وزارة التعليم العالي و البحث العلمي
جامعة ابن خلدون تيارت
كلية علوم المادة
قسم الكيمياء
السنة الثالثة ليسانس كيمياء المواد

Corrigé d'examen du Module : Cristallochimie

Exercice 1 : (6 pts)

Calcul du rayon atomique d'iridium 1

Dans un réseau CFC, on a : $4R = a\sqrt{2}$ (1)
La multiplicité de la maille de ce système est $z = 4$ 1

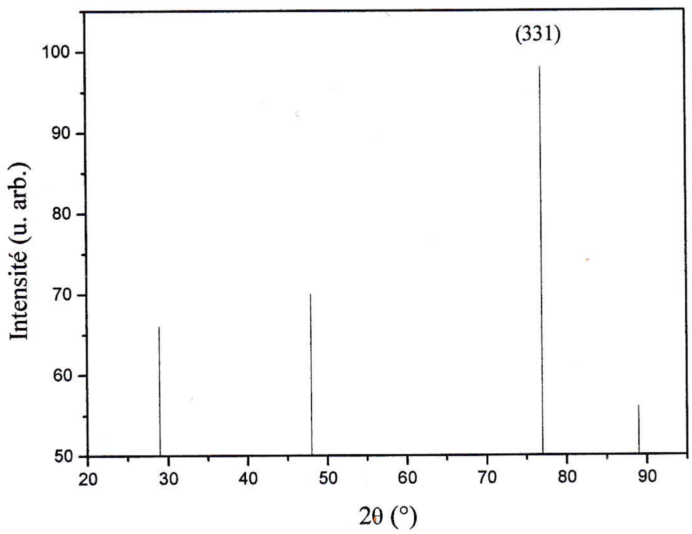
Nous avons vu précédemment que : $a^3 = \dfrac{z \times M_{Ir}}{N_A \times \rho_{Ir}}$

On obtient : $a = 3.85\times10^{-10}$ m = 3.85 Å. **Alors : a = 3.85 Å** 2

d'après (1) on obtient : $R_{Ir} = 1.36\times10^{-10}$ m = 1.36 Å. **Alors : R_{Ir} = 1.36 Å** 2

Exercice 2 : (8 pts)

1) Le diffractogramme DRX :



0,50

2) Calcul des distances interréticulaire d_{R2} et d_{R4} :

D'après la loi de Bragg, on a :

$2d_{hkl}\sin\theta = \lambda$. Alors : $d_{hkl} = \dfrac{\lambda}{2\sin\theta}$ (1) 0,5

AN : $d_{R2} = \dfrac{1.54}{2\sin(24)} = 1.893$ Å 1

$d_{R4} = \dfrac{1.54}{2\sin(44.5)} = 1.098$ Å 1

3.1) Calcul de la constante de réseau a :

Pour un système cristallin cubique, nous avons :

$$a = d_{hkl} \times \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \qquad (2)$$

0,5

Remplaçant (1) dans (2), on obtient :

$$a = \frac{\lambda\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}{2\sin\theta}$$

AN : $a = \frac{1.54\sqrt{19}}{2\sin(38.5)} = 5.39$ Å. **Alors : a = 5.39 Å.**

0,5

3.2) Calcul du nombre de motifs par maille :

Soit z le nombre de motifs par maille.

On a : $\rho = \frac{m_{maille}}{V_{maille}} = \frac{m_{maille}}{a^3} \Rightarrow m_{maille} = \rho \times a^3 \qquad (3)$

D'autre part on a :

$$z = \frac{m_{maille} \times N_A}{M_{Si}} = \frac{\rho \times a^3 \times N_A}{M_{Si}}$$

0,5

AN : $z = \frac{2.38 \times (5.39 \times 10^{-8})^3 \times 6.023 \times 10^{23}}{28.09}$ =7.99≈ 8 Motifs/Maille

3.3) Le type de structure adoptée par le silicium :

0,5

Le type de structure adopté par le silicium est le diamant.

4.1) Calcul du facteur de structure du AuCu :

Le facteur de structure F_{hkl} est donné par la relation suivante :

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

$$= f_{Au}\,(1 + e^{i\pi(h+k)}) + f_{Cu}\,(e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)})$$

2

4.2) Discussion des conditions d'extinction :

$F_{hkl} = 0$ quand $(1 + e^{i\pi(h+k)})$ et $(e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)})$ s'annulent simultanément, c'est-à-dire ; quand h et k sont de parité différente et l quelconque.

2