UNIVERSITE SIDI MOHAMED BEN ABDELLAH ***ANNEE UNIVERSITAIRE 2015-2016***

FACULTE DES SCIENCES DHAR MEHRAZ -FES

SERIE N°1

TD DE CRISTALLOGRAPHIE

FILIERES SMP-SMC - SEMESTRE 4

I- RANGEES ET PLANS RETICULAIRES :

1) Indexer les rangées réticulaires passant par les couples de nœuds N_1 et N_2 suivants :

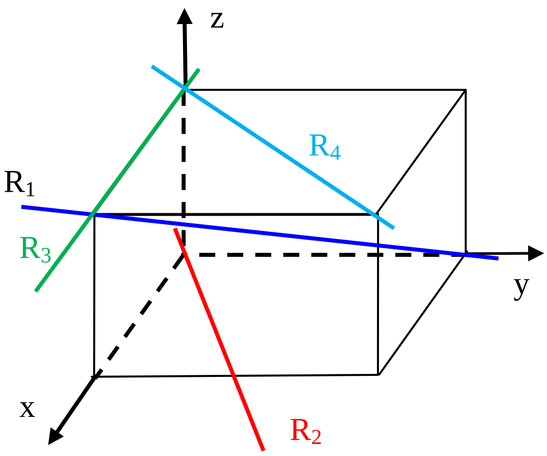
a- N1 : 223 et N2 : 531

b- N1 : 532 et N2 : 211

c- N1 : 320 et N2 : 746

Préciser dans chaque cas l'ordre du nœud N_2 par rapport au nœud N_1 et donner le paramètre (ou période) de la rangée considérée si le système cristallin est orthorhombique.

2) Indexer les rangées cristallographiques représentées dans la maille suivante :

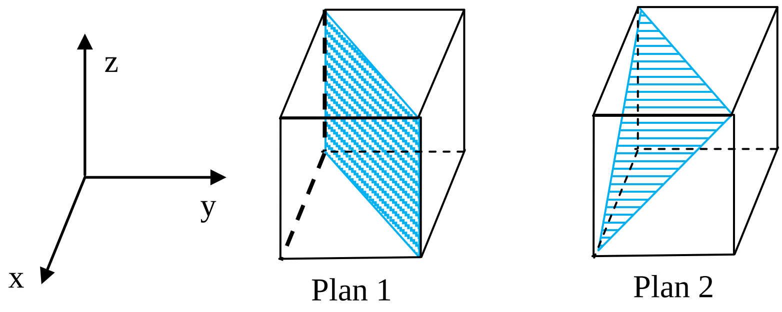


3) A quelle famille de plans réticulaires appartient le plan contenant les rangées cristallographiques R_2 et [001] ?

4) Indexer puis dessiner les plans réticulaires qui coupent les axes Ox, Oy et Oz respectivement aux points A, B et C tels que :

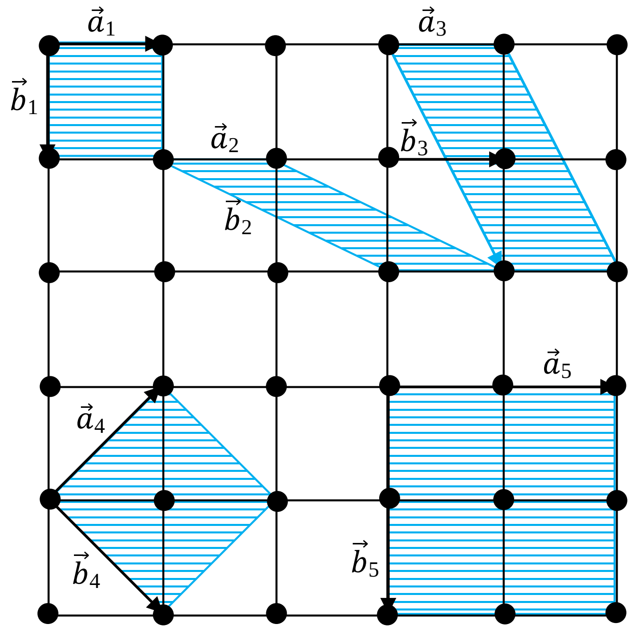
Plan 1 :	OA = a	OB = ∞	Oc = c
Plan 2 :	OA = a	OB = 2b	OC = 3c
Plan 3 :	OA = 2a	OB = $\frac{3}{2}$ b	OC = c
Plan 4 :	OA = a	OB = b	OC = 2 c

5) A quelles familles réticulaires appartiennent les plans schématisés sur les figures ci-dessous (plans hachurés) :



II- MULTIPLICITE DES MAILLES :

1) Soit un réseau ponctuel bidimensionnel dans lequel on considère les mailles représentées ci-dessous. Comparer la surface de chacune des mailles à la surface de la maille origine. Conclure.



2) une maille rhomboédrique peut-être inscrite dans une maille CFC.

a- tracer les deux mailles.

b- que devient le plan (111) du système cubique dans le système rhomboédrique ?

c- calculer le volume de la maille rhomboédrique par rapport à celui de la maille CFC. En déduire la multiplicité de la maille rhomboédrique.

III- RESEAUX 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 F et C (A ou B) n'existent pas dans le système quadratique. Expliquer pour quelle raison.

IV- RELATIONS ENTRE LES RESEAUX DIRECT ET RECIPROQUE :

1) Monter 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 des réseaux orthorhombique, quadratique et cubique.

V- DIFFRACTION DES RAYONS X :

1) Démontrer la relation de diffraction de Bragg.
2) Représenter la figure de diffraction avec une différence de marche $\delta = 2\lambda$. Conclure.
3) Représenter la figure de diffraction avec une différence de marche $\delta = 1{,}5\lambda$. Conclure.

VI- SYMETRIE CRISTALLINE :

1) Montrer que les seuls ordres possibles pour les axes directs (ou inverses) sont les ordres 1, 2, 3, 4 et 6.
2) Donner les positions équivalentes à une position atomique (x,y,z) si celle-ci subit l'action de l'un des axes de symétrie 2, 3, 4, $\bar{1}$, $\bar{2}$ et $\bar{4}$ (ces derniers sont orientés suivant l'axe Oz). Faire les schémas montrant ces images dans le plan xoy.
3) Démontrer les propos suivants :
   - a- L'action de 2/m est une inversion.
   - b- L'intersection de trois miroirs perpendiculaires 2 à 2 est un centre d'inversion.
   - c- L'intersection de deux miroirs perpendiculaires est un axe d'ordre 2. Selon ce propos, comment pourra-t-on noter le groupe ponctuel orthorhombique mm2 ?
   - d- Si dans un plan existent n axes d'ordre 2 faisant entre eux des angles de π/n alors l'axe perpendiculaire au plan contenant ces axes d'ordre 2 est un axe d'ordre n (on prendra n=2).
4) Tous les axes de réflexion rotatoire sont équivalents à un axe de symétrie directe ou inverse ou à une combinaison de ces axes. A quoi correspond donc les axes *1', 2', 3', 4' et 6'*.

5) A quel système correspond le groupe ponctuel 6/mmm ? Préciser l'orientation des éléments de symétrie de ce groupe.

6) Représenter sur une maille tous les éléments de symétrie d'orientation du système cubique.

VII- SYMETRIE CRISTALLINE (examen - session normale 2014-2015) :

1) A quel système cristallin correspond le groupe ponctuel (4/m)mm (justifier votre réponse) ? Dessiner les éléments de symétrie du groupe sur la maille représentant le système cristallin. Indexer les axes de symétrie et les miroirs.

2) Donner les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) :

a. par l'axe 4. Faire le schéma montrant ces images dans le plan xOy.

b. par l'axe $\bar{4}$. Faire le schéma montrant ces images dans le plan xOy.

c. par l'axe 4_3. Faire le schéma en perspective montrant ces images.

Les axes ci-dessus sont orientés suivant Oz.

3) A quel système cristallin fait partie le groupe d'espace Ibca (justifier votre réponse). Donner les positions équivalentes à la position (x,y,z) dans ce groupe d'espace.

VIII- SYMETRIE CRISTALLINE (examen - session de rattrapage 2014-2015):

1) Soient les groupes d'espace P2, $P2_1$, Pm, Pc, P2/m, $P2_1/m$, P2/c, $P2_1/c$, C2, Cm, Cc, C2/m, et C2/c.

a. à quel(s) système(s) cristallin(s) correspondent ces groupes (justifier votre réponse) ?

b. regrouper ces groupes suivant le groupe ponctuel (ou classe de symétrie) auquel ils font partie en précisant si le groupe ponctuel est holoèdre, hémièdre ou tétartoèdre.

c. donner l'un des groupes d'espace dont la classe de symétrie est une classe de LAUE.

d. quels sont parmi ces groupes d'espace ceux qui sont symmorphiques (justifier votre réponse).

e. donner les positions équivalentes à la position (x,y,z) dans le groupe d'espace C2/c.

2) Donner les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) générées :

a. par l'axe 4_1 orienté suivant Oz. Faire le schéma montrant ces images.

b. par l'axe 4_2 orienté suivant Oz. Faire le schéma montrant ces images.

SOLUTION

I- RANGEES CRISTALLOGRAPHIQUES ET PLANS RETICULAIRES :

1) Indexation des rangées réticulaires passant par les couples de nœuds N_1 et N_2 :

a- La rangée réticulaire passant par le couple de nœuds 223 et 531 ne passe pas par l'origine. Pour la faire passer par l'origine, celle-ci peut être prise en N_1, dans ce cas les coordonnées de N_2 deviennent : u = 5 – 2 = 3, v = 3 – 2 = 1 et w = 1 – 3 = -2. Comme les nombres u, v et w sont premiers entre eux, alors le nœud 31-2 est le nœud le plus proche de l'origine (les deux nœuds N_1 et N_2 sont consécutifs : le nœud N_2 se trouve juste après N_1). La rangée réticulaire en question sera alors notée [31-2] qu'on écrit aussi [$31\bar{2}$].

