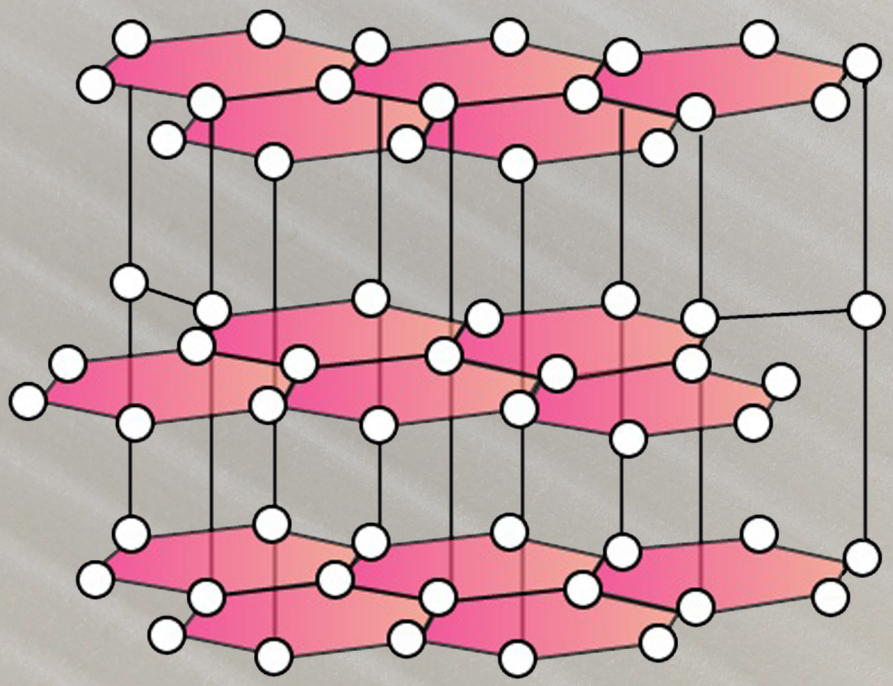
UNIVERSITE CHOUAIB DOUKKALI
FACULTE DES SCIENCES EL JADIDA MAROC

نادي النجاح كلية العلوم
success club

Les TD avec solution

physique des materiaux



متمنياتنا للجميع بالتوفيق والنجاح

2016/2017

www.clubnajah.com
Clubnajah2013@gmail.com
www.facebook.com/succes.club

UNIVERSITE CHOUAIB DOUKKALI
FACULTE DES SCIENCES
Département de physique

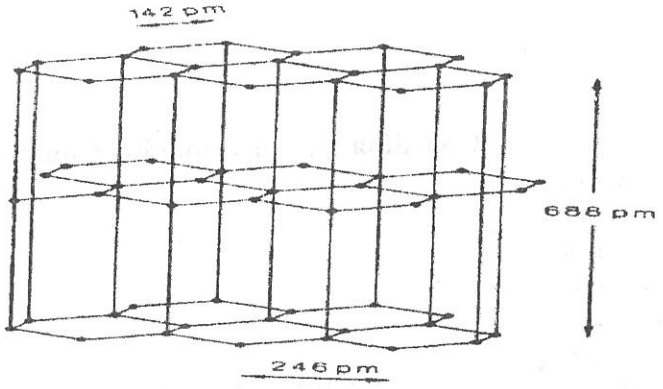
Année Universitaire 2015-16

S_5 module physique des matériaux

Série N° 1

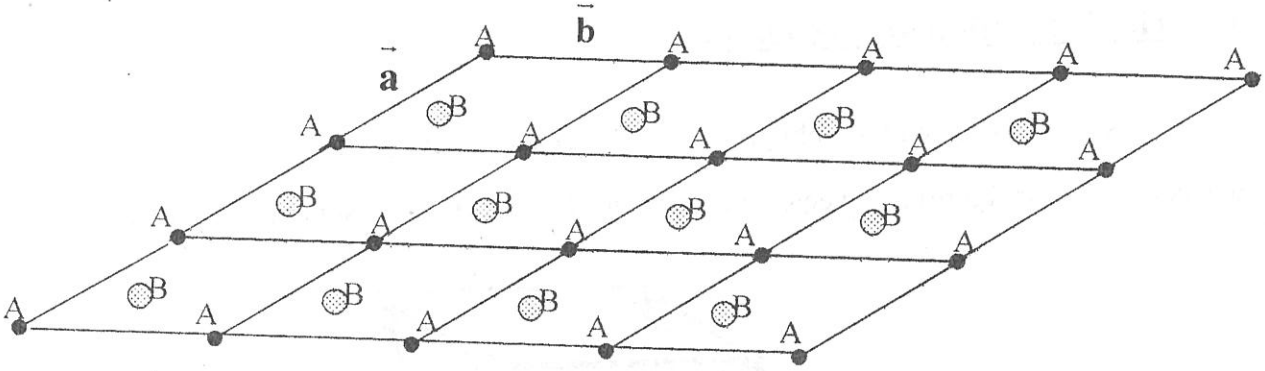
PHYSIQUE DES MATERIAUX

Rappel de cristallographie



Exercice 1

Le graphite a une structure constituée de feuillets hexagonaux non compacts, nommés graphème, séparés d'environ 0,336nm le long de la direction normale. Chaque feuillet est un cristal à deux dimensions dont le réseau de Bravais est un hexagonal, ***a=b=2,46 Å***, ***γ=120°***. Il est constitué d'un motif de *2* atomes **de carbone**, l'un repéré par la lettre **A** est situé en A(***0,0***), l'autre repéré par la lettre **B** est situé en $(\frac{2}{3},\frac{1}{3})$.



a) Dessiner ce réseau à deux dimensions avec une échelle de **1cm=1Å**.

b) Dessiner la maille élémentaire.

c) Déterminer les distances AA, AB, BA et BB.

d) Montrer que le réseau obtenu est constitué de deux sous réseaux triangulaires A et B qui s'imbriquent l'un dans l'autre

e) Déterminer les angles (AB, AB) et (BA, BA).

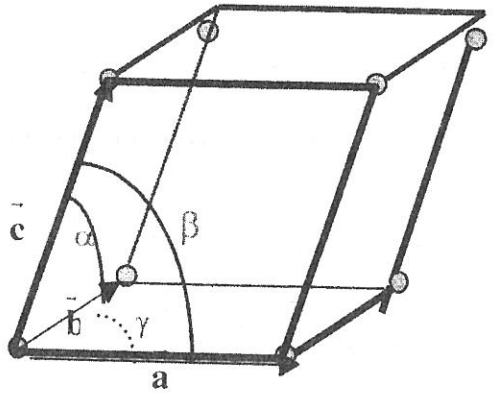
Exercice 2

Les réseaux cristallins du cuivre et du Germanium sont respectivement un cubique à faces centrées et une structure diamant. Le Titane présente deux formes allotropiques. Pour des températures inférieures à 882°, il se présente sous une forme d'un cubique centré. Au-delà de cette température, il se présente sous forme hexagonale compacte. En assimilant les atomes dans chacun de ces cristaux à des sphères dures de rayon r, remplir le tableau suivant:

Cristal	Réseau	Coordinance C	Multiplicité Z	Compacité τ	masse volumique ρ	Densité d
Cuivre M_a=63,55ua T=20°	Cubique à faces centrées a=3,61 Å					
Germanium M_a=72,64ua T=20°	Diamant a = 5,65 Å					
Titane (β) T>882° M_a=47,87ua	Cubique Centré a = 3,32 Å					
Titane(α) T<882° M_a=47,87ua	hexagonale compacte a = 2,95 Å					

Exercice 3/ Multiplicité des mailles

Les repères cristallographiques sont en général constitués par des axes obliques quelconques (voir figure) ; les vecteurs de base du réseau $(\vec{a},\vec{b},\vec{c})$ ne sont pas unitaires.



Quelles sont dans ces conditions :

1. L'expression analytique du produit scalaire de deux vecteurs $\vec{V}_1$ et $\vec{V}_2$ de composantes cristallographiques **(p_1, q_1, r_1)** et **(p_2, q_2, r_2)** en fonction de ces composantes et des six paramètres **a, b, c, α, β, et γ** ?
2. L'expression analytique du produit vectoriel de $\vec{V}_1$ et $\vec{V}_2$?
3. En déduire la multiplicité de la maille délimitée par les vecteurs $\vec{V}_1, \vec{V}_2, \vec{V}_3$.
4. Calculer cette multiplicité de la maille cristallographique définie par :

$$[1\ \bar{2}\ 1],\ [1\ \bar{1}\ 0] \text{ et } [1\ 0\ 1]\ ?$$

4. Calculer cette multiplicité délimitée par les vecteurs $\vec{V}_1, \vec{V}_2\ \vec{V}_3$ tels que :

$$\vec{V}_1 = -\vec{a} + \vec{b}\,, \vec{V}_2 = \vec{b}\,, \vec{V}_3 = \vec{c} - \vec{a}$$

$$\vec{V}_1 = -2\vec{a} + \vec{b} - \vec{c}\,,\ \vec{V}_2 = \vec{b} - \vec{a}\,,\ \vec{V}_2 = \vec{a} + \vec{c}$$

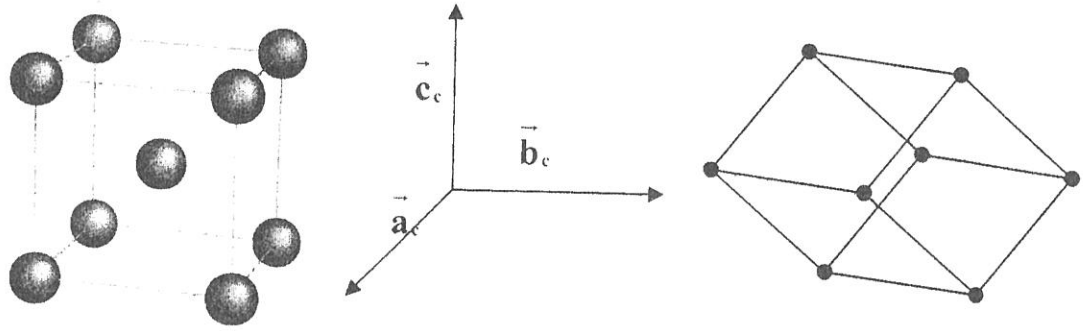
Exercice 3 :

Dessiner une maille cubique simple et déduire la maille élémentaire. Déterminer la première zone de Brillouin correspondante.

