

TD

DE

CRISTALLOGRAPHIE
SMC – S5

SOLUTION DE LA SERIE N°1

PROFESSEUR
Abderrafie BRITEL

FACULTE DES SCIENCES DHAR EL MEHRIZ FES

ANNEE UNIVERSITAIRE 2015-2016

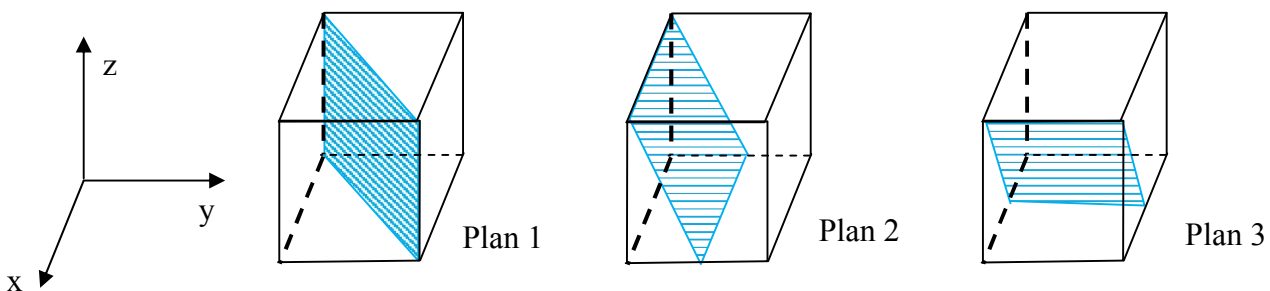
SERIE N°1
TD DE CRISTALLOGRAPHIE
FILIERE SMC-SEMESTRE 5

I- RANGEES CRISTALLOGRAPHIQUES :

Indexer la rangée cristallographique passant par le couple de nœuds $N_1 : 3\ 2\ 0$ et $N_2 : 7\ 4\ 6$. Préciser l'ordre du nœud N_2 par rapport au nœud N_1 et donner le paramètre (ou période) de la rangée considérée dans le cas où la maille est orthorhombique.

II- PLANS RETICULAIRES :

- 1) A quelles familles réticulaires appartiennent les plans dont l'intersection avec la maille est schématisée sur les figures ci-dessous (sections hachurées). Préciser à chaque fois l'ordre du plan traité dans la famille à laquelle il appartient :



- 2) Indexer la famille réticulaire dont l'un de ses plans coupe les axes cristallographiques Ox , Oy et Oz , respectivement aux points A, B et C tels que : $OA = 2a$, $OB = b$ et $OC = 5c$.
- 3) Déterminer la densité atomique de chacun des plans réticulaires (100) et (111) d'un réseau CFC. Conclure.

III- MULTIPLICITE DES MAILLES :

Une maille rhomboédrique peut-être inscrite dans une maille CFC :

- 1) Tracer les deux mailles.
- 2) Calculer le volume de la maille rhomboédrique par rapport à celui de la maille CFC. En déduire la multiplicité de la maille rhomboédrique.

IV- RESEAU DE BRAVAIS :

- 1) Quel est le nombre de réseaux de Bravais ? préciser les systèmes auxquels ils sont attribués.
- 2) Certains modes de Bravais n'existent pas dans certains systèmes cristallins. Ainsi, par exemple, les modes C (A ou B) et F n'existent pas dans le système quadratique, le mode I n'existe pas dans le système monoclinique et le mode A (ou B ou C) n'existent pas dans le système cubique. Expliquer pour quelle raison.

V- RELATIONS ENTRE RESEAU DIRECT ET RESEAU RECIPROQUE :

- 1) Montrer qu'une rangée réticulaire $[hkl]^*$ du réseau réciproque est perpendiculaire à la famille de plans réticulaires (hkl) du réseau direct.
- 2) Montrer que la distance inter-réticulaire d_{hkl} de la famille (hkl) du réseau direct correspond à l'inverse de la période n^*_{hkl} de la rangée $[hkl]^*$ du réseau réciproque càd que : $d_{hkl} = 1/n^*_{hkl}$.
- 3) Déterminer, en utilisant le réseau réciproque, l'expression de la distance inter-réticulaire d'une famille donnée en fonction des paramètres de la maille si cette dernière est orthorhombique, quadratique ou cubique.

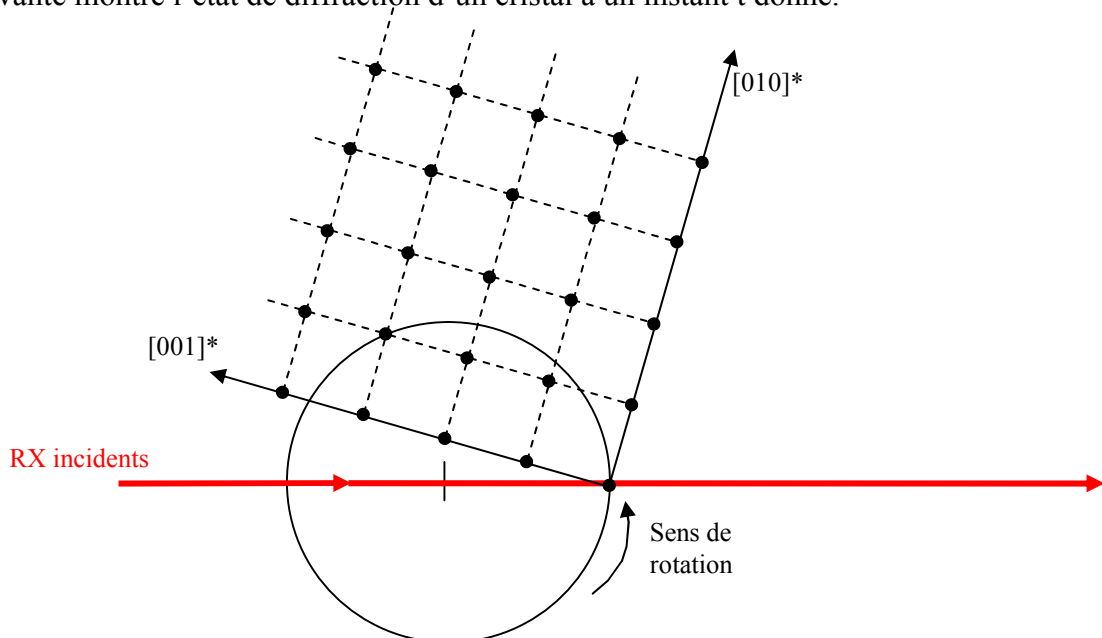
VI- DIFFRACTION DES RAYONS X:

Exercice 1:

- 1) Démontrer la relation de diffraction de LAUE par la rangée $[100]$ (Représenter la figure de diffraction avec une différence de marche $\delta = \lambda$).
- 2) Démontrer la relation de diffraction de Bragg (Représenter la figure de diffraction avec une différence de marche $\delta = 3\lambda$).

Exercice 2 :

La figure suivante montre l'état de diffraction d'un cristal à un instant t donné.



- 1) Quel est l'axe de rotation du cristal ? en déduire les plans réticulaires représentés par les nœuds de la figure.
- 2) Donner les indices des familles de plans réticulaires ne diffractant à aucun ordre. Que faut-il faire si on a besoin de la diffraction de ces plans ?
- 3) Donner les indices d'une famille de plans réticulaires ne diffractant qu'au 1^{ier} et 2^{ème} ordre.

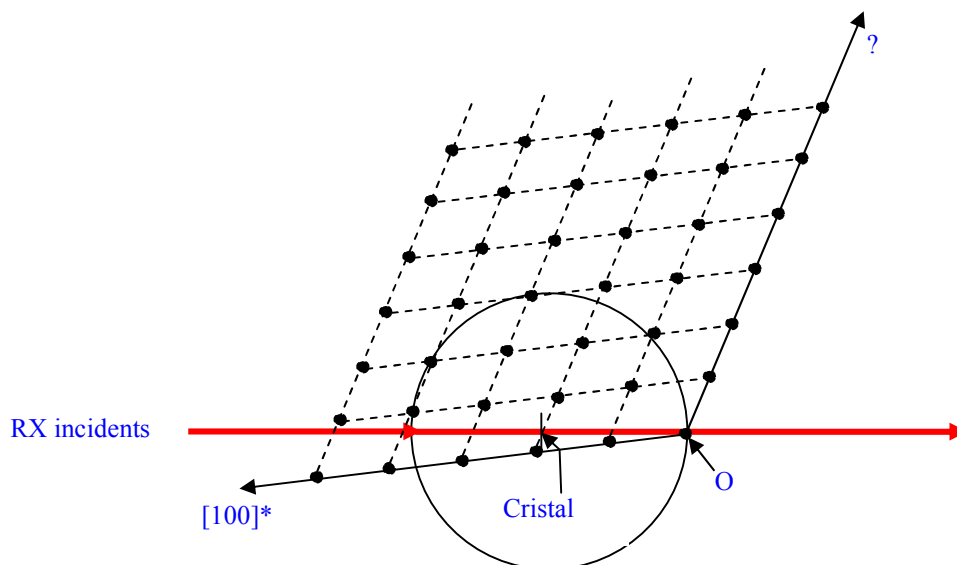
- 4) Quelles sont les familles de plans réticulaires ne diffractant qu'au 1^{er} ordre.
- 5) Quelle est la famille qui est en train de diffracter et à quel ordre ? Calculer l'angle de diffraction de cette famille sachant que la maille est cubique de paramètre $a = 4,572 \text{ \AA}$ et que la longueur d'onde utilisée est $\lambda = 1,540 \text{ \AA}$.
- 6) Que faut-il faire, à partir de l'état représenté par la figure, pour diffracter le 2^{ème} ordre de la famille trouvée à la question 5) ci-dessus ?

Exercice 3 :

- 1) Soit la rangée cristallographique réciproque passant par le couple de nœuds $N^*_1: 1 \ 3 \ 4$ et $N^*_2: 4 \ 9 \ 4$.
 - a- Indexer cette rangée et préciser l'ordre du nœud N^*_2 par rapport au nœud N^*_1 .
 - b- Donner l'expression du paramètre (ou période) de la rangée considérée si le système cristallin est quadratique.
 - c- Quelle est la famille de plans réticulaires correspondant à cette rangée ? dessiner l'intersection du plan représentant cette famille avec la maille.
- 2) Dessiner la figure de diffraction d'Ewald en considérant la famille réticulaire trouvée en 1)-c en train de diffracter au 2^{ème} ordre. Représenter le rayon diffracté, le plan qui diffracte, les vecteur \vec{S}_0 , \vec{S} et \vec{N} . Calculer alors l'angle de diffraction de la famille de plans réticulaires qui est en train de diffracter sachant que la maille est quadratique de paramètre $a = 6,887 \text{ \AA}$ et $c = 9 \text{ \AA}$ et que la longueur d'onde utilisée pour la diffraction est $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$. A quel angle se positionne le compteur ? Que faut-il faire pour diffracter le 3^{ème} ordre de la même famille ?

Exercice 4 :

La figure suivante montre l'état de diffraction d'un cristal de symétrie monoclinique à un instant t donné.



- 1) Calculer le volume de la maille sachant qu'elle a comme paramètre $a = 5 \text{ \AA}$, $b = 6,6 \text{ \AA}$, $c = 7 \text{ \AA}$ et $\beta = 60^\circ$.
- 2) Préciser l'angle entre les axes de la figure ci-dessus et donner sa valeur.

- 3) Quel est le 2ème axe de la figure ci-dessus ? en déduire l'axe de rotation du cristal.
- 4) Quelle est l'expression générale des rangées de la figure ci-dessus ? en déduire le point commun entre les plans réticulaires représentés par ces rangées.
- 5) Donner les indices de l'une des familles de plans réticulaires ne pouvant diffracter à aucun ordre (donner celle ayant h le plus petit). Que faut-il faire si on a besoin de la diffraction de cette famille ?
- 6) Donner les indices de l'une des familles de plans réticulaires ne pouvant diffracter qu'au 1er ordre (donner celle ayant h le plus grand).
- 7) Donner les indices de l'une des familles de plans réticulaires ne pouvant diffracter qu'au 1^{er} et 2^{ème} ordre (donner celle ayant h le plus petit).
- 8) Donner les indices de la famille de plans réticulaires pouvant diffracter au plus grand ordre de diffraction (préciser cet ordre). Dessiner l'intersection avec la maille du plan représentant cette famille.
- 9) Quelle (s) est (sont) la (les) famille (s) qui est (sont) en train de diffracter et à quel ordre ? Comment on note cette (ces) réflexion (s) ? Calculer l'angle de diffraction de cette (ces) famille (s) sachant que la longueur d'onde utilisée est $\lambda = 1,540 \text{ \AA}$.
- 10) Dessiner sur un film de longueur 18 cm, l'emplacement exact de la réflexion ayant θ le plus élevé dans la question précédente et ce si on réalise pour le composé étudié un diagramme de Debye-Scherrer :
 - a- avec montage normal.
 - b- avec montage de Van Arkel

VII- RAIES DE DIFFRACTION ET EXTINCTIONS SYSTEMATIQUES DANS LES DIFFERENTS MODES DU RESEAU CUBIQUE :

Exercice 1 :

- 1) Quelles sont les trois premières familles réticulaires (càd celles qui se trouvent au début du spectre de diffraction) qui diffractent dans un matériau cristallisant avec une maille cubique primitive (justifier votre réponse).
- 2) Déduire de la question précédente (en justifiant la réponse) la famille réticulaire qui diffracte la 1^{ère} (càd celle qui se trouve au début du spectre de diffraction) dans un matériau ayant une maille :
 - a- cubique centrée
 - b- cubique à faces centrées.

Exercice 2 :

- 1) Préciser les ordres de diffraction de la famille réticulaire de distance $d_{100} = 3,10 \text{ \AA}$ dans le cas où la symétrie est cubique à faces centrées et la radiation $K\alpha_1$ du cuivre utilisée a pour longueur $\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$. En cas de besoin, que doit-on faire pour augmenter le nombre de diffractions ? Justifier votre réponse.

- 2) Pourra-t-on observer la diffraction du 1^{ier} ordre de la famille réticulaire de distance $d = 0,75 \text{ \AA}$ en cas où cette diffraction n'est pas concernée par une extinction systématique ? Justifier votre réponse.

VIII- METHODE DE DEBYE-SCHERRER :

La distance inter-réticulaire de la 2^{ème} raie d'une phase de symétrie cubique simple a pour valeur $4,25 \text{ \AA}$ (La longueur d'onde utilisée a pour valeur $\lambda = 1,54059 \text{ \AA}$).

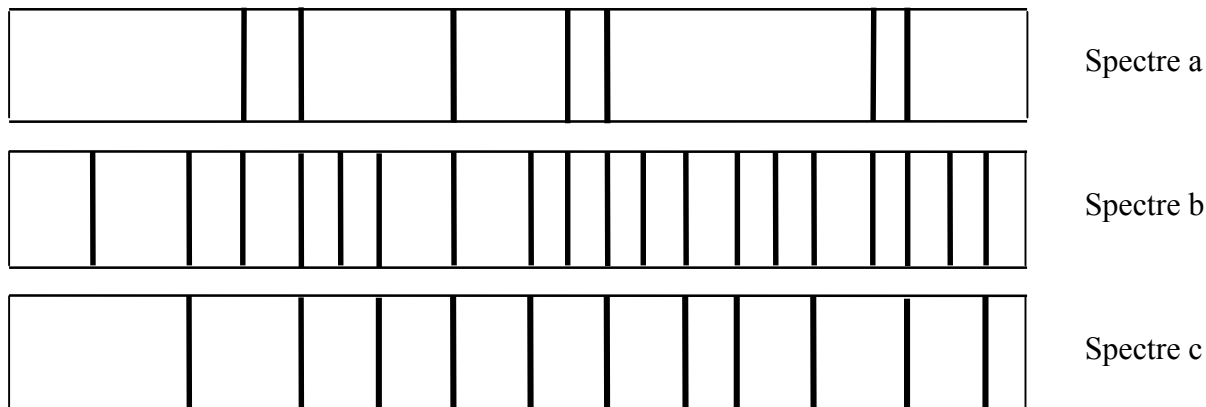
- 1) Déterminer le paramètre de maille de la phase considérée.
- 2) Calculer le rayon de la chambre de Debye-Scherrer sachant que sa circonférence est de 360 mm.
- 3) Calculer les valeurs de L_g et L_d pour la 1^{ière} raie du spectre direct (la chambre utilisée étant celle de Debye-Scherrer et le montage du film étant celui de Straumanis).
- 4) Etablir les expressions de L_g et L_d pour une raie donnée du spectre en retour (la chambre utilisée étant celle de Debye-Scherrer et le montage du film étant celui de Straumanis).
- 5) Peut-on indexer, avec la même méthode utilisée pour indexer les phases cubiques, une phase de symétrie autre que cubique ? Justifier votre réponse.