REMARQUE

☞ Si c'est N_2 qu'on prend comme origine, les coordonnées de N_1 deviennent dans le nouveau repère : u'= 2 - 5= -3 , v'= 2 - 3= -1 et w'= 3 - 1 = 2. Dans ce cas, la rangée réticulaire en question sera notée [$\bar{3}\bar{1}2$]. En fait [$31\bar{2}$] et [$\bar{3}\bar{1}2$] représentent la même rangée réticulaire et de façon générale [uvw] = [$\bar{u}\bar{v}\bar{w}$]

Le paramètre de la rangée [uvw] est donné par :

$p = |\vec{N}|$

$p = [(u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c})\,(u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c})]^{1/2}$
$\quad = [u^2\vec{a}^2 + v^2\vec{b}^2 + w^2\vec{c}^2 + 2\,u\,v\,\vec{a}\,\vec{b} + 2\,uw\,\vec{a}\,\vec{c} + 2\,vw\,\vec{b}\,\vec{c}]^{1/2}$

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

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

b- La rangée réticulaire passant par le couple de nœuds 532 et 211 ne passe pas par l'origine. Pour la faire passer par l'origine, celle-ci peut être prise en N_1. Dans ce cas les coordonnées de N_2 deviennent : u = 2 – 5 = -3, v = 1 – 3 = -2 et w = 1 – 2 = -1. Comme les nombres u, v et w sont premiers entre eux, alors le nœud -3-2-1 est le nœud le plus proche de l'origine (les deux nœuds N_1 et N_2 sont consécutifs : le nœud N_2 se trouve juste après N_1). La rangée réticulaire en question sera alors notée [-3-2-1] qu'on écrit aussi [$\bar{3}\bar{2}\bar{1}$] et cette rangée pourra se noter aussi [321].

Le paramètre de la rangée est :

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

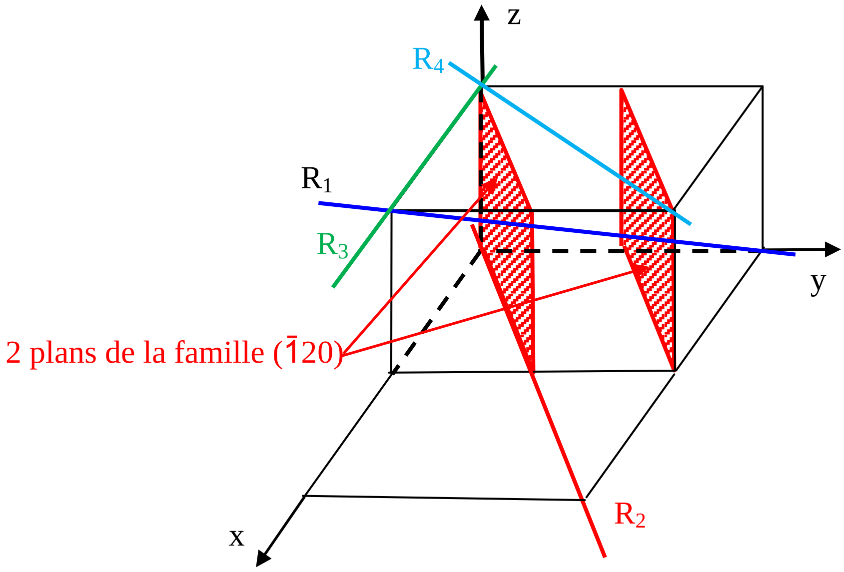
$p = (9\,a^2 + 4\,b^2 + c^2)^{1/2}$

c- La rangée réticulaire passant par le couple de nœuds 320 et 746 ne passe pas par l'origine. Pour la faire passer par l'origine, celle-ci peut être prise en N_1. Dans ce cas les coordonnées de N_2 deviennent : u = 7 – 3 = 4, v = 4 – 2 = 2 et w = 6 – 0 = 6. Les nombres u, v et w ne sont pas premiers entre eux, puisqu'ils sont divisibles par 2. Le nœud N_2 n'est pas alors le nœud le plus proche de l'origine mais plutôt le deuxième. Les coordonnées du 1er nœud après l'origine seront alors 213. La rangée réticulaire en question sera alors notée [213] (ou $[\bar{2}\bar{1}\bar{3}]$).

Le paramètre de la rangée est :

$p = (u^2a^2 + v^2b^2 + w^2c^2)^{1/2} = (4a^2 + b^2 + 9\ c^2)^{1/2}$

2) Indexation des rangées R_1, R_2, R_3 et R_4 :



a- La rangée R_1 passe par les nœuds de coordonnées 101 et 010. Si on prend le deuxième nœud comme origine, les coordonnées du premier nœud deviennent 1-11. Ces coordonnées sont premières entre elles, la rangée R_1 sera notée alors $[1\bar{1}1]$ (ou $[\bar{1}1\bar{1}]$).

b- La rangée R_2 passe par l'origine et le nœud de coordonnées 210 qui est le nœud le plus proche de l'origine (ses coordonnées sont premières entre elles). La rangée R_2 sera notée alors [210] (ou $[\bar{2}\bar{1}0]$)

c- La rangée R_3 est parallèle à l'axe Ox, elle fait donc partie de la même famille de rangées à laquelle appartient Ox. Comme c'est Ox qui représente cette famille (puisqu'il passe par l'origine) il s'agit donc de la rangée [100].

d- La rangée R_4 est parallèle à la rangée qui passe par l'origine et le nœud 110 et cette rangée c'est [110]. R_4 fait donc partie de la même famille de rangées notée [110].

3) famille de plans réticulaires à laquelle appartient le plan contenant les rangées cristallographiques R2 et [001] ?

Le plan contenant les rangées cristallographiques R2 et [001] (plan hachuré sur la figure précédente) fait partie de la famille de plans réticulaires $(\bar{1}20)$: on obtient cette indexation en indexant le plan étudié par rapport à la maille qui a pour origine le nœud 100, en effet par rapport à cette maille le plan étudié coupe les axes Ox, Oy et Oz respectivement :

en OA = a/h = –a, soit h = -1

en OB = b/k = b/2 , soit k = 2 et

en OC = c/l = ∞ c, soit l = 0

4) Indexation des plans1, 2, 3 et 4 :

Les indices de Miller h, k et l d'une famille réticulaire (hkl) sont tels que :

OA = a/h , OB = b/k et OC = c/l ,

a- **Plan1** :

Les indices de Miller h, k et l de la famille réticulaire dont l'un des plans coupe les axes Ox, Oy et Oz respectivement aux points A, B et C tels que : OA = a, OB = ∞ et Oc = c, s'obtiennent en écrivant que : OA = a/h = a, OB = b/k = ∞ et Oc = c/l = c, soient :

h =1, k = 0 et l = 1. Ces indices étant premiers entre eux, la famille représentée par le plan 1 sera notée (101).

b- **Plan 2** :

Les indices de Miller h, k et l de la famille réticulaire dont l'un des plans coupe les axes Ox, Oy et Oz respectivement aux points A, B et C tels que : OA = a, OB = 2b et Oc = 3c, s'obtiennent en écrivant que : OA = a/h = a, OB = b/k = 2b et Oc = c/l = 3c, soient :

h =1, k = 1/2 et l = 1/3. Ces indices ne sont pas premiers entre eux, dans ce cas on note ces indices h', k' et l' (càd : h' =1, k' = 1/2 et l' = 1/3) et non h, k et l. Pour obtenir alors des indices h, k et l premiers entre eux, on multiplie les indices h', k' et l' par 6 (ce nombre est le plus petit multiple communs de 2 et 3, dénominateurs respectifs de k' et l'). Les indices de Miller de la famille représentée par le plan 2 sont alors h= 6 , k = 3 et l = 2 et la famille sera notée alors (6 3 2).

REMARQUE

☞ Comme on a multiplié h', k' et l' par 6 pour avoir des indices h, k et l premiers entre eux, alors le plan 2 est le 6ème plan de la famille (6 3 2) après celui passant par l'origine.

c- **Plan3** :

Les indices de Miller h, k et l de la famille réticulaire dont l'un des plans coupe les axes Ox, Oy et Oz respectivement aux points A, B et C tels que : OA = 2a, OB = 3/2b et Oc = c, s'obtiennent en écrivant que : OA = a/h = 2a, OB = b/k = 3/2 b et Oc = c/l = c, soient :

h =1/2, k = 2/3 et l = 1. Ces indices ne sont pas premiers entre eux, dans ce cas on note ces indices h', k' et l' (càd : h' =1/2, k' = 2/3 et l'= 1) et non h, k et l. Pour obtenir alors des indices h, k et l premiers entre eux, on multiplie les indices h', k' et l' par 6 (ce nombre est le plus petit multiple communs de 2 et 3, dénominateurs respectifs de h' et k'). Les indices de Miller de la famille représentée par le plan 2 sont alors h= 3, k = 4 et l = 6 et la famille sera notée alors (3 4 6).

REMARQUE

☞ Comme on a multiplié h', k' et l' par 6 pour avoir des indices h, k et l premiers entre eux, alors le plan 3 est le 6ème plan de la famille (3 4 6) après celui passant par l'origine.

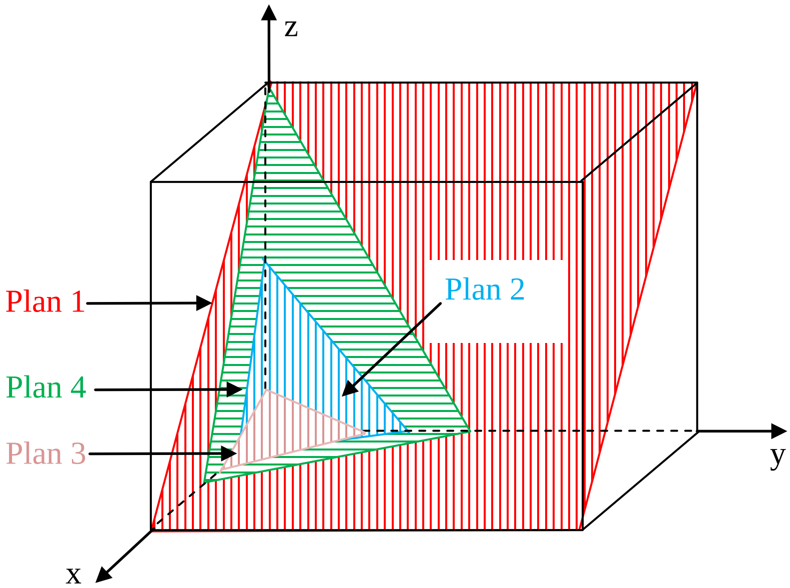
d- **Plan4** :

Les indices de Miller h, k et l de la famille réticulaire dont l'un des plans coupe les axes Ox, Oy et Oz respectivement aux points A, B et C tels que : OA = a, OB = b et Oc = 2c, s'obtiennent en écrivant que : OA = a/h = a, OB = b/k = b et Oc = c/l = 2c, soient :

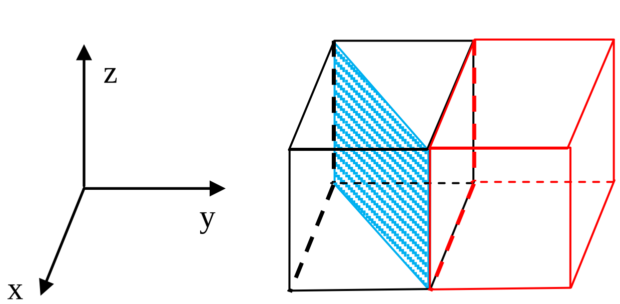
h =1, k = 1 et l = 1/2. Ces indices ne sont pas premiers entre eux, dans ce cas on note ces indices h’, k’ et l’ (càd : h’ =1, k’ = 1 et l’= 1/2) et non h, k et l. Pour obtenir alors des indices h, k et l premiers entre eux, on multiplie les indices h’, k’ et l’ par 2 (ce nombre est le dénominateur de l’). Les indices de Miller de la famille représentée par le plan 4 sont alors h= 2, k = 2 et l = 1 et la famille sera notée alors (2 2 1).