1. Dessiner une maille cubique centré et déduire la maille élémentaire. Déterminer la première zone de Brillouin correspondante.
2. Dessiner une maille cubique à faces centrées et déduire la maille élémentaire
3. Application au chlorure de césium, au chlorure de sodium.

Exercice1/ calcul sur les mailles

1°) on considère un réseau cubique centré de vecteurs de bases $(\vec{a}_c, \vec{b}_c, \vec{c}_c)$:



1. Rappeler la maille élémentaire rhomboédrique correspondante de vecteurs de base $(\vec{a}_r, \vec{b}_r, \vec{c}_r)$ ainsi que la matrice de passage **Mp(R/C)** qui permet le passage de cette maille élémentaire à la maille cubique faces centrées.

On considère maintenant une maille hexagonale de vecteurs de base $(\vec{a}_h, \vec{b}_h, \vec{c}_h)$. On montre que : $\vec{a}_h = (\vec{a}_r + \vec{c}_r)$ $\quad \vec{b}_h = \frac{1}{3}(-\vec{a}_r + \vec{b}_r + \vec{c}_r)$ $\quad \vec{a}_h = \frac{1}{3}(-\vec{b}_r + \vec{c}_r)$

2. Déterminer la maille élémentaire du cubique centré. Préciser sa nature, ses vecteurs de base $(\overrightarrow{a_R}, \overrightarrow{b_R}, \overrightarrow{c_R})$ ainsi que ses angles α, β, γ.
3. Ecrire la matrice de passage **M(R/C)** qui permet le passage de la maille cubique centré vers la maille élémentaire correspondante.

$$\begin{pmatrix} \overrightarrow{a_R} \\ \vec{b}_R \\ \vec{c}_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \overrightarrow{a_{CC}} \\ \vec{b}_{CC} \\ \vec{c}_{CC} \end{pmatrix}$$

M(R/C)

4. Déterminer les multiplicités de la maille cubique centré et de sa maille élémentaire avec trois méthodes.
5. Donner la matrice de passage M_p**(H/R)** et en déduire M_p**(H/C)**
6. Calculer la multiplicité des mailles cubique centré, rhomboédrique et hexagonale.
7. On considère les plans **(0 1 1)** et **(1 1 0)** repères dans de la maille cubique $(\vec{a}_c, \vec{b}_c, \vec{c}_c)$. Que devient ces indices dans les repères rhomboédrique $(\vec{a}_r, \vec{b}_r, \vec{c}_r)$ et hexagonal $(\vec{a}_h, \vec{b}_h, \vec{c}_h)$.

UNIVERSITE CHOUAIB DOUKKALI
FACULTE DES SCIENCES
Département de physique

Année Universitaire 2014-15

S_5 physique des matériaux

PHYSIQUE DES MATERIAUX

TD N° 2

Exercice1/ Etude du facteur de structure

1) Calculer le facteur de structure F (h, k, l) dans les systèmes suivants :
   a. Cubique simple
   b. Cubique centré
   c. Cubique à faces centrées
   d. Diamant
   e. Hexagonal compact
2) Pour chacun de ces systèmes, déterminer la séquence des premières réflexions autorisées dans une expérience de diffraction
3) Retrouver la nature du réseau réciproque pour ces systèmes
4) Calculer la distance entre les plans réticulaires correspondante

Présenter ces résultats dans le tableau suivant :

h k l						
d_{hkl}						

Exercice2/ Energie de cohésion

Le mécanisme de cohésion dans les cristaux ioniques est essentiellement régi par des liaisons ioniques caractérisées par des interactions à grande distance purement coulombienne. Pour illustrer cette interaction colombienne on se propose de l'étudier dans un système binaire qui est le chlorure de sodium NaCl. La configuration du Chlore(17) est : $1S^2\ 2S^2\ 2P^6\ 3S^2\ 3S^5$. La configuration du sodium(11) est : $1S^2\ 2S^2\ 2P^6\ 3S^1$.

1. Donner la configuration de l'ion chlorure Cl^- et celle de l'ion Na^+.
2. Le chlorure de sodium NaCl cristallise sous une structure cubique à faces centrées de paramètre a=2,81Å. Dessiner une maille NaCl.

3. Déterminer la stœchiométrie de NaCl.

4. Rappeler l'expression de l'énergie électrostatique U_{ij} entre deux charges q_i et q_j séparées par une distance r_{ij} et appliquer cette expression aux ions Cl^- et Na^+

5. En prenant l'ion $(Na^+)_0$ du centre de la maille cubique comme origine du système :

   a. Déterminer les coordonnées des premiers voisins Cl^- de cet ion $(Na+)_0$ et la distance d_1 qui les sépare.

   b. Déterminer les coordonnées des premiers voisins Na^+ de cet ion $(Na+)_0$ et la distance d_2 qui les sépare.

   c. Déterminer les coordonnées des seconds voisins Cl^- de cet ion $(Na+)_0$ et la distance d_3 qui les sépare.

   d. Déterminer les coordonnées des seconds voisins Na^+ de cet ion $(Na+)_0$ et la distance d_4 qui les sépare.

5) Donner l'expression du potentiel V_0 au point (0, 0, 0)

6) En déduire l'énergie potentielle de l'ion $(Na+)_0$ et monter qu'elle s'écrit sous la forme : $\mathbf{E_p(a) = \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{M}{a}}$

7) Quelle est le signe de M ? expliquer

8) En déduire l'énergie potentielle une mole de molécules de NaCl

9) Les ions Na^+ et Cl^- ne sont pas uniquement soumis au potentiel attractif qu'on vient d'étudier (sinon ils s'interpénétreraient les uns dans les autres); il existe une répulsion entre les nuages qui se traduit par un potentiel: $\mathbf{V_1 = \frac{A}{a^n}}$ ou A> 0 et n > 1. Le paramètre ***n*** s'obtient en étudiant la compressibilité du cristal. En prenant pour NaCl: **n=8**. Ecrire l'énergie potentielle totale du système.

10) Déterminer la constante A et écrire l'expression de l'énergie potentielle totale.

UNIVERSITE CHOUAIB DOUKKALI
FACULTE DES SCIENCES
Département de physique

Année Universitaire 2014-15

S_5 physique des matériaux

PHYSIQUE DES MATERIAUX

TD N° 3

Exercice1/ Potentiel de Leonard Jones

Le potentiel de Lennard-Jones est une énergie potentielle qui est souvent utilisée pour décrire les interactions entre deux atomes au sein d'un corps monoatomique de type gaz rare. Son expression est donnée en fonction de la distance r entre les deux noyaux atomiques. Il contient un terme attractif dominant à grande distance et qui porte le nom d'interaction de Van der Waals et un terme répulsif dominant à courte distance, qui rend compte de la répulsion de Pauli entre les électrons et qui empêche l'interpénétration mutuelle des nuages électroniques des deux atomes. Pour illustrer ce potentiel, nous allons procéder par le principe de superposition entre ces deux potentiels pour estimer l'énergie de cohésion dans tel cristal.

1. Rappeler l'expression du potentiel d'interaction entre deux dipôles $\vec{p}_1$ et $\vec{p}_2$ séparés par une distance r.
2. En déduire l'énergie potentielle E_{att} attractive entre deux atomes d'un corps monoatomique de types gaz rares séparés par une distance r.(énergie de Van der Walls) et monter qu'elle s'écrit sous la forme de $E_{att}=-A/r^6$
3. Tracer l'allure de cette énergie attractive E_{att}.

4. La partie répulsive est empiriquement introduite sous la forme: $E_{rep}=+B/r^{12}$.En tenant compte de cette forme, écrire la forme de l'énergie potentielle totale E_t. Cette expression est appelée expression de Lennard-Jones

5. En prenant la constante $A=4E_0d^6$ et $B= 4E_0d^{12}$ ou d est distance et E_0 est une énergie , écrire l'expression de E_t

6. Quelle la signification de d.

7. Tracer l'allure de cette énergie attractive E_t.

8. On se propose d'utiliser cette expression de Lennard-Jones pour calculer l'énergie de Cohésion $E_{cristal}$ d'un cristal monoatomique de type gaz rare. Pour cela, on considère que ce cristal est caractérisé par une distance typique a et que toute distance r_{ij} entre un atome i et un atome j s'écrit sous la forme: $r_{ij}= q_{ij}\, a$. En négligeant l'énergie cinétique, Ecrire l'expression de $E_{cristal}$

9. Montrer que cette énergie de cohésion du cristal s'écrit :

$$\mathbf{E}_{cristal} = \frac{1}{2}(4\mathbf{E}_0)\sum_{ij}\left[\left(\frac{\mathbf{d}}{\mathbf{q}_{ij}\mathbf{a}}\right)^6 - \left(\frac{\mathbf{d}}{\mathbf{q}_{ij}\mathbf{a}}\right)^{12}\right] = \mathbf{E}_{att} + \mathbf{E}_{rep}$$

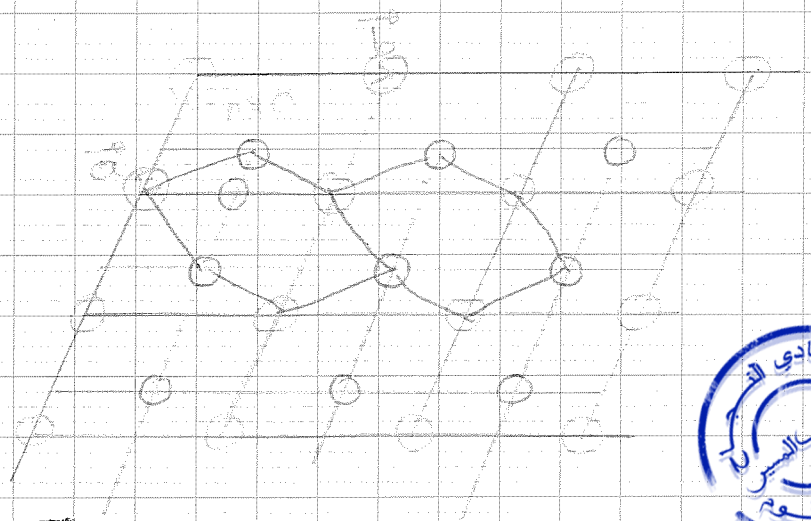
10. Application aux systèmes suivants: En notant: $\left(\frac{\mathbf{d}}{\mathbf{a}}\right)^{12} = (\mathbf{C}_{12})$ et $\left(\frac{\mathbf{d}}{\mathbf{a}}\right)^{6} = (\mathbf{C}_{6})$

Structure	E_{att}	E_{rep}
Cubique à faces centrées		
Cubique centré		
Hexagonal compact		

10. en minimisant l'énergie $E_{cristal}$, trouver la valeur de a_0 qui correspond à l'équilibre.