IX- EVOLUTION DU SPECTRE DE DIFFRACTION EN FONCTION DE LA SYMETRIE :

Exercice 1 :

Supposons qu'à la suite d'un traitement thermique, la maille d'un composé reste toujours cubique avec un paramètre invariant mais la symétrie initialement primitive change.

- 1) Préciser comment évolue la symétrie de la phase considérée avec la température.
- 2) La figure ci-dessous représente trois spectres de diffraction possibles du composé cubique étudié. Classer les différents spectres par ordre de symétrie croissante.
- 3) Indiquer les indices de la 1^{ère} famille de plans réticulaires qui ne s'éteint jamais au cours de l'évolution de la symétrie du composé étudié.



Exercice 2 :

Soit une phase solide de symétrie cubique primitive et de paramètre a . Si le paramètre de la maille augmente à la suite d'un traitement thermique et que la symétrie reste toujours cubique primitive, alors, les raies de diffraction de la phase obtenue après traitement seront :

- a-** aux mêmes endroits que les raies de diffraction de la phase initiale ?
- b-** déplacées à la droite des raies de diffraction de la phase initiale ?
- c-** déplacées à la gauche des raies de diffraction de la phase initiale ?

(Justifier votre réponse).

Exercice 3 :

- 1)** Etablir l'expression de d_{hkl} en fonction des paramètres d'une maille quadratique.
- 2)** Si le réseau quadratique est primitif, préciser où sera placée la raie (100) par rapport à la raie (001) sur le spectre de diffraction enregistré par un diffractomètre automatique si on suppose que $c > a$.
- 3)** Que se passe-t-il si la symétrie du réseau devient cubique ?

SOLUTION


I- RANGÉES CRISTALLOGRAPHIQUES :

Indexer la rangée cristallographique passant par le couple de nœuds N1 : 3 2 0 et N2 : 7 4 6. Préciser l'ordre du nœud N₂ par rapport au nœud N₁ et donner le paramètre (ou période) de la rangée considérée dans le cas où la maille est orthorhombique.

SOLUTION

La rangée réticulaire [u v w] passant par le couple de nœuds 3 2 0 et 7 4 6 ne passe pas par l'origine du repère. Pour la faire passer par l'origine, on fera un changement d'origine de telle sorte que celle-ci devienne en N₁, les coordonnées de N₂ deviennent alors dans le nouveau repère : $u' = 7 - 3 = 4$, $v' = 4 - 2 = 2$ et $w' = 6 - 0 = 6$. Ces coordonnées ne sont pas premières entre elles, le nœud N₂ n'est donc pas le 1^{er} nœud après l'origine mais plutôt le 2^{ème} (puisque lorsqu'on divise les nombres u', v' et w' par 2, on obtient des nombres premiers entre eux). Le 1^{er} nœud après l'origine aura plutôt comme coordonnées : u = 2, v = 1 et w = 3 (u, v et w sont cette fois premiers entre eux). La rangée réticulaire en question sera notée par les coordonnées du 1^{er} nœud après l'origine soit : [2 1 3].

REMARQUE

 Si c'est N₂ qu'on prendra comme origine, les coordonnées de N₁ deviennent dans le nouveau repère : $u' = 3 - 7 = -2$, $v' = 2 - 4 = -2$ et $w' = 0 - 6 = -6$. Dans ce cas, la rangée réticulaire en question sera notée [-2 -1 -3] qu'on note aussi [2̄ 1̄ 3̄]. En fait [2 1 3] et [2̄ 1̄ 3̄] représentent la même rangée réticulaire.

De façon générale (cas où la maille est triclinique), l'expression générale du paramètre p de la rangée [u v w] est :

$$p = N_1 N_2 = [u^2 \vec{a}^2 + v^2 \vec{b}^2 + w^2 \vec{c}^2 + 2uv \vec{a}\vec{b} + 2uw \vec{a}\vec{c} + 2vw \vec{b}\vec{c}]^{1/2}$$

Comme la maille est orthorhombique dans l'exercice ci-dessus, l'expression générale du paramètre de la rangée devient :

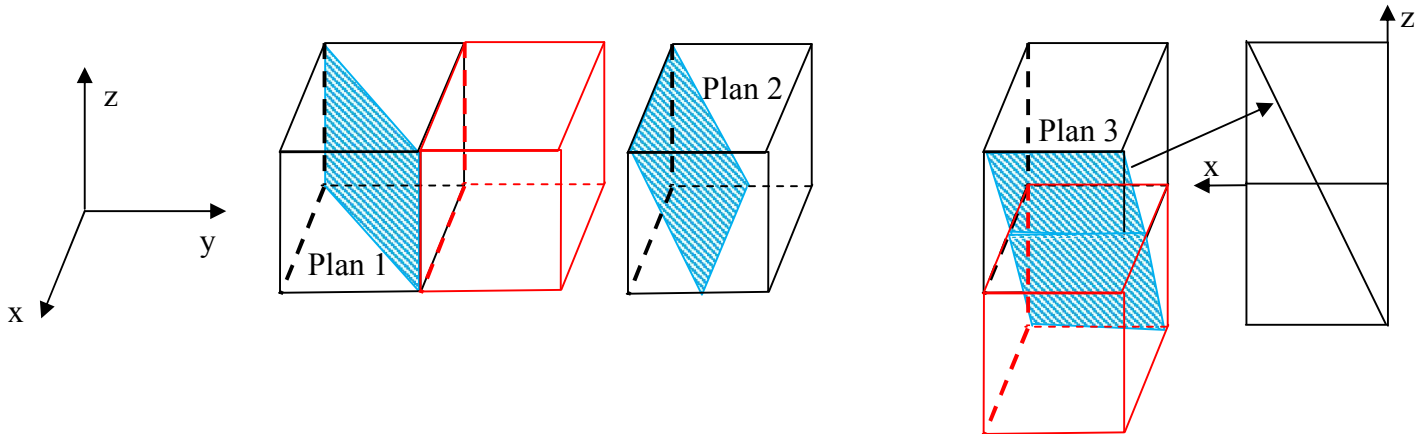
$$p = N_1 N_2 = (u^2 a^2 + v^2 b^2 + w^2 c^2)^{1/2}$$

APPLICATION NUMERIQUE

$$p = (2^2 a^2 + 1^2 b^2 + 3^2 c^2)^{1/2} = (4a^2 + b^2 + 9c^2)^{1/2}$$

II- PLANS RETICULAIRES :

- 1) A quelles familles réticulaires appartiennent les plans dont l'intersection avec la maille est schématisée sur les figures ci-dessous (sections hachurées). Préciser à chaque fois l'ordre du plan traité dans la famille à laquelle il appartient :



SOLUTION

a- Plan 1 :

Le plan réticulaire 1 passe par l'origine du repère, il ne peut alors représenter la famille à laquelle il fait partie (sinon : $h = k = \infty$ ce qui doit être exclu). Comme une famille réticulaire doit être représentée par le premier plan parallèle à celui passant par l'origine (pour éviter les indices infini), ce dernier peut être le plan 1 à condition de changer l'origine du repère. Si on choisit de prendre l'origine au nœud $0\ 1\ 0$ par exemple, le plan 1 couperait les axes cristallographiques Ox , Oy et Oz , respectivement aux points A , B et C tels que : $OA = a$, $OB = -b$ et $OC = \infty c$. Or les indices de Miller h , k et l sont tels que : $OA = a / h$, $OB = b/k$ et $OC = c/l$. On en déduit alors que les indices de Miller h , k et l du plan réticulaire considéré sont : $h = 1$, $k = -1$ et $l = 0$ (Comme les indices h , k et l sont premiers entre eux, le plan 1 est le plan le plus proche de l'origine). La famille à laquelle fait partie le plan 1 sera alors notée $(1\ -1\ 0)$ qu'on note aussi $(1\ \bar{1}\ 0)$.

REMARQUE

☞ Si on considère l'origine au nœud $1\ 0\ 0$, la famille à laquelle fait partie le plan 1 sera notée $(-1\ 1\ 0)$ qu'on note aussi $(\bar{1}\ 1\ 0)$. Il s'agit de la même famille que celle notée $(1\ \bar{1}\ 0)$.

b- Plan 2 :

Le plan réticulaire 2 coupe les axes cristallographiques Ox , Oy et Oz , respectivement aux points A , B et C tels que : $OA = \infty a$, $OB = b/2$ et $OC = 1 c$. Comme les indices de Miller h , k et l sont tels que : $OA = a / h$, $OB = b/k$ et $OC = c/l$, on en déduit alors que les indices de Miller h , k et l du plan réticulaire considéré sont : $h = 0$, $k = 2$ et $l = 1$. Comme les indices h , k et l sont premiers entre eux, le plan 2 est le plan le plus proche de l'origine. La famille qu'il représente sera alors notée $(0\ 2\ 1)$.

c- Plan 3 :

Le plan réticulaire 3 coupe les axes cristallographiques Ox, Oy et Oz, respectivement aux points A, B et C tels que : $OA = a/2$, $OB = \infty b$ et $OC = -1c$. Comme les indices de Miller h, k et l sont tels que : $OA = a/h$, $OB = b/k$ et $OC = c/l$, on en déduit alors que les indices de Miller h, k et l du plan réticulaire considéré sont : $h = 2$, $k = 0$ et $l = -1$. Comme les indices h, k et l sont premiers entre eux, le plan 3 est le plan le plus proche de l'origine. La famille qu'il représente sera alors notée $(2\ 0\ -1)$ qu'on note aussi $(2\ 0\ \bar{1})$.

- 2) Indexer la famille réticulaire dont l'un de ses plans coupe les axes cristallographiques Ox, Oy et Oz, respectivement aux points A, B et C tels que : $OA = 2a$, $OB = b$ et $OC = 5c$.

SOLUTION

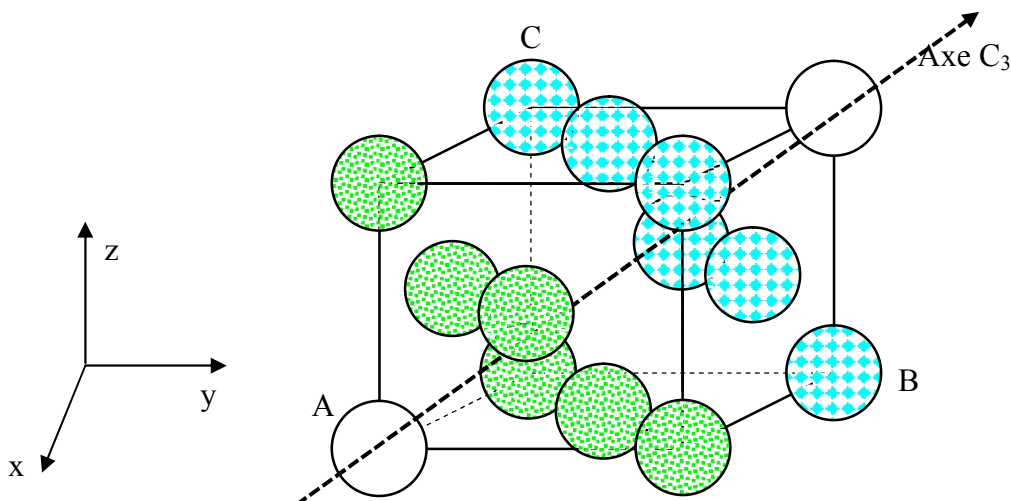
Le plan réticulaire qui coupe les axes cristallographiques Ox, Oy et Oz, respectivement aux points A, B et C tels que : $OA = 2a$, $OB = b$ et $OC = 5c$ a pour indices de Miller h, k et l tels que : $OA = a/h$, $OB = b/k$ et $OC = c/l$. On en déduit alors que les indices de Miller h, k et l du plan réticulaire considéré sont : $h = 1/2$, $k = 1$ et $l = 1/5$. Comme les indices h et l ne sont pas entiers (les trois indices seront notés dans ce cas h' , k' et l'), on en conclut que le plan réticulaire considéré n'est pas le plan le plus proche de l'origine de la maille. Or, le plan réticulaire représentant une famille donnée est le plan le plus proche de l'origine (1^{er} plan). Les indices de Miller h, k et l du plan réticulaire recherché (le plan le plus proche de l'origine) s'obtiennent en multipliant les indices $h' = 1/2$, $k' = 1$ et $l' = 1/5$ par $2 \times 5 = 10$ (10 est le plus petit multiple commun des nombres 2 et 5), soit : $h = h' \times 10 = 1/2 \times 10 = 5$, $k = k' \times 10 = 1 \times 10 = 10$ et $l = l' \times 10 = 1/5 \times 10 = 2$ (Comme h' et l' sont devenus entiers en les multipliant par 10, le plan étudié est alors le 10^{ème} plan après celui passant par l'origine).

La famille réticulaire recherchée sera alors notée $(5\ 10\ 2)$: son plan le plus proche de l'origine coupe les axes cristallographiques Ox, Oy et Oz, respectivement aux points A, B et C tels que : $OA = a/5$, $OB = b/10$ et $OC = c/2$.

- 3) Déterminons la densité atomique de chacun des plans réticulaires (100) et (111) d'un réseau CFC.

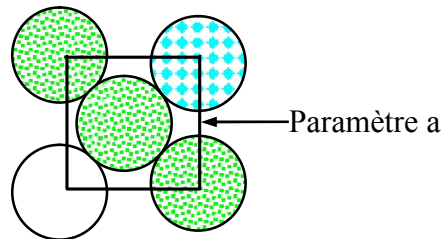
SOLUTION

La représentation en perspective d'une maille CFC est la suivante :



a- densité de la face (100) :

Le contenu atomique de la face (100) d'un réseau CFC peut être représenté comme suit :



Le nombre d'atomes dans la face (100) = face (b, c) est : $4 \times 1/4 + 1 = 2$ atomes.

