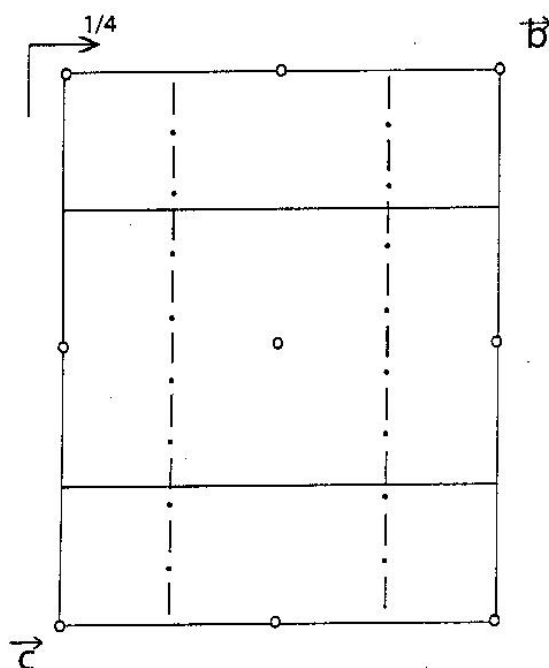


SUJET D'EXAMEN

Diplôme : Master de Chimie - M1 - SA/CPMI	Durée du sujet : 2h00
Epreuve de : Diffraction, diffusion et structures	Nom du rédacteur : Richard Welter
Session : janvier 2009	Documents non autorisés
Date : 21 janvier 2009	Calculatrices autorisées
Horaire et lieu : 9h00, Amphi Fischer	

**Problème n°1. (14 points)**



Le composé  $\text{Fe}_3\text{C}$  cristallise dans le groupe d'espace  $Pbnm$ . Les principales données sont résumées ci-après :

$$a = 4,52 \text{ \AA} \quad b = 5,08 \text{ \AA} \quad c = 6,75 \text{ \AA}$$

	x/a	y/b	z/c
C	0,43	-0,13	0,25
Fe1	-0,17	0,04	0,25
Fe2	0,33	0,17	0,06

- 1) A quel système cristallin appartient ce groupe ?
- 2) Calculer le volume de cette maille et en déduire le nombre d'unités formulaires contenues dans une maille (rappel : volume moyen d'un atome =  $18 \text{ \AA}^3$ ).
- 3) Définir chacun des termes du groupe  $Pbnm$ .
- 4) La figure ci-contre représente le groupe correctement construit avec le centre d'inversion à l'origine de la maille. Placer un objet asymétrique ( $F^+$ ) dans ce groupe et montrer graphiquement que la multiplicité de la position générale est 8.

- 5) Dessiner la structure de ce composé  $\text{Fe}_3\text{C}$  en projection sur le plan (b,c).
- 6) Quels sont les opérateurs de symétrie responsables d'extinctions systématiques dans ce groupe. On peut trouver les conditions d'extinction à partir d'un calcul de facteur de structure. Réaliser le calcul pour le miroir de type n qui est perpendiculaire à l'axe b.

On donne :

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{j=n} f_j \exp 2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j)$$

**Questions de cours. (6 points).**

- 1) Que représente le terme  $f_j$  dans l'expression générale du facteur de structure ?
- 2) Le terme  $f_j$  est-il constant ou bien évolue-t-il en fonction de l'angle de diffraction theta ?
- 3) Donner la relation de Bragg et expliciter chacun des termes.
- 4) Donner les groupes de symétrie ponctuelle associés au système triclinique et monoclinique.
- 5) Préciser, pour les groupes spaciaux suivants, - le système cristallin auquel ils appartiennent, - leur groupe de symétrie ponctuelle, - s'ils sont ou non centrosymétriques, - les extinctions systématiques qu'ils doivent générer le cas échéant :

$P2_1/c$

$Pmna$

$P-1$

$P2/m$