TD : Materiaux :

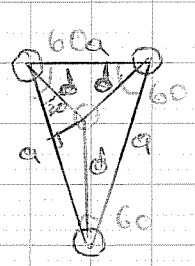
a°/ $a = b = 2,46\ A^\circ \qquad \gamma = (\vec{a}, \vec{b}) = 120^\circ$

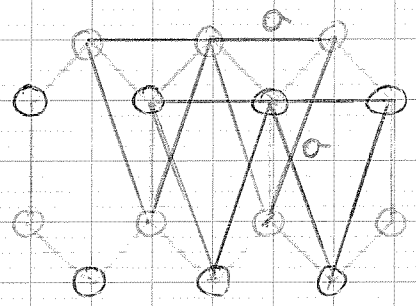


نادي التحرير
المكتبة المركزية
كلية العلوم

$$S = \|\vec{a} \wedge \vec{b}\| = a\, b \sin 120$$

b°/





c°/ $$\cos 30 = \frac{a/2}{d} = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

$$d = \frac{a}{\sqrt{3}} = 1,42\ A^\circ$$

Les noeuds à 60° appartenent à 3 mailles chacun est compté pour $\frac{1}{3}$

Les noeuds à 120° appartenent à 3 mailles chacun est compté pour $\frac{1}{3}$

$$\begin{cases} 2 \times \frac{1}{3} \\ 4 \times \frac{1}{3} \end{cases} \Rightarrow 2 \Rightarrow$$ c'est une maille élementaire

Donc : $AA = BB = a = 2,46 \, A^\circ$

$d = AB = BA = 1,42 \, A^\circ$.

نادي الأستاذ
المكتب العلمي
كلية العلوم

Exercice 2 :

① * Cuivre : $M_a = 63,55$ ua , $T = 20^\circ$

② * Cubique à faces centrées : (Diamant).

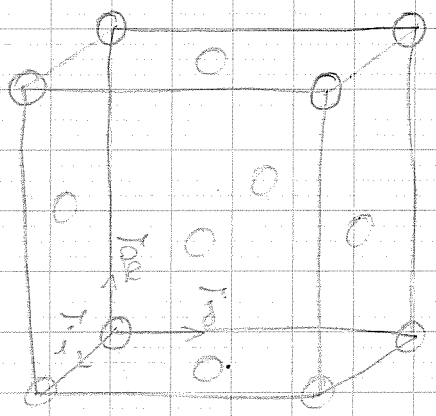
8 sites tétraédriques

$\boxed{\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)}$; $\left(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$; $\boxed{\left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}\right)}$

$\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right)$; $\boxed{\left(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right)}$

$\left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}\right)$; $\left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}\right)$

$\boxed{\left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}\right)}$



$a = \frac{8r}{\sqrt{3}} \Leftarrow 2r = \frac{a\sqrt{3}}{4} = \frac{D}{4}$

* coordinance C : $C = 4$

* Multiplicité Z : $Z = 8$

* Compacité : τ :

$$\tau = \frac{Z \times V_{atome}}{V_{totale}} = \frac{8 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{8 \times \frac{4}{3}\pi \frac{\sqrt{3}}{8}}{\frac{\cancel{8} \times \frac{\cancel{8}}{2} \times 8 \sqrt{3}}{\cancel{3}\sqrt{3}}}$$

$$\tau = \frac{\pi\sqrt{3}}{16} = 0,34 = 34\%$$

Cristal	Réseau	coordinaire C	Mult Z	compact τ	masse V ρ	Densité
Cu, T=20° Ma=63,54uma	C.F.C a=3,61A°	12	4	0,74	8972,5 Kg/m³	8,972
Germ Ma=72,64	Diamant a=5,65A°	4	8	0,34	5351 Kg/m³	5,351
Ti (β) (T>882°) Ma=47,87uma	C.C. a=3,32A°	8	2	0,68	4344 Kg/m³	4,344
Ti (α) T<882°	H.C. a=2,95A°	12	6			

* ρ masse Volumique :

$$\rho = \frac{Z \times M/N}{a^3} = \frac{8 \times 72,64 \cdot 10^{-3}}{6,023 \cdot 10^{23} \times (5,65)^3 \cdot 10^{-30}}$$

$$\rho = 5351 \text{ Kg/m}^3.$$

* Titane (β) : Cubique centré.

coord : C = 8

Multi $Z = 8 \times \left(\frac{1}{8}\right) + 1 = 2$

* $$\tau = \frac{Z \cdot V_{atome}}{V_{totale}} = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{a^3}$$

$$\tau = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{\frac{2 \times 4 \times 4 r^3}{3\sqrt{3}}} = \frac{\pi\sqrt{3}}{2 \times 4}$$

$a\sqrt{3} = 4r$

$a = \frac{4r}{\sqrt{3}}$

$$\tau = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} = 0,68 = 68\%$$

$$* \quad \rho = \frac{Z \times M/N}{a^3} = \frac{2 \times 47,87 \cdot 10^{-3}}{6,022 \cdot 10^{23} \times (3,32)^3 \cdot 10^{-30}}$$

$$\rho = 4344 \ Kg/m^3$$

$$* \quad d = \frac{\rho_{cristal}}{\rho_{eau}} = \frac{4344}{1000} = 4,344.$$

* Titane (α) H.C :

* coord C : $C = 12$.

* Mult Z : $Z = 6$

$$* \quad \tau = \frac{Z \times \frac{4}{3}\pi r^3}{V_{maille}} = \frac{6 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{3 \times (\vec{a} \wedge \vec{b}) \cdot \vec{c}}$$

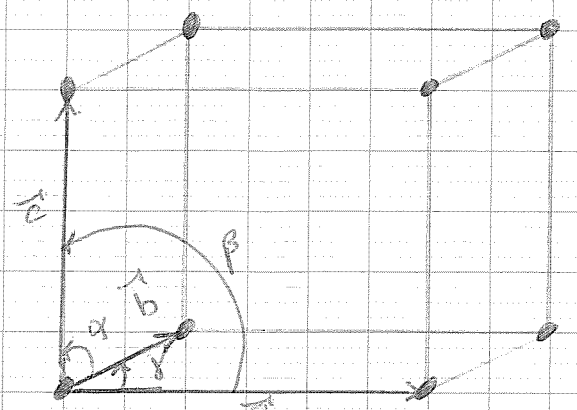
$$\tau = \frac{6 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{c \times 3\, a^2 \sin 120} = \frac{\cancel{6} \times \frac{4}{3}\pi r^3}{\cancel{3} \cdot a^2 \cdot \frac{\sqrt{3}}{2}\, a\, \cancel{2} \cdot \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}} = \frac{\cancel{8}\pi \cancel{r^3}}{3 \times \cancel{8} \times \cancel{r^3}\sqrt{2}}$$

$$= \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0,74 = 74\%$$

نادي التحدي
المكتب المسير
كلية العلوم

Exercice 3 :

1°/



$$V = (\vec{a} \wedge \vec{b}) \cdot \vec{c}$$
$$= (\vec{b} \wedge \vec{c}) \cdot \vec{a}$$
$$= (\vec{c} \wedge \vec{a}) \cdot \vec{b}$$

$\vec{V_1}(p_1, q_1, r_1)$, $\vec{V_2}(p_2, q_2, r_2)$, $\vec{V_3}(p_3, q_3, r_3)$

$\vec{V_1} \wedge \vec{V_2} = \vec{V_3}'$ / $\|\vec{V_3}'\| = |\vec{V_1}| \cdot |\vec{V_2}| \sin(\vec{V_1}, \vec{V_2})$

$(\vec{V_1} \wedge \vec{V_2}) \cdot \vec{V_3}$ = Volume de la droite constituée par les 3 vecteur.

$$* \ (\vec{V_1} \wedge \vec{V_2}) = (p_1 \vec{a} + q_1 \vec{b} + r_1 \vec{c}) \wedge (p_2 \vec{a} + q_2 \vec{b} + r_2 \vec{c})$$
$$= (p_1 q_2 - q_1 p_2)(\vec{a} \wedge \vec{b}) + (p_1 r_2 - p_2 r_1)(\vec{a} \wedge \vec{c})$$
$$+ (q_1 r_2 - r_1 q_2)(\vec{b} \wedge \vec{c})$$

2°/ $* \ (\vec{V_1} \wedge \vec{V_2}) \cdot \vec{V_3} = \det \begin{pmatrix} p_1 & q_1 & r_1 \\ p_2 & q_2 & r_2 \\ p_3 & q_3 & r_3 \end{pmatrix} \cdot V = M$

$\vec{V_1}(1, -2, 1)$, $\vec{V_2}(1, -1, 0)$ et $\vec{V_3}(1, 0, 1)$

4°/

$$M = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$\det(M) = 2$ c'est une maille double

* $\vec{V}_1 = (-1, 1, 0)$, $\vec{V}_2 (0, 1, 0)$, $\vec{V}_3 (-1, 0, 1)$

$$M = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \det(M) = -1$$

$\| \det(M) \| = 1$ c'est une maille simple.

* $\vec{V}_1 (-2, 1, -1)$, $\vec{V}_2 (-1, 1, 0)$, $\vec{V}_3 (1, 0, 1)$

$$M = \begin{pmatrix} -2 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \det(M) = 0$$

pas de volume situé à cette 3 vecteurs.

