

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) :

InP	111	200	220	311	222	400
GaAs	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** : $l \neq 3n$.