SOLUTION DE L'EXAMEN

DE

CRISTALLOGRAPHIE
SMC – S5

SESSION DE RATTRAPAGE

PROFESSEUR
Abderrafî BRITEL

FACULTE DES SCIENCES DHAR EL MEHRAZ FES

ANNEE UNIVERSITAIRE 2018-2019

Pr A. BRITEL

UNIVERSITE SIDI MOHAMED BEN ABDELLAH
FACULTE DES SCIENCES DHAR MEHRAZ –FES

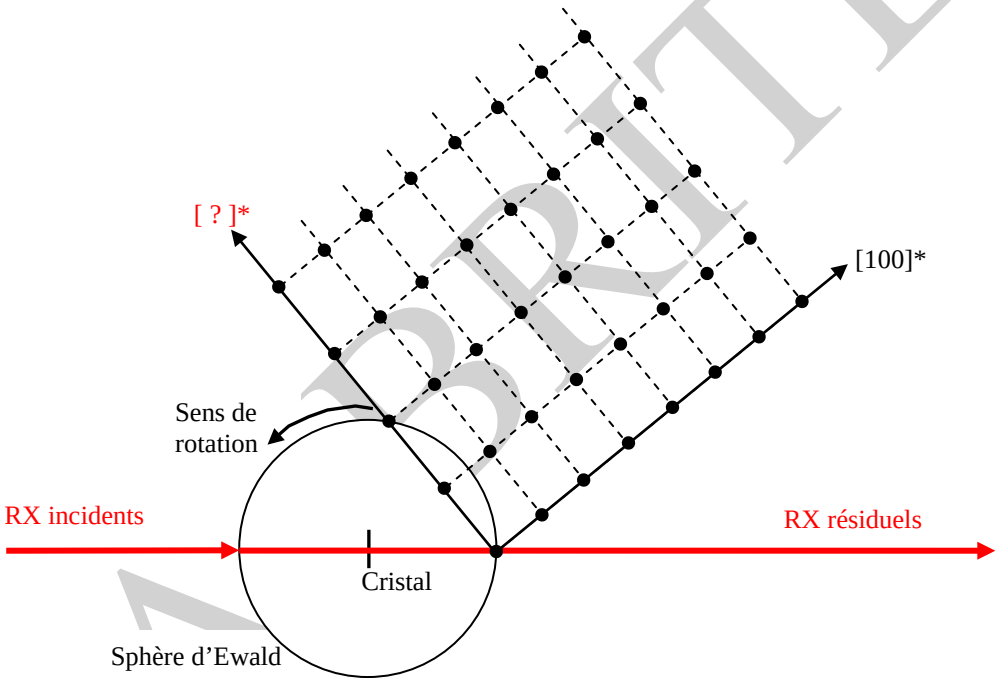
ANNEE UNIVERSITAIRE 2018-2019

Lundi 11 février 2019

EXAMEN DE CRISTALLOGRAPHIE
SESSION DE RATTRAPAGE
FILIERE SMC–SEMESTRE 5

I. Démontrer la relation de diffraction de Bragg puis représenter la figure de diffraction à n = 1 et n = 1,5 (commenter les deux figures).

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



1) quelle est l'indexation du 2ème axe de la figure ci-dessus (axe noté [?]*) ?

2) quel est l'axe de rotation du cristal ?

3) quelle est l'expression générale des rangées centrales de la figure ci-dessus ? en déduire l'expression générale des familles réticulaires représentées par ces rangées (préciser leur orientation dans l'espace).

4) quelles sont les familles de plans réticulaires qui peuvent diffracter ? Préciser les ordres de diffraction possibles pour ces familles.

5) à quel angle se place le compteur pour mesurer l'intensité du signal émis par la famille de plans réticulaires qui est en train de diffracter sachant que la maille est quadratique de paramètres a = 3,5 Å et c = 2,5 Å et que la longueur d'onde utilisée est λ = 1,5406 Å ?