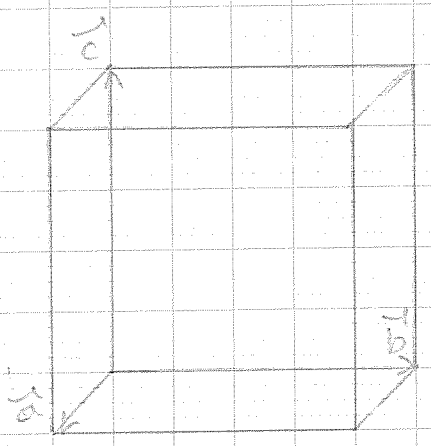
Exercice 4 :

$a = b = c$

$\alpha = \beta = \gamma = 90°$

$Z_{C.S} = 8 \times \frac{1}{8} = 1$

c'est une primitive



$$\vec{A} = \frac{2\pi(\vec{b}\wedge\vec{c})}{(\vec{a}\wedge\vec{b})\cdot\vec{c}}$$

$$\vec{a} = a\,\vec{i}$$
$$\vec{b} = a\,\vec{j}$$
$$\vec{c} = a\,\vec{k}.$$

$$\vec{B} = \frac{2\pi(\vec{c}\wedge\vec{a})}{(\vec{b}\wedge\vec{c})\cdot\vec{a}}$$

$$\vec{a}$$
$$\vec{b} \quad \vec{c}$$

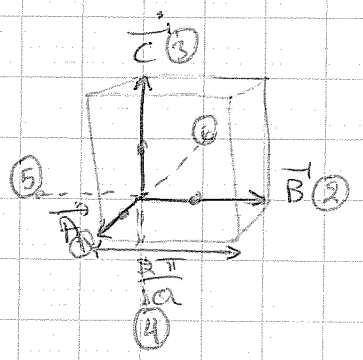
$$\vec{C} = \frac{2\pi(\vec{a}\wedge\vec{b})}{(\vec{c}\wedge\vec{a})\cdot\vec{b}}$$

$$\vec{A} = \frac{2\pi(\vec{b}\wedge\vec{c})}{(\vec{b}\wedge\vec{c})\cdot\vec{a}}, \quad \vec{B} = \frac{2\pi(\vec{c}\wedge\vec{a})}{(\vec{c}\wedge\vec{a})\cdot\vec{b}}, \quad \vec{C} = \frac{2\pi(\vec{a}\wedge\vec{b})}{(\vec{a}\wedge\vec{b})\cdot\vec{c}}$$

$$V = m\,v$$

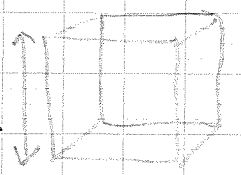
(V_1, V_2, V_3) — m: $\det(M)$ — v: $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$

$$\vec{A} = \frac{2\pi}{a}\,\vec{i}, \quad \vec{B} = \frac{2\pi}{a}\,\vec{j}, \quad \vec{C} = \frac{2\pi}{a}\,\vec{k}.$$



La 1er zone de Brillouin est est un cube de cote $\frac{2\pi}{a}$.

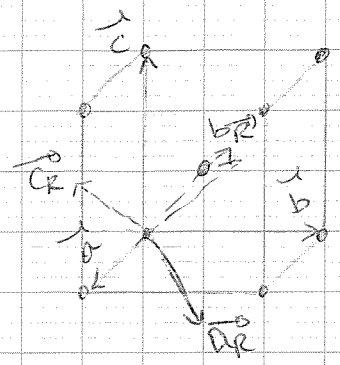
$$\left(\frac{2\pi}{a}\right)/1 = \frac{2\pi}{a}$$



1°/ Cubique centré :

$$Z = \frac{1}{8} \times 8 + 1 = 2$$

c'est une maille double



⇒ trouvra la maille élementaire.

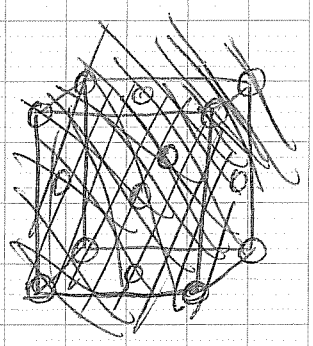
$$\vec{a_R} = \frac{a}{2}\left(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}\right)$$

$$\vec{b_R} = \frac{a}{2}\left(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}\right)$$

$$\vec{c_R} = \frac{a}{2}\left(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}\right)$$

$$\vec{A} = \frac{2\pi\left(\vec{b_R} \wedge \vec{c_R}\right)}{\left(\vec{b_R} \wedge \vec{c_R}\right) \cdot \vec{a_R}} = \frac{2\pi}{a}\left(\vec{i} + \vec{j}\right)$$

$$\vec{B} = \frac{2\pi\left(\vec{c_R} \wedge \vec{a_R}\right)}{\left(\vec{c_R} \wedge \vec{a_R}\right) \cdot \vec{b_R}} = \frac{2\pi}{a}\left(\vec{j} + \vec{k}\right)$$



$$\vec{C} = \frac{2\pi\left(\vec{a_R} \wedge \vec{b_R}\right)}{\left(\vec{a_R} \wedge \vec{b_R}\right) \cdot \vec{c_R}} = \frac{2\pi}{a}\left(\vec{i} + \vec{k}\right)$$

c'est la maille élementaire de cubique à faces centré.

نادي المكتب العلمي كلية العلوم

c'est un rhomboedrique de cote $A_R = \frac{2\sqrt{2}\pi}{a}$

$B_R = \frac{2\sqrt{2}\pi}{a}$

$C_R = \frac{2\sqrt{2}\pi}{a}$

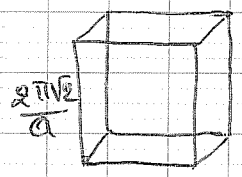
$\cos\gamma = \frac{1}{2}$

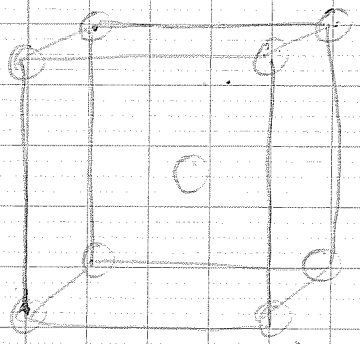
$\vec{A} \cdot \vec{B} = \|\vec{A}\| \cdot \|\vec{B}\| \cos\gamma$

$\frac{2\pi}{a} \cdot \frac{2\pi}{a} = \frac{2\sqrt{2}\pi}{a} \cdot \frac{2\sqrt{2}\pi}{a} \cos\gamma$

$\gamma = 60°, \quad \alpha = 60°, \quad \beta = 60°$

c'est un maille élémentaire d'un cubique à faces centrées.





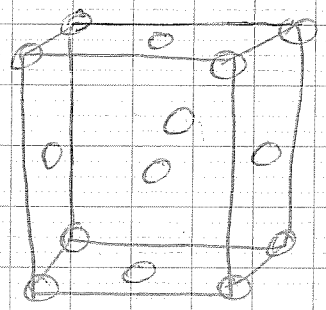
$\vec{a}_R = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k})$

$\vec{b}_R = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j} + \vec{k})$

$\vec{c}_R = \frac{a}{2}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k})$

$\|a_R\| = \|b_R\| = \|c_R\| = \frac{a\sqrt{2}}{2}$

$\alpha = \beta = \gamma = 109{,}47°$



$\vec{a}_R = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j})$

$\vec{b}_R = \frac{a}{2}(\vec{j} + \vec{k})$

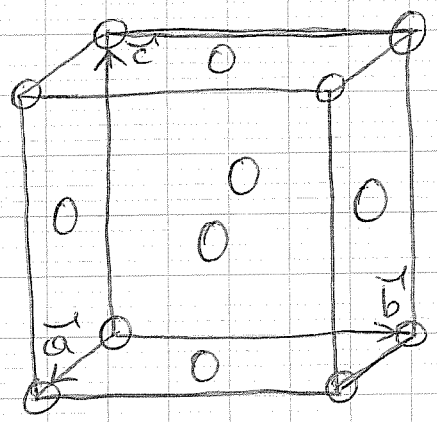
$\vec{c}_R = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{k})$

$\|a_R\| = \|b_R\| = \|c_R\| = \frac{a\sqrt{3}}{2}$

$\alpha = \beta = \gamma = 60$

La 1er zone de Brillion d'un cubique centré de cote a est un rhomboédre de coté $\frac{2\pi\sqrt{2}}{a}$ et d'angle $\alpha = \beta = \gamma = 60°$ qui la maille élémentaire d'un cubique à faces centrées.

2°/



cubique à faces centrées est une maille quadriple : $8 \times \left(\frac{1}{8}\right) + 6 \times \frac{1}{2} = 4$

$$\vec{A} = \frac{2\pi}{a}\left(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}\right)$$

$$\vec{B} = \frac{2\pi}{a}\left(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}\right)$$

$$\vec{C} = \frac{2\pi}{a}\left(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}\right)$$

$$\|\vec{A}\| = \frac{2\pi\sqrt{3}}{a} = \|\vec{B}\| = \|\vec{C}\|$$

$$\vec{A}\cdot\vec{B} = \cancel{\frac{2\pi\sqrt{3}}{a}}\ \|\vec{A}\|\cdot\|\vec{B}\| \cos\gamma$$

$$-\frac{2\pi}{a} \times \frac{2\pi}{a} = \frac{2\pi\sqrt{3}}{a} \cos\gamma$$

$$\cos\gamma = -\frac{1}{3} \Rightarrow \arccos\left(-\frac{1}{3}\right) = 109°47.$$

c'est un rhomboédre de coté $\frac{2\pi\sqrt{3}}{a}$ et d'angle

$$\alpha = \beta = \gamma = 109°47.$$

La première zone de Brillouin d'un cubique à face centrées de coté a est un ~~cubique~~ rhombo de coté $\frac{2\pi\sqrt{3}}{a}$ et d'angles $\alpha = \beta = \gamma = 109°47$ qui

La maille élementaire d'un cubique à face centrées

للمزيد من الدروس والتمارين زورا موقعنا الإلكتروني

www.clubnajah.com

لا تترددوا في طرح استفساراتكم عبر البريد الالكتروني أو صفحتنا الرسمية عبر الفايسبوك

