

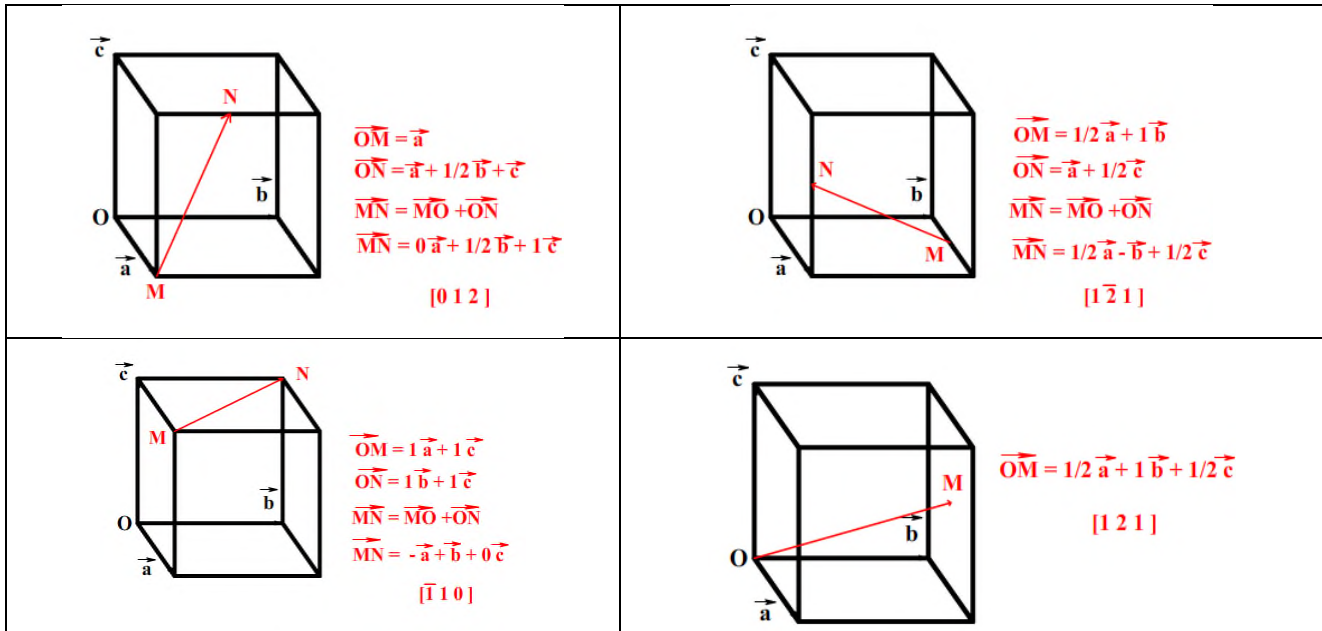


Chapitre 2 : Introduction et notions de base de la cristallographie

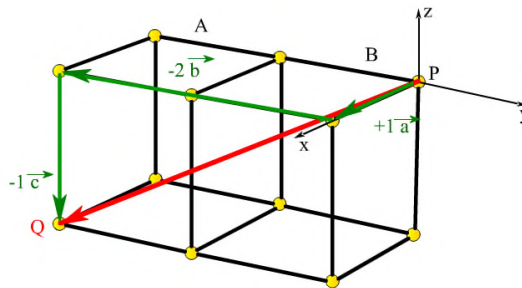
Modèle de cristal parfait

EX 1 : Rangées

1)

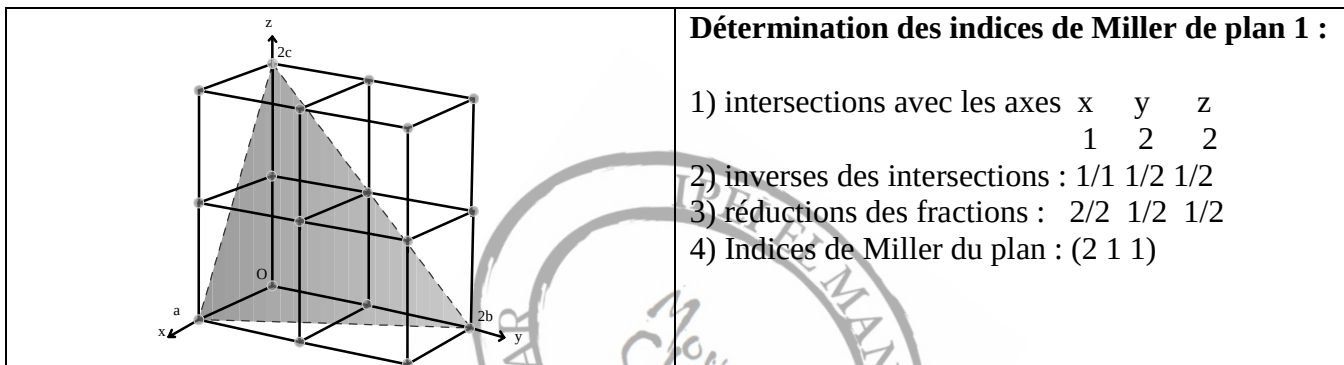


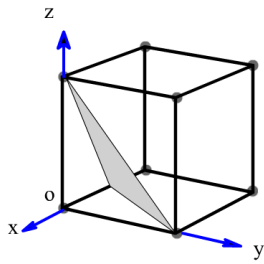
2) On choisira le nœud P de la deuxième maille comme origine du réseau et en effectuant le parcours vectoriel plus une fois a, moins deux fois b, moins une fois c, on arrive au nœud extrémité Q. La direction $[1\bar{2}1]$ est la direction PQ mise en place dans la maille considérée.



