

## Travaux dirigés N°02

**Exercice 01** On rappelle,

- L'expression du facteur de structure pour un ensemble de N atomes :

$$F_{(hkl)} = \sum_{j=1}^N f_j \exp[2\pi i(h x_j + k y_j + l z_j)]$$

Où  $f_j$  est le facteur de diffusion atomique de l'atome  $j$  et  $(x_j, y_j, z_j)$  sont ses coordonnées réduites dans la maille.

- L'intensité d'un faisceau diffracté est proportionnelle au carré du module du facteur de structure :

$$I_{(hkl)} \propto |F_{(hkl)}|^2 = F_{(hkl)} \cdot F_{(hkl)}^*$$

1. Établir une relation entre  $F_{(hkl)}$  et son complexe-conjugué  $F_{(hkl)}^*$  et montrer la loi de Friedel :

$$I_{(hkl)} = I_{(\bar{h} \bar{k} \bar{l})}$$

2. Établir les conditions d'extinction dues au mode de réseau de Bravais.

### Exercice 02

La présence de miroirs avec glissement ou d'axes hélicoïdaux dans le groupe d'espace d'un cristal se traduit en diffraction des rayons X par l'extinction de certaines raies de diffraction. Ces extinctions sont dites systématiques. Dans cet exercice, nous voulons établir les conditions sur les indices  $h, k$  et  $l$  qui définissent les extinctions systématiques dues aux éléments de symétrie.

1. Plan de glissement de type  $c \perp \vec{a}$ .
2. Plan de glissement de type  $a \perp \vec{c}$ .
3. Axe hélicoïdal de type  $2_1 \parallel \vec{c}$ .
4. Axe hélicoïdal de type  $4_2 \parallel \vec{c}$ .

### Exercice 03

Le chlorure de Césium (CsCl) cristallise dans un système cubique, tel que :



1. Dessiner la maille et déduire le mode de réseau de Bravais.
2. Déterminer le facteur de structure  $F_{hkl}$ .
3. Déduire les conditions d'extinction systématique.

### Exercice 04

1. Calculer le facteur de structure  $F_{hkl}$  pour un alliage Or-Cuivre de composition chimique  $Cu_3Au$  de structure cubique tel que :

Au : occupent les sommets du cube.

Cu : occupent les centres des six (06) faces.

2. Discuter sa valeur selon la parité des indices hkl.

### Exercice 05

Le phosphore d'indium (**InP**) et l'arséniure de gallium (**GaAs**) sont des composés isostructuraux.

Pourtant leurs diagrammes de diffraction de poudres respectifs ne présentent pas la même succession de raies diffractées par les plans (hkl) :

<b>InP</b>	111	200	220	311	222	400
<b>GaAs</b>	111	-	220	311	-	400

1. Quel est le mode de réseau de InP et GaAs ?
2. Expliquer pourquoi certaines raies qui existent pour InP ne sont pas visibles pour GaAs.

Pour ce faire, on calculera le facteur de structure.

#### Données :

- Les coordonnées réduites des atomes dans les deux mailles :

$$\text{InP} \begin{cases} \text{In: } (0, 0, 0) \\ \text{P: } (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}) \end{cases} \quad \text{et} \quad \text{GaAs} \begin{cases} \text{Ga: } (0, 0, 0) \\ \text{As: } (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}) \end{cases}$$

- Les numéros atomiques Z des quatre éléments : Ga= 31, As= 33, In = 49 et P= 15.

### Exercice 06

Déterminer les groupes d'espace caractérisés par les extinctions systématiques suivantes :

- Monoclinique ; **hkl** :  $h + k = 2n + 1$ , **h0l** :  $l = 2n + 1$ .
- Orthorhombique ; **hkl** : pas d'extinction, **0kl** :  $l = 2n + 1$ , **h0l** :  $h = 2n+1$ , **00l** :  $l = 2n + 1$ .
- Tétragonal ; **hkl** : pas d'extinction, **00l** :  $l \neq 4n$ , **h00** :  $h \neq 2n$ .
- Trigonal ; classe de Laüe 3m ; **hkl** : pas d'extinction, **00l** :  $l \neq 3n$ .