Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
UNIVERSITE ABDELHAMID IBN BADIS - MOSTAGANEM
FACULTE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE

Concours d'accès à la Formation de Troisième Cycle

Doctorat LMD 2013-2014

Technologie, structure & propriétés des solides

Sujet 2

Épreuve de Cristallographie (1H30)

Exercice 1 (10 points)

L'étude d'une substance, cubique, par diffraction des rayons X en utilisant la longueur d'onde du cuivre (λ = 1,5406Å) a donné les distances inter-réticulaires suivantes :

d_{hkl}(Å)	3.579	3.100	2.193	1.870
Θ (degrés)	12	14	20	24

0,5 1. Quels sont les types de réseaux possibles pour le système cubique.
0,5 2. Rappeler la loi de diffraction de Bragg
0,5 3. Compléter le tableau ci-dessus.
2 4. Exprimer les paramètres du réseau réciproque en fonction des paramètres du réseau direct.
3 5. Déduire l'expression de la distance inter-réticulaire d_{hkl} du plan d'indice (hkl) en fonction du paramètre de la maille ***a*** et des indices h,k et l.
1,5 6. Exprimer les trois premières distances pour un réseau cubique primitif
2 7. Est-ce que spectre proposé correspond à un réseau primitif ? justifier.

Exercice 2 (10 points)

Considérons le groupe d'espace $P2_1$. Donner :

1 1. Le système cristallin et le type du réseau.
1 2. Le groupe ponctuel et l'ordre de ce groupe.
1 3. Les coordonnées des positions équivalentes générales.
1 4. Les extinctions systématiques de ce groupe.
3 5. Donner les éléments de symétrie existants dans la molécule d'eau.
3 6. Montrer comment peut-on passer d'une maille cubique centrée vers une maille primitive simple dont on précisera la nature.

(2) (1)

Exercice ① :

(3,5) 1) systeme cubique : reseaux possibles : P, I et F

(3,5) 2) Loi de Bragg : $2d\sin\theta = \lambda$

(3,5) 3) Les valeurs du tableau :

(2pts) 4) $\vec{a}^*\cdot\vec{a} = 1$ $\quad$ $\vec{a} \perp \vec{b} \perp \vec{c}$ reseau cubique

$\vec{a}^*\cdot\vec{b} = 0$ $\quad$ ($\alpha = \beta = \gamma = 90$ et $a = b = c$)

$\vec{a}^*\cdot\vec{c} = 0$ $\quad$ Donc $\vec{a}^* \perp \vec{b}$ et $\vec{a}^* \perp \vec{c}$

D'où : $a^*\cdot a = 1$

$$a^* = \frac{1}{a}$$

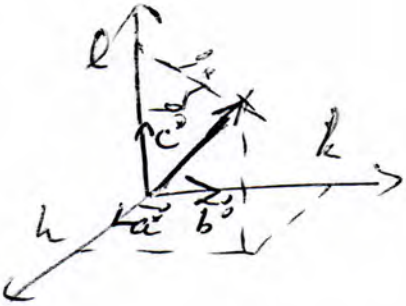
De la meme façon : $b^* = \frac{1}{b}$ et $c^* = \frac{1}{c}$

D'où $a^* = b^* = c^* = \frac{1}{a}$

et $\alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90°$

(3pts) 5) $d_{hkl} = \dfrac{1}{d^*_{hkl}} = \dfrac{1}{\|\vec{r}^*_{hkl}\|}$

(1pt)



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

(1pt) $\|\vec{r}^*_{hkl}\|^2 = (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*)^2$

en utilisant les relations de la question 4

$\|\vec{r}^*_{hkl}\|^2 = (h^2+k^2+l^2)\,a^{*2} = \dfrac{h^2+k^2+l^2}{a}$

D'où $\quad d_{hkl} = \dfrac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$

(1pts)

Sujet A ②

Exercice ① suite :

