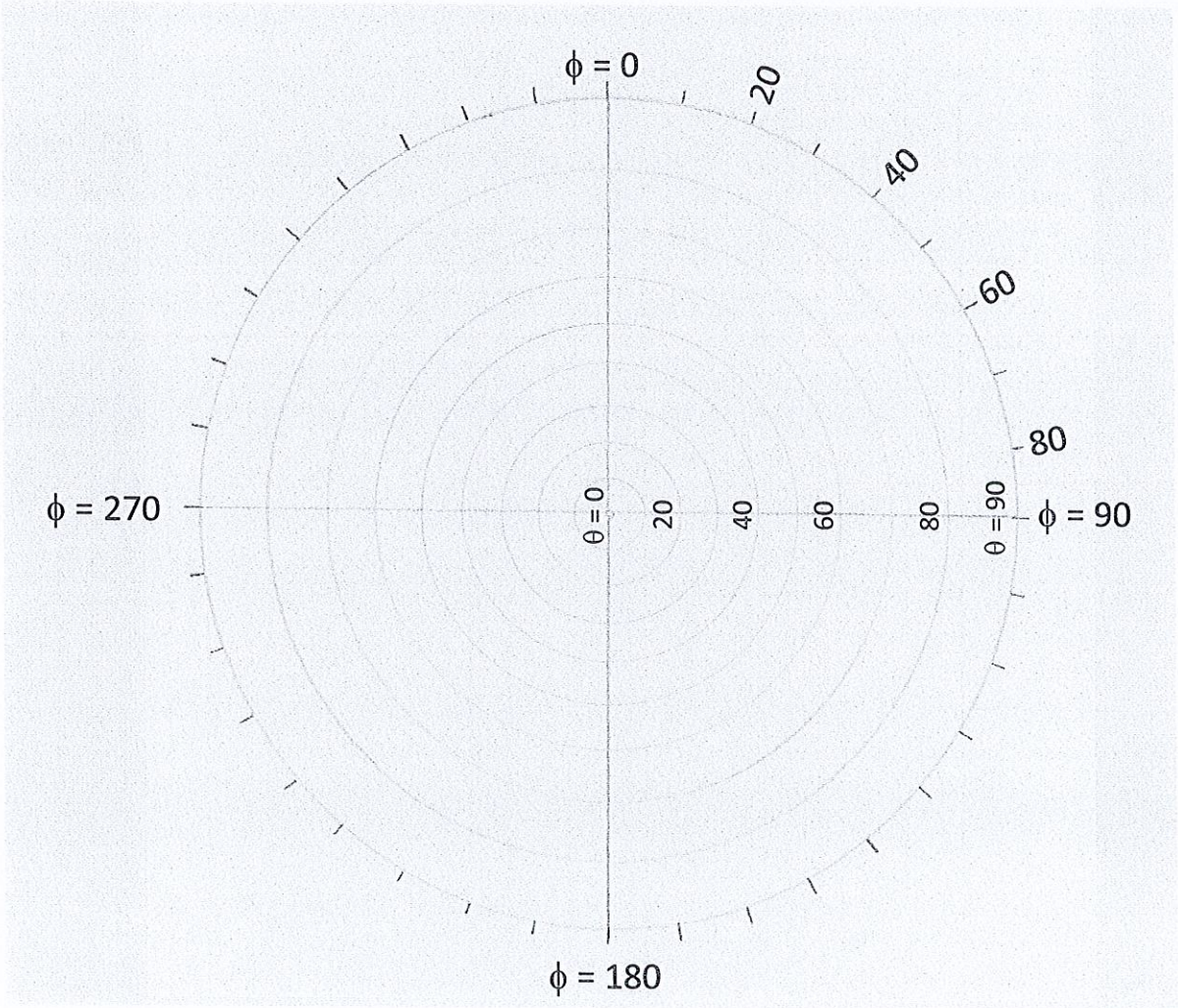
Valeurs de $h^2 + k^2 + l^2$ permises pour les modes de réseau cubiques P, I et F et valeurs de hkl correspondantes.

hkl	$h^2 + k^2 + l^2$		
	Mode P	Mode I $h+k+l = 2n$	Mode F h, k, l même parité
100	1		
110	2	2	
111	3		3
200	4	4	4
210	5		
211	6	6	
220	8	8	8
300, 221	9		
310	10	10	
311	11		11
222	12	12	12
320	13		
321	14	14	
400	16	16	16
410, 322	17		
411, 330	18	18	
331	19		19
420	20	20	20
421	21		
332	22	22	
422	24	24	24

Système cubique : $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$

Nom – Prénom :

Annexe 1 - Canevas (à rendre avec la copie)



Nom – Prénom :

Annexe 2 – Diffractogramme de rayons X du matériau A (à rendre avec la copie)

(Attention ce sont les valeurs de 2θ qui sont indiquées sur le diagramme)