REMARQUE

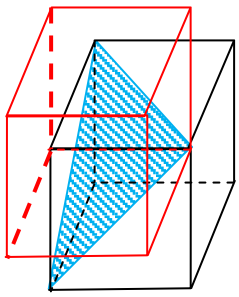
☞ Comme on a multiplié h’, k’ et l’ par 2 pour avoir des indices h, k et l premiers entre eux, alors le plan 4 est le 2ème plan de la famille (2 2 1) après celui passant par l’origine.



5) A quelles familles réticulaires appartiennent les plans schématisés sur les figures ci-dessous (plans hachurés). Préciser à chaque fois l’ordre du plan traité dans la famille à laquelle il appartient :



Plan 1



Plan 2

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 = ∞ 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 de la maille (par rapport à laquelle on peut indexer la famille réticulaire à laquelle fait partie le plan 1) au nœud 010 par exemple, le plan 1 couperait les axes cristallographiques Ox, Oy et Oz de la maille choisie, respectivement aux points A, B et C tels que : OA = a , OB = -b et OC = ∞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 de la famille de plans réticulaires considérée sont : h = 1, k = -1 et l = 0. La famille à laquelle fait partie le plan 1 sera alors notée ($1\ \bar{1}\ 0$).

REMARQUE

- si on considère l'origine au nœud 100, la famille à laquelle fait partie le plan 1 sera notée ($\bar{1}\ 1\ 0$). Il s'agit de la même famille que celle notée ($1\ \bar{1}\ 0$). De façon générale, la famille réticulaire notée (hkl) est la même que celle notée ($\bar{h}\bar{k}\bar{l}$).

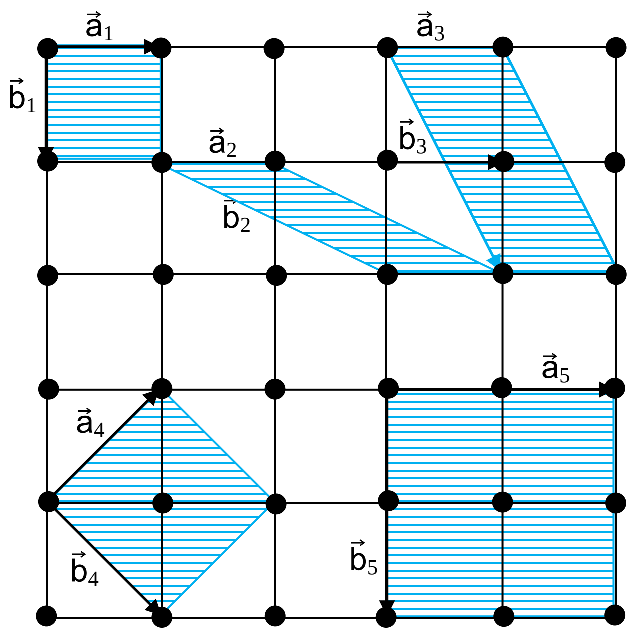
b- Plan 2 :

La maille contenant le plan 2 n'est pas adaptée pour indexer la famille réticulaire à laquelle appartient ce plan (on ne voit pas clairement les intersections du plan 2 avec cette maille). La maille par rapport à laquelle on peut indexer facilement la famille réticulaire à laquelle fait partie le plan 2 est celle ayant pour origine 101 par exemple, le plan 2 couperait les axes cristallographiques Ox, Oy et Oz de la maille choisie, respectivement aux points A, B et C tels que : OA = - a , OB = b et OC = - 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 de la famille de plans réticulaires considérée sont : h = -1, k = 1 et l = -1. La famille à laquelle fait partie le plan 2 sera alors notée ($\bar{1}\ 1\ \bar{1}$) (ou ($1\ \bar{1}\ 1$)).

II- MULTIPLICITE DES MAILLES :

1) Soit un réseau ponctuel bidimensionnel dans lequel on considère les mailles représentées ci-dessous. Comparer la surface de chacune des mailles à la surface de la maille origine. Conclure.

SOLUTION



Dans un réseau bidimensionnel, la maille construite sur les vecteurs $\vec{n}_1$ et $\vec{m}_1$ tels que $\vec{n}_1 = u_1\vec{a} + v_1\vec{b}$ et $\vec{m}_1 = u_2\vec{a} + v_2\vec{b}$, est un parallélogramme ayant comme surface :

$$S = |\vec{n}_1 \wedge \vec{m}_1| = \begin{vmatrix} u_1 & v_1 \\ u_2 & v_2 \end{vmatrix} |\vec{a} \wedge \vec{b}| = |u_1 v_2 - u_2 v_1| \times |\vec{a} \wedge \vec{b}| = m \times |\vec{a} \wedge \vec{b}| = mS_0$$

a- <u>Surface de la maille 2 :</u>

$$S_2 = |\vec{n}_2 \wedge \vec{m}_2| = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 1 \end{vmatrix} |\vec{a}_1 \wedge \vec{b}_1| = |1\times1 - 2\times0| \times |\vec{a}_1 \wedge \vec{b}_1| = |\vec{a}_1 \wedge \vec{b}_1| = a_1b_1 = S_1$$

La maille 2 a la même surface que la maille 1 de référence. Comme la maille 1 de référence est primitive, la maille 2 est également primitive comme on peut le voir aisément sur le dessin : seuls les sommets sont occupés.

b- <u>Surface de la maille 3</u> :

$$S_3 = |\vec{n}_3 \wedge \vec{m}_3| = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 2 \end{vmatrix} |\vec{a}_1 \wedge \vec{b}_1| = |1\times2 - 1\times0| \times |\vec{a}_1 \wedge \vec{b}_1| = 2|\vec{a}_1 \wedge \vec{b}_1| = 2a_1b_1 = 2S_1$$

La maille 3 a une surface double de la maille 1 de référence. Comme la maille 1 de référence est primitive, la maille 3 est une maille double ou de multiplicité 2 comme on peut aisément le déterminer par calcul du nombre d'atomes par maille. Ce dernier est égal à 4 ×1/4 + 1 ×1 = 2.

c- <u>Surface de la maille 4</u> :

$$S_4 = |\vec{n}_4 \wedge \vec{m}_4| = \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} |\vec{a}_1 \wedge \vec{b}_1| = |1\times1 - (1\times-1)| \times |\vec{a}_1 \wedge \vec{b}_1| = 2|\vec{a}_1 \wedge \vec{b}_1| = 2a_1b_1 = 2S_1$$

La maille 4 a une surface double de la maille 1 de référence. Comme la maille 1 de référence est primitive, la maille 4 est une maille double ou de multiplicité 2 comme on peut aisément le déterminer par calcul du nombre d'atomes par maille. Ce dernier est égal à 4 ×1/4 + 1 ×1 = 2.

d- <u>Surface de la maille 5</u> :

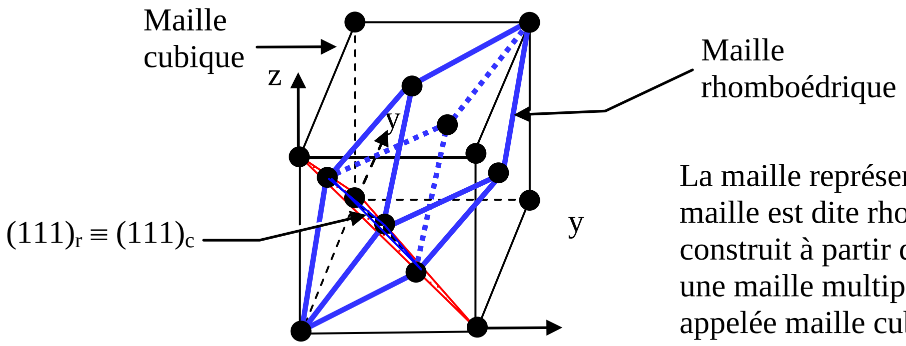
$$S_5 = |\vec{n}_5 \wedge \vec{m}_5| = \begin{vmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{vmatrix} |\vec{a}_1 \wedge \vec{b}_1| = |2\times2 - 0\times0| \times |\vec{a}_1 \wedge \vec{b}_1| = 4|\vec{a}_1 \wedge \vec{b}_1| = 4a_1b_1 = 4S_1$$

La maille 5 a une surface quadruple de la maille 1 de référence. Comme la maille 1 de référence est primitive, la maille 5 est une maille quadruple ou de multiplicité 4 comme on peut aisément le déterminer par calcul du nombre d'atomes par maille. Ce dernier est égal à 4 ×1/4 + 4 ×1/2 + 1 ×1 = 4.

2) une maille rhomboédrique peut-être inscrite dans une maille CFC.

a. tracer les deux mailles.

SOLUTION



La maille représentée en gras est élémentaire (cette maille est dite rhomboédrique) mais le réseau construit à partir de cette maille peut être décrit par une maille multiple (quadruple) contenant 4 atomes, appelée maille cubique à faces centrée (CFC).

b. que devient le plan (111) du système cubique dans le système rhomboédrique ?

SOLUTION

$(111)_r \equiv (111)_c$

c. 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 :

$$V_R = \begin{vmatrix} 0 & ½ & ½ \\ ½ & 0 & ½ \\ ½ & ½ & 0 \end{vmatrix} (\vec{a}_{CFC}, \vec{b}_{CFC}, \vec{c}_{CFC}) = ¼\ \vec{a}_{CFC} (\vec{b}_{CFC} \wedge \vec{c}_{CFC}) = ¼\ V_{CFC} \text{ soit } V_{CFC} = 4\ V_R.$$

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

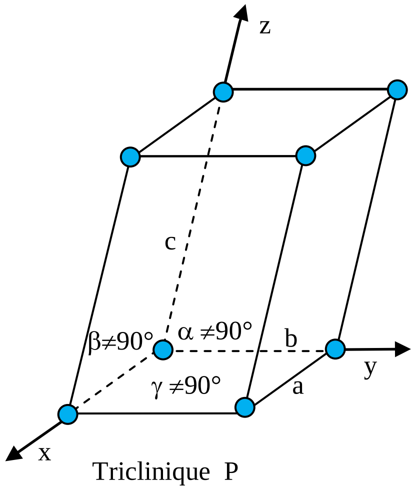
Comme la maille CFC contient quatre atomes $8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4$ (maille quadruple), la maille rhomboédrique n'en contient qu'un seul (maille primitive : atomes uniquement aux sommets).