La densité atomique de la face (b, c) est alors :

$d_{100} = (\text{nombre d'atome de la face (b, c)} \times \text{section médiane d'un atome}) / \text{surface de la face (b, c)}$

$$d_{100} = 2 \times (\pi R^2) / a^2$$

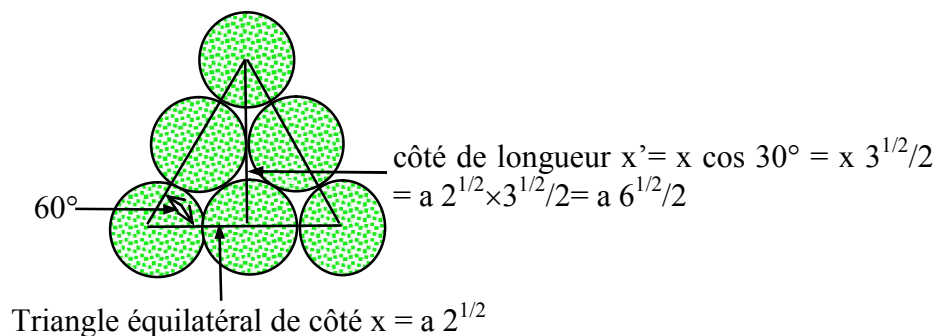
avec R = rayon de l'atome et a = paramètre de la face (b, c)

Or $4R = a 2^{1/2}$ soit $a = 2(2^{1/2}) R$, d_{100} devient alors :

$$d_{100} = 2 \times (\pi R^2) / a^2 = 2 \times (\pi R^2) / 8 R^2 = \pi/4 = \mathbf{0,785}$$

b- densité de la face (111) :

Le contenu atomique du plan (111) d'un réseau CFC peut être représenté comme suit :



Le nombre d'atomes dans la face (111) = section (ABC) est : $3 \times 1/6 + 3 \times 1/2 = 2$ atomes.

La densité atomique de la section (ABC) est alors :

$d_{111} = (\text{nombre d'atome de section (ABC)} \times \text{section médiane d'un atome}) / \text{surface de la section (ABC)}$

$$d_{111} = 2 \times (\pi R^2) / s$$

avec R = rayon de l'atome et s = surface de la section (ABC)

Or $4R = x = a \cdot 2^{1/2}$ soit $a = 2(2^{1/2}) R$
 et $s = x' \times x/2 = (a \cdot 6^{1/2}/2) \times (a \cdot 2^{1/2}/2) = a^2 \times 3^{1/2}/2$
 d_{111} devient alors :

$$d_{111} = 2 \times (\pi R^2) / (a^2 \times 3^{1/2}/2) = [2 \times (\pi R^2) / a^2] \times (2/3^{1/2}) = d_{100} \times (2/3^{1/2}) = (\pi/4) \times (2/3^{1/2}) = 0,785 \times (2/3^{1/2})$$

soit : $d_{111} = 0,906$

CONCLUSION

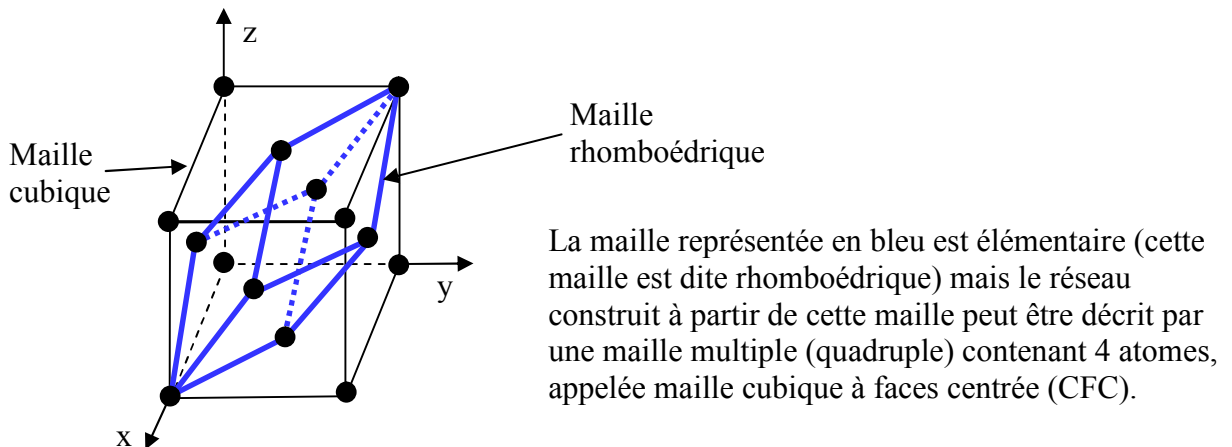
$d_{111} > d_{100} \Rightarrow$ le plan (111) contient plus d'atome que le plan (100) \Rightarrow l'intensité I_{111} du plan (111) est plus élevée que l'intensité I_{100} du plan (100) ($I_{111} > I_{100}$).

III- MULTIPLICITE DES MAILLES :

Une maille rhomboédrique peut-être inscrite dans une maille CFC :

1) Tracer les deux mailles.

SOLUTION



2) Calculer le volume de la maille rhomboédrique par rapport à celui de la maille CFC. En déduire la multiplicité de la maille rhomboédrique.

SOLUTION

Dans le cas tridimensionnel, les mailles sont des parallélépipèdes dont les sommets sont occupés par des nœuds ce qui veut dire que la maille se construit sur trois vecteurs \vec{n}_1 , \vec{n}_2 et \vec{n}_3 du réseau tels que :

$\vec{n}_1 = u_1\vec{a} + v_1\vec{b} + w_1\vec{c}$ et $\vec{n}_2 = u_2\vec{a} + v_2\vec{b} + w_2\vec{c}$ et $\vec{n}_3 = u_3\vec{a} + v_3\vec{b} + w_3\vec{c}$. Le volume de la maille est égal au produit mixte $(\vec{n}_1, \vec{n}_2, \vec{n}_3) = \vec{n}_1 (\vec{n}_2 \wedge \vec{n}_3)$ soit :

$$V = (\vec{n}_1, \vec{n}_2, \vec{n}_3) = \vec{n}_1 (\vec{n}_2 \wedge \vec{n}_3) = \begin{vmatrix} u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \\ u_3 & v_3 & w_3 \end{vmatrix} (\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}) = m (\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}) = m \vec{a} (\vec{b} \wedge \vec{c}) = m v_0$$

Le volume de la maille rhomboédrique par rapport au volume de la maille cubique peut donc se calculer comme suit :

$$\vec{V}_R = \begin{vmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{vmatrix} (\vec{a}_{CFC}, \vec{b}_{CFC}, \vec{c}_{CFC}) = \frac{1}{4} \vec{a}_{CFC} (\vec{b}_{CFC} \wedge \vec{c}_{CFC}) = \frac{1}{4} V_{CFC} \text{ soit } V_{CFC} = 4 V_R.$$

La maille rhomboédrique est donc 4 fois plus petite que la maille CFC.

Comme la maille CFC contient quatre atomes $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ (maille quadruple), la maille rhomboédrique n'en contient qu'un seul $8 \times \frac{1}{8} = 1$ (maille primitive : atomes uniquement aux sommets).

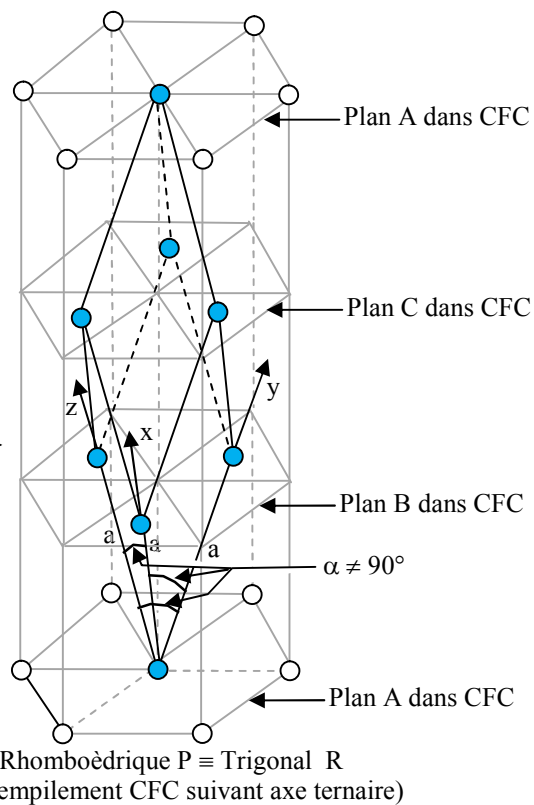
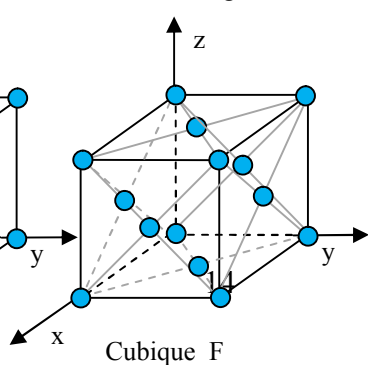
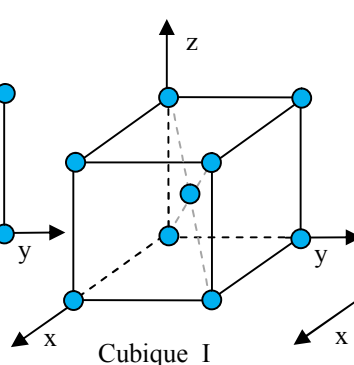
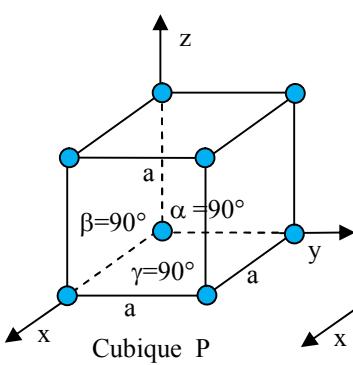
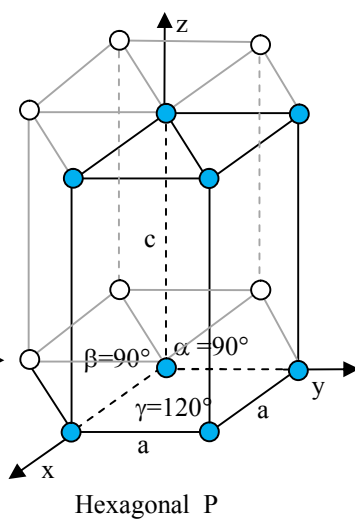
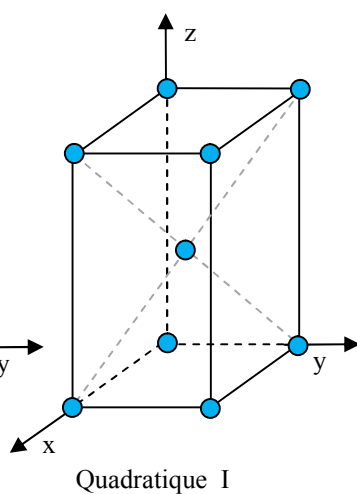
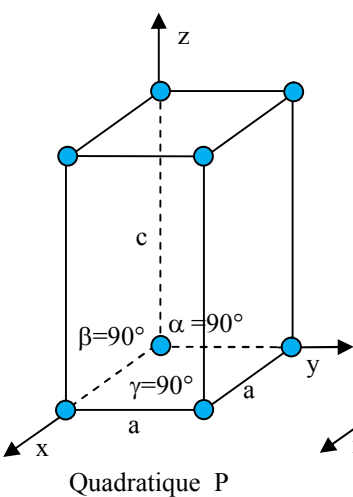
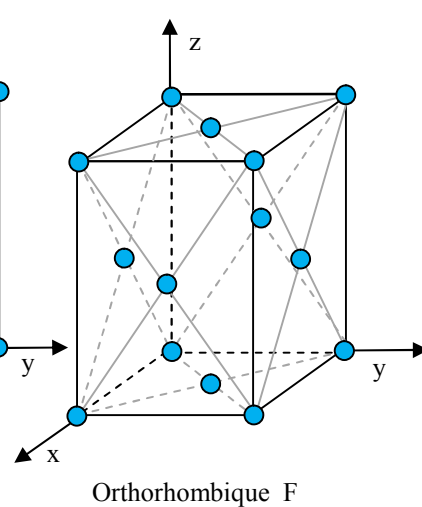
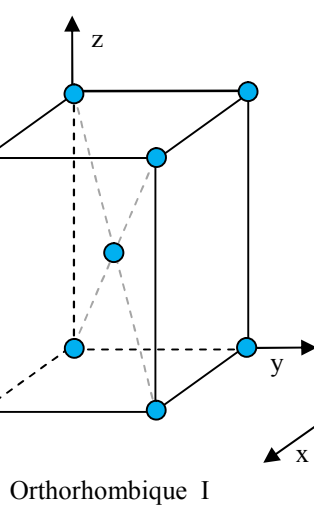
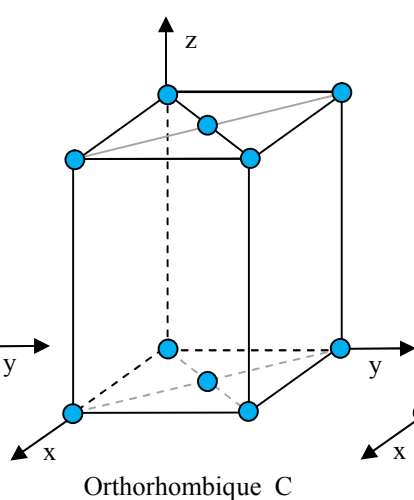
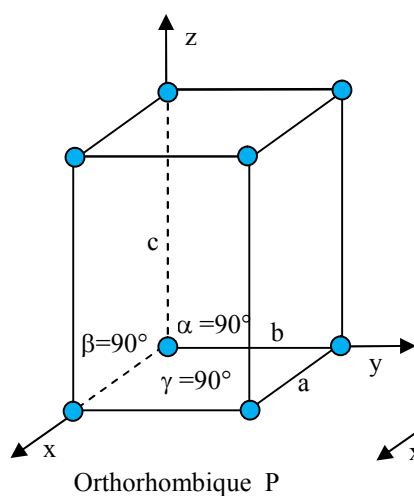
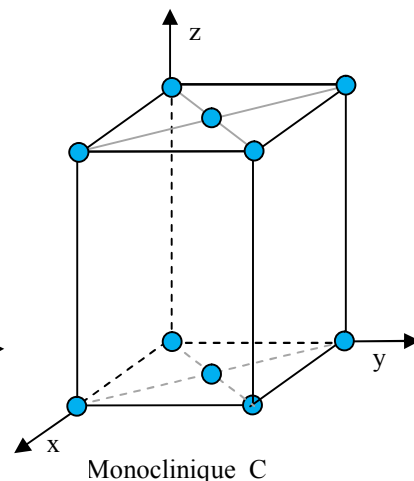
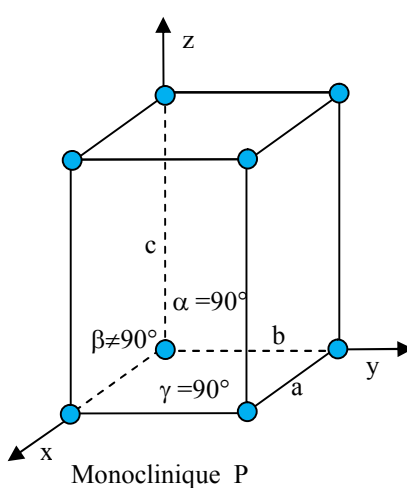
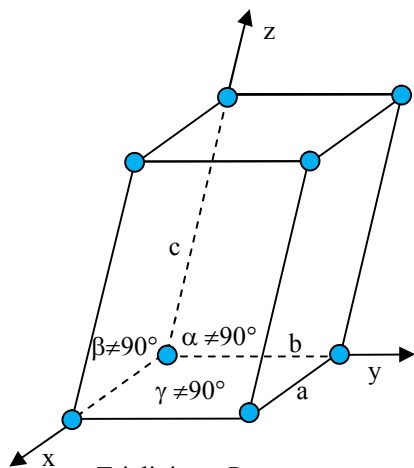
IV- RESEAU DE BRAVAIS :

1) Quel est le nombre de réseaux de Bravais ? Préciser les systèmes auxquels ils sont attribués.