Clubnajah2013@gmail.com

www.facebook.com/succes.club

بالتوفيق للجميع

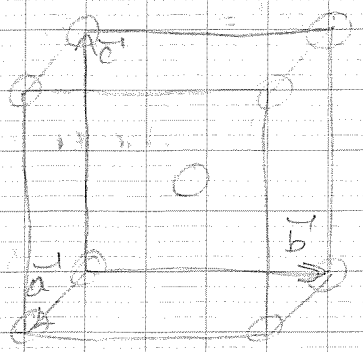
مع تحيات المكتب المسير لنادي النجاح

Exercice 5 : Cubique centré

1°/ $\vec{a} = a\vec{i}$

$\vec{b} = a\vec{j}$

$\vec{c} = a\vec{k}$



multiplicité du cubique centré $\frac{1}{8} \times 8 + 1 = 2 = m$

maille élémentaire :

$$\vec{a}_R = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k})$$

$$\vec{b}_R = \frac{a}{2}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k})$$

$$\vec{c}_R = \frac{a}{2}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k})$$

3°/ $$M_p(R/C) = \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}}_{M_p(R/C)} \begin{pmatrix} \vec{a}_C \\ \vec{b}_C \\ \vec{c}_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{a}_R \\ \vec{b}_R \\ \vec{c}_R \end{pmatrix}$$

$$m = \det M_p(R/C) = \frac{1}{2}$$

$$V_{CC} = a^3$$

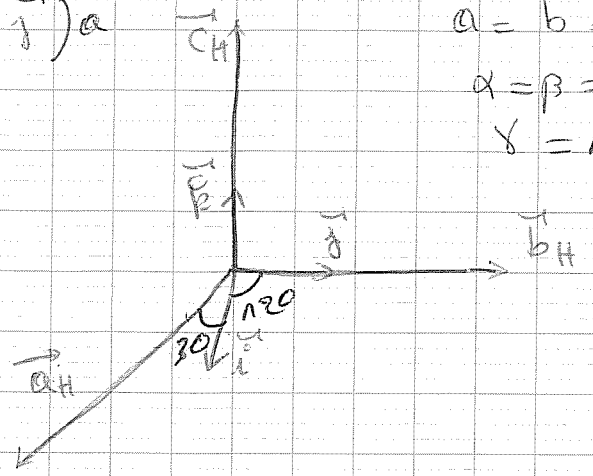
$$V_R = \frac{a^3}{2}$$

$$\det M_p(R/C) = \frac{1}{2} = \frac{m_R}{m_{CC}} = \frac{V_R}{V_{CC}}$$

$$\vec{a}_H = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\vec{i} - \frac{1}{2}\vec{j}\right)a$$

$$\vec{b}_H = a\vec{j}$$

$$\vec{c}_H = c\,\vec{k}$$



$a = b = c$

$\alpha = \beta = 90°$

$\gamma = 120°$

$$\begin{pmatrix} \vec{a}_H \\ \vec{b}_H \\ \vec{c}_H \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} & \sqrt{3} \end{pmatrix}}_{M_P(H/R)} \begin{pmatrix} \vec{a}_R \\ \vec{b}_R \\ \vec{c}_R \end{pmatrix}$$

$$\det M(H/R) = 3$$

$$V_H = (\vec{a}_H \wedge \vec{b}_H)\cdot\vec{c}_H = a^2\frac{\sqrt{3}}{2}\cdot a\sqrt{3} = \frac{3a^3}{2}$$

$$V_R = \frac{a^3}{2}$$

$$\det(M_P(H/R)) = 3 = \frac{m_H}{m_R} = \frac{V_H}{V_R}$$

5°/

$$\begin{pmatrix} \vec{a}_H \\ \vec{b}_H \\ \vec{c}_H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} & \sqrt{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{a}_R \\ \vec{b}_R \\ \vec{c}_R \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \vec{a}_H \\ \vec{c}_H \\ \vec{b}_H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} & \sqrt{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{a}_{cc} \\ \vec{b}_{cc} \\ \vec{c}_{cc} \end{pmatrix}$$

$$= \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} \end{pmatrix}}_{\vec{M}_p(H/C)} \begin{pmatrix} \vec{a}_{cc} \\ \vec{b}_{cc} \\ \vec{c}_{cc} \end{pmatrix}$$

$$\det_p(H/C) = \frac{3}{2} = \frac{m_H}{m_{cc}} = \frac{V_H}{V_{cc}}$$

$$M_p(R_1/R_3) = M_p(R_1/R_2) \times M_p(R_2/R_3)$$

7°/ $R \longrightarrow (\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}) \longrightarrow (\vec{A}, \vec{B}, \vec{C})$

$R' \longrightarrow (\vec{a}', \vec{b}', \vec{c}') \longrightarrow (\vec{A}', \vec{B}', \vec{C}')$.

$$\vec{r} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}.$$

$$\vec{G} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C} \quad \times \vec{a} \quad (1)$$

$$= h'\vec{A}' + k'\vec{B}' + l'\vec{C}' \quad \times \vec{a}$$

$$\begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \\ \vec{c} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{a}' \\ \vec{b}' \\ \vec{c}' \end{pmatrix}$$

① $\vec{a} = m_{11}\vec{a'} + m_{12}\vec{b'} + m_{13}\vec{c'}$

$$\cancel{2\pi}\, h = \cancel{2\pi}\, m_{11} h' + \cancel{2\pi}\, m_{12} k' + \cancel{2\pi}\, m_{13} l'$$

$$\cancel{2\pi}\, k = \cancel{2\pi}\, m_{21} h' + \cancel{2\pi}\, m_{22} k' + \cancel{2\pi}\, m_{23} l'$$

$$\cancel{2\pi}\, l = \cancel{2\pi}\, m_{31} h' + \cancel{2\pi}\, m_{32} k' + \cancel{2\pi}\, m_{33} l'$$

$$\begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h' \\ k' \\ l' \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}_C \longrightarrow \begin{pmatrix} \\ \\ \end{pmatrix}_R$$

نادي الفيزياء
المكتبة العلمية

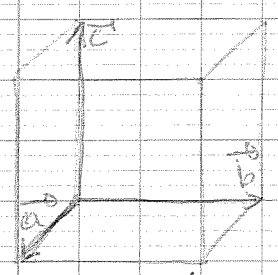
$$\Rightarrow \overset{R}{\begin{pmatrix} h' \\ k' \\ l' \end{pmatrix}} = \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}}_{M_P(R/C)} \overset{C}{\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}}$$

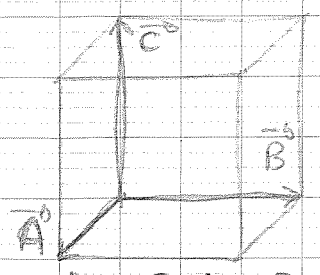
$$h' = 0 \,,\quad k' = 1 \,,\quad l' = 0$$

$$\begin{pmatrix} h' = 1 \\ k' = 0 \\ l' = 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Facteur de structure

$$F(h,k,l) = \sum_j f_j \, e^{-2i\pi(x_j h + y_j k + z_j l)}$$

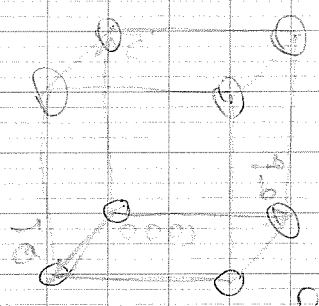




$\vec{r} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}$ $\qquad$ $\vec{G} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}$

Application :

1°/ Cubique simple :



$\vec{a} = a\vec{i}$

$\vec{b} = a\vec{j}$

$\vec{c} = a\vec{k}$

il y a une seule famille caracterisée par l'atome en $(0,0,0)$. $T = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}$

$$F(h,k,l) = \sum_j f_j \, e^{-2\pi i(x_j h + y_j k + z_j l)}$$

$$= f_0 \, e^{-2\pi i(0h + 0\times k + 0\times l)} = f_0$$

loi de Bragg. $\quad 2d_{hkl} \sin\theta_{hkl} = \lambda, \; n = 1$

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{\|\vec{G}(h,k,l)\|} = \frac{2\pi}{\|h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}\|}$$

$$d_{hkl} = \frac{\cancel{2\pi} \times a}{\cancel{2\pi}\sqrt{h^2+l^2+k^2}} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

reseau réciproque du cubique simple.

$$\vec{A} = \frac{2\pi}{a}\vec{i}, \quad \vec{B} = \frac{2\pi}{a}\vec{j}, \quad \vec{C} = \frac{2\pi}{a}\vec{k}.$$

$$\sin\theta_{hkl} = \frac{\lambda/2}{d_{hkl}} = \frac{\lambda}{2a} \times \sqrt{h^2+k^2+l^2}$$

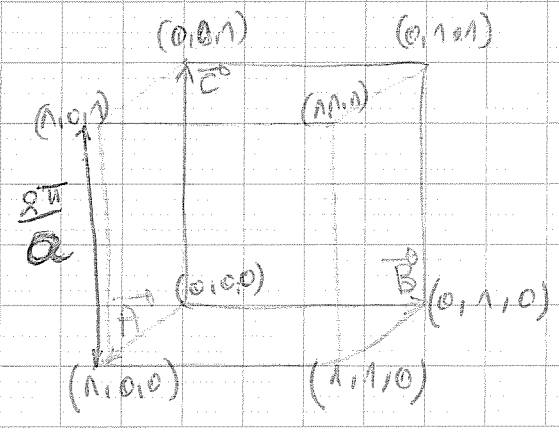
$$\theta_{hkl} \nearrow \longrightarrow h^2+l^2+k^2 \nearrow$$

$$h^2+k^2+l^2 = 1 \longrightarrow \begin{cases} (1,0,0) \\ (0,1,0) \\ (0,0,1) \end{cases}$$

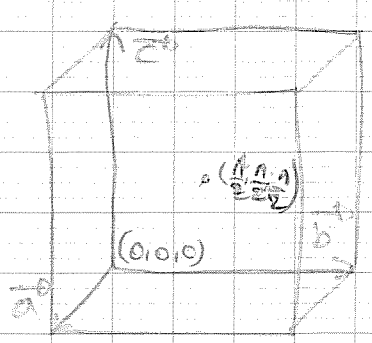
$$h^2+k^2+l^2 = 2 \longrightarrow \begin{cases} (1,1,0) \\ (1,0,1) \\ (0,1,1) \end{cases}$$