III- RESEAUX DE BRAVAIS :

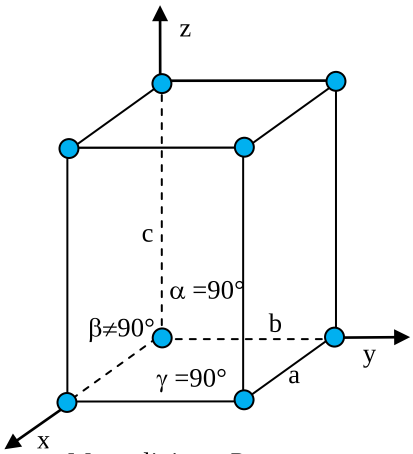
1) Quel est le nombre de réseaux de Bravais ? Préciser les systèmes auxquels ils sont attribués.

SOLUTION

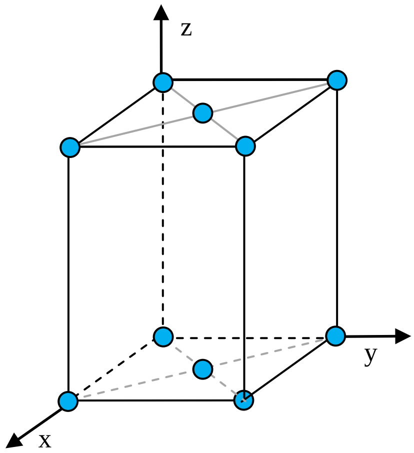
Les réseaux de bravais sont au nombre de 14 et sont répartis sur les systèmes cristallins comme suit :



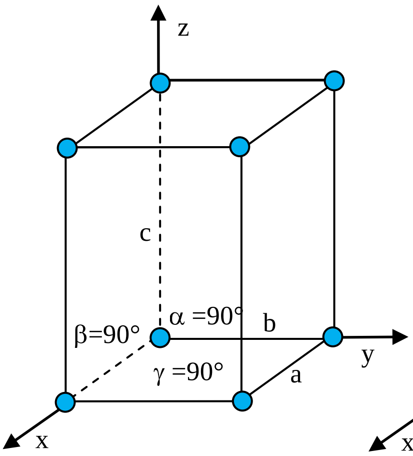
Triclinique P



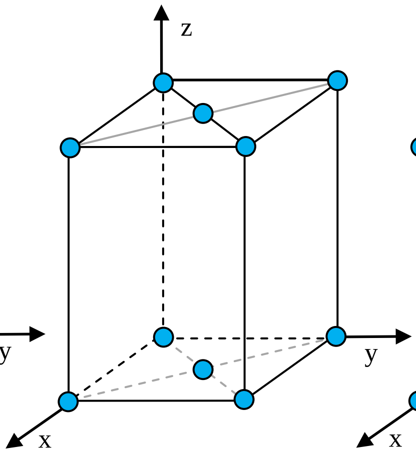
Monoclinique P



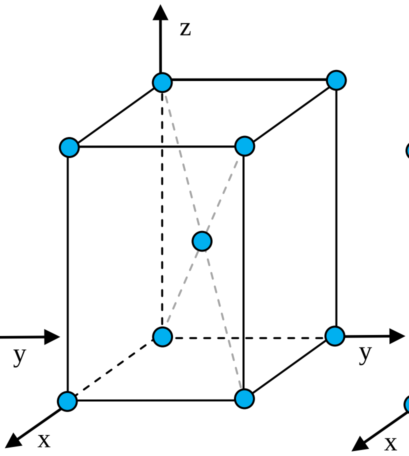
Monoclinique C



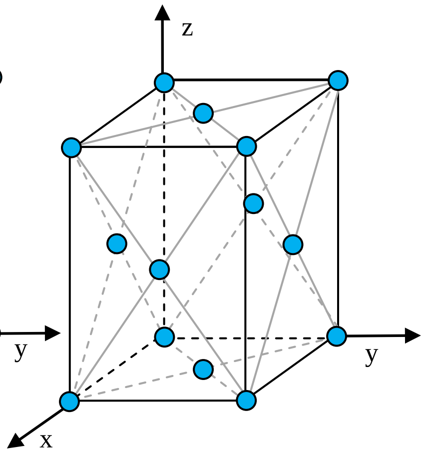
Orthorhombique P



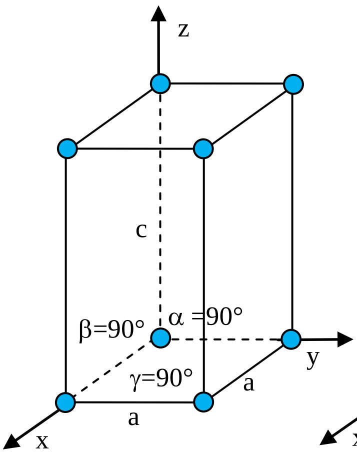
Orthorhombique C



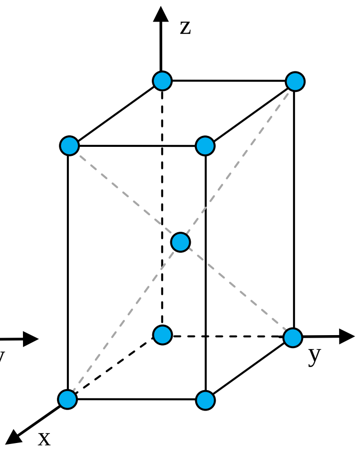
Orthorhombique I



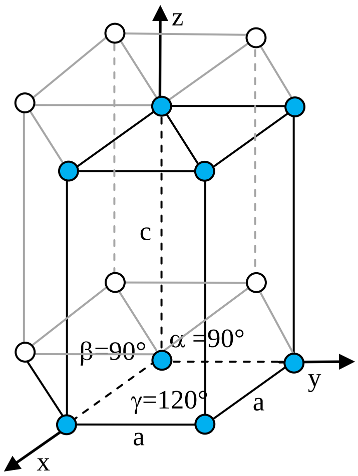
Orthorhombique F



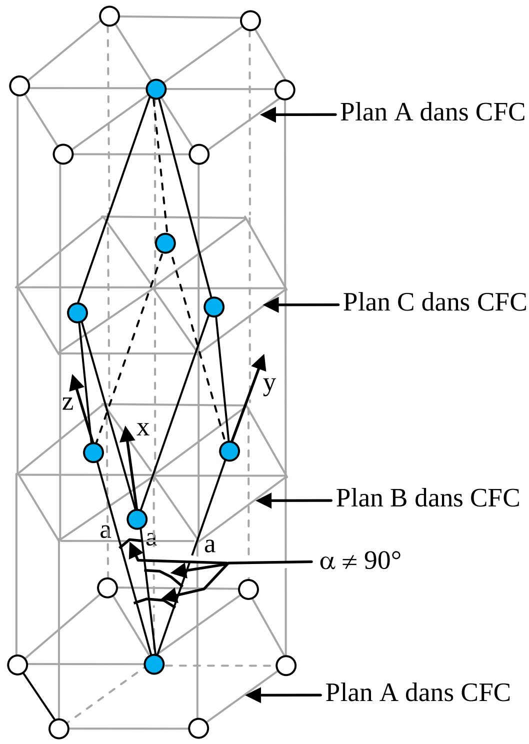
Quadratique P



Quadratique I

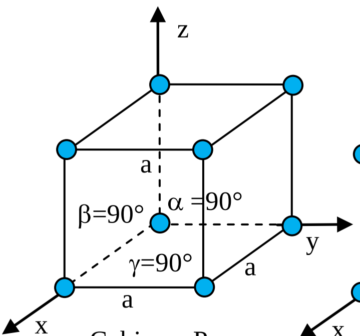


Hexagonal P

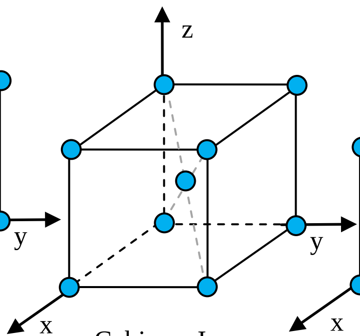


Rhomboèdrique P ≡ Trigonal R

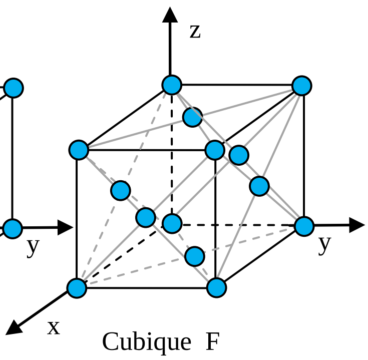
(voir empilement CFC suivant axe ternaire)



Cubique P



Cubique I



Cubique F

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. Expliquer pour quelle raison.

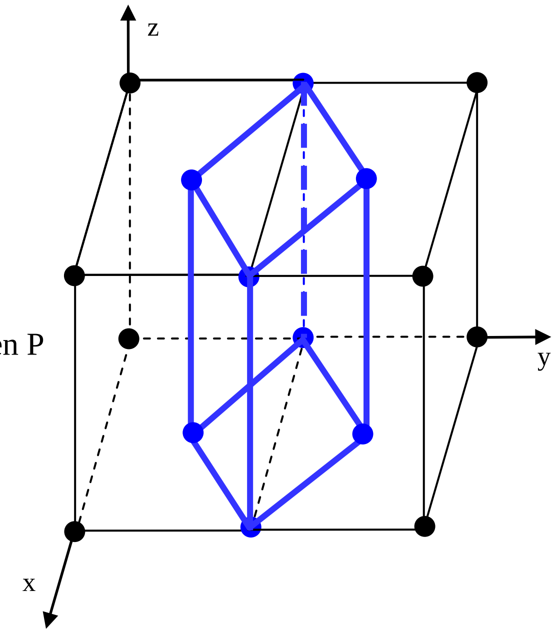
SOLUTION

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√2/2 et c'= c : maille en gras) comme le montre la figure suivante :

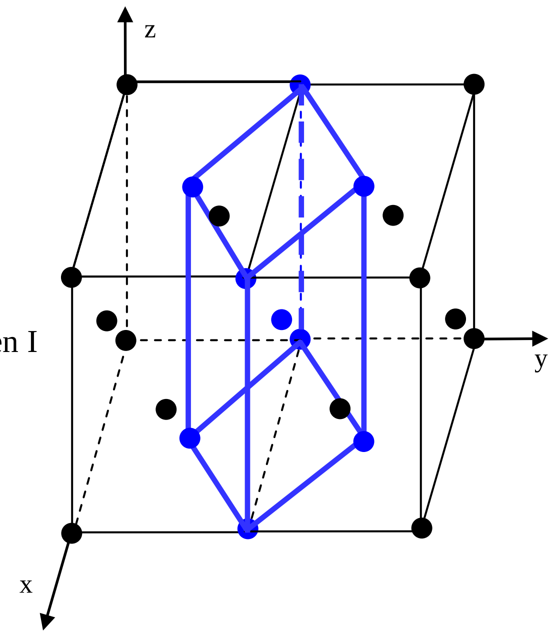
Transformation d'un réseau quadratique C en P



