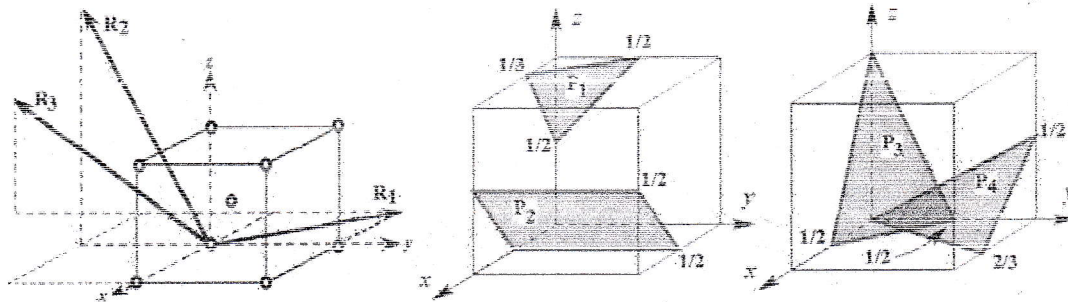


Corrigé de l'examen du Module : Cristallographie avancée

Exercice n°1(6pts)

a. On considère un réseau cubique centré de vecteurs de bases (a, b, c).



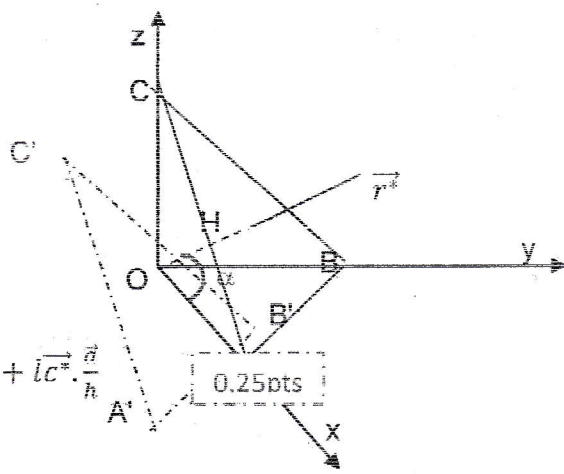
- 1- Les indices de la rangée R_1 sont : $[1 \ 1 \ 0]$
- Les indices de la rangée R_2 sont : $[0 \ 1 \ 2]$
- Les indices de la rangée R_3 sont : $[1 \ 2 \ 1]$
- 2- Les indices de Miller du plan P_1 sont : $(\bar{3} \ 2 \ 2)$
- Les indices de Miller du plan P_2 sont : $(2 \ 0 \ 2)$
- Les indices de Miller du plan P_3 sont : $(0 \ 2 \ 1)$
- Les indices de Miller du plan P_4 sont : $(\bar{3} \ 1 \ 1)$

0.25pts
0.25pts
0.25pts
0.25pts
0.25pts
0.25pts
0.25pts

b. Montrer que la distance inter-réticulaire d_{hkl} de la famille (hkl) du réseau direct correspond à l'inverse de la période r_{hkl}^* de la rangée $[hkl]^*$ du réseau réciproque.

1- La période du réseau réciproque est l'inverse de la distance réticulaire $|\vec{r}^*| \cdot d_{hkl} = 1$
 On prend le plan le plus proche de l'origine O.

On a: $\alpha = (\vec{r}^*, \vec{OA})$
 $OH = d_{hkl}$
 $\vec{r}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$
 $|\vec{r}^*|^2 = (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*)^2$
 $\vec{OA} = \frac{a}{h}$



$\vec{r}^* \cdot \vec{OA} = (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \cdot \frac{a}{h} = h\vec{a}^* \cdot \frac{a}{h} + k\vec{b}^* \cdot \frac{a}{h} + l\vec{c}^* \cdot \frac{a}{h}$

Donc : $\vec{r}^* \cdot \vec{OA} = 1$ (1)

Et d'autre part : $\vec{r}^* \cdot \vec{OA} = |\vec{r}^*| \cdot |\vec{OA}| \cdot \cos \alpha = |\vec{r}^*| \cdot |\vec{OA}| \cdot \frac{d}{|\vec{OA}|}$

$\vec{r}^* \cdot \vec{OA} = |\vec{r}^*| \cdot d$ (2)

De (1) et (2), on obtient : $d = \frac{1}{|\vec{r}^*|}$

0.5pts
0.5pts

2- Dans le réseau réciproque, le vecteur de translation est donnée par :



$$\vec{r}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

La distance interréticulaire est l'inverse de la période (longueur) de vecteur de \vec{r}^* :

$$d_{hkl} = \frac{1}{|\vec{r}^*|}$$

(Expression de la distance interréticulaire en fonction des paramètres de la maille du RR).

On a :

$$|\vec{r}^*|^2 = \vec{r}^* \cdot \vec{r}^* = (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \cdot (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*)$$

0.5pts

$$\text{Alors : } |\vec{r}^*|^2 = h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hka^*b^* \cos\gamma^* + 2klb^*c^* \cos\alpha^* + 2hla^*c^* \cos\beta^*$$

Donc, on peut déduire la relation :

$$d_{hkl} = (h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hka^*b^* \cos\gamma^* + 2klb^*c^* \cos\alpha^* + 2hla^*c^* \cos\beta^*)^{-\frac{1}{2}}$$

0.5pts

1. Les valeurs des distances inter-réticulaires en fonction du paramètre a des plans P_1, P_2, P_3 et P_4

$$d = a\sqrt{11} ; d = a\sqrt{8} ; d = a\sqrt{9} ; d = a\sqrt{14}$$

02pts

Exercice n°2(10pts)