SOLUTION

Les réseaux de bravais sont au nombre de 14 et sont répartis sur les systèmes cristallins comme suit :

SOLUTION DE LA SERIE N°1- TD DE CRISTALLOGRAPHIE – S5-FILIERE SMC – 2015-2016
Professeur Abderrafie BRITEL



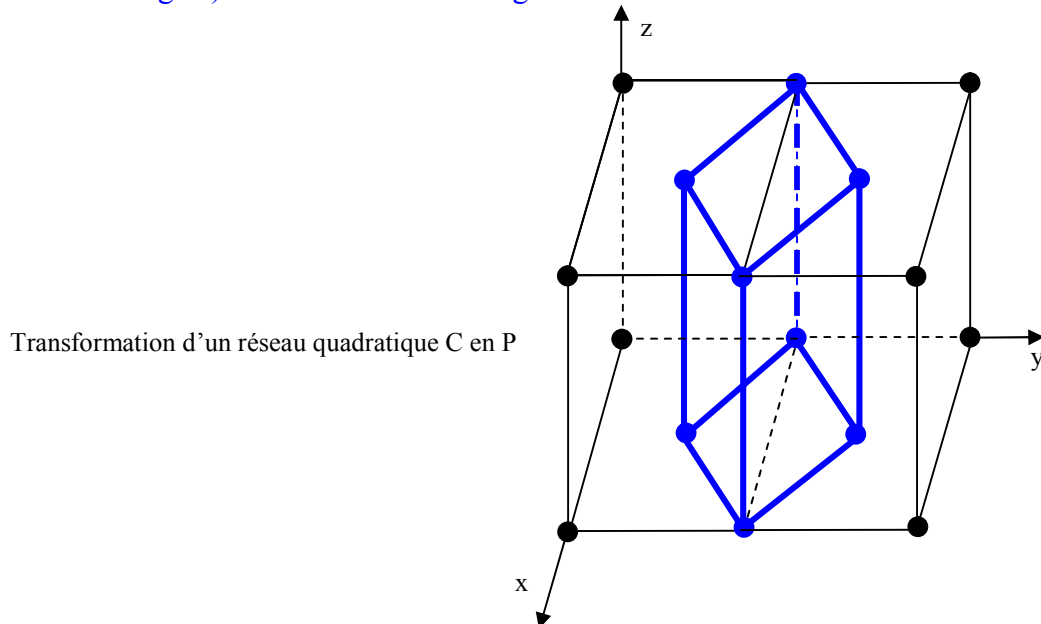
- 2) Certains modes de bravais n'existent pas dans certains systèmes cristallins. Ainsi, par exemple, les modes C (A ou B) et F n'existent pas dans le système quadratique, le mode I n'existe pas dans le système monoclinique et le mode A (ou B ou C) n'existent pas dans le système cubique. Expliquer pour quelle raison.

SOLUTION

En général, si un mode donné n'existe pas c'est parce que la maille qui le représente peut être remplacée par une maille de multiplicité plus petite compatible avec un autre mode.

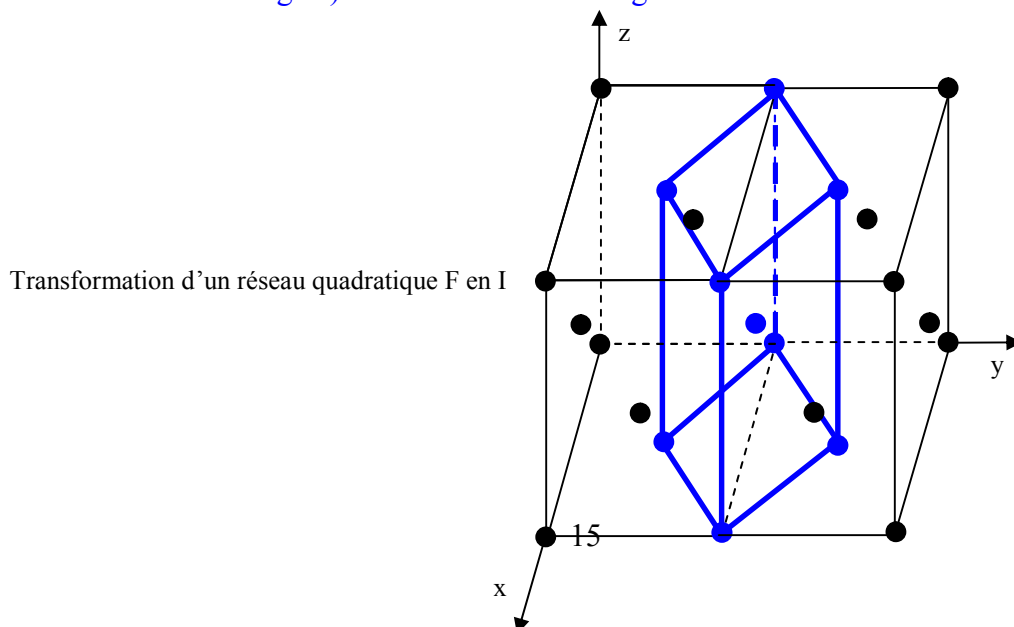
a- Inexistence du réseau quadratique bases centrées C :

Si nous considérons par exemple un réseau quadratique bases centrées C (maille double de paramètres a et c), ce réseau sera remplacé par un réseau quadratique primitif (maille simple de paramètres $a' = a\sqrt{2}/2$ et $c' = c$: maille en gras) comme le montre la figure suivante :



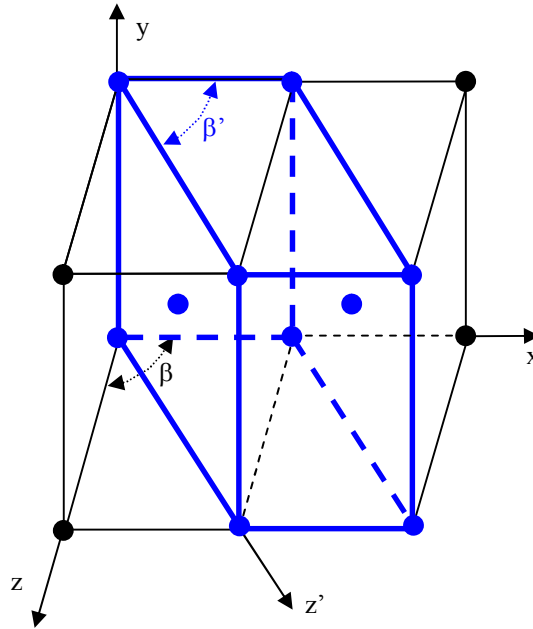
b- Inexistence du réseau quadratique à faces centrées F :

De même, si nous considérons un réseau quadratique à faces centrées F (maille quadruple de paramètres a et c), ce réseau sera remplacé par un réseau quadratique centré I (maille uniquement double de paramètres $a' = a\sqrt{2}/2$ et $c' = c$: maille en gras) comme le montre la figure suivante :



c- Inexistence du réseau monoclinique I :

De même, si nous considérons un réseau monoclinique I (maille double de paramètres a, b, c et β), ce réseau sera remplacé par un réseau monoclinique à bases centrées C (maille double de paramètres $a'=a, b'=b, c' \neq c$ et $\beta' \neq \beta$: maille en gras) comme le montre la figure suivante :



Transformation d'un réseau monoclinique I en monoclinique C

Dans ce cas, les réseaux monocliniques I et C ont même multiplicité et le réseau C n'est retenu que par convention (consignes de l'U.I.Cr : Union Internationale de Cristallographie).

L'axe $O\vec{X}$ est le même que l'axe $O\vec{X}'$ et l'axe $O\vec{Z}$ devient $-O\vec{Y}$ pour que le repère $(Ox'y'z')$ soit direct.

d- Inexistence du réseau cubique à bases centrées A (B ou C):

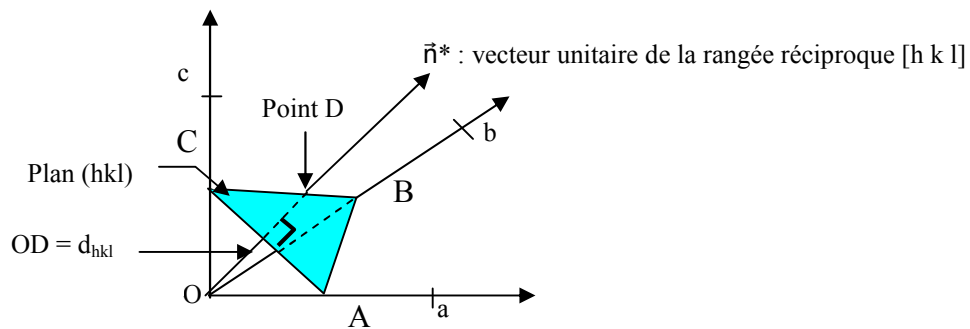
Pour ce qui concerne le réseau cubique, les modes bases centrées A, B ou C (dont les mailles seraient de multiplicité 2) ne peuvent pas exister puisque les faces sont toutes équivalentes et de ce fait si deux faces parallèles sont centrées, les quatre autres faces doivent également être centrées ce qui conduit à un réseau CFC (Cubiques à Faces Centrées) de multiplicité plus élevée que celle d'un mode à bases centrées.

V- RELATIONS ENTRE RESEAU DIRECT ET RESEAU RECIPROQUE :

- 1) Montrer qu'une rangée réticulaire $[hkl]^*$ du réseau réciproque est perpendiculaire à la famille de plans réticulaires (hkl) du réseau direct.

SOLUTION

Soient $\vec{n}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$ le vecteur unitaire de la rangée réciproque $[h k l]^*$, et A, B et C les points d'intersection du plan réticulaire $(h k l)$ avec les axes Ox, Oy et Oz du réseau direct :



Calculons les produits scalaires $\vec{n}^* \cdot \vec{AB}$ et $\vec{n}^* \cdot \vec{AC}$:

$$\begin{aligned}\vec{AB} &= \vec{AO} + \vec{OB} = -\vec{OA} + \vec{OB} = -\vec{a}/h + \vec{b}/k \\ \Rightarrow \vec{n}^* \cdot \vec{AB} &= (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \times (-\vec{a}/h + \vec{b}/k) \\ &= -\vec{a}^* \cdot \vec{a} + (h/k)\vec{a}^* \cdot \vec{b} - (k/h)\vec{b}^* \cdot \vec{a} + \vec{b}^* \cdot \vec{b} - (l/h)\vec{c}^* \cdot \vec{a} + (l/k)\vec{c}^* \cdot \vec{b} \\ &= -1+0+0+1-0+0 = 0\end{aligned}$$

\Rightarrow

$$\vec{n}^* \perp \vec{AB} \quad (1)$$

De même :

$$\begin{aligned}\vec{AC} &= \vec{AO} + \vec{OC} = -\vec{OA} + \vec{OC} = -\vec{a}/h + \vec{c}/l \\ \Rightarrow \vec{n}^* \cdot \vec{AC} &= (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \times (-\vec{a}/h + \vec{c}/l) \\ &= -\vec{a}^* \cdot \vec{a} + (h/l)\vec{a}^* \cdot \vec{c} - (k/h)\vec{b}^* \cdot \vec{a} + (k/l)\vec{b}^* \cdot \vec{c} - (l/h)\vec{c}^* \cdot \vec{a} + \vec{c}^* \cdot \vec{c} \\ &= -1+0-0+0-0+1 = 0\end{aligned}$$

\Rightarrow

$$\vec{n}^* \perp \vec{AC} \quad (2)$$

(1) et (2) $\Rightarrow \vec{n}^* \perp \text{plan (ABC)}$ soit :

$$\vec{n}^* \perp (hkl).$$

- 2) Montrer que la distance inter-réticulaire d_{hkl} de la famille (hkl) du réseau direct correspond à l'inverse de la période n_{hkl}^* de la rangée $[hkl]^*$ du réseau réciproque càd que : $d_{hkl} = 1/n_{hkl}^*$.

SOLUTION

Soient $\vec{n}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$ le vecteur unitaire de la rangée réciproque $[h k l]^*$, et A, B et C les points d'intersection du plan réticulaire (h k l) avec les axes Ox , Oy et Oz du réseau direct :

$$\begin{aligned}\vec{OA} \cdot \vec{n}^* &= |\vec{OA}| \times |\vec{n}^*| \times \cos(\vec{OA}, \vec{n}^*) = |\vec{OA}| \times \cos(\vec{OA}, \vec{n}^*) \times |\vec{n}^*| \\ &= (\text{projection de } \vec{OA} \text{ sur } \vec{n}^*) \times |\vec{n}^*| = OD \times |\vec{n}^*| \text{ or } OD = d_{hkl} \Rightarrow\end{aligned}$$

$$\vec{OA} \cdot \vec{n}^* = d_{hkl} \times |\vec{n}^*| \quad (1)$$

D'autre part,

$$\begin{aligned}\vec{OA} \cdot \vec{n}^* &= (\vec{a}/h) \times (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \\ &= \vec{a}\vec{a}^* + (k/h)\vec{a}\vec{b}^* + (l/h)\vec{a}\vec{c}^* \\ &= 1+0+0 \text{ soit :}\end{aligned}$$

$$\vec{OA} \cdot \vec{n}^* = 1 \quad (2)$$

(1) et (2) \Rightarrow

$$d_{hkl} \times |\vec{n}^*| = 1$$

soit :

$$d_{hkl} = 1/n_{hkl}^*$$

- 3) Déterminer, en utilisant le réseau réciproque, l'expression de la distance inter-réticulaire d'une famille donnée en fonction des paramètres de la maille si cette dernière est orthorhombique, quadratique ou cubique.

SOLUTION

Nous avons vu à la question précédente que d_{hkl} et n_{hkl}^* sont reliés par la relation :

$$d_{hkl} \cdot n_{hkl}^* = 1 \Rightarrow d_{hkl} = 1/n_{hkl}^*$$

$$\text{or } \vec{n}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

$$\Rightarrow n^* = [h^2 \vec{a}^{*2} + k^2 \vec{b}^{*2} + l^2 \vec{c}^{*2} + 2hk \vec{a}^* \vec{b}^* + 2hl \vec{a}^* \vec{c}^* + 2kl \vec{b}^* \vec{c}^*]^{1/2} \text{ soit :}$$

$$n^* = [h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hk a^* b^* \cos \gamma^* + 2hl a^* c^* \cos \beta^* + 2kl b^* c^* \cos \alpha^*]^{1/2}.$$

Donc :

\Rightarrow

$$d_{hkl} = [h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hk a^* b^* \cos \gamma^* + 2hl a^* c^* \cos \beta^* + 2kl b^* c^* \cos \alpha^*]^{-1/2}$$

En utilisant les formules reliant l'espace direct et l'espace réciproque, d_{hkl} devient :

$$d_{hkl} = [(h^2 / (a^2 \cos^2(\vec{a}, \vec{a}^*))) + (k^2 / (b^2 \cos^2(\vec{b}, \vec{b}^*))) + (l^2 / (c^2 \cos^2(\vec{c}, \vec{c}^*))) - (2hk \cos \gamma / ((ab \cos(\vec{a}, \vec{a}^*) \cos(\vec{b}, \vec{b}^*))) - (2hl \cos \beta / ((ac \cos(\vec{a}, \vec{a}^*) \cos(\vec{c}, \vec{c}^*))) - (2kl \cos \alpha / ((bc \cos(\vec{b}, \vec{b}^*) \cos(\vec{c}, \vec{c}^*))))]^{-1/2}.$$

Dans le cas du système orthorhombique :

$$d_{hkl} = [h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2}]^{-1/2}$$

soit :

$$d_{hkl} = [(h^2 / a^2) + (k^2 / b^2) + (l^2 / c^2)]^{-1/2}$$

Dans le cas du système quadratique :

$$d_{hkl} = [(h^2 + k^2)a^{*2} + (l^2c^{*2})]^{-1/2}$$

soit :

$$d_{hkl} = [((h^2 + k^2)/ a^2)) + (l^2/ c^2)]^{-1/2}$$

Dans le cas du système cubique :

$$d_{hkl} = [(h^2 + k^2 + l^2) a^{*2}]^{-1/2}$$

$$= [(h^2 + k^2 + l^2)/ a^2]^{-1/2}$$

soit :

$$d_{hkl} = a / (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$$

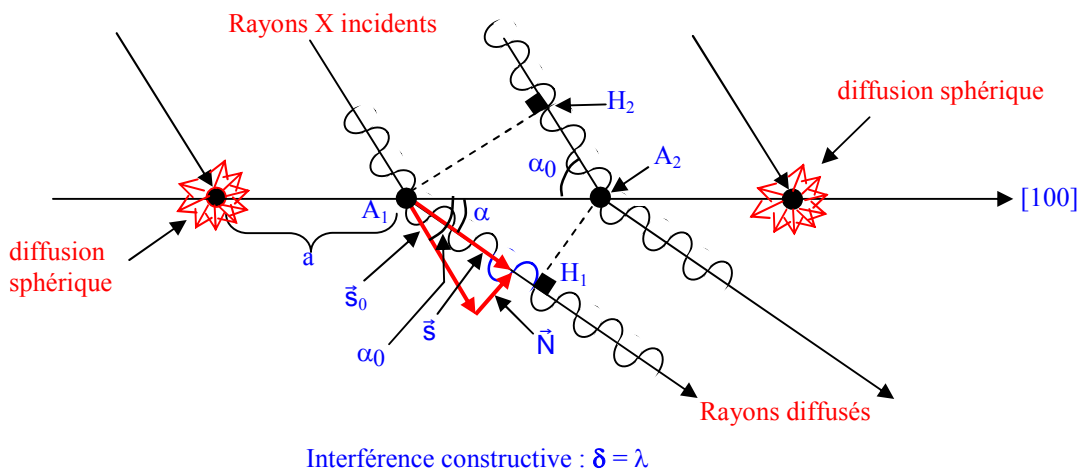
VI- DIFFRACTION DES RAYONS X:

Exercice 1:

- 1) Démontrer la relation de diffraction de LAUE par la rangée [100] (Représenter la figure de diffraction avec une différence de marche $\delta = \lambda$).

