

UNIVERSITE LOUIS PASTEUR STRASBOURG I
FACULTE DE CHIMIE

SUJET D'EXAMEN

Diplôme : Master 1 - CMS -semestre 2
Epreuve de : Structure et liaison
Session : Mars 2008
Date : 26 mars 2008
Horaire et lieu : 09h00 – Amphi Fischer

Durée du sujet : 2h00
Nom du rédacteur : Pr. R. Welter
Documents non autorisés
Calculatrices autorisées

Le composé ionique LaTiO_3 cristallise dans le groupe spatial : **P b n m**

- 1) Quels sont les **degrés d'oxydation** des atomes de ce composé ionique ? (1 pt)
- 2) A quel **système cristallin** appartient ce groupe ? (1 pt)
- 3) Décrire chacun des **termes du groupe** (1 pt)
- 4) Ce groupe est-il **centrosymétrique** ? Pourquoi ? (1 pt)
- 5) **Construire ce groupe** (en projection sur le plan (a,c)) et montrer que la multiplicité de la position générale est 8. (4 pts)
- 6) **Reconstruire le groupe** en plaçant le centre de symétrie à l'origine de la maille. (3 pts)
- 7) Compte tenu des données structurales et de votre construction en 6), représenter le **contenu de la maille élémentaire** de LaTiO_3 . Faire une projection sur le plan (a,c). (4 pts)

$$a = 5,63 \text{ \AA}; b = 5,61 \text{ \AA}; c = 7,91 \text{ \AA}$$

Atome	x/a	y/b	z/c
La	0,99	0,05	0,25
Ti	0	0,5	0
O1	0,08	0,49	0,25
O1	0,71	0,29	0,04

- 8) **Calculer une distance Ti-O** du polyèdre de coordination TiO_6 . Donner une valeur en Angström (1 pt). Que vaut x ? Y-a-il un effet Jahn-Teller pour cet ion du titane ? (3 pts)
- 9) **Indexer (hkl) et donner les valeurs d_{hkl} en Å** pour les quatre premiers pics du diffractogramme de poudre donné au verso. Y-a-t-il des extinctions systématiques ? Si oui, lesquelles ? (2 pts)

LaTiO₃ - P b n m
Lambda = 0.71079 Å