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√2/2 et c'=c : maille en gras) comme le montre la figure suivante :

Transformation d'un réseau quadratique F en I

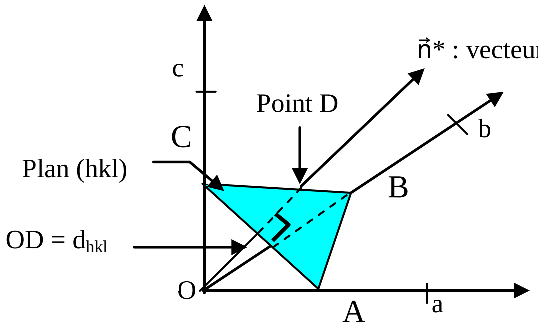


IV- RELATIONS ENTRE LES RESEAUX DIRECT ET RECIPROQUE :

1) Monter 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 $\vec{n}^*.\,\vec{AB}$ et $\vec{n}^*.\,\vec{AC}$:

$\vec{AB} = \vec{AO} + \vec{OB} = -\vec{OA} + \vec{OB} = -\vec{a}/h + \vec{b}/k$

$\Rightarrow \vec{n}^*.\,\vec{AB} = (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \times (-\vec{a}/h + \vec{b}/k)$

$= -\vec{a}^*\vec{a} + (h/k)\vec{a}^*\vec{b} - (k/h)\,\vec{b}^*\vec{a} + \vec{b}^*\vec{b} - (l/h)\,\vec{c}^*\vec{a} + (l/k)\,\vec{c}^*\vec{b}$

$= -1+0+0+1-0+0 = 0$

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

De même :

$\vec{AC} = \vec{AO} + \vec{OC} = -\vec{OA} + \vec{OC} = -\vec{a}/h + \vec{c}/l$

$\Rightarrow \vec{n}^*.\,\vec{AC} = (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \times (-\vec{a}/h + \vec{c}/l)$

$= -\vec{a}^*\vec{a} + (h/l)\vec{a}^*\vec{c} - (k/h)\,\vec{b}^*\vec{a} + (k/l)\,\vec{b}^*\vec{c} - (l/h)\,\vec{c}^*\vec{a} + \vec{c}^*\vec{c}$

$= -1+0-0+0-0+1 = 0$

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

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

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

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 :

$\vec{OA}.\vec{n}^* = |\vec{OA}| \times |\vec{n}^*| \times \cos(\vec{OA},\vec{n}^*) = |\vec{OA}| \times \cos(\vec{OA},\vec{n}^*) \times |\vec{n}^*|$

$= (\text{projection de } \vec{OA}/\vec{n}^*) \times |\vec{n}^*| = OD \times |\vec{n}^*|$ or $OD = d_{hkl} \Rightarrow$

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

D'autre part,

$\vec{OA}.\vec{n}^* = (\vec{a}/h) \times (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*)$

$= \vec{a}\vec{a}^* + (k/h)\vec{a}\vec{b}^* + (l/h)\vec{a}\vec{c}^*$

$= 1+0+0$ soit :

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

(1) et (2) $\Rightarrow$

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

soit :

$$\boxed{d_{hkl} = 1/n^*_{hkl}}$$

3) Déterminer, en utilisant le réseau réciproque, l'expression de la distance inter-réticulaire d'une famille donnée en fonction des paramètres des réseaux orthorhombique, quadratique et cubique.

SOLUTION

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

$$d_{hkl} . n^*_{hkl} = 1 \Rightarrow d_{hkl} = 1/n^*_{hkl}$$

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

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

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

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 :

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

soit :

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

Dans le cas du système quadratique :

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

soit :

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

Dans le cas du système cubique :

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

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

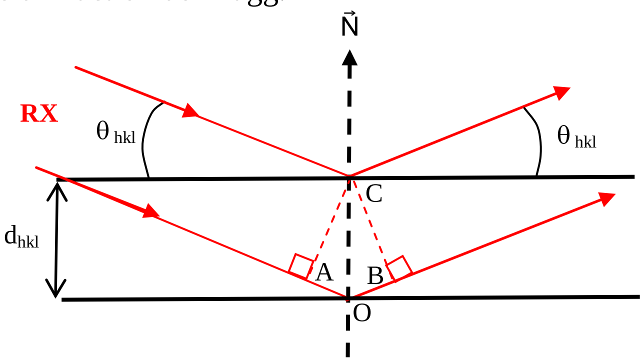
soit :

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

V- DIFFRACTION DES RAYONS X :

1) Démontrer la relation de diffraction de Bragg.

SOLUTION



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

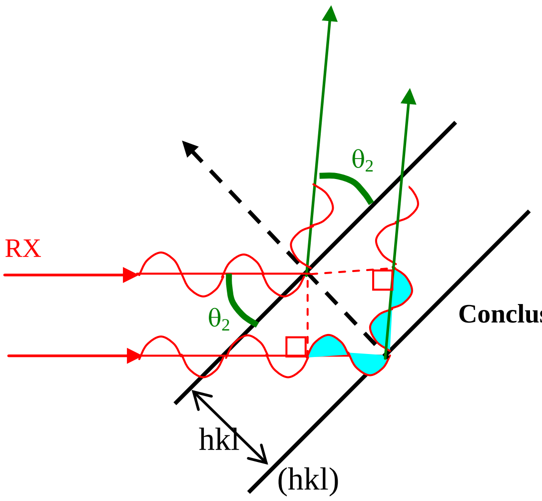
$$\delta = AO + OB = d_{hkl} \sin\theta_{hkl} + d_{hkl} \sin\theta_{hkl} = 2\, d_{hkl} \sin\theta_{hkl}.$$

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

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

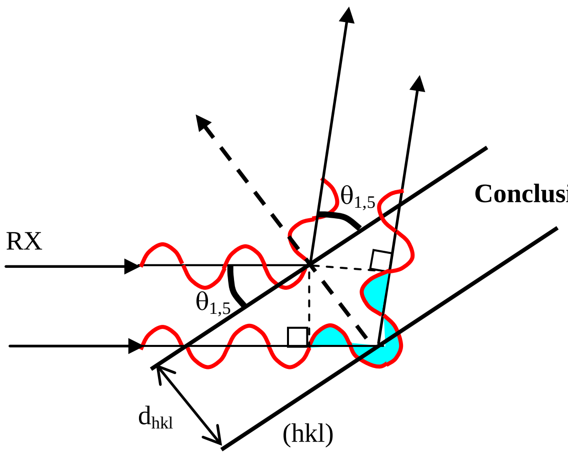
n (entier) étant l'ordre de la réflexion.

2) Représentation de la figure de diffraction avec une différence de marche $\delta = 2\lambda$. Conclure.



Conclusion : dans ce cas l'interférence des ondes est constructive ⇒ diffraction

3) Représentation de la figure de diffraction avec une différence de marche **$\delta = 1{,}5\ \lambda$**.

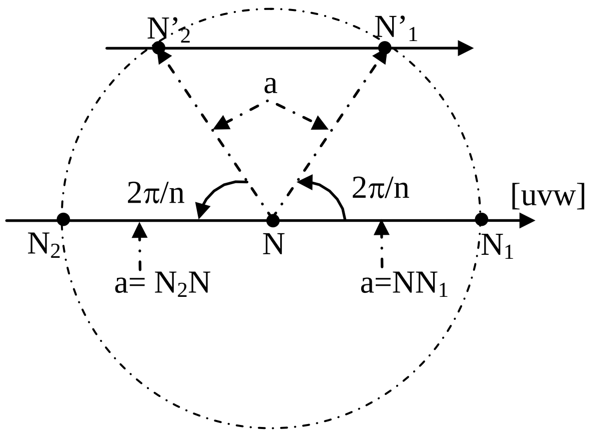


Conclusion : dans ce cas l'interférence des ondes est destructive ⇒ pas de diffraction

VI- SYMETRIE CRISTALLINE :

1) Montrer que les seuls ordres possibles pour les axes directs (ou inverses) sont les ordres 1, 2, 3, 4 et 6.

SOLUTION



Considérons un axe C_n perpendiculaire au plan de la figure et traversant le nœud N, ce dernier faisant partie d'une rangée réticulaire [uvw] de paramètre (ou période) a. Les nœuds N'_1 et N_2 sont respectivement les images par l'axe C_n des nœuds N_1 et N'_2 (N_1 et N_2 appartiennent à la rangée [uvw] et sont symétriques par rapport au nœud N). Les nœuds N'_1et N'_2, ayant le même écartement par rapport à la rangée contenant N_1et N_2, se trouvent alors sur une rangée équivalente à la rangée passant par N_1 et N_2 (rangée [uvw]) et de ce fait elle lui est parallèle. Il en résulte que :

$$N'_1N'_2 = m\,a \quad (1)$$

avec m nombre entier positif, négatif ou nul selon que l'angle $2\pi/n$ est aigu, obtus ou nul.

D'autre part, le triangle $NN'_1N'_2$ nous permet d'écrire que :

$(N'_1N'_2)/2 = a\cos(2\pi/n)$ soit :

$$N'_1N'_2 = 2a\cos(2\pi/n) \quad (2)$$

(1) et (2) $\Rightarrow$

$$\cos(2\pi/n) = m/2$$

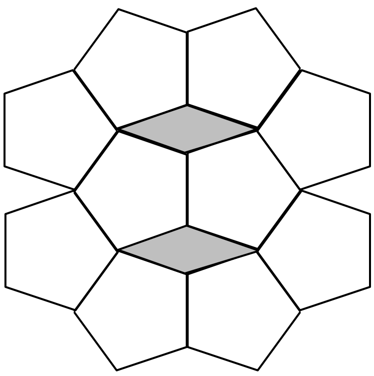
$\Rightarrow$

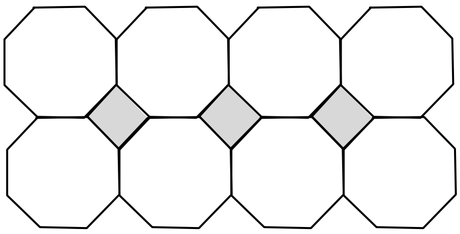
$$-1 \leq m/2 \leq +1 \quad \Rightarrow \quad -2 \leq m \leq +2$$

- si $m = -2$ $\Rightarrow$ $\cos 2\pi/n = -1$ $\Rightarrow$ $2\pi/n = \pi = 2\pi/2$ $\Rightarrow$ $n = 2$
- si $m = -1$ $\Rightarrow$ $\cos 2\pi/n = -1/2$ $\Rightarrow$ $2\pi/n = 2\pi/3$ $\Rightarrow$ $n = 3$
- si $m = 0$ $\Rightarrow$ $\cos 2\pi/n = 0$ $\Rightarrow$ $2\pi/n = \pi/2 = 2\pi/4$ $\Rightarrow$ $n = 4$
- si $m = 1$ $\Rightarrow$ $\cos 2\pi/n = 1/2$ $\Rightarrow$ $2\pi/n = \pi/3 = 2\pi/6$ $\Rightarrow$ $n = 6$
- si $m = +2$ $\Rightarrow$ $\cos 2\pi/n = 1$ $\Rightarrow$ $2\pi/n = 2\pi = 2\pi/1$ $\Rightarrow$ $n = 1$

Les axes d'ordre 2, 3, 4 et 6 sont donc les seuls axes compatibles avec la périodicité d'un réseau cristallin.