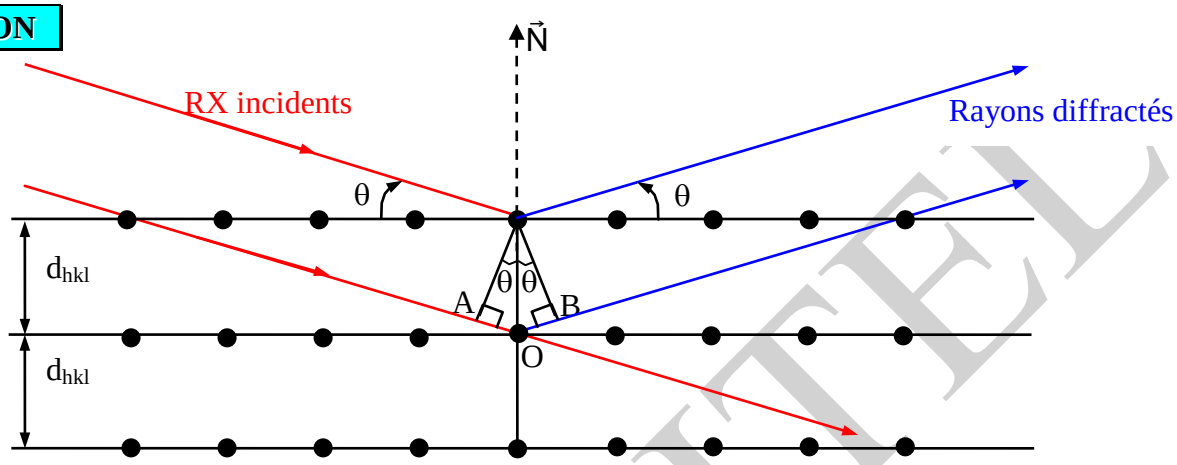
6) à quels ordres la famille de la question précédente peut diffracter si on irradie le cristal par la radiation $K_{\alpha 1}$ du molybdène de longueur d'onde 0,7107 Å ?

Pr A. BRITEL

SOLUTION

I. Démontrer la relation de diffraction de Bragg puis représenter la figure de diffraction à n = 1 et n = 1,5.

SOLUTION



Réflexion sélective sur une famille de plans (hkl)

Sur la figure on voit que la différence de marche δ entre les rayons incidents et le rayon diffracté est :

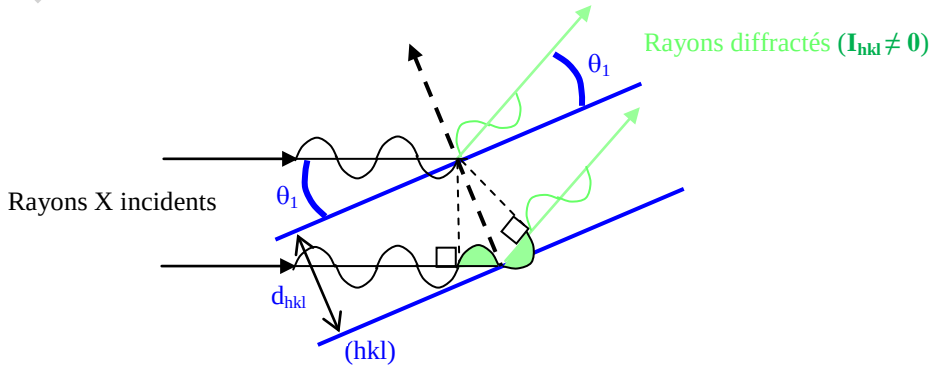
$$\delta = AO + OB = d_{hkl}\sin\theta_{hkl} + d_{hkl}\sin\theta_{hkl} = 2\, d_{hkl}\sin\theta_{hkl}.$$

Pour que l'interférence soit constructive (ce qui donne lieu à un signal de diffraction), il faut que les ondes diffusées soient en phase ce qui ne peut avoir lieu que si : $\delta = n\,\lambda$ (λ est la longueur d'onde des rayonnements incident et diffracté) par conséquent on devrait avoir :

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

n est un entier et il représente l'ordre de la réflexion.

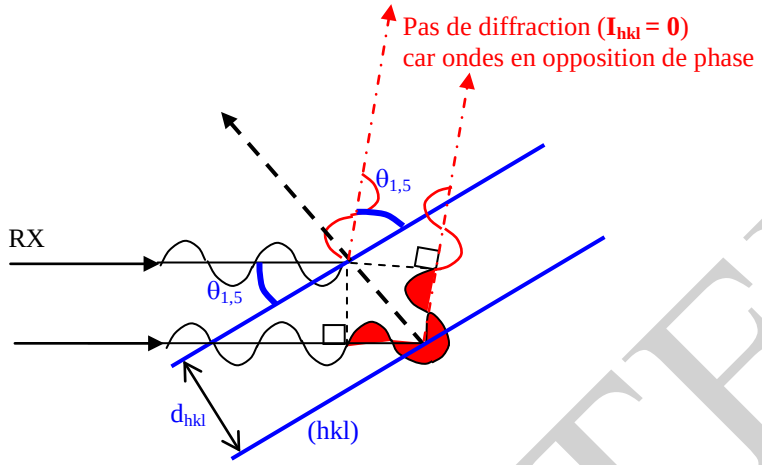
La figure de diffraction à l'ordre n = 1 de la famille (hkl) conformément à la loi de Bragg est la suivante (la différence de marche est égale à λ) :



n = 1 ⇒ **ondes diffusées en phase** ⇒ l'interférence est constructive ⇒ **diffraction**