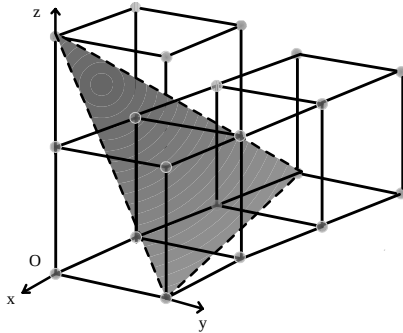
EX 2. Plans réticulaires

1)

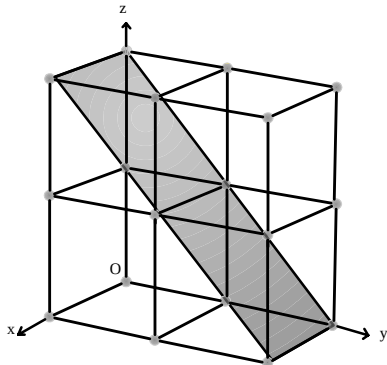


**Détermination des indices de Miller de plan 2 :**

- 1) intersections avec les axes x y z
 $-1/2$ 1 1
- 2) inverses des intersections : -2 $1/1$ $1/1$
- 3) réductions des fractions : $-2/1$ $1/1$ $1/1$
- 4) Indices de Miller du plan : $(\bar{2} \ 1 \ 1)$

**Détermination des indices de Miller de plan 3 :**

- 1) intersections avec les axes x y z
 -3 1 2
- 2) inverses des intersections : $-1/3$ $1/1$ $1/2$
- 3) réductions des fractions : $-2/6$ $6/6$ $3/6$
- 4) Indices de Miller du plan : $(\bar{2} \ 6 \ 3)$

**Détermination des indices de Miller de plan 4 :**

- 1) intersections avec les axes x y z
 ∞ 2 2
- 2) inverses des intersections : 0 $1/2$ $1/2$
- 3) réductions des fractions : $0/2$ $1/2$ $1/2$
- 4) Indices de Miller du plan : $(0 \ 1 \ 1)$

Remarque : les plans que nous avons dessinés ne sont pas forcément les premiers plans de la famille (hkl) après l'origine.

Pour trouver le premier plan après l'origine, il suffit de chercher les inverses de hkl.

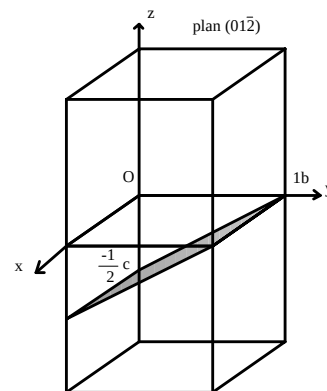
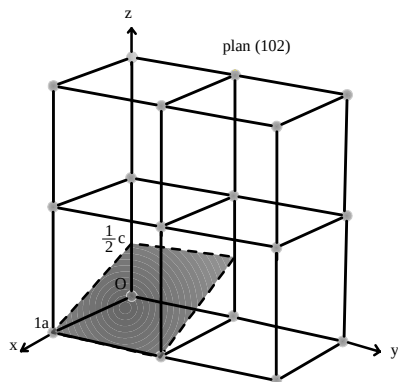
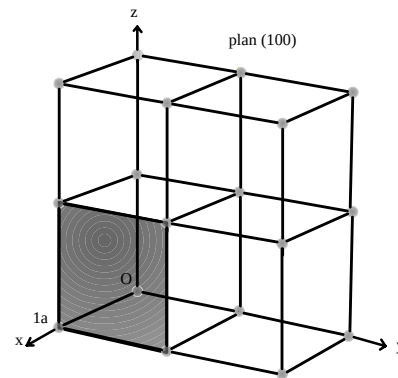
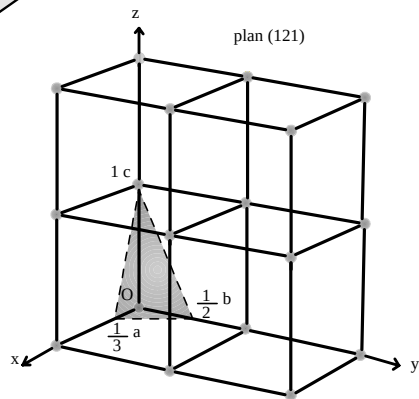