SOLUTION

Si l'on considère la rangée [100] de vecteur unitaire \vec{a} (figure ci-dessous), la différence de marche de deux rayons diffusés par deux atomes A_1 et A_2 , situés sur deux nœuds consécutifs, est :



$$\delta = \overline{A_1 H_1} - \overline{A_2 H_2} = a \cos \alpha - a \cos \alpha_0$$

$$= a \times (\lambda \times 1/\lambda) \times \cos \alpha - a \times (\lambda \times 1/\lambda) \times \cos \alpha_0$$

$$= \vec{a} \cdot \lambda \vec{s} - \vec{a} \cdot \lambda \vec{s}_0 = \lambda \vec{a} \cdot (\vec{s} - \vec{s}_0)$$

soit :

$$\delta = \vec{a} \cdot \vec{N} \lambda \quad (1)$$

$\lambda \vec{s}_0$ et $\lambda \vec{s}$ sont les vecteurs unitaires des directions d'incidence et de diffusion avec :
 \vec{s} et \vec{s}_0 sont les vecteurs d'onde tel que : $|\vec{s}| = |\vec{s}_0| = 1/\lambda$,

$\vec{a} = \overrightarrow{A_1 A_2}$ tel que $|\vec{a}|$ = périodicité de la rangée [100] et
 $\vec{N} = \vec{S} - \vec{S}_0$ = bissectrice de l'angle $(-\vec{S}_0, \vec{S})$ = vecteur de diffusion

Interférence constructive des rayons diffusés \Rightarrow

$$\delta = h \lambda \quad (2)$$

avec h entier représentant l'ordre de la diffraction.

(1) et (2) \Rightarrow

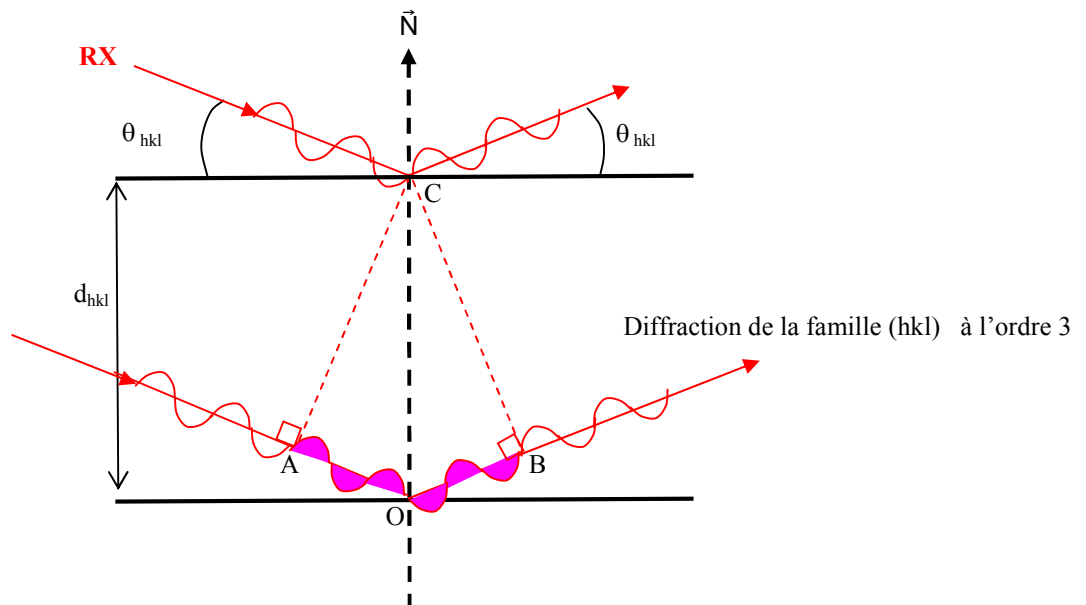
$$\vec{a} \cdot \vec{N} = h \quad (3)$$

avec h entier

C'est la **condition de diffraction de Laue par la rangée [100]** de périodicité a.

- 2) Démontrer la relation de diffraction de Bragg (Représenter la figure de diffraction avec une différence de marche $\delta = 3\lambda$).

SOLUTION



Sur la figure on voit que la différence de marche entre le rayon incident et le rayon diffracté est :

$$\delta = AO + OB = d_{hkl} \sin \theta_{hkl} + d_{hkl} \sin \theta_{hkl} = 2 d_{hkl} \sin \theta_{hkl}.$$

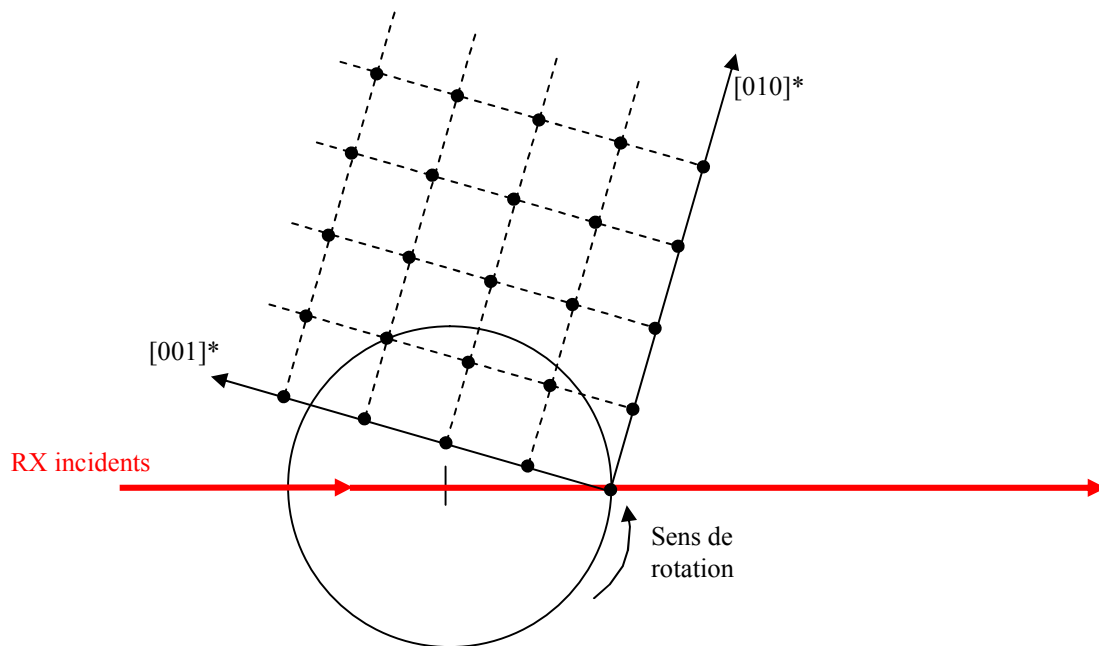
Pour que l'interférence soit constructive, il faudrait que : $\delta = n \lambda$, par conséquent on devrait avoir :

$$2 d_{hkl} \sin \theta_{hkl} = n \lambda$$

n (entier) étant l'ordre de la réflexion.

Exercice 2 :

La figure suivante montre l'état de diffraction d'un cristal à un instant t donné.



- 1) Quel est l'axe de rotation du cristal ? en déduire les plans réticulaires représentés par les nœuds de la figure.

SOLUTION

Les nœuds de la figure ci-dessus sont de type $0kl$ puisqu'ils appartiennent au plan réciproque (b^*, c^*) .

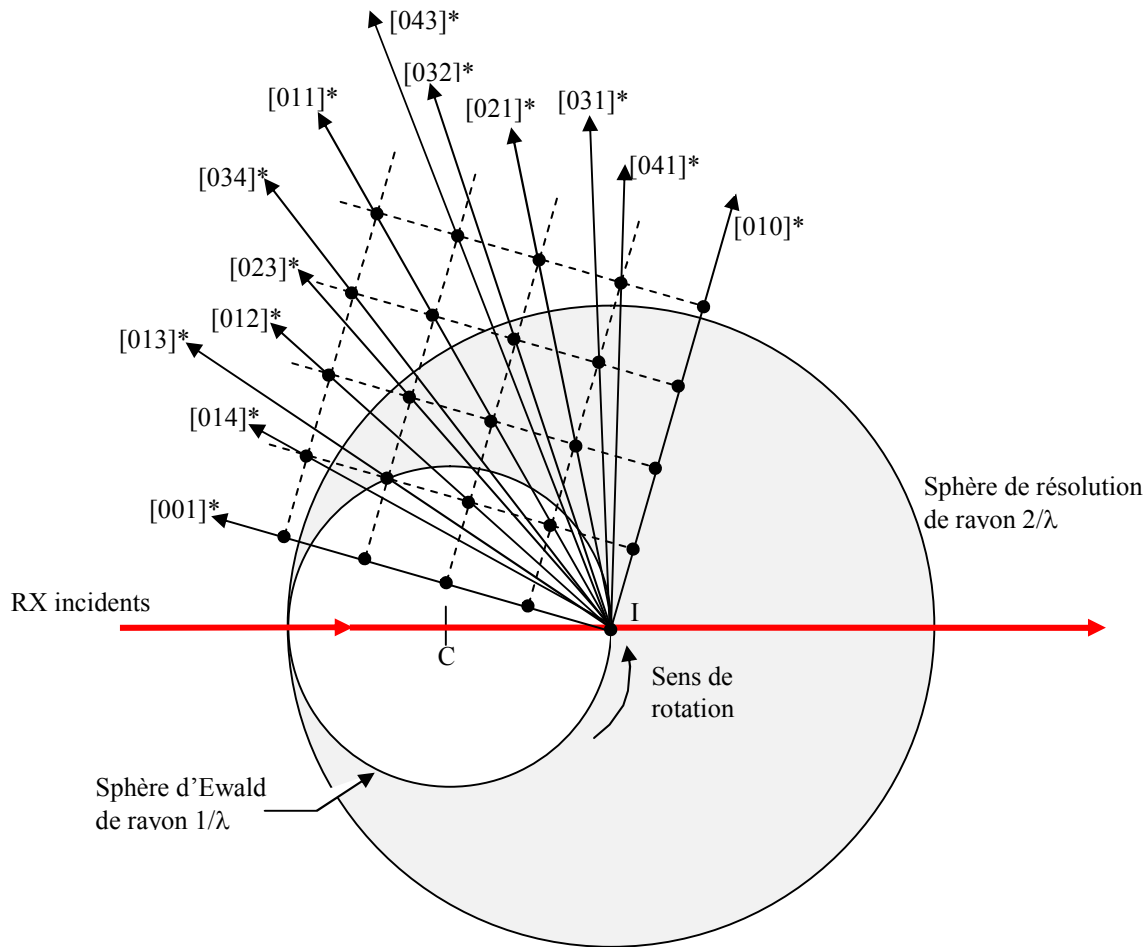
Comme l'axe de rotation est perpendiculaire au plan (b^*, c^*) , il s'agit alors de l'axe Ox .

- 2) Donner les indices des familles de plans réticulaires ne diffractant à aucun ordre. Que faut-il faire si on a besoin de la diffraction de ces plans ?

SOLUTION

REMARQUE

👉 Pour répondre à cette question et à celles qui suivent, il faut représenter la sphère de résolution (de rayon $2/\lambda$) sur la figure de diffraction.



Les familles de plans réticulaires ne diffractant à aucun ordre sont celles dont les premiers nœuds des rangées réciproques qui lui sont normales sont en dehors de la sphère de résolution. Ces familles sont : **(041), (043), (034) et (014).**

Si on a besoin de la diffraction de ces familles, il faut irradier le cristal par un rayonnement X de longueur d'onde plus petite (dans la pratique on irradie le cristal par la radiation $k_{\alpha 1}$ du molybdène de longueur d'onde $\lambda = 0,7100 \text{ \AA}$ au lieu de la radiation $k_{\alpha 1}$ du cuivre couramment utilisée de longueur d'onde $\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$). Dans ces conditions, la sphère de résolution devient plus grande et peut contenir certains nœuds qui étaient auparavant en dehors de la 1^{ère} sphère de résolution.

3) Donner les indices d'une famille de plans réticulaires ne diffractant qu'au 1^{ier} et 2^{ème} ordre.

SOLUTION :

Les familles de plans réticulaires ne diffractant qu'au 1^{ier} et 2^{ème} ordre sont celles dont seuls les deux premiers nœuds des rangées réciproques qui lui sont normales sont dans la sphère de résolution. Il existe une seule famille répondant à cette condition, il s'agit de la famille **(011).**

4) Quelles sont les familles de plans réticulaires ne diffractant qu'au 1^{ier} ordre.

SOLUTION

Les familles de plans réticulaires ne diffractant qu'au 1^{er} ordre sont celles dont seuls les premiers nœuds des rangées réciproques qui lui sont normales sont dans la sphère de résolution. Les familles répondant à cette condition, sont : **(031) (021) (032) (023) (012) (013).**

- 5) Quelle est la famille qui est en train de diffracter et à quel ordre ? Calculer l'angle de diffraction de cette famille sachant que la maille est cubique de paramètre $a = 4,872 \text{ \AA}$ et que la longueur d'onde utilisée est $\lambda = 1,540 \text{ \AA}$.

SOLUTION

La famille qui est en train de diffracter est celle dont l'un des nœuds se trouve exactement sur la sphère d'Ewald. Il s'agit de la famille **(013)**. Comme c'est le 1^{er} nœud qui se trouve sur la sphère d'Ewald, la famille est donc en train de diffracter au 1^{er} ordre. Dans ce cas on peut écrire que :

$$2 d_{013} \sin \theta_{1(013)} = 1 \lambda \text{ soit } \theta_{1(013)} = \arcsin (\lambda / 2 \times d_{013})$$

Comme la maille est cubique on a :

$$d_{hkl} = a / (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$$

APPLICATION NUMERIQUE

$$d_{013} = a / (0^2 + 1^2 + 3^2)^{1/2} = a / 10^{1/2}$$

et

$$\theta_{1(013)} = \arcsin [1,540 \times 10^{1/2} / (2 \times 4,872)] = \arcsin 0,5 = 32,18^\circ$$

- 6) Que faut-il faire, à partir de l'état représenté par la figure, pour diffracter le 2^{ème} ordre de la famille trouvée à la question 5) ci-dessus ?