C.S $\longleftrightarrow$ C.S

$$h^2+k^2+l^2 = 3 \longrightarrow (1,1,1).$$



2°/ Cubique centré :



il y a deux familles qui caractérisent le cristal d'atome en $(0,0,0)$ et l'atome en $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$.

$$F(h,k,l) = \sum_j f_j e^{-2\pi i(x_j h + y_j k + z_j l)}$$

$$= f_0 e^{-2\pi i(0h + 0k + 0l)} + f_1 e^{-\frac{2\pi i}{2}(1h + 1k + 1l)}$$

$$= f_0 + f_1 e^{-\pi i(h+k+l)}$$

loi de Bragg : $2 d_{hkl} \sin\theta_{hkl} = n \qquad n = 1$

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{\|G(h,k,l)\|} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

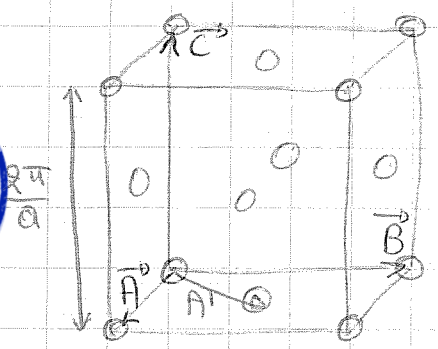
réseau reciproque du cubique centré.

$$\vec{A'} = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} + \vec{j}) =$$

$$\vec{B'} = \frac{2\pi}{a}(\vec{j} + \vec{k}) =$$

$$\vec{C'} = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} + \vec{k}) =$$

$$\vec{A} = \frac{2\pi}{a}\vec{i}, \quad \vec{B} = \frac{2\pi}{a}\vec{j}, \quad \vec{C} = \frac{2\pi}{a}\vec{k}.$$



$$\|\vec{A'}\| = \frac{2\pi\sqrt{2}}{a}$$

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{\left\| \frac{2\pi}{a} h\vec{i} + \frac{2\pi}{a} k\vec{j} + \frac{2\pi}{a} l\vec{k} \right\|} = \frac{\cancel{2\pi}}{\frac{\cancel{2\pi}}{a}\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

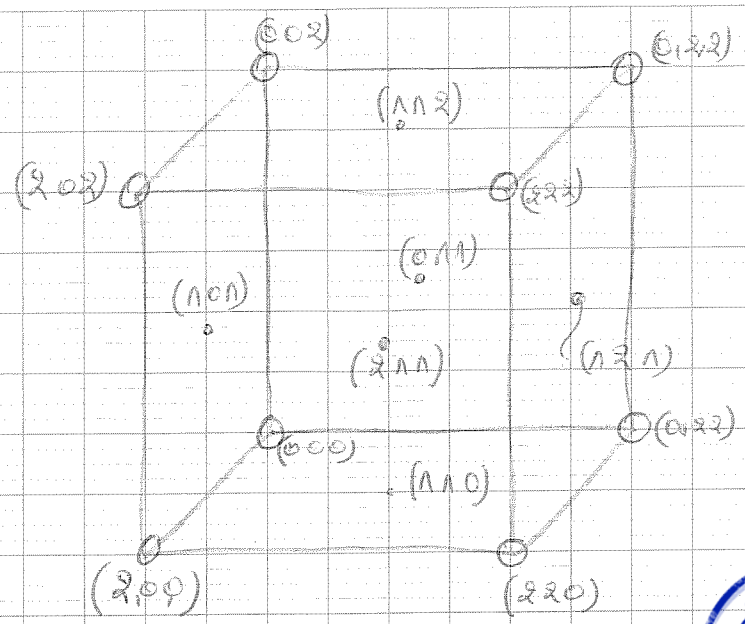
$$F(h,k,l) = f_0\left(1 + e^{-i\pi(h+k+l)}\right)$$

$h+k+l$ → paire $\Rightarrow F(h,k,l) = 2f$

$h+k+l$ → impaire $\Rightarrow F(h,k,l) = 0$

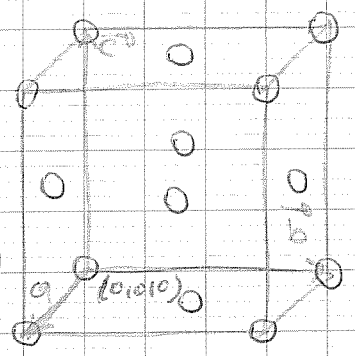
$h+k+l = 2$ → $(1\,1\,0)$; $(2,0,0)$ → $(1\,0\,1)$ $(0\,2\,0)$ → $(0\,1\,1)$ $(0\,0\,2)$

$h+k+l = 4$ → $(2\,2\,0)$; $(1\,1\,2)$ → $(2\,0\,2)$ $(2\,1\,1)$ → $(0\,2\,2)$ $(1\,2\,1)$



3°/ Cubique à faces centrées :

il y a 4 familles qui caractérisent le cristal



l'atome en $(0,0,0)$ et $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$; $\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$; $\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right)$.

$$F_{hkl} = f_0\, e^{-2\pi i(0h+0k+0l)} + f_1\, e^{-2\pi i\left(\frac{h}{2}+\frac{k}{2}+0\times l\right)} + f_2\, e^{-2\pi i\left(\frac{h}{2}+0\cdot k+\frac{l}{2}\right)} + f_3\, e^{-2\pi i\left(0\cdot h+\frac{k}{2}+\frac{l}{2}\right)}$$

m̂ atome : $f_0 = f_1 = f_2 = f_3$

$$F_{hkl} = f\left(1 + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(k+l)}\right)$$

$F_{hkl} \neq 0$ → hkl tous pairs
→ hkl tous impairs

$\Rightarrow F_{hkl} = 4f$.

$\sin\theta_{hkl} \nearrow \longrightarrow h^2 + k^2 + l^2 \nearrow$

$h^2 + k^2 + l^2 = 1$ impossible

$h^2 + k^2 + l^2 = 2$ //

$h^2 + k^2 + l^2 = 3 \longrightarrow (1,1,1)$

$h^2 + k^2 + l^2 = 4$ → $(2,0,0)$, $(0,2,0)$, $(0,0,2)$

$h^2 + k^2 + l^2 = 5 \rightarrow$ impossible

$h^2 + k^2 + l^2 = 6 \longrightarrow$ impossible.

$h^2 + k^2 + l^2 = 7$ impossible

$h^2 + k^2 + l^2 = 8$ → $(2,2,0)$, $(2,0,2)$, $(0,2,2)$

$h^2 + k^2 + l^2 = 9$ impossible

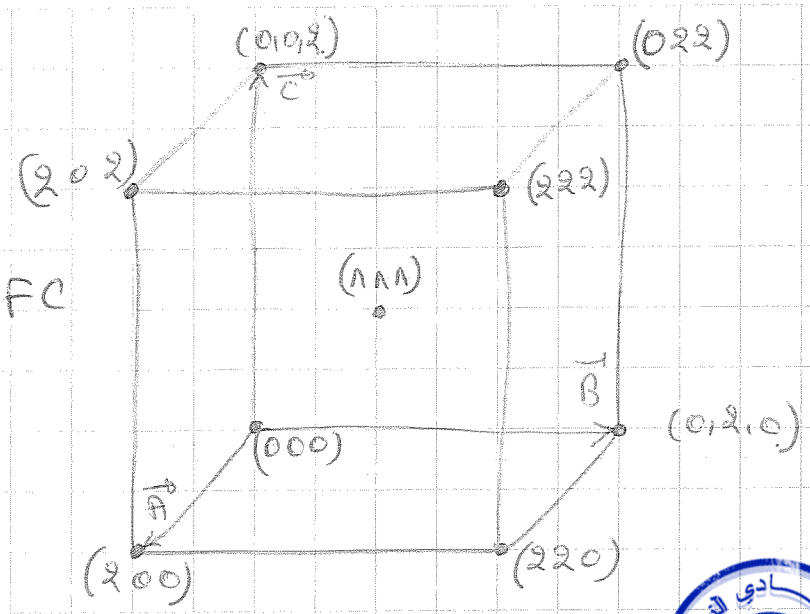
$h^2 + k^2 + l^2 = 10$ impossible

$h^2 + k^2 + l^2 = 11$ //

$h^2 + k^2 + l^2 = 12 \longrightarrow (2\ 2\ 2)$

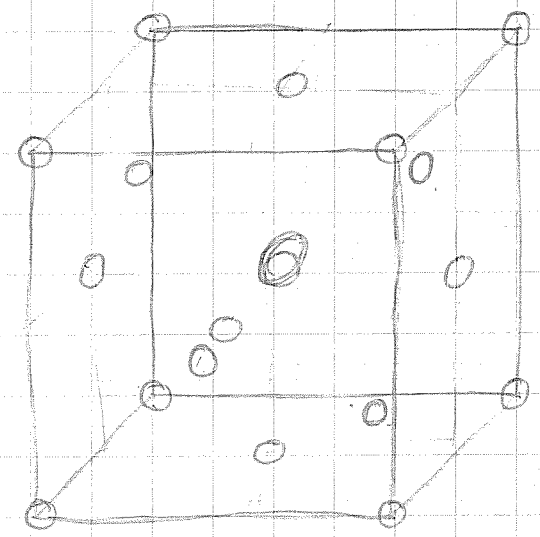
نادي المكتبة المركزية كلية العلوم

C.C $\Longleftrightarrow$ CFC



d°/ Structure diamant :

il y a 8 atomes qui vont contribuer dans le facteur de structure.