Le système cristallin est monoclinique car : $a \neq b \neq c$ et $\beta \neq 90^\circ$

a- Calcul de la masse volumique de $C_6H_5NO_3$.

$$\text{On a } \rho = \frac{ZM}{N_A V} \quad \text{et } Z=4$$

$$\text{et } V^2 = a^2 b^2 c^2 (1 + 2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma - \cos\alpha^2 - \cos\beta^2 - \cos\gamma^2)$$

$$\text{Ou } V = abc \sin\alpha \sin\beta \sin\gamma = abc \sin\beta$$

0.25pts

$$\text{Alors : } V = 597.52 \text{ \AA}^3$$

0.25pts

$$M_{C_6H_5NO_3} = 139 \text{ g/mol}$$

0.25pts

$$\text{On trouve : } \rho = 1.54 \text{ g/cm}^3$$

01pts

b- Dans le groupe $P2_1/m$, le système cristallin est monoclinique et le groupe ponctuel est $2/m$.

0.50pts

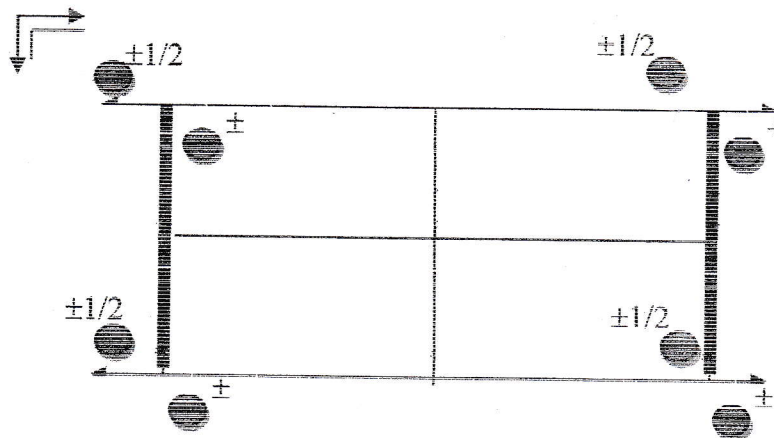
0.50pts

Dans le groupe $P2_12_12_1$, le système cristallin est orthorhombique et le groupe ponctuel est 222 .

0.50pts

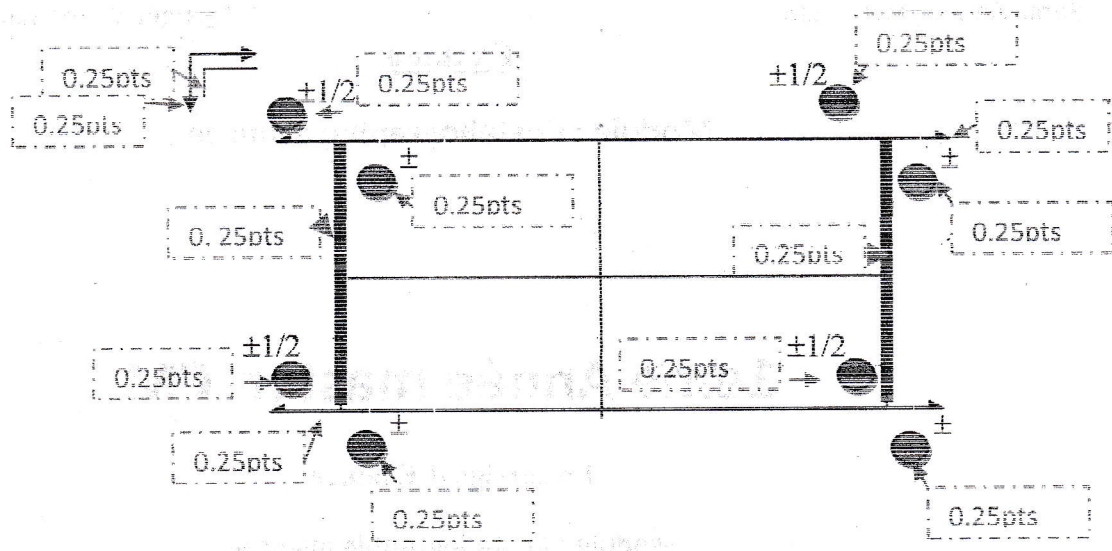
0.50pts

c- la projection cotée du groupe d'espace $P2_1/m$ (la représentation type tables international de $P2_1/m$) :



2

(Le barème de cette représentation)



d- Les coordonnées des positions équivalentes :

(x, y, z) ; $(-x, -y, -z)$; $(x, y, \frac{1}{2} + z)$; $(x, y, \frac{1}{2} - z)$

0.25pts 0.25pts 0.25pts 0.25pts

Exercice n°3(4pts)

Considérons un axe hélicoïdal 2_1 parallèle à l'axe c . On groupe les atomes identiques par paires :

$$\begin{bmatrix} x_j, y_j, z_j \\ -x_j, -y_j, \frac{1}{2} + z_j \end{bmatrix} \quad \text{01pts}$$

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{N/2} f_j \left[\exp 2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j) + \exp 2\pi i (-hx_j - ky_j + lz_j + \frac{1}{2}l) \right] \quad \text{01pts}$$

Si on considère les réflexions 001, on peut écrire:

$$F_{001} = \sum_{j=1}^{N/2} f_j \exp 2\pi i lz_j (1 + \exp \pi i l) \quad \text{01pts}$$

D'où la condition de réflexion pour 001:

$$00l \quad l = 2n \quad \text{01pts}$$

3