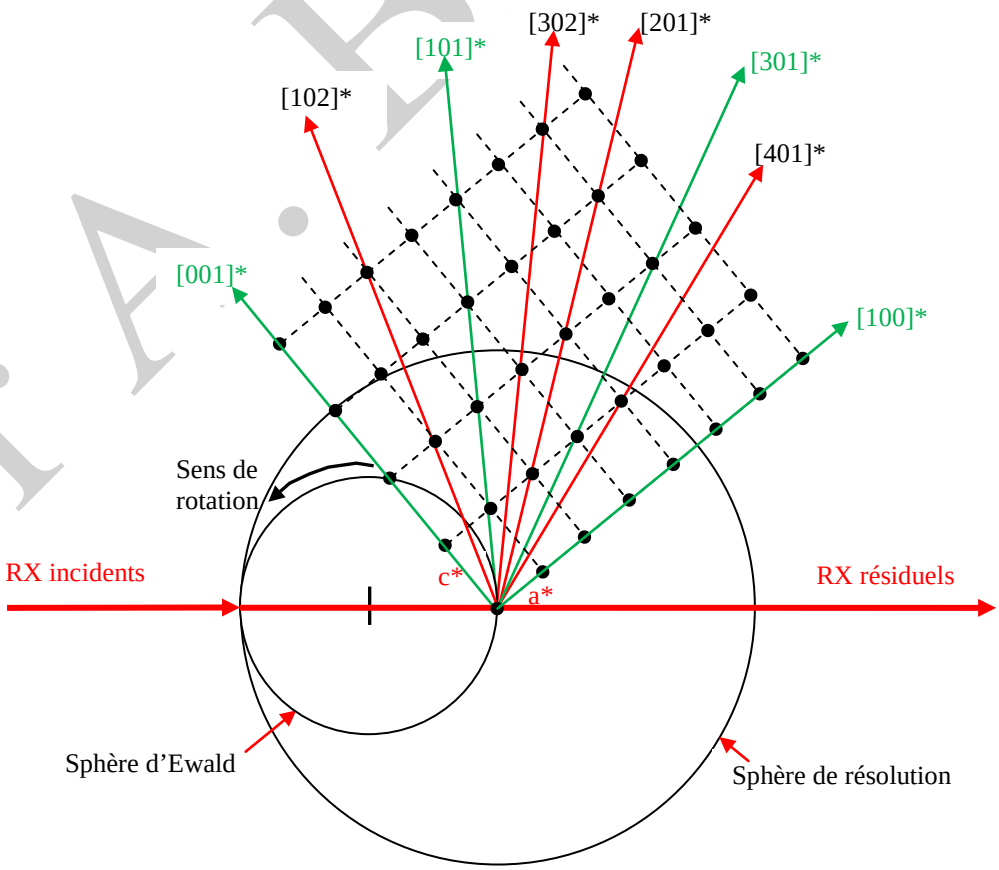
Pr A. BRITEL

La figure de diffraction à n = 1,5 de la famille (hkl) conformément à la loi de Bragg est la suivante (la différence de marche est égale à 1,5 λ) :



n = 1,5 ⇒ ondes diffusées en **opposition de phase** ⇒ l'interférence est destructive ⇒ **pas de diffraction.**

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



Pr A. BRITEL

1) quelle est l'indexation du 2ème axe de la figure ci-dessus (axe noté [?]*) ?

SOLUTION

Comme le système est quadratique, les paramètres de la maille directe sont a=b ≠ c, par conséquent la maille réciproque a comme paramètres linéaires a*=b* ≠ c*. Sur la figure ci-dessus qui fait partie du réseau réciproque, le paramètre de la rangée [100]* est a*, et comme ce paramètre est différent du celui de la rangée [?]* qu'on cherche à indexer c'est que cette dernière n'est autre que la rangée [001]* de paramètre c*≠ a*.

2) quel est l'axe de rotation du cristal ?

SOLUTION

Comme les axes principaux de la figure ci-dessus sont [100]*(ou h00) et [001]* (ou 00l), c'est que les nœuds de la figure sont de type h 0 l puisqu'ils appartiennent au plan réciproque (a*, c*).

Comme l'axe de rotation est perpendiculaire au plan (a*, c*), il s'agit alors de l'axe Oy (rangée [010]).

3) quelle est l'expression générale des rangées centrales de la figure ci-dessus ? en déduire l'expression générale des familles réticulaires représentées par ces rangées (préciser leur orientation dans l'espace).

SOLUTION

Rappel : Les rangées centrales sont les rangées qui passent par l'origine du réseau (réseau réciproque dans notre cas).

L'expression générale des rangées centrales de la figure ci-dessus est [h0l]*. Les familles réticulaires représentées par ces rangées sont donc les familles (h0l). Comme k = 0, ces familles sont parallèles à l'axe [010] (axe Oy) qui est l'axe de rotation.