SOLUTION

La famille trouvée à la question 5) est la famille (013), d'après la figure de diffraction, elle ne peut pas diffracter au 2^{ème} ordre puisque le 2^{ème} nœud de la rangée [013]* qui lui est normale est en dehors de la sphère de résolution et par conséquent il ne peut traverser la sphère d'Ewald (dans ces conditions : $\sin \theta_{2(013)} = (2\lambda / 2d_{013}) = (\lambda / d_{013}) = [1,540 \times 10^{1/2} / (4,872)] = 1,065 > 1$!!!).

Pour faire diffracter l'ordre 2 de la famille (013), il faut irradier le cristal par un rayonnement X de longueur d'onde plus petite (dans la pratique on irradiera le cristal par la radiation $k_{\alpha 1}$ du molybdène de longueur d'onde $\lambda = 0,7100 \text{ \AA}$ au lieu de la radiation $k_{\alpha 1}$ du cuivre couramment utilisée de longueur d'onde $\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$).

Exercice 3 :

- 1) Soit la rangée cristallographique réciproque passant par le couple de nœuds $N^*_1 : 1 \ 3 \ 4$ et $N^*_2 : 4 \ 9 \ 4$.
a. indexer cette rangée et préciser l'ordre du nœud N_2 par rapport au nœud N_1 .

SOLUTION

La rangée cristallographique réciproque $[h\ k\ l]^*$ passant par le couple de nœuds $N^*_1: 1\ 3\ 4$ et $N^*_2: 4\ 9\ 4$ ne passe pas par l'origine du repère. Pour la faire passer par l'origine, on fera un changement d'origine de telle sorte que celle-ci devienne en N^*_1 , les coordonnées de N^*_2 deviennent alors dans le nouveau repère : $h' = 4 - 1 = 3$, $k' = 9 - 3 = 6$ et $l' = 4 - 4 = 0$. Ces coordonnées ne sont pas premières entre elles, le nœud N^*_2 n'est donc pas le 1^{er} nœud après l'origine mais plutôt le 3^{ème} (puisque lorsqu'on divise les nombres h' , k' et l' par 3, on obtient des nombres premiers entre eux). Le 1^{er} nœud après l'origine aura plutôt comme coordonnées : $h = 1$, $k = 2$ et $l = 0$ (h , k et l sont cette fois premiers entre eux). La rangée réticulaire en question sera notée par les coordonnées du 1^{er} nœud après l'origine soit : **$[1\ 2\ 0]^*$** .

- b.** donner l'expression du paramètre (ou période) de la rangée considérée si le système cristallin est quadratique.

SOLUTION

Dans le cas où la maille est triclinique, l'expression générale du paramètre p^* d'une rangée $[h\ k\ l]^*$ est :
 $p^* = [h^2 \vec{a}^{*2} + k^2 \vec{b}^{*2} + l^2 \vec{c}^{*2} + 2hk \vec{a}^* \vec{b}^* + 2hl \vec{a}^* \vec{c}^* + 2kl \vec{b}^* \vec{c}^*]^{1/2}$
 Comme la maille est quadratique, l'expression générale du paramètre de la rangée $[h\ k\ l]^*$ devient :

$$p^* = d^* = N^*_1 N^*_2 = [(h^2 + k^2)a^{*2} + l^2 c^{*2}]^{1/2}$$

APPLICATION NUMERIQUE

$$p_{120}^* = d_{120}^* = [(1^2 + 2^2)a^{*2}]^{1/2} = 5^{1/2} a^* = 5^{1/2}/a = 5^{1/2}/6,887 = 0,325 \text{ \AA}^{-1}$$

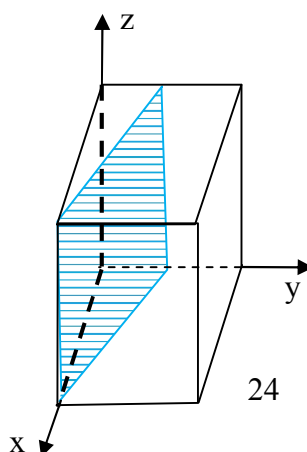
REMARQUE

👉 $p_{120}^* = d_{120}^* = 1/d_{120} = 0,325 \text{ \AA}^{-1} \Rightarrow d_{120} = 3,08 \text{ \AA}$ (voir calcul de d_{120} dans la question 2) ci-dessous)

- c.** quelle est la famille de plans réticulaires correspondant à cette rangée ? dessiner sur une maille le plan représentant cette famille.

SOLUTION

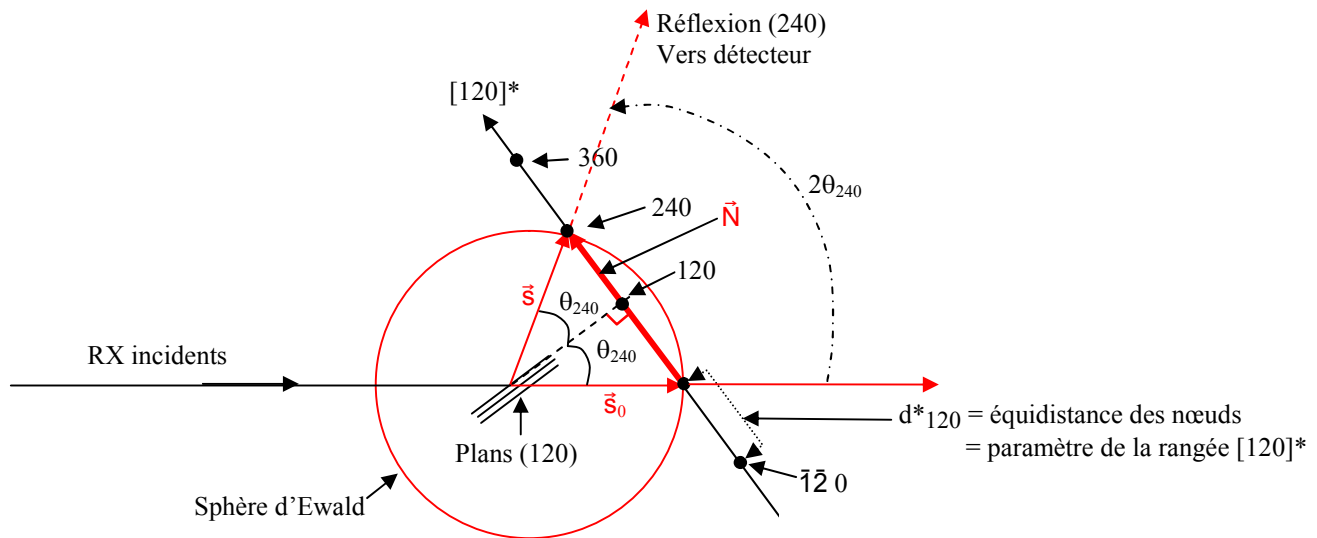
La famille de plans réticulaires correspondant à la rangée $[1\ 2\ 0]^*$ est la famille **$(1\ 2\ 0)$** . L'intersection avec la maille du plan représentant cette famille est la section hachurée de la figure suivante :



- 2) Dessiner la figure de diffraction d'Ewald en considérant la famille réticulaire trouvée en 1)-c en train de diffracter au 2^{ème} ordre. Représenter le rayon diffracté, le plan qui diffracte, les vecteur \vec{S}_0 , \vec{S} et \vec{N} . Calculer alors l'angle de diffraction de la famille de plans réticulaires qui est en train de diffracter sachant que la maille est quadratique de paramètre $a = 6,887 \text{ \AA}$ et $c = 9 \text{ \AA}$ et que la longueur d'onde utilisée pour la diffraction est $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$. A quel angle se positionne le compteur ? Que faut-il faire pour diffracter le 3^{ème} ordre de la même famille ?

SOLUTION

Dessin de la figure de diffraction d'Ewald en considérant la famille de plans réticulaires (120) en train de diffracter au 2^{ème} ordre (le 2^{ème} nœud de la rangée réciproque [120]* doit être sur la sphère d'Ewald) :



Quand la famille de plans réticulaires (120) est en train de diffracter au 2^{ème} ordre, on peut écrire que :

$$2 d_{120} \sin\theta_{2(120)} = 2 \lambda \text{ soit } \theta_{2(120)} = \arcsin (\lambda/ d_{120})$$

Comme la maille est quadratique on a :

$$d_{hkl} = 1 / [((h^2 + k^2)/a^2) + (l^2/c^2)]^{1/2}$$

APPLICATION NUMERIQUE

$$\mathbf{d}_{120} = 1 / [((1^2 + 2^2)/a^2)]^{1/2} = a / 5^{1/2} = 6,887 / 5^{1/2} = 6,887 / 2,236 = \mathbf{3,08 \text{ \AA}}$$

et

$$\theta_{2(120)} = \arcsin [1,54/3,08] = \arcsin 0,5 = 30^\circ$$

Le compteur se positionne par rapport à l'axe résiduel des rayons X à $2\theta_{(120)}$ soit à 60° .

Pour faire diffracter la famille de plans réticulaires (120) au 3^{ème} ordre, il faut la positionner à l'angle $\theta_{3(120)}$ tel que :

soit

$$2 d_{120} \sin \theta_{3(120)} = 3 \lambda$$

$$\theta_{3(120)} = \arcsin (3\lambda / 2d_{120})$$

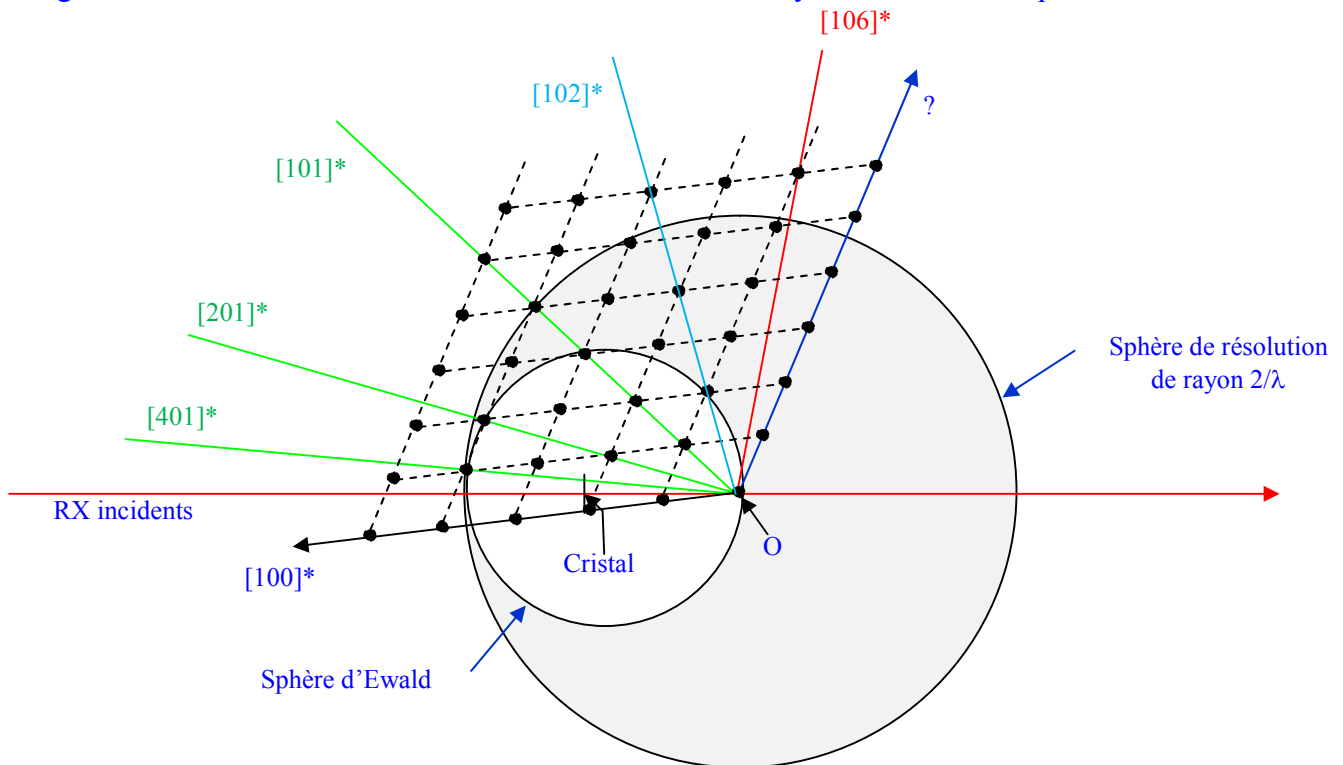
APPLICATION NUMERIQUE

$$d_{120} = 3,08 \text{ \AA} \text{ et } \theta_{3(120)} = \arcsin [(3 \times 1,54) / (2 \times 3,08)] = \arcsin 0,75 = 48,59^\circ$$

Initialement, la famille de plans réticulaires (120) est en train de diffracter au 2^{ème} ordre (état initial à $\theta_{2(120)} = 30^\circ$) et pour la faire diffracter au 3^{ème} ordre, il faut alors la tourner autour de l'axe de rotation dans le sens direct d'un angle $\Delta\theta = \theta_{3(120)} - \theta_{2(120)} = 18,59^\circ$.

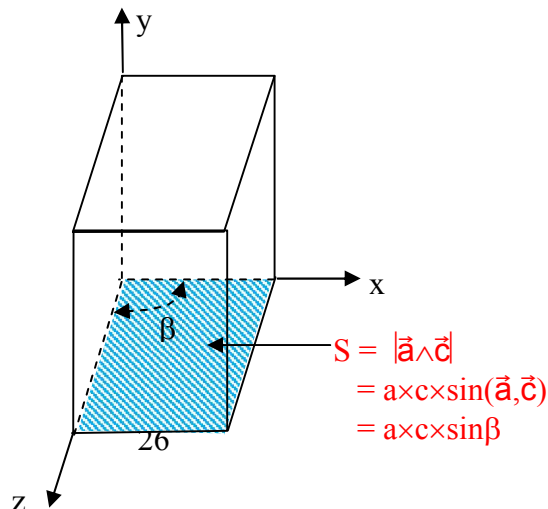
Exercice 4 :

La figure suivante montre l'état de diffraction d'un cristal de symétrie monoclinique à un instant t donné.



- 1) Calculer le volume de la maille sachant qu'elle a comme paramètre $a = 5 \text{ \AA}$, $b = 6,6 \text{ \AA}$, $c = 7 \text{ \AA}$ et $\beta = 60^\circ$.

SOLUTION



$$V = S \times b = a \times c \times \sin 60^\circ \times b = 5 \times 6,6 \times 7 \times 0,866 = 200,046 \text{ \AA}^3.$$

- 2) Préciser l'angle entre les axes de la figure ci-dessus et donner sa valeur.

SOLUTION

L'angle entre les axes de la figure ci-dessus est l'angle β^* (c'est le seul angle qui n'est pas droit dans le système monoclinique), cet angle a pour valeur $\pi - \beta$ soit $\beta^* = 120^\circ$

- 3) Quel est le 2^{ème} axe de la figure ci-dessus ? en déduire l'axe de rotation du cristal.