$(0,0,0)$; $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$

$\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right)$; $\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$

$\left(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4}\right)$; $\left(\frac{3}{4},\frac{3}{4},\frac{1}{4}\right)$; $\left(\frac{3}{4},\frac{1}{4},\frac{3}{4}\right)$; $\left(\frac{1}{4},\frac{3}{4},\frac{3}{4}\right)$

$$* \; F_{hkl} = \sum_j f_j \, e^{-2\pi i (x_j h + y_j k + z_j l)}$$

$$F_{hkl} = f_0\, e^{-2\pi i(0.h+0k+0l)} + f_1\, e^{-2\pi i\left(\frac{1}{2}h+\frac{1}{2}k+0l\right)}$$

$$+ f_2\, e^{-2\pi i\left(\frac{1}{2}h+0k+\frac{1}{2}l\right)} + f_3\, e^{-2\pi i\left(0h+\frac{1}{2}k+\frac{1}{2}l\right)}$$

$$+ f_4\, e^{-2\pi i\left(\frac{h+k+l}{4}\right)} + f_5\, e^{-2\pi i\left(\frac{3h+3k+l}{4}\right)}$$

$$+ f_6\, e^{-2\pi i\left(\frac{h+3k+3l}{4}\right)} + f_7\, e^{-2\pi i\left(\frac{3h+k+3l}{4}\right)}$$

si même atome $\Rightarrow f_0 = f_1 = f_2 = f_3 = f_4 = f_5 = f_6 = f_7 =$

$$F_{hkl} = F_{CFC} + e^{-2\pi i\left(\frac{h+k+l}{4}\right)} f\left(1 + e^{-2\pi i\left(\frac{h+k}{2}\right)} + e^{-2\pi i\left(\frac{h+l}{2}\right)} + e^{-2\pi i\left(\frac{k+l}{2}\right)}\right)$$

$F_{CFC}(h,k,l)$

$$\boxed{F_{diam} = F_{CFC}(h,k,l)\left(1 + e^{-2\pi i\left(\frac{h+k+l}{4}\right)}\right)}$$

il faut que $F_{CFC} \neq 0$

$F_{CFC}(h,k,l) \neq 0$ → h, k, l tous pairs ; h, k, l tous impairs

si h, k, l ont la même parité

<u>1er cas</u> $h + k + l = 4m$ et m entier

$$F_{diam} = F_{CFC}(1+1) = 2F_{CFC} = 8f \quad \text{reel}$$

$\cancel{e^{-i\pi\left(\frac{4}{4}\right)} = \cos\frac{4\pi}{4} - i\sin\frac{4\pi}{4} = 1}$

$$e^{-2\pi i \frac{4m}{4}} = e^{-2\pi i} = 1$$

2ème cas : $h + k + l = 4m + 1$

$$e^{-2\pi i\left(\frac{4m+1}{4}\right)} = e^{-2\pi i m + \frac{1}{4}\times(-2\pi i)}$$

$$= \underbrace{e^{-2\pi i m}}_{=1} \times \underbrace{e^{-\frac{\pi i}{2}}}_{=-i}$$

$F_{cdi} = F_{cfc}(1-i) = 4f(1-i)$ complexe

* 3ème cas : $h + k + l = 4m + 2$

$$F_{cfc}(1-1) = 0 = 0$$

* 4ème cas :

$$h + k + l = 4m + 3$$

$$F_{cfc}(1+i) = 4f(1+i) \text{ complexe}$$

1er cas :

$$I \propto \|F(h,k,l)\|^2 \propto 64 f^2$$

2ème cas : $I \propto \|F(h,k,l)\|^2 \propto 32 f^2$

3ème cas : $I = 0$

4ème cas : $I \propto \|F_{hkl}\|^2 \propto 32 f^2$

$$2\, d_{hkl} \sin\theta = \lambda \qquad n = 1.$$

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

$$h^2+k^2+l^2 = 1$$

$$h^2+k^2+l^2 = 2$$

$$h^2+k^2+l^2 = 3 \qquad (1,1,1)$$

$$h^2+k^2+l^2 = 4 \Rightarrow \begin{cases} (2,0,0) \\ (0,2,0) \\ (0,0,2) \end{cases}$$

$$h^2+k^2+l^2 = 5$$

$$h^2+k^2+l^2 = 6$$

$$h^2+k^2+l^2 = 8 \quad \begin{cases} (2,2,0) \\ (2,0,2) \\ (0,2,2) \end{cases}$$

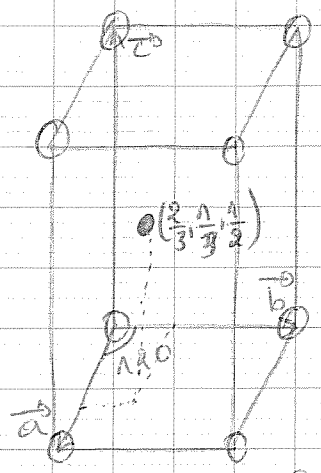
$$h^2+k^2+l^2 = 11 \longrightarrow (3,1,1)$$

$$h^2+k^2+l^2 = 12 \longrightarrow (2,2,2)$$

نادي الشمس
المكتبة المركزية
جامعة العلوم

e°/ Hexagonal compact :

il y a deux type d'atomes $\begin{cases} (0,0,0) \\ \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right) \end{cases}$



$$F_{HC}(hkl) = f_0\, e^{-2\pi i(0h+0k+0l)} + f_1\, e^{-2\pi i\left(\frac{2h}{3}+\frac{k}{3}+\frac{l}{2}\right)}$$

si même atome : $f_0 = f_1 = f$

$$F_{H.C}(h,k,l) = f\left(1 + e^{-\cancel{2}\pi i \frac{l}{\cancel{2}}}\, e^{-2\pi i\left(\frac{2h+k}{3}\right)}\right)$$

1er cas : $l \Rightarrow$ pair

$$F_{HC}(hkl) = f\left(1 + e^{-2\pi i\left(\frac{2h+k}{3}\right)}\right)$$

1er cas : $2h + k = 3m$

$$F_{H.C}(hkl) = (2f) \Rightarrow I \propto 4f^2$$

2ème cas : $2h + k = 3m+1$

$$F_{H.C}(hkl) = f\left(1 - \frac{1}{2} - i\frac{\sqrt{3}}{2}\right)$$

$$= f\left(\frac{1}{2} - i\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \Rightarrow I \propto f^2$$

3ème cas : $2h + k = 3m + 2$

$$F_{HC}(hkl) = f\left(1 - \frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2}\right)$$

$$= f\left(\frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \Rightarrow I \propto f^2$$

2ème cas : l est impair

$$_{(HC)}F_{hkl} = f\left(1 - e^{-2\pi i\left(\frac{2h+k}{3}\right)}\right)$$

1er cas : $2h + k = 3m$

$$F_{HC}(h, k, l) = 0 \Rightarrow I = 0$$

2ème cas : $2h + k = 3m + 1$

$$F_{HC}(hkl) = f\left(\frac{3}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \Rightarrow I \propto 3f^2$$

3ème cas : $2h + k = 3m + 2$

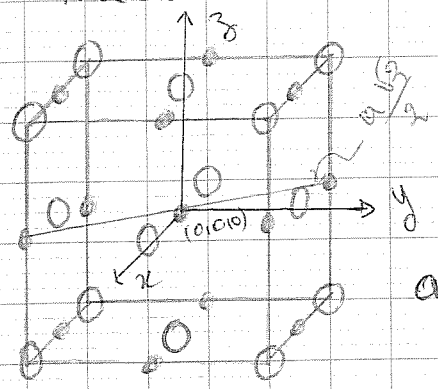
$$F_{HC}(h, k, l) = f\left(\frac{3}{2} - i\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \Rightarrow I \propto 3f^2$$

جامعة الجزائر
المكتبة المركزية
كلية العلوم

Exercice 2 :

NaCl : CFC

(2)



O : Cl^-

• : Na^+

$a = 2{,}81\ A^\circ$

$Cl(17)$: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$

$Na(11)$: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

1° ⇒ Cl^- : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

⇒ Na^+ : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^0$

3°/

Cl^- → $8 \times \left(\frac{1}{8}\right)$, $6 \times \left(\frac{1}{2}\right)$ ⇒ 4 Cl^-/maille.

Na^+ → $12 \times \left(\frac{1}{4}\right)$, 1 au centre ⇒ 4 Na^+/maille

⇒ la stoechiométrie de NaCl : 1 : 1

4°/

$q_i \xrightarrow{r_{ij}} q_j$

$$W_{ij} = \frac{q_i q_j}{4\pi\varepsilon_0 r_{ij}}$$

$q_i \longrightarrow Cl^- \Rightarrow q_i = -e$

$q_j \longrightarrow Na^+ \Rightarrow q_j = +e$

نادي الصحراء للكتاب العلمي
كلية العلوم

$$U_{Cl^- - Na^+} = \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 \, r_{Cl^- - Na^+}}$$

5°/ b°/ $d_2 = \frac{a\sqrt{3}}{2} \longrightarrow 8$

a°/ $d_1 = \frac{a}{2} \Longrightarrow 6$

c°/ $d_3 = \frac{a\sqrt{2}}{2} \longrightarrow 12$

d°/ $d_4 = a \longrightarrow 6$

6°/

$$V_0 = V(0,0,0) = \frac{-e}{4\pi\varepsilon_0 \frac{a}{2}} \times 6 + \frac{-e}{4\pi\varepsilon_0 \frac{a\sqrt{3}}{2}} \times 8$$

$$+ \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 \frac{a\sqrt{2}}{2}} \times 12 + \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 \, a} \times 6$$

7°/

$$U_{Na^+} = +e\,V_0$$

$$= \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 a} \underbrace{\left(12 + \frac{16}{\sqrt{3}} - \frac{24}{\sqrt{2}} - 6\right)}_{M}$$

$$U_{Na^+_0} = \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 a} M$$

M : est la constante de Madulung.

