

## 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.

---

Soit un métal référencé « A » qui cristallise dans le système hexagonal compact . Il appartient à la classe cristalline :  $\frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ .

1 – Représenter dans une projection stéréographique tous les points équivalents obtenus par action du groupe ponctuel de symétrie. On prendra soin d'énumérer et de représenter sur la projection les axes de rotation propres et les plans miroirs. Ce groupe ponctuel est-il centrosymétrique ou non ? Quel est le degré de symétrie de ce groupe ?

2 – Représenter en perspective la maille simple ou unitaire du réseau hexagonal et indiquer où sont les paramètres de maille.

3 – Le paramètre de maille a vaut :  $a = 3 \text{ \AA}$ . Sur la feuille de papier millimétrée jointe, représenter à l'échelle la projection de la maille dans le plan (001). On prendra comme échelle :  $2 \text{ cm} = 1 \text{ \AA}$ .

4 – Représenter dans cette projection les traces des quatre premiers plans réticulaires de la famille (120).

5 – Mesurer graphiquement la distance interréticulaire  $d_{120}$ .

6 – Le diffractogramme de rayons X du métal « A », obtenue avec la radiation  $K_{\alpha}$  du cuivre ( $\lambda = 1,541 \text{ \AA}$ ) est donné en annexe 1.

a – A quel angle  $\theta$  la famille de plans (120) diffracte-t-elle les rayons X émis par l'anticathode au cuivre ?

b – Calculer à l'aide de cet angle la distance interréticulaire  $d_{120}$ . Comparer la valeur obtenue à celle mesurée graphiquement.

7 – A l'aide du diffractogramme, déterminer la valeur du paramètre de maille c.

8 – Calculer alors le volume de la maille.

9 – Sachant que la masse volumique du métal « A » vaut  $4,17 \text{ g.cm}^{-3}$  et que sa maille cristalline est de multiplicité égale à 2, déterminer la masse molaire du métal A.

10 – De quel métal s'agit-il : Mg, Ca, Ti ou Co ?

11 – Quand il est chauffé au-dessus de 1173 K, le métal « A » subit une transformation allotropique et sa structure devient cubique. Le diffractogramme de rayons X obtenu avec la radiation  $K_{\alpha}$  du cuivre ( $\lambda = 1,541 \text{ \AA}$ ) est donné en annexe 2. Déterminer quel est le mode de réseau : cubique simple, cubique centré ou cubique faces centrées ?

12 – Déterminer le rayon de l'atome A.

## Données :

Masses molaires (g.mol<sup>-1</sup>) : Mg : 24      Ca : 40      Ti : 48      Co : 59

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

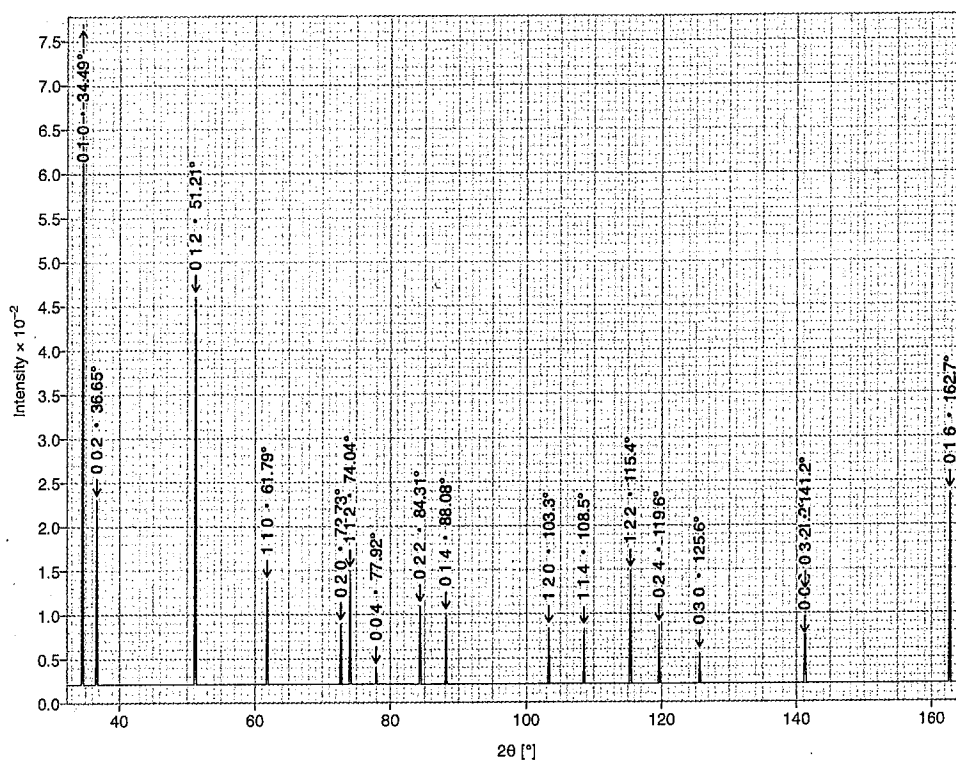
| hkl      | $h^2 + k^2 + l^2$ |                        |                               |
|----------|-------------------|------------------------|-------------------------------|
|          | Mode P            | Mode I<br>$h+k+l = 2n$ | Mode F<br>h, k, l même parité |
| 100      | 1                 |                        |                               |
| 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 :  $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$