L'existence des seuls axes 2, 3, 4 et 6 peut également s'expliquer en considérant les figures suivantes qui représentent la juxtaposition de mailles formant un réseau plan hypothétique. Comme on le sait, il ne peut exister de vide entre ces mailles, et l'existence d'axes d'ordre 5 ou supérieur à 6 dans ces mailles implique nécessairement l'existence de vides (parties en gris sur les figures suivantes). Le fait qu'il soit impossible de couvrir un plan en juxtaposant des pentagones réguliers ou des polygones réguliers à plus de 6 côtés, sans laisser de vide, confirme donc l'absence de ces éléments de symétrie dans le réseau cristallin.



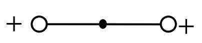
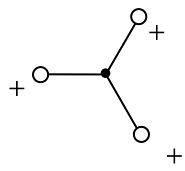
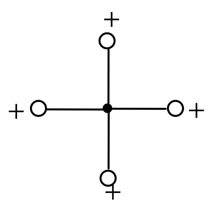


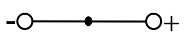
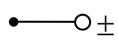
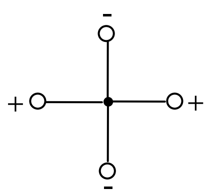
2) Donner les positions équivalentes à une position atomique (x,y,z) si celle-ci subit l'action de l'un des axes de symétrie 2, 3, 4, $\bar{1}$, $\bar{2}$ et $\bar{4}$, ces derniers sont supposés être orientés suivant l'axe Oz :

Rappel :

- Un axe de rotation d'ordre n fait coïncider le cristal avec lui-même après une rotation, dans le sens trigonométrique, d'angle $2\pi/n$, n est un nombre entier positif.
- Un axe de rotation-inversion (dite aussi roto-inversion ou inversion rotatoire) fait coïncider le cristal avec lui-même après une rotation d'angle $2\pi/n$ autour de l'axe, dans le sens trigonométrique, suivie d'une symétrie (ou inversion) par rapport à un point situé sur cet axe.

n	Positions générées par les axes 2, 4, -1, -2 et –4 (l'axe d'ordre n est l'axe Oz et le centre d'inversion pour les axes inverses est situé en (0,0,0))			
2	(x,y,z)	($\bar{x}$,$\bar{y}$,z)		
3	(x,y,z)	($\bar{y}$,x-y,z)	(y-x, $\bar{x}$,z)	
4	(x,y,z)	($\bar{y}$,x,z)	($\bar{x}$,$\bar{y}$,z)	(y,$\bar{x}$,z)
$\bar{1}$ = i	(x,y,z)	($\bar{x}$,$\bar{y}$,$\bar{z}$)		
$\bar{2}$ = m	(x,y,z)	(x,y,$\bar{z}$)		
$\bar{4}$	(x,y,z)	(y,$\bar{x}$,$\bar{z}$)	($\bar{x}$,$\bar{y}$,z)	($\bar{y}$,x,$\bar{z}$)

axes	2	3	4
schémas des positions équivalentes			

axes	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{4}$
Positions équivalentes			

3) Démontrer les propos suivants :

a- L'action de 2/m est une inversion.

L'action sur la position (x,y,z) d'un axe 2 orienté suivant Oz suivie de l'action d'un miroir perpendiculaire à l'axe 2 s'écrit comme suit :

$(x,y,z) \xrightarrow{2//Oz} (\bar{x},\bar{y},z) \xrightarrow{m \perp Oz} (\bar{x},\bar{y},\bar{z})$

L'action de 2/m sur la position (x,y,z) est alors :

$(x,y,z) \xrightarrow{2/m} (\bar{x},\bar{y},\bar{z}) \Rightarrow$ **2/m ≡ i (centre d'inversion)**

b- L'intersection de trois miroirs perpendiculaires 2 à 2 est un centre d'inversion.

Si m_1= (yOz), m_2= (xOz) et m_3= (xOy) , on peut écrire :

$(x,y,z) \xrightarrow{m_1} (\bar{x}, y,z) \xrightarrow{m_2} (\bar{x},\bar{y},z) \xrightarrow{m_3} (\bar{x},\bar{y},\bar{z})$

$\Rightarrow$ **$m_1 \cap m_2 \cap m_3$ = i (centre d'inversion) puisque :**

$(x,y,z) \xrightarrow{\text{i en } (0,0,0)} (\bar{x},\bar{y},\bar{z})$

c- L'intersection de deux miroirs perpendiculaires est un axe d'ordre 2. Selon ce propos comment pourra-t-on noter le groupe ponctuel orthorhombique mm2 ?

Si m_1= (xOz) et m_2= (yOz) ($m_1 \cap m_2$ = Oz) , on peut écrire :

$(x,y,z) \xrightarrow{m_1} (x,\bar{y},z) \xrightarrow{m_2} (\bar{x},\bar{y},z) \Rightarrow$ **Oz (= $m_1 \cap m_2$) = axe d'ordre 2 puisque :**

$(x,y,z) \xrightarrow{2//Oz} (\bar{x},\bar{y},z)$

Dans le groupe ponctuel orthorhombique mm2, l'axe 2 est l'axe Oz. Cet axe résulte de l'intersection des miroirs perpendiculaires (yOz) et (xOz), le groupe ponctuel orthorhombique mm2 peut donc être noté de façon abrégée par mm.

d- Si dans un plan existent n axes d'ordre 2 faisant entre eux des angles de π/n alors l'axe perpendiculaire au plan contenant ces axes d'ordre 2 est un axe d'ordre n (on prendra n=2).

Si Ox = 2 et Oy = 2 (soit (xOy) contenant 2 axes d'ordre 2), on peut écrire :

$(x,y,z) \xrightarrow{2//Ox} (x,\bar{y}, \bar{z}) \xrightarrow{2//Oy} (\bar{x},\bar{y}, z)$

Or $(x,y,z) \xrightarrow{2//Oz} (\bar{x},\bar{y}, z)$

$\Rightarrow$ **[Ox = 2 (Ox ∈(xOy)) + Oy = 2 (Oy∈(xOy))] ≡ Oz (⊥(xOy)) = axe d'ordre 2**

<u>**NB**</u> : voir remarque de l'exercice 5.

4) Tous les axes de réflexion rotatoire sont équivalents à un axe de symétrie directe ou inverse ou à une combinaison de ces axes. A quoi correspondent donc les axes *1', 2', 3', 4' et 6'*.

Rappel :

Un axe de réflexion rotatoire (dite aussi roto-réflexion ou rotation-réflexion) fait coïncider le cristal avec lui-même après une rotation d'angle 2π/n autour de l'axe n, suivie d'une symétrie (ou réflexion) par rapport à un plan perpendiculaire à cet axe.

Les axes 1', 2', 3' , 4' et 6' (axes de réflexion rotatoire) sont équivalents à :

- ***1' = m***,
- ***2' =*** $\bar{1}$,
- ***3' =*** $\bar{6}$ ***= 3/m***,
- ***4' =*** $\bar{4}$
- ***6' =*** $\bar{3}$ ***= 3+*** $\bar{1}$

5) A quel système correspond le groupe ponctuel 6/mmm ? Préciser l'orientation des éléments de symétrie de ce groupe.

Le symbole 6/mmm qui devrait être noté (6/m)(2/m)(2/m) signifie :

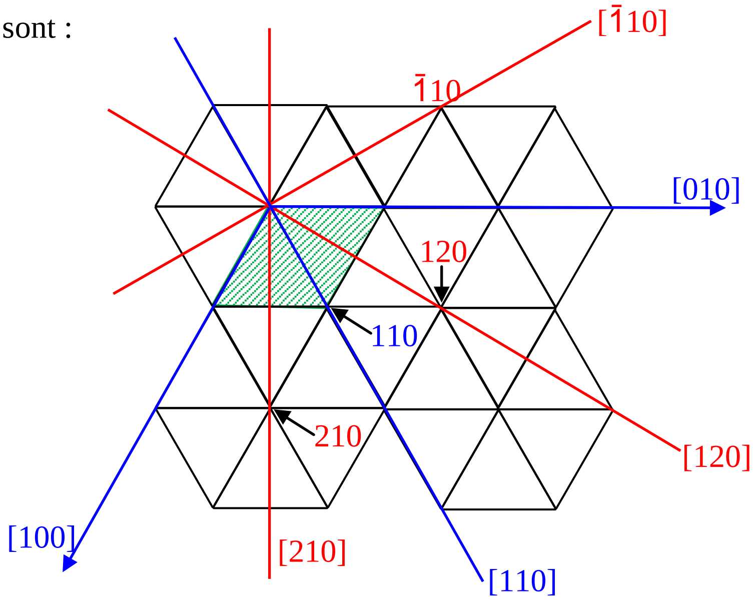
- le système est hexagonal puisque c'est le seul système qui contient l'axe 6.

Les directions principales du système hexagonal sont :

1ère direction : [001]

2ème direction : [100], [010] et [110]

3ème direction : [210], [120] et [$\bar{1}$10]



REMARQUE

☞ conformément à l'exercice 3) d-, comme le plan (xOy) contient 6 axes d'ordre 2 faisant entre eux des angles de π/6 (axes [100], [010], [110], [210], [120] et [$\bar{1}$10]) alors l'axe Oz (axe [001]) perpendiculaire au plan (xOy) est un axe d'ordre 6.

- suivant [001], on peut avoir un axe 6 (ou $\bar{6}$) et (ou) un miroir perpendiculaire.

- suivant chacun des axes [100], [010], [110], [210], [120] et [$\bar{1}$10], on peut avoir un axe 2 et (ou) un miroir perpendiculaire.