8°/ le signe de M est positive

9°/ l'énergie d'une mole de NaCl est :

$$U_{Na^+O} = \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 a} N_A M$$

10°/ Le potentiel de repulsion est :

$$V_1 = \frac{A}{a^m}, \text{ où } A > 0, \text{ et } m > 1$$

Pour NaCl : $m = 8$

$$V_1 = \frac{A}{e a^8} \quad \text{avec} \quad a = 2{,}81 \text{ A}^\circ$$

$$U_{Na^+O} = +e V_0 + e V_1$$

$$= \frac{-e^2 N_A M}{4\pi\varepsilon_0 a} + \underbrace{\frac{A}{a^m}}_{\text{partie repulsive}}$$

l'équilibre $\Rightarrow U_{Na^+O}$ est minimale

$$\Rightarrow \frac{dU_{Na^+O}}{da} = 0 \qquad A = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{M a^{m-1}}{m}$$

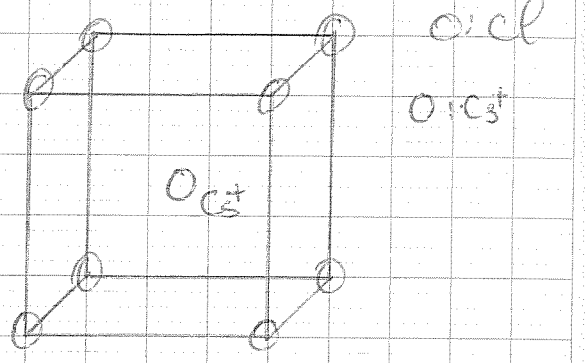
11°/

NaCl $\Rightarrow$ $\boxed{A = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} N_A \frac{M a^7}{8}}$

d'où $U_{Na^+O} = \frac{-e^2 N_A M}{4\pi\varepsilon_0 a}\left(1 - \frac{1}{m}\right)$ $\quad m = 8$

$$U_{NaCl} = N_A \cdot U_{Na^+O}$$

Application sur Cs Cl.



$Cl(17) : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$

$Cs : (55) : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^1$

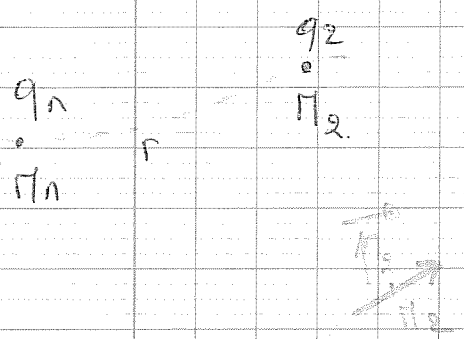
$\Rightarrow Cl^- : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

$\Rightarrow Cs^+ : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^0$

للمزيد من الدروس والتمارين زورا موقعنا الإلكتروني
www.clubnajah.com
لا تترددوا في طرح استفساراتكم عبر البريد الالكتروني أو صفحتنا الرسمية عبر الفايسبوك

Clubnajah2013@gmail.com
www.facebook.com/succes.club
بالتوفيق للجميع
مع تحيات المكتب المسير لنادي النجاح

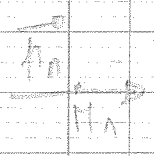
Série 3 :



$$V_1(M_2) = \frac{q_1}{4\varepsilon_0 \pi r} \propto \frac{1}{r}$$

$$V_2(M_1) = \frac{q_2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$$U = \frac{q_1 q_2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$



$$V(r) = \frac{\left[\vec{p_1}\vec{p_2} - 3(\vec{p_1}\vec{r_1})(\vec{p_2}\vec{r_2})\right]}{r^3} \propto \frac{1}{r^3}$$

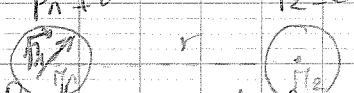
$$V = \frac{p\cos\theta}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$$

$$\vec{E} = -\vec{\text{grad}}\,V \quad \begin{cases} E_r = -\dfrac{\partial V}{\partial r} \\ E_\theta = -\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial V}{\partial \theta} \end{cases}$$

$\vec{p_1} = 0$ $\vec{p_2} = 0$

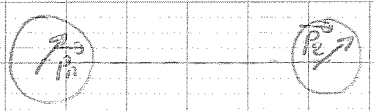
deux atomes separés par une distance r

$\Downarrow$ $\vec{p_1} \neq 0$ $\vec{p_2} = 0$



$\Longrightarrow$

$\vec{p_1} \neq 0$ $\vec{p_2} \neq 0$

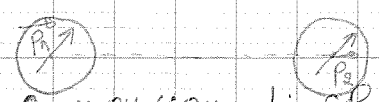


Fluctuation de la charge electrique

1 $\Rightarrow$ creation d'un dipôle $\vec{p_1}$ induit

ce dipôle induit $\vec{p_1}$ crée un dipôle $\vec{p_2}$ dans l'atome 2.

$\Longrightarrow$



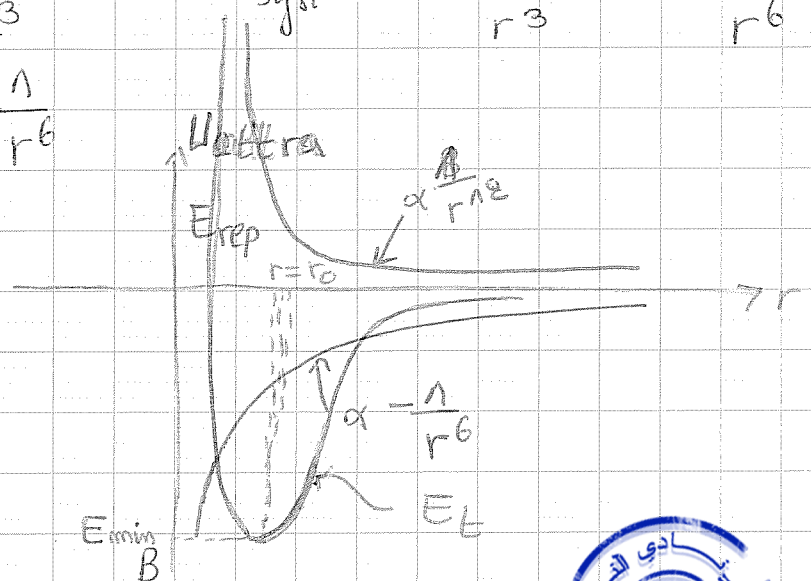
a nouveau dipôle $\vec{p_2}$ agit aussi sur $\vec{p_1}$

$$\vec{P}_{ind} \propto V(r) = \frac{\left(\vec{P}_1 \vec{P}_2 - 3\left(\vec{P}_1 \vec{r}_1\right)\left(\vec{P}_2 \vec{r}_2\right)\right)}{r^3} \propto \frac{1}{r^3}$$

$$U_{syst} \propto \frac{P_{ind}}{r^3} \Rightarrow U_{syst} \propto \frac{\frac{1}{r^3}}{r^3} \propto -\frac{1}{r^6}$$

$$U_{attra} \propto -\frac{1}{r^6}$$

$$E_{repel} \propto \frac{B}{r^{12}}$$



$$E_t = -\frac{A}{r^6} + \frac{B}{r^{12}}$$

avec $A = 4 E_0 d^6$

$B = 4 E_0 d^{12}$

$$E_t = 4 E_0 \left(-\left(\frac{d}{r}\right)^6 + \left(\frac{d}{r}\right)^{12}\right)$$

c'est l'energie de Lennard_Jones.

Le système est stable $\Rightarrow E_t$ est minimale

$$\Rightarrow \frac{dE_t}{dr} = 0$$

$$\frac{dE_t}{dr} = 0 \Rightarrow \frac{d}{dr}\left[-\frac{1}{r^6} + \frac{d^6}{r^{12}}\right] = 0$$

$$\Rightarrow \quad -1(-6)\, r^{-7} - 12\, d^6\, r^{-13} = 0$$

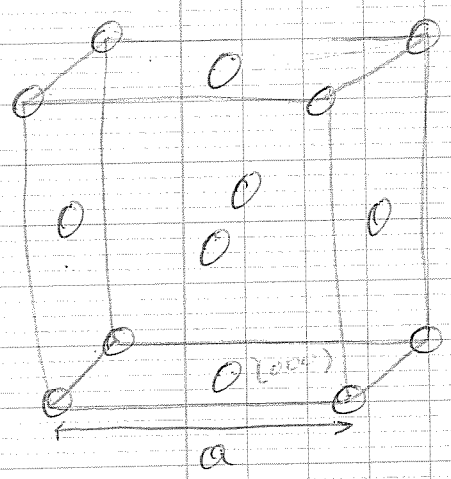
$$6\,\frac{1}{r^7} - 12\, d^6\, \frac{1}{r^{13}} = 0$$

$$\Rightarrow \quad +\cancel{12}^{\,2}\, d^6\, \frac{1}{r^{13}} = +\frac{\cancel{6}}{r^7}$$

$$\Rightarrow \quad 2\, d^6 = \frac{r^{13}}{r^7} = r^6$$

$$\boxed{d^6 = \frac{r^6}{2}} \quad \Rightarrow \quad d = \frac{r_0}{2^{1/6}}$$

$$\boxed{d = 0{,}89\, r_0}$$



$$E_{paire} = 4\,E_0 \left[-\left(\frac{d}{r}\right)^6 + \left(\frac{d}{r}\right)^{12} \right]$$

$$E_{cristal} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} 4\,E_0 \left[-\left(\frac{d}{r_{ij}}\right)^6 + \left(\frac{d}{r_{ij}}\right)^{12} \right]$$

$$r_1 = \frac{a\sqrt{2}}{2} \times 12$$

$$r_2 = a \times 6$$

$$r_3 = \frac{a\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \times 8$$

$$r_4 = a\sqrt{2} \times 8$$

$$E_{crista} = \frac{1}{2}\, N\, 4\, E_0 \left[-\left(\frac{d}{a_{p_{jj}}}\right)^6 + \left(\frac{d}{a_{p_{jj}}}\right)^{12} \right]$$

8/ $U_t = E_T = E_{att} + E_{rep} = \frac{-C}{r^6} + \frac{D}{r^{12}}$

$$C = 4 E_0 d^6$$

$$U_t = 4 E_0 \left[\left(\frac{d}{r}\right)^{12} - \left(\frac{d}{r}\right)^6 \right]$$ c'est le potentiel de Lemmard-Jones.

$$\sum_j \left(\frac{1}{p_j}\right)^{12} = 12,13188 \quad CFC$$

$$\sum_j \left(\frac{1}{p_j}\right)^6 = 14,45392 \quad CFC$$

$$(CFC)\ U_{cristal} = 2 N E_0 \left[12,13188 \left(\frac{d}{a}\right)^{12} - 14,45392 \times \left(\frac{d}{a}\right)^6 \right]$$

$$\frac{d}{r_0} = 2^{1/6} = 1,12.$$

$$r_0 = 2^{\frac{1}{6}} d$$

élément	Ne	Ar	Kr	Se
$\frac{r_0}{d}$	1,14	1,11	1,10	1,09