SOLUTION

La figure montre un angle différent de 90° , or dans le monoclinique le seul angle différent de 90° est l'angle β formé entre les axes a et c c-à-d entre $[100]$ et $[001]$. Il lui correspond dans le réseau réciproque l'angle β^* formé entre les axes a^* et c^* c-à-d entre $[100]^*$ et $[001]^*$: le 2^{ème} axe de la figure ci-dessus est donc l'axe $[001]^*$. L'axe de rotation du cristal doit être perpendiculaire au plan (a^*, c^*) : l'axe de rotation est donc l'axe Oy .

- 4) Quelle est l'expression générale des rangées de la figure ci-dessus ? En déduire le point commun entre les plans réticulaires représentés par ces rangées.

SOLUTION

Les rangées de la figure ci-dessus sont de type $[h \ 0 \ l]^*$ puisqu'ils appartiennent au plan réciproque (a^*, c^*) . Ces rangées représentent les familles de plans réticulaires $(h \ 0 \ l)$, ces derniers sont // à Oy (car $k = 0$)

- 5) Donner les indices de l'une des familles de plans réticulaires ne pouvant diffracter à aucun ordre (donner celle ayant h le plus petit). Que faut-il faire si on a besoin de la diffraction de cette famille ?

SOLUTION

Les familles de plans réticulaires ne diffractant à aucun ordre sont celles dont les premiers nœuds des rangées réciproques qui lui sont normales sont en dehors de la sphère de résolution. La famille ayant h le plus petit est la famille **(106)**.

Si on a besoin de la diffraction de cette famille, il faut irradier le cristal par un rayonnement X de longueur d'onde plus petite que celle du cuivre (dans la pratique on prend le molybdène de longueur d'onde $\lambda = 0,7100 \text{ \AA}$ au lieu du cuivre couramment utilisé de longueur d'onde $\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$). Dans ces conditions, la sphère de résolution devient plus grande et contient ainsi d'autres nœuds qui étaient en dehors de la 1^{ère} sphère de résolution.

- 6) Donner les indices de l'une des familles de plans réticulaires ne pouvant diffracter qu'au 1^{er} ordre (donner celle ayant h le plus grand).

SOLUTION

Les familles de plans réticulaires ne diffractant qu'au 1^{ier} ordre sont celles dont seuls les premiers nœuds des rangées réciproques qui lui sont normales sont dans la sphère de résolution. La famille répondant à cette condition et ayant h le plus grand est : **(401)**

- 7) Donner les indices de l'une des familles de plans réticulaires ne pouvant diffracter qu'au 1^{ier} et 2^{ème} ordre (donner celle ayant h le plus petit).

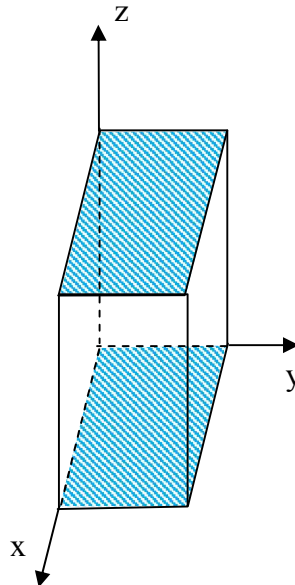
SOLUTION

Les familles de plans réticulaires ne pouvant diffracter qu'au 1^{ier} et 2^{ème} ordre sont celles dont seuls les deux premiers nœuds des rangées réciproques qui lui sont normales sont dans la sphère de résolution. La famille répondant à cette condition et ayant h le plus petit est : **(102)**

- 8) donner les indices de la famille de plans réticulaires pouvant diffracter au plus grand ordre de diffraction (préciser cet ordre). Dessiner l'intersection avec la maille du plan représentant cette famille.

SOLUTION

La famille de plans réticulaires ayant l'ordre de diffraction le plus élevé est la famille **(001)**, cet ordre est **$n=4$** .



Intersection avec la maille du plan représentant la famille (001)

REMARQUE



La famille de plans réticulaires (101) a également comme ordre de diffraction maximal $n=4$, mais cette famille ne peut diffracter effectivement à cet ordre puisque le nœud 404 se trouve exactement sur la sphère de résolution et en diffraction il coupera la sphère d'Ewald sur l'axe des RX et le rayon diffracté sera impossible à mesurer puisque il revient du côté de la source des RX.

- 9) Quelle (s) est (sont) la (les) famille (s) qui est (sont) en train de diffracter et à quel ordre ? Comment on note cette (ces) réflexion (s) ? Calculer l'angle de diffraction de cette (ces) famille (s) sachant que la longueur d'onde utilisée est $\lambda = 1,540 \text{ \AA}$.

SOLUTION

La famille qui est en train de diffracter est celle dont l'un des nœuds se trouve exactement sur la sphère d'Ewald. Il y a trois familles répondant à ce critère. Il s'agit de :

- la famille **(401)** qui diffracte au **1^{ier} ordre** (1^{ier} nœud se trouve sur la sphère d'Ewald), cette réflexion sera notée **(401)**.
- la famille **(201)** qui diffracte au **2^{ème} ordre** (2^{ème} nœud se trouve sur la sphère d'Ewald), cette réflexion sera notée **(402)**.
- la famille **(101)** qui diffracte au **3^{ème} ordre** (3^{ème} nœud se trouve sur la sphère d'Ewald), cette réflexion sera notée **(303)**.

Les angles de diffraction s'obtiennent par la relation de Bragg :

$$\theta_{hkl} = \arcsin (n\lambda / 2d_{hkl})$$

Pour un système monoclinique :

$$d_{hkl} = [(h^2 / (a^2 \sin^2 \beta)) + (k^2 / b^2) + (l^2 / (c^2 \sin^2 \beta)) - (2hlc \cos \beta / (ac \sin^2 \beta))]^{-1/2}.$$

APPLICATION NUMERIQUE

1) Calcul de d_{401} :

$$d_{401} = [(16 / (25 \times 3/4)) + (1 / (49 \times 3/4)) - (2 \times 4 \times 0,5 / (5 \times 7 \times 3/4))]^{-1/2}.$$

$$d_{401} = [(64 / 75) + (4 / 147) - (4 \times 4 / (105))]^{-1/2} = 0,728^{-1/2} = 1,172 \text{ \AA}$$

2) Calcul de θ_{401} :

$$\theta_{401} = \arcsin (\lambda / 2d_{401}) = \arcsin (1,54 / 2 \times 1,172) = \arcsin (0,657) = 41,07^\circ$$

3) Calcul de d_{201} :

$$d_{201} = [(4 / (25 \times 3/4)) + (1 / (49 \times 3/4)) - (2 \times 2 \times 0,5 / (5 \times 7 \times 3/4))]^{-1/2}.$$

$$d_{201} = [(16 / (75)) + (4 / (147)) - (8 / (105))]^{-1/2} = 0,164^{-1/2} = 2,467 \text{ \AA}$$

4) Calcul de θ_{402} :

$$\theta_{402} = \arcsin (2\lambda / 2d_{201}) = \arcsin (1,54 / 2,467) = \arcsin (0,624) = 38,61^\circ$$

5) Calcul de d_{101} :

$$d_{101} = [(1 / (5^2 \sin^2 60)) + (1 / (7^2 \sin^2 60)) - (2 \cos 60 / (5 \times 7 \sin^2 60))]^{-1/2}.$$

$$d_{101} = [(1 / (25 \times 3/4)) + (1 / (49 \times 3/4)) - (2 \times 0,5 / (5 \times 7 \times 3/4))]^{-1/2}.$$

$$d_{101} = [(4 / (75)) + (4 / (147)) - (4 / (105))]^{-1/2} = 4,854 \text{ \AA}$$

6) Calcul de θ_{303} :

$$\theta_{303} = \arcsin(3\lambda / 2d_{101}) = \arcsin(3 \times 1,54 / 2 \times 4,854) = \arcsin(0,474) = 28,29^\circ$$

10) Dessiner sur un film de longueur 18 cm, l'emplacement exact de la réflexion ayant θ le plus élevé dans la question précédente et ce si on réalise pour le composé étudié un diagramme de Debye-Scherrer :

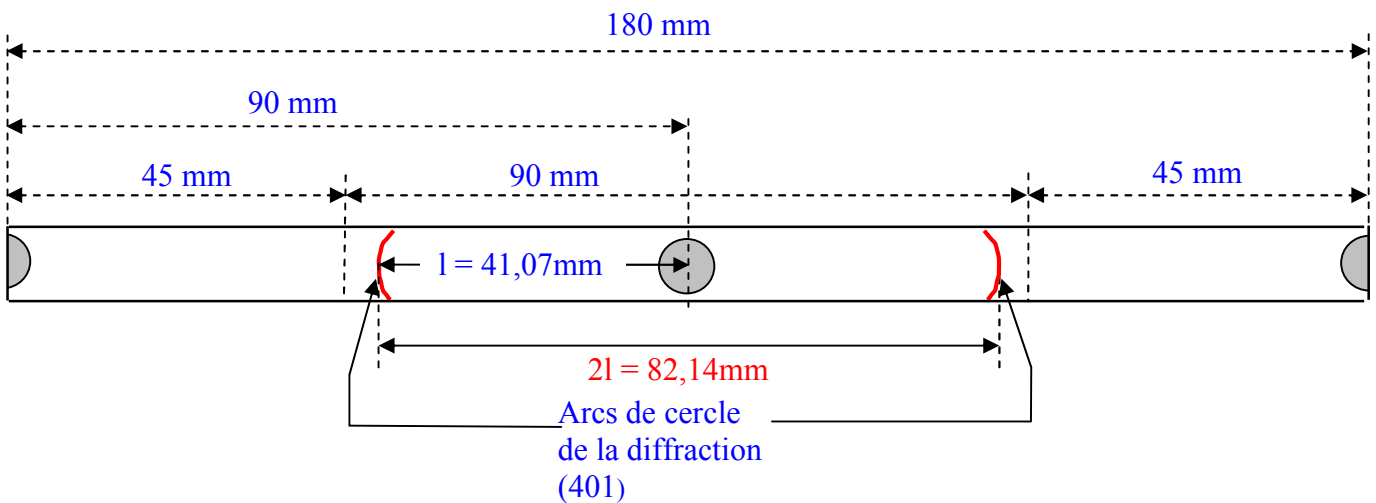
a- avec montage normal.

b- avec montage de Van Arkel

SOLUTION

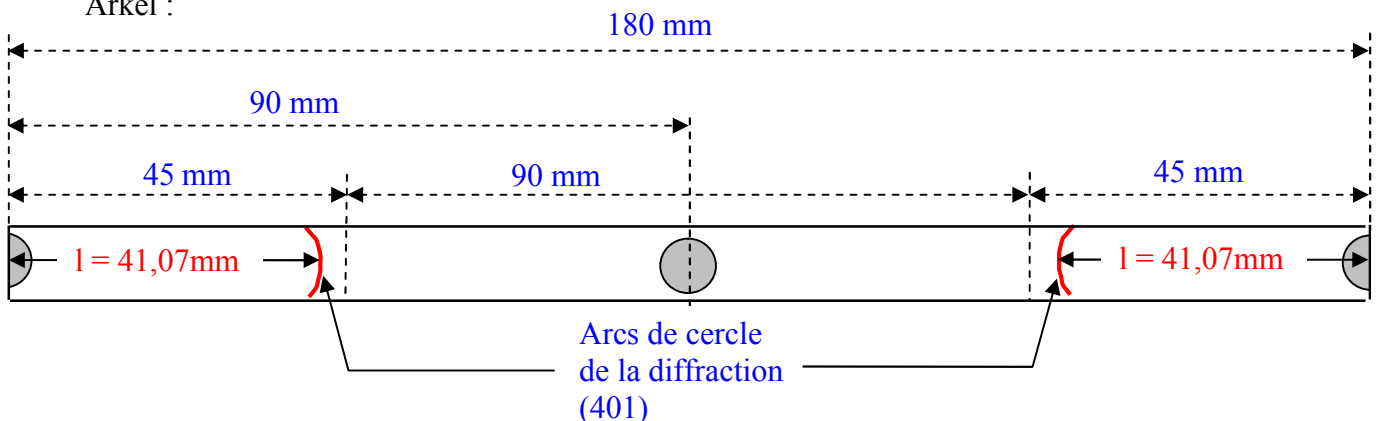
La réflexion ayant θ le plus élevé dans la question précédente correspond à la diffraction du 1^{er} ordre de la famille (401), diffraction qui se fait à $\theta_{401} = 41,07^\circ$. Dans un diagramme de Debye-Scherrer, la diffraction du 1^{er} ordre de la famille (401) sera dans le spectre direct centrée autour de la trace du puits sur le film et la distance $2l$ séparant les deux arcs de cercle de la diffraction aura pour valeur $2l = 4 \times 41,07 = 164,28$ mm si le film a pour longueur 360mm. Si donc on prend un film de 180mm, on aura $2l = 82,14$ mm.

a- emplacement des arcs du cercle correspondant à la diffraction (401) si le montage est normal :



a : montage normal : ouverture du côté du collimateur

b- emplacement des arcs du cercle correspondant à la diffraction (401) si le montage est celui de Van Arkel :



b : montage de Van Arkel : ouverture du côté du puits

VII- RAIES DE DIFFRACTION ET EXTINCTIONS SYSTEMATIQUES DANS LES DIFFERENTS MODES DU RESEAU CUBIQUE :

Exercice 1 :

- 1) Quelles sont les trois premières familles réticulaires (càd celles qui se trouvent au début du spectre de diffraction) qui diffractent dans un matériau cristallisant avec une maille cubique primitive (justifier votre réponse).

SOLUTION

La première famille de plans réticulaire (càd celle qui se trouve au début du spectre de diffraction) qui diffracte dans un matériau donné a pour caractéristique d'avoir l'angle θ le plus petit (2θ le plus petit dans le spectre de diffraction). Il s'agit donc de la famille ayant d_{hkl} le plus grand puisque $2d_{hkl} \sin\theta = n\lambda$ (pour la première famille de plans réticulaire $n = 1$). Dans le cas particulier du cubique $d_{hkl} = a / (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$, d_{hkl} le plus grand correspond donc à $(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$ le plus petit soit $(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2} = 1$ ce qu'on peut avoir pour $h=1$, $k=0$ et $l = 0$. La famille recherchée est donc la famille **(100)**. La 2^{ème} famille s'obtiendrait pour $(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2} = 2$ ce qu'on peut avoir pour $h=1$, $k=1$ et $l = 0$. La 2^{ème} famille recherchée est donc la famille **(110)**. La 3^{ème} famille s'obtiendrait pour $(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2} = 3$ ce qu'on peut avoir pour $h=1$, $k=1$ et $l = 1$. La 3^{ème} famille recherchée est donc la famille **(111)**.

- 2) Dédurre de la question précédente (en justifiant la réponse) la famille réticulaire qui diffracte la 1^{ère} (càd celle qui se trouve au début du spectre de diffraction) dans un matériau ayant une maille :

a- cubique centrée

b- cubique à faces centrées.

SOLUTION

- a- Les familles diffractant dans un matériau cristallisé de symétrie cubique centrée sont celles du cubique simple aux quelles il faut retrancher les familles réticulaires pour lesquelles $h+k+l=2n+1$. Dans ces conditions, la famille réticulaire qui diffracte la 1^{ère} (càd celle qui se trouve au début du spectre de diffraction) dans un matériau ayant une maille cubique centrée est la famille **(110)**.
- b- Les familles diffractant dans un matériau cristallisé de symétrie cubique à faces centrées sont celles du cubique simple auxquelles il faut retrancher les familles réticulaires pour lesquelles h , k et l sont de parité différente. Dans ces conditions, la famille réticulaire qui diffracte la 1^{ère} (càd celle qui se trouve au début du spectre de diffraction) dans un matériau ayant une maille cubique à faces centrées est la famille **(111)**.