(1,5 pts) 6) Pour un réseau primitif :

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

$h=1$, $k=0$ et $l=0$

(0,5) $d_1 = a$

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

$h=1$, $k=1$, $l=0$

(0,5) $d_2 = \frac{a}{\sqrt{2}}$

(0,5) Distance 3 : $d_3 = \frac{a}{\sqrt{3}}$

(2pts) 7) Calcul du rapport : $\frac{d_1}{d_2}$

(1) pour un réseau primitif $\frac{d_1}{d_2} = \sqrt{2}$

le spectre proposé donne un rapport

(1) $\frac{d_1}{d_2} = 1,154$

Donc réseau non primitif.

Exercice 2

(1 pt) 1) Monoclinique (0,5), Primitif (0,5)

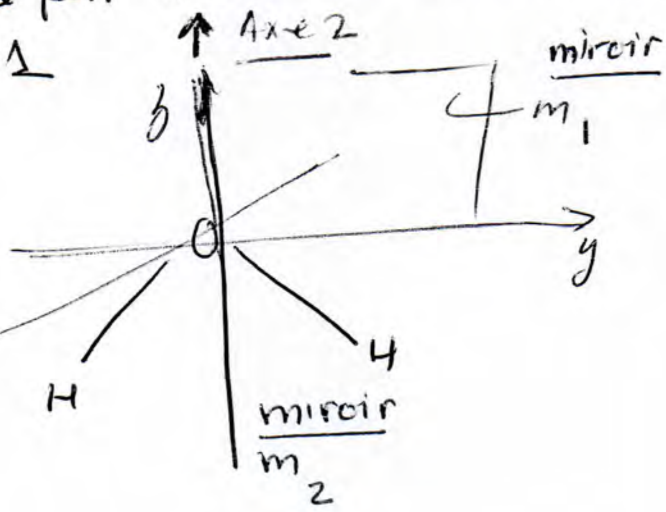
(1 pt) 2) Groupe ponctuel 2 (0,5) ; l'ordre $n = 2$ (0,5)

(1 pt) 3) x, y, z (0,5) et $\bar{x}, \bar{y}, z+\frac{1}{2}$ (0,5)

$+$ $+\frac{1}{2}$

(1 pt) 4) Pas d'extinction de reseau
Mais extinction donnée par l'axe helicoïdal 2_1
(1) (00ℓ) $n = 2n+1$

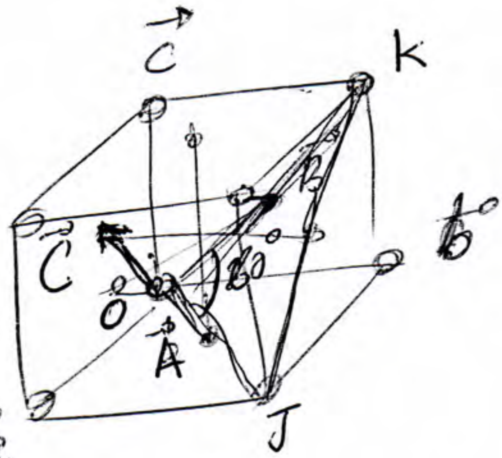
(3 pts) 5) Molecule d'eau



(1) Axe $2 \parallel z$
(1) miroir $m_1 \perp x$
(1) miroir $m_2 \perp y$

(3 pts) 6)

(1 pt)



$a = b = c$
$\alpha = \beta = \gamma = 90°$

$\vec{A} = \frac{\vec{a}+\vec{b}}{2}$ (1 pt)

$\vec{B} = \frac{\vec{b}+\vec{c}}{2}$

$\vec{C} = \frac{\vec{c}+\vec{a}}{2}$

(1 pt) $A = B = C = \frac{a\sqrt{2}}{2}$

$\alpha' = \beta' = \gamma' = 60°$

triangle OJK est equilateral donc $\gamma' = 60°$