Conformément à ces critères, les éléments de symétrie du groupe P6/mmm sont comme suit :

- un axe d'ordre 6 parallèle à **c** ([001]) et le plan de réflexion (miroir) *m* est perpendiculaire à **c** (*m* = plan (xOy))
- 3 plans de réflexion respectivement perpendiculaires :

  à [100] (miroir *m* = plan contenant [120] et [001] , m ∈ famille réticulaire (2$\bar{1}$0))

  à [010] (miroir *m* = plan contenant [210] et [001] , m ∈ famille réticulaire (1$\bar{2}$0))

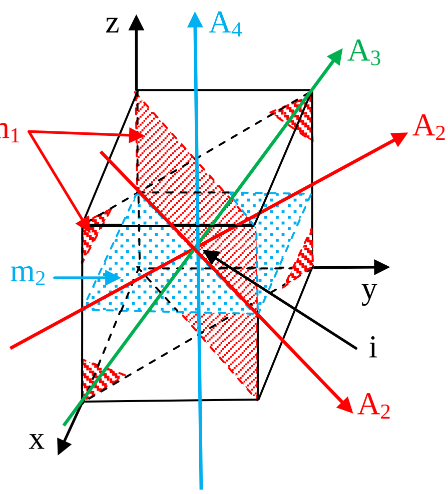
  à [110] (miroir *m* = plan contenant [$\bar{1}$10] et [001] , m ∈ famille réticulaire (110)).
- 3 plans de réflexion respectivement perpendiculaires :

  à [210] (miroir *m* = plan contenant [010] et [001] , m ∈ famille réticulaire (100))

  à [120] (miroir *m* = plan contenant [100] et [001] , m ∈ famille réticulaire (010))

  à [$\bar{1}$10] (miroir *m* = plan contenant [110] et [001] , m ∈ famille réticulaire (1$\bar{1}$0)).

6) Représenter sur une maille tous les éléments de symétrie du système cubique.



Eléments de symétrie dans le système cubique

Les éléments de symétrie se trouvant dans un cube sont :

a- un centre d'inversion I au centre du cube

b- 6 axes directs d'ordres 2 (axes binaires). Ces axes passent par les milieux de deux arêtes opposées diagonalement (directions cristallographiques : [110] et [1$\bar{1}$0], [101] et [10$\bar{1}$], [011] et [01$\bar{1}$]).

c- 4 axes directs d'ordres 3 (axes ternaires). Ces axes passent par deux sommets opposés diagonalement (directions cristallographiques : [111], [$\bar{1}$11], [1$\bar{1}$1] et [11$\bar{1}$]).

d- 3 axes directs d'ordres 4 (axes quaternaires). Ces axes passent par les centres de deux faces opposées (directions cristallographiques : [100], [010] et [001]).

REMARQUE

☞ Les plans de symétrie (miroirs) sont tous perpendiculaires aux axes de symétrie d'ordre pair (il n'y a donc pas de miroirs perpendiculaires aux axes 3).

Conformément à la remarque précédente :

a- il y a 6 axes directs d'ordres 2 ⇒ Il y a 6 plans de symétrie (miroirs de type m_1) perpendiculaires aux axes 2. Ces miroirs appartiennent aux familles réticulaires :

(110), $(1\bar{1}0)$, (101), $(10\bar{1})$, (011) et $(01\bar{1})$.

b- il y a 3 axes directs d'ordres 4 ⇒ Il y a 3 plans de symétrie (miroirs de type m_2) perpendiculaires aux axes 4. Ces miroirs appartiennent aux familles réticulaires :

(100), (010) et (001).

En résumé, le cube contient les éléments de symétrie suivants :

$$\mathbf{I}, 3A_4/m_2, 4A_3, 6A_2/m_1$$

Ces éléments forment la classe de symétrie du cube qu'on peut noter : **4/m 3 2/m (ou m3m)**.

VII- SYMETRIE CRISTALLINE (examen - session normale 2014-2015) :

1) A quel système cristallin correspond le groupe ponctuel (4/m)mm (justifier votre réponse) ? Dessiner les éléments de symétrie du groupe sur la maille représentant le système cristallin. Indexer les axes de symétrie et les miroirs.

Le symbole 4/mmm qui devrait être noté (4/m)(2/m)(2/m) signifie :

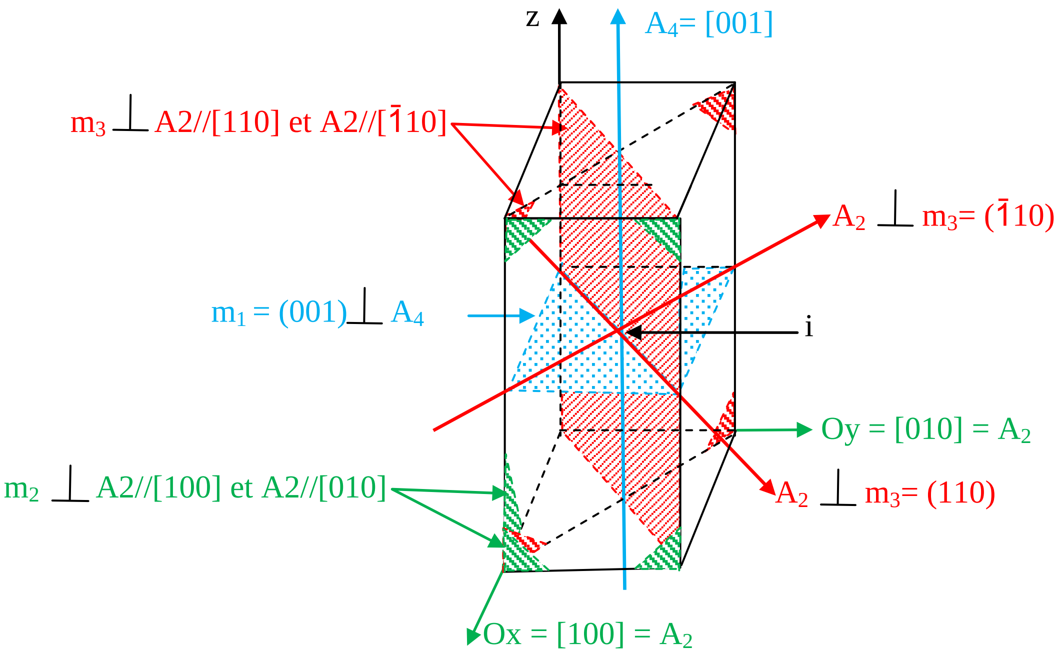
- le système peut être quadratique ou cubique dans ces deux systèmes l'axe 4 est orienté suivant la 1ère direction, mais comme l'axe 3 n'existe pas suivant la 2ème direction, alors le système est quadratique.

Les directions principales du système quadratique sont :

1ère direction : [001]

2ème direction : [100] et [010]

3ème direction : [110] et $[\bar{1}10]$



Eléments de symétrie dans le système quadratique

- suivant [001], on peut avoir un axe 4 (ou $\bar{4}$) et (ou) un miroir perpendiculaire.

- suivant chacun des axes [100], [010], [110] et [$\bar{1}$10], on peut avoir un axe 2 et (ou) un miroir perpendiculaire.

Conformément à ces critères, les éléments de symétrie du groupe P4/mmm sont comme suit :

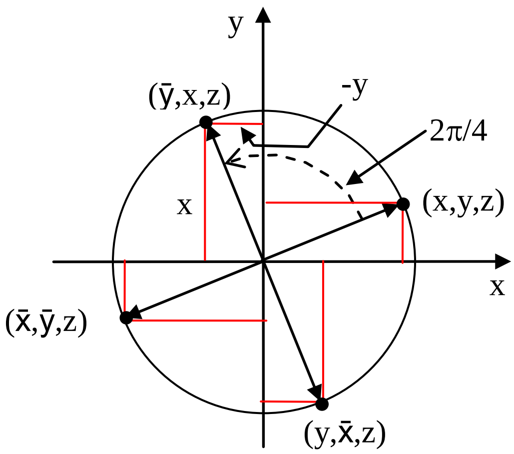
- un axe d'ordre 4 parallèle à **c** ([001]) et le plan de réflexion (miroir) *m* est perpendiculaire à **c** (*m* = plan (xOy) $\in$ famille réticulaire (001))
- 2 plans de réflexion respectivement perpendiculaires :
  - à axe 2 = [100] (miroir *m* $\in$ famille réticulaire (100))
  - à axe 2 = [010] (miroir *m* $\in$ famille réticulaire (010))
- 2 plans de réflexion respectivement perpendiculaires :
  - à axe 2 = [110] (miroir *m* $\in$ famille réticulaire (110)).
  - à axe 2 = [$\bar{1}$10] (miroir *m* $\in$ famille réticulaire ($\bar{1}$10)).

2) Donner les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) :

a. par l'axe 4 // Oz. Faire le schéma montrant ces images dans le plan xOy :

Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) par l'axe 4 // Oz s'obtiennent en faisant une rotation de $\pi/4$ autour de Oz. Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) sont alors :

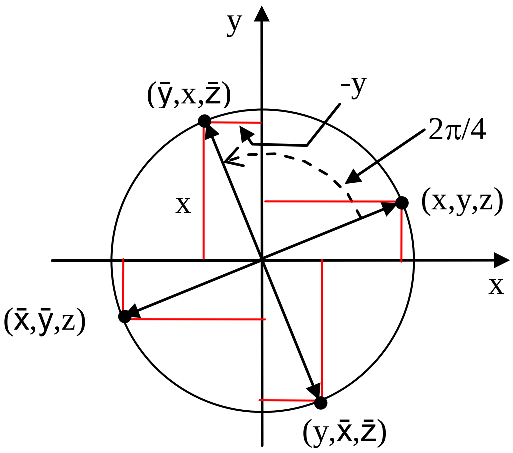
(x,y,z), $(\bar{y},x,z)$, $(\bar{x},\bar{y},z)$ et $(y,\bar{x},z)$



b. par l'axe $\bar{4}$ // Oz . Faire le schéma montrant ces images dans le plan xOy :

Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) par l'axe $\bar{4}$ // Oz s'obtiennent en faisant une rotation de π/4 autour de Oz suivie d'une inversion par rapport à l'origine de cet axe. Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) sont alors :

(x,y,z), $(\bar{y},x,\bar{z})$, $(\bar{x},\bar{y},z)$ et $(y,\bar{x},\bar{z})$



c. par l'axe 4_3 // Oz. Faire le schéma en perspective montrant ces images :

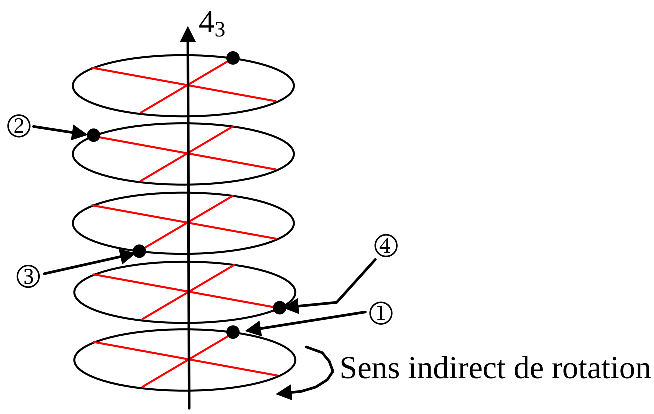
Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) par l'axe 4_3 // Oz s'obtiennent en faisant une rotation de π/4 autour de Oz suivie d'une translation de ¾ c. Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) sont alors :

① : (x,y,z),

② : $(\bar{y},x,z+ ¾)$,

③ : $(\bar{x},\bar{y},z+ ½)$ et

④ : $(y,\bar{x},z+¼)$



REMARQUE

☞ Si on classe les positions par ordre croissant de z (① : (x,y,z), ④ : (y,$\bar{x}$,z+ ¼) ③ : ($\bar{x}$,$\bar{y}$,z+ ½) et ② : ($\bar{y}$,x,z+ ¾)), on voit bien que le glissement suivant l'axe 4_3 se fait suivant une hélice gauche (Sens indirect de rotation).