Exercice 2 :

- 1) Préciser les ordres de diffraction de la famille réticulaire de distance $d_{100} = 3,10 \text{ \AA}$ dans le cas où la symétrie est cubique à faces centrées et la radiation $K\alpha_1$ du cuivre utilisée a pour longueur $\lambda=1,5406 \text{ \AA}$. En cas de besoin, que doit-on faire pour augmenter le nombre de diffractions ? Justifier votre réponse.

SOLUTION

Les ordres n de diffractions possibles d'une famille réticulaire de distance d_{hkl} sont tel que : $nd^* < 2/\lambda$ (càd le $n^{\text{ième}}$ nœud de la rangée $[hkl]^*$ se trouve dans la sphère de résolution) soit $n/d < 2/\lambda$ ou $n < 2d/\lambda$. Dans le cas de la famille réticulaire de distance $d_{hkl} = 3,10 \text{ \AA}$, $n < 2 \cdot 3,10 / 1,5406$ soit $n < 4,03$. Comme n est entier, les ordres de diffractions possibles sont donc $n = 1, 2, 3$ et 4 . Les diffractions possibles seraient donc (100) , (200) , (300) et (400) et ce en cas où il n'y a pas des extinctions systématiques dues au mode du réseau ou aux éléments de symétrie avec glissement, mais dans le cas où la symétrie est cubique à faces centrées, seules les diffractions (200) et (400) seront observées (diffractions pour lesquelles les indices h, k et sont de même parité).

Pour augmenter le nombre de diffractions, il faut irradier le cristal par un rayonnement X de longueur d'onde plus petite que celle du cuivre (dans la pratique on prend le molybdène de longueur d'onde $\lambda = 0,7100 \text{ \AA}$ au lieu du cuivre couramment utilisé de longueur d'onde $\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$). Dans ces conditions, la sphère de résolution devient plus grande et contient ainsi d'autres nœuds qui étaient en dehors de la 1^{ère} sphère de résolution. Ainsi, en irradiant le cristal avec $\lambda = 0,7100 \text{ \AA}$, $n < 8,73$ et les diffractions possibles de la famille (100) dans le cas où la symétrie est cubique à faces centrées seraient donc (200) , (400) , (600) et (800) .

- 2) Pourra-t-on observer la diffraction du 1^{er} ordre de la famille réticulaire de distance $d = 0,75 \text{ \AA}$ en cas où cette diffraction n'est pas concernée par une extinction systématique ? Justifier votre réponse.

SOLUTION

La diffraction du 1^{er} ordre d'une famille réticulaire de distance d_{hkl} aura lieu en absence de toute extinction systématique si : $d^* < 2/\lambda$ soit $1/d < 2/\lambda$ ou $d > \lambda/2$. Dans ces conditions, la famille réticulaire de distance $d_{hkl} = 0,75 \text{ \AA}$ ne peut diffracter à aucun ordre puisque $0,75 < (1,5406/2 = 0,7703)$.

VIII- METHODE DE DEBYE-SCHERRER :

La distance inter-réticulaire de la 2^{ème} raie d'une phase de symétrie cubique simple a pour valeur $4,25 \text{ \AA}$ (La longueur d'onde utilisée a pour valeur $\lambda = 1,54059 \text{ \AA}$).

- 1) Déterminer le paramètre de maille de la phase considérée.

SOLUTION

La 2^{ème} raie d'une phase de symétrie cubique simple correspond à la diffraction du 1^{er} ordre de la famille (110) (voir cours). D'un autre côté, la distance d_{hkl} a pour expression dans le cas d'une symétrie cubique :

$$d_{hkl} = a / (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$$

on en déduit que :

$$a = d_{hkl} (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$$

APPLICATION NUMERIQUE

$$a = 4,25 \times 2^{1/2} = 6,01 \text{ \AA}$$

- 2) Calculer le rayon de la chambre de Debye-Scherrer sachant que sa circonférence est de 360 mm.

SOLUTION

Le rayon R de la chambre de Debye-Scherrer de circonférence 360 mm est tel que : $2\pi R = 360$ soit
 $R = 360/2\pi$

APPLICATION NUMERIQUE

$$R = 360/(2 \times 3,14) = 57,32 \text{ mm}$$

- 3) Calculer les valeurs de L_g et L_d pour la 1^{ère} raie du spectre direct (la chambre utilisée étant celle de Debye-Scherrer et le montage du film étant celui de Straumanis).

SOLUTION

L_g et L_d pour toutes les raies du spectre direct, quand la chambre utilisée étant celle de Debye-Scherrer et le montage du film étant celui de Straumanis, sont tels que :

$$L_g = 90 - l \text{ et } L_d = 90 + l \text{ (l est la distance entre l'un des arcs de la diffraction et la trace du puits).}$$

La 1^{ère} raie d'une phase de symétrie cubique simple correspond à la diffraction du 1^{er} ordre de la famille (100) (voir cours). Les arcs du cercle de cette diffraction, dans le cas où la chambre utilisée est celle de Debye-Scherrer et le montage du film est celui de Straumanis, sont séparées de la distance $2l = 4R\theta_{100} = 4R \arcsin(\lambda/2d_{100})$ soit $l = 2R\theta_{100} = 2R \arcsin(\lambda/2d_{100})$,

Comme le système est cubique, $d_{100} = a$, l'expression de l devient alors : $l = 2R \arcsin(\lambda/2a)$

APPLICATION NUMERIQUE

$$l = 2R \arcsin(\lambda/2a) = 2 \times 57,32 \arcsin(1,54059/2 \times 6,01) = 14,73 \text{ mm (l en mm } \equiv 2\theta \text{ en } ^\circ \text{ !!)}$$

\Rightarrow

$$L_g = 90 - l = 90 - 14,73 = 75,27 \text{ mm}$$

et

$$L_d = 90 + l = 90 + 14,73 = 104,73 \text{ mm}$$

- 4) Etablir les expressions de L_g et L_d pour une raie donnée du spectre en retour (la chambre utilisée étant celle de Debye-Scherrer et le montage du film étant celui de Straumanis).

SOLUTION

L_g et L_d pour toutes les raies du spectre en retour, quand la chambre utilisée étant celle de Debye-Scherrer et le montage du film étant celui de Straumanis, sont tels que :

$L_g = 270 - l'$ et $L_d = 270 + l'$ (l' est la distance entre l'un des arcs de la diffraction et la trace du collimateur de telle sorte que $2l' = 360 - 4R\theta$).

- 5) Peut-on indexer, avec la même méthode utilisée pour indexer les phases cubiques, une phase de symétrie autre que cubique ? Justifier votre réponse.

SOLUTION

L'indexation avec les méthodes de poudre d'une phase de symétrie cubique est possible du fait que cette indexation repose sur la détermination des rapports d_i/d_1 qui sont des rapports numériques indépendants du paramètre de la maille cubique. Dans les phases de symétrie autre que cubique, les rapports d_i/d_1 dépendent des paramètres de la maille (les rapports d_i/d_1 ne sont pas les mêmes pour deux mailles de même symétrie et de paramètres différents), par conséquent une phase de symétrie autre que cubique ne peut être indexée, avec la même méthode utilisée pour indexer les phases cubiques.

IX- EVOLUTION DU SPECTRE DE DIFFRACTION EN FONCTION DE LA SYMETRIE :

Exercice 1 :

Supposons qu'à la suite d'un traitement thermique, la maille d'un composé reste toujours cubique avec un paramètre invariant mais la symétrie initialement primitive change.

- 1) Préciser comment évolue la symétrie de la phase considérée avec la température.

SOLUTION

Si, à la suite d'un traitement thermique, la maille d'un composé reste toujours cubique mais son réseau de Bravais n'est plus primitif, alors certaines raies seraient éteintes (il s'agit des raies pour lesquelles $h+k+l = 2n+1$ si le réseau devient centré et celles pour lesquelles h, k et l sont de parités différentes si le réseau devient CFC). D'un autre côté, comme le paramètre reste invariant, les raies qui ne seraient pas éteintes apparaissent au même endroit qu'elles occupaient quand le réseau était primitif. Ces constats peuvent être illustrés par le schéma suivant :

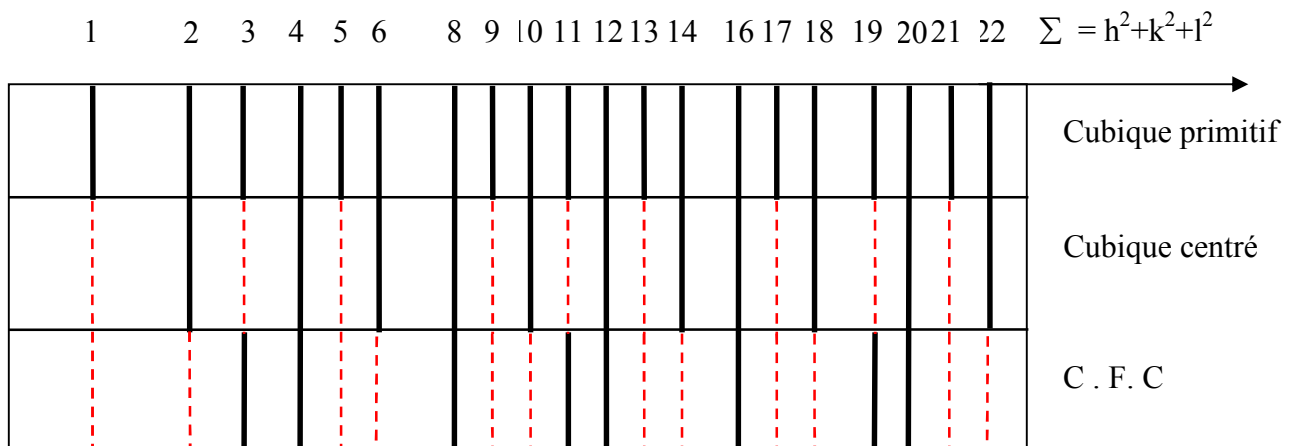
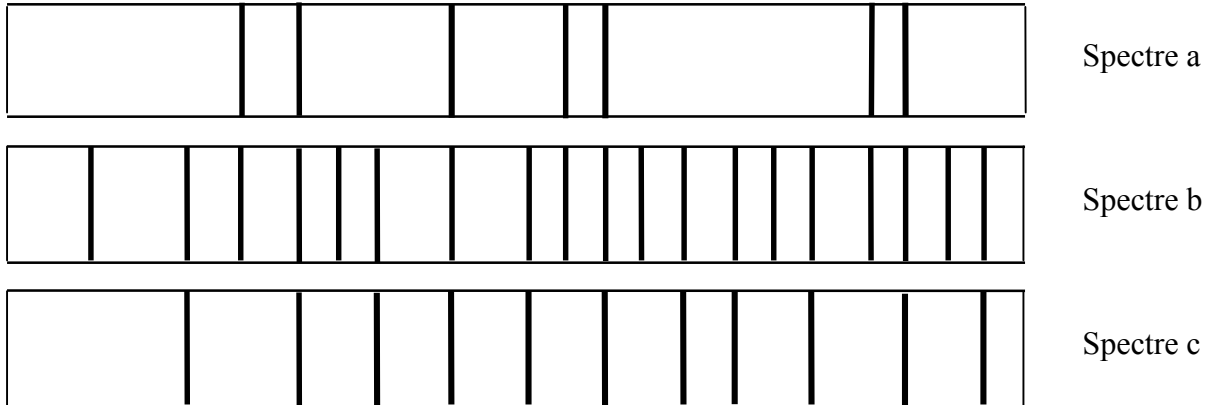


Schéma comparatif des différentes raies (h,k,l) présentes dans les clichés de matériaux de structures cubiques (le paramètre a est supposé le même).

⇒ Raie éteinte

- 2) La figure ci-dessous représente trois spectres de diffraction possibles du composé cubique étudié. Classer les différents spectres par ordre de symétrie croissante.



SOLUTION

- Le **spectre b** est le spectre où il y a toutes les raies (aucune extinction), il s'agit donc du spectre de la **phase primitive**.
 - Quand le réseau de la phase devient centré, parmi les raies qui vont s'éteindre il y a la 1^{ère} raie du primitif (il s'agit de la raie (100) pour laquelle la somme des indices est impaire), le spectre correspondant au **réseau centré** est donc le **spectre c**.
 - Le **spectre a** est le spectre où il y a extinction des raies pour lesquelles h, k et l sont de parités différentes (les deux premières sont (100) et (110)), il s'agit donc du spectre correspondant à la phase dont le réseau est **CFC**.
- 3) Indiquer les indices de la 1^{ère} famille de plans réticulaires qui ne s'éteint jamais au cours de l'évolution de la symétrie du composé étudié.

SOLUTION

Comme le montre les schémas des spectres de la question 1), la 1^{ère} raie de diffraction qui ne s'éteint jamais au cours de l'évolution de la symétrie du composé cubique étudié est la **raie (200)** (il s'agit de la 4^{ème} raie de la phase primitive), cette raie correspond à la diffraction du 2^{ème} ordre de la famille réticulaire (100).

Exercice 2 :

Soit une phase solide de symétrie cubique primitive et de paramètre a. Si le paramètre de la maille augmente à la suite d'un traitement thermique et que la symétrie reste toujours cubique primitive, alors, les raies de diffraction de la phase obtenue après traitement seront :

- a- aux mêmes endroits que les raies de diffraction de la phase initiale ?
 - b- déplacées à la droite des raies de diffraction de la phase initiale ?
 - c- déplacées à la gauche des raies de diffraction de la phase initiale ?
- (Justifier votre réponse).

SOLUTION

Si le paramètre de la maille augmente à la suite d'un traitement thermique et que la symétrie reste toujours cubique primitive, alors les raies de diffraction de la phase obtenue après traitement seront déplacées à la gauche des raies de diffraction de la phase initiale (2θ diminue). En effet, quand le paramètre **a augmente**, **d_{hkl} augmente** puisque $a = d_{hkl} (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$ et par conséquent **θ diminue** puisque $\theta = f(1/d)$ ($\theta = \arcsin(n \lambda / 2d)$).

Exercice 3 :

- 1) Etablir l'expression de d_{hkl} en fonction des paramètres d'une maille quadratique.

SOLUTION

Dans le cas du système quadratique (voir question 3) de l'exercice V), la distance d_{hkl} a pour expression :

$$d_{hkl} = [(h^2 + k^2)a^2 + (l^2c^2)]^{-1/2}$$

soit :

$$d_{hkl} = [((h^2 + k^2)/a^2) + (l^2/c^2)]^{-1/2}$$

- 2) Si le réseau quadratique est primitif, préciser où sera placée la raie (100) par rapport à la raie (001) sur le spectre de diffraction enregistré par un diffractomètre automatique si on suppose que $c > a$.

SOLUTION

Pour déterminer l'emplacement de la raie (100) par rapport à la raie (001), il faut déterminer leurs angles de diffraction. Comme ces derniers dépendent de d_{hkl} , il faut d'abord calculer ces distances. Ainsi :

$$d_{100} = [1/a^2]^{-1/2} = a$$

$$d_{001} = [1/c^2]^{-1/2} = c$$

Comme $c > a \Rightarrow d_{001} > d_{100} \Rightarrow \theta_{001} < \theta_{100} \Rightarrow 2\theta_{001} < 2\theta_{100} \Rightarrow$ la raie (100) sera placée à la droite de la raie (001).

- 3) Que se passe-t-il si la symétrie du réseau devient cubique ?

SOLUTION

Si la symétrie devient cubique alors $d_{100} = d_{001} \Rightarrow \theta_{100} = \theta_{001} \Rightarrow 2\theta_{100} = 2\theta_{001} \Rightarrow$ la raie (100) sera confondue avec la raie (001) (les deux signaux apparaîtront au même endroit mais l'intensité du pic obtenu sera plus importante que l'intensité de chacun des pics (100) et (001) quand la phase était quadratique).

BONNE CHANCE.

BON COURAGE ET BONNE REUSSITE

Pr Abderrafie BRITEL