REMARQUE

☞ les plans parallèles à un axe donné sont appelés "plans en zone" et l'axe auquel ils sont parallèle est appelé "axe de zone". Les plans (h0l) sont donc des plans en zone et l'axe [010] est leur axe de zone.

4) quelles sont les familles de plans réticulaires qui peuvent diffracter ? Préciser les ordres de diffraction possibles pour ces familles.

SOLUTION

Pr A. BRITEL

REMARQUE

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

D'après la figure de diffraction ci-dessus :

- La famille (100) peut diffracter aux ordres n = 1, 2, 3 et 4 mais comme le mode de réseau de Bravais est centré, elle ne peut diffracter qu'aux ordres n = 2 et 4. (On observera donc les réflexions (200) et (400) mais on n'observera pas (100) et (300)).

- La famille (301) peut diffracter à l'ordre n = 1 puisque sa diffraction à cet ordre est autorisée par le mode de réseau de Bravais centré. (On observera donc la réflexion (301)).
- La famille diagonale (101) peut diffracter aux ordres n = 1 et 2 ; puisque sa diffraction à ces ordres est autorisée par le mode de réseau de Bravais centré. (On observera donc les réflexions (101) et (202)).
- La famille (001) peut diffracter aux ordres n = 1, 2 et 3 mais comme le mode de réseau de Bravais est centré elle ne peut diffracter qu'à l'ordre n = 2. (On n'observera donc que la réflexion (002)).
- Les familles (102), (302), (201) et (401) peuvent diffracter à l'ordre n = 1 mais comme le mode de réseau de Bravais est centré leur diffraction à l'ordre n = 1 n'est pas autorisée.

RAPPEL

Lorsque le mode de Bravais est centré (qu'on note I), les réflexions pour lesquelles h+k+l=2n+1 sont éteintes : (I_{hkl} = 0 si h+k+l=2n+1)

5) à quel angle se place le compteur pour mesurer l'intensité du signal émis par la famille de plans réticulaires qui est en train de diffracter sachant que la maille est quadratique de paramètres a = 3,5 Å et c = 2,5 Å et que la longueur d'onde utilisée est λ = 1,5406 Å ?

SOLUTION

La famille qui est en train de diffracter est la famille (001) et elle est en train de diffracter à l'ordre 2. L'angle de diffraction de cette famille est :

$$\theta_2 = \arcsin \lambda/d_{001}$$

L'angle où se place le compteur pour mesurer l'intensité du signal émis par la famille de plans réticulaires (001) quand elle est en train de diffracter à l'ordre 2 est l'angle : $2\theta_2$.

Comme la maille est quadratique, la distance réticulaire peut être calculée par la formule :

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

Pr A. BRITEL

APPLICATION NUMERIQUE

$$d_{001} = 1 / [1/c^2)]^{1/2} = c = 2{,}5 \text{ Å}$$

et

$$\theta_{2(001)} = \arcsin [1{,}5406/2{,}5)] = \arcsin 0{,}61 = 38{,}04°$$

Pour mesurer l'intensité du signal émis par la famille de plans réticulaires (001) quand elle est en train de diffracter à l'ordre 2, le compteur se positionne à l'angle : $2\theta_2 = 76{,}08°$

6) à quels ordres la famille de la question précédente peut diffracter si on irradie le cristal par la radiation $K_{\alpha 1}$ du molybdène de longueur d'onde 0,7107 Å ?

SOLUTION

Pour savoir à quels ordres la famille (001) (qui est en tain de diffracter) peut diffracter si on irradie le cristal par la radiation $K_{\alpha 1}$ du molybdène de longueur d'onde 0,7107 Å, il faut calculer l'ordre de diffraction maximal de cette famille, cet ordre est tel que :

$$n_{max} \leq 2d_{001}/\lambda$$

Comme la maille est quadratique, la distance inter-réticulaire d_{001} peut être calculée par la formule :

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

APPLICATION NUMERIQUE

$d_{001} = 2{,}5$ Å (voir question précédente)

$\Rightarrow$

$n_{max} \leq 2\times 2{,}5 / 0{,}7107$ soit $n_{max} \leq 7{,}04$.

Comme n_{max} est entier on aura $n_{max} = 7 \Rightarrow$ la famille (001) peut diffracter alors aux ordres n = 1, 2, 3, 4, 5 et 6 mais comme le mode de réseau de Bravais est centré elle ne peut diffracter qu'aux ordres n = 2, 4 et 6. (On n'observera donc que les diffractions (002), (004) et (006)).

BONNE CHANCE.

ET BONNE REUSSITE

Pr Abderrafî BRITEL

Pr A. BRITEL