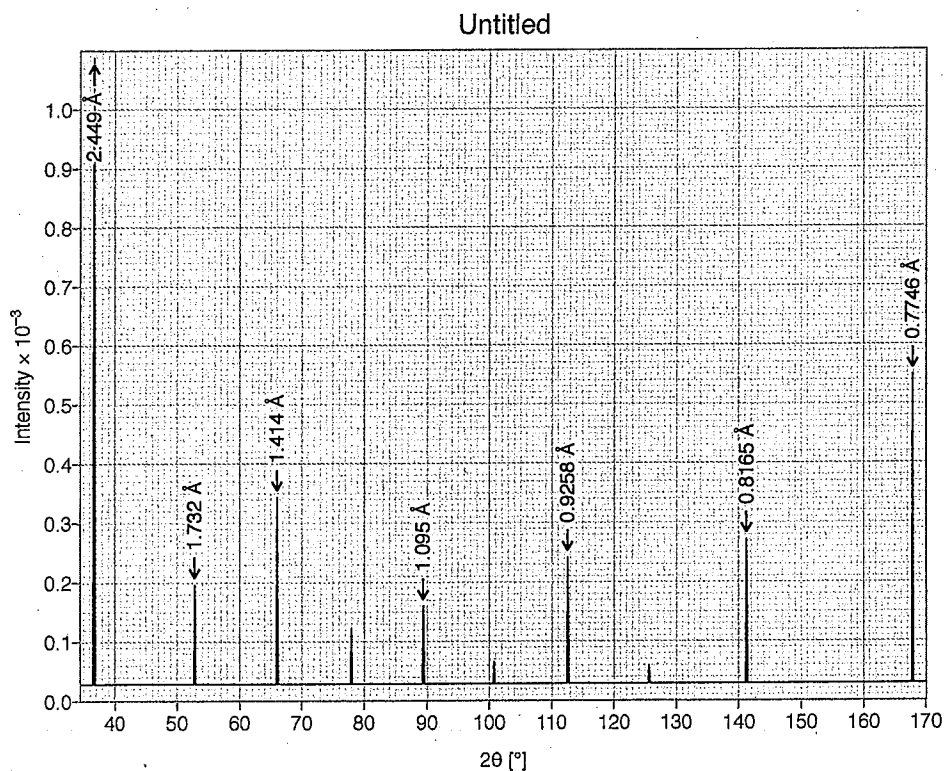
Système hexagonal :  $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{\left(\frac{4}{3}(h^2+k^2+hk)+l^2\frac{a^2}{c^2}\right)}}$

Loi de Bragg :  $2d_{hkl}\sin\theta = \lambda$

### Annexe 1 – Diffractogramme de rayons X du métal A



### Annexe 2 – Diffractogramme de rayons X du métal A à 1173 K



(Attention ce sont les valeurs de  $2\theta$  et les indices des plans hkl qui sont indiqués sur les diagrammes)