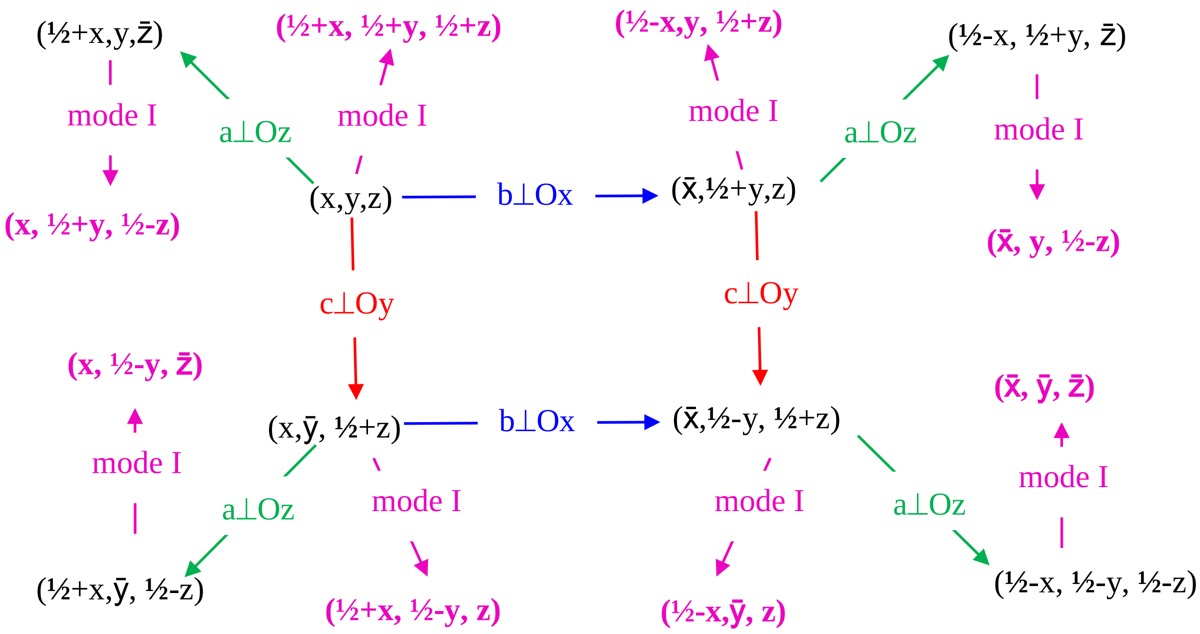
3) A quel système cristallin fait partie le groupe d'espace Ibca (justifier votre réponse). Donner les positions équivalentes à la position (x,y,z) dans ce groupe d'espace :

Le groupe d'espace Ibca est un groupe orthorhombique puisque sa classe de symétrie est mmm (il s'agit de la classe holoèdre du système orthorhombique : multiplicité 8 = multiplicité maximale).

La notation Ibca signifie que :

- **le réseau est centré**
- **il existe un plan de glissement b ⊥ Ox (glissement de b/2)**
- **il existe un plan de glissement c ⊥ Oy (glissement de c/2)**
- **il existe un plan de glissement a ⊥ Oz (glissement de a/2)**

Les positions équivalentes à la position (x,y,z) dans le groupe d'espace Ibca sont illustrées alors par le schéma suivant :



Les plans de glissements b, c et a conduisent donc à 8 positions équivalentes mais comme le mode de BRAVAIS est I, chaque position (x,y,z) possède une image en (x+1/2,y+1/2,z+1/2).

La position générale du groupe Ibca est donc de multiplicité 16 et ses coordonnées sont :

(x,y,z), (x,ȳ, ½+z), (x̄,½+y,z), (x̄,½-y, ½+z),

(½+x,y,z̄), (½+x,ȳ, ½-z), (½-x, ½+y,z̄), (½-x, ½-y, ½-z)

(½+x, ½+y, ½+z), (½+x, ½-y, z), (½-x,y, ½+z), (½-x,ȳ, z),

(x, ½+y, ½-z), (x, ½-y, z̄), (x̄, y, ½-z), (x̄, ȳ, z̄)

VIII- SYMETRIE CRISTALLINE (examen - session de rattrapage 2014-2015) :

1) Soient les groupes d'espace P2, $P2_1$, Pm, Pc, P2/m, $P2_1/m$, P2/c, $P2_1/c$, C2, Cm, Cc, C2/m, et C2/c.

a. à quel(s) système(s) cristallin(s) correspondent ces groupes (justifier votre réponse) ?

Les classes de symétrie des groupes d'espace ci-dessus sont 2, m et 2/m ; ces classes sont caractéristiques du système monoclinique.

b. regrouper ces groupes suivant le groupe ponctuel (ou classe de symétrie) auquel ils font partie en précisant si le groupe ponctuel est holoèdre, hémièdre ou tétartoèdre.

Les groupes d'espace P2/m, $P2_1/m$, P2/c, $P2_1/c$, C2/m, et C2/c ont pour classe de symétrie 2/m. Cette classe est holoèdre puisqu'elle donne 4 positions équivalentes (multiplicité maximale).

Les groupes d'espace Pm, Pc, Cm et Cc ont pour classe de symétrie m. Cette classe est hémièdre puisqu'elle ne donne que 2 positions équivalentes au lieu de 4 (multiplicité maximale/2).

Les groupes d'espace P2, $P2_1$ et C2 ont pour classe de symétrie 2. Cette classe est hémièdre puisqu'elle ne donne que 2 positions équivalentes au lieu de 4 (multiplicité maximale/2).

c. donner l'un des groupes d'espace dont la classe de symétrie est une classe de LAUE.

Une classe de symétrie de LAUE est une classe qui est centrosymétrique càd une classe où les positions atomiques sont reliées par un centre de symétrie. P2/m est l'un des groupes dont la classe est une classe de LAUE (les positions de ce groupe sont : (x,y,z), (x̄,y,z̄), (x,ȳ,z), (x̄,ȳ,z̄) et sont inverses 2 à 2).

d. quels sont parmi ces groupes d'espace ceux qui sont symmorphiques (justifier votre réponse).

Les groupes d'espace symmorphiques sont ceux qui ne contiennent aucun élément de symétrie avec glissement, il s'agit donc des groupes : P2, C2, Pm, Cm, P2/m, et C2/m.

e. donner les positions équivalentes à la position (x,y,z) dans le groupe d'espace C2/c.

$$\begin{tikzcd}
(\tfrac12+x, \tfrac12+y, z) & (x,y,z) \arrow[l, "\text{mode C}"'] \arrow[r, "2 // Oy"] \arrow[d, "c \perp Oy"] & (\bar{x},y,\bar{z}) \arrow[r, "\text{mode C}"] \arrow[d, "c \perp Oy"] & (\tfrac12 -x, \tfrac12 +y,\bar{z}) \\
(\tfrac12 +x, \tfrac12-y, \tfrac12+z) & (x,\bar{y}, \tfrac12+z) \arrow[l, "\text{mode C}"'] \arrow[r, "2 // Oy"] & (\bar{x},\bar{y},\tfrac12-z) \arrow[r, "\text{mode C}"] & (\tfrac12 -x, \tfrac12-y, \tfrac12-z)
\end{tikzcd}$$

Les éléments de symétrie 2 et c conduisent à 4 positions équivalentes mais comme le mode de BRAVAIS est C, chaque position (x,y,z) possède une image en (x+1/2,y+1/2,z).

La position générale du groupe C2/c est donc de multiplicité 8 et ses coordonnées sont :

(x,y,z), $(\bar{x},y,\bar{z})$, $(x,\bar{y}, \tfrac12 +z)$, $(\bar{x},\bar{y},\tfrac12-z)$

$(\tfrac12+x, \tfrac12+y,z)$, $(\tfrac12 -x, \tfrac12 +y,\bar{z})$, $(\tfrac12 +x, \tfrac12-y, \tfrac12+z)$, $(\tfrac12 -x, \tfrac12-y, \tfrac12-z)$

2) Donner les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) générées :

a. par l'axe 4_1 orienté suivant Oz. Faire le schéma montrant ces images :

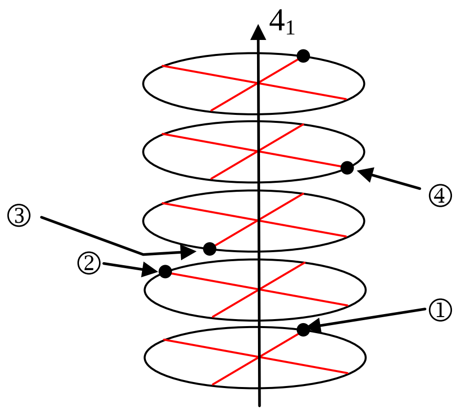
Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) par l'axe 4_1 // Oz s'obtiennent en faisant une rotation de $\pi/4$ autour de Oz suivie d'une translation de ¼ c. Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) sont alors :

① : (x,y,z),

② : $(\bar{y},x,z+ \tfrac14)$,

③ : $(\bar{x},\bar{y},z+ \tfrac12)$ et

④ : $(y,\bar{x},z+ \tfrac34)$



REMARQUE

☞ le glissement suivant l'axe 4_1 se fait suivant une hélice droite (Sens direct de rotation) contrairement au cas de l'axe 4_3 (voir question 2-c de l'exercice VII).

b. par l'axe 4_2 orienté suivant Oz. Faire le schéma montrant ces images.

Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) par l'axe 4_2 // Oz s'obtiennent en faisant une rotation de $\pi/4$ autour de Oz suivie d'une translation de ½ c. Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) sont alors :

① : (x,y,z),

② : ($\bar{y}$,x,z+ ½),

③ : ($\bar{x}$,$\bar{y}$,z) et

④ : (y,$\bar{x}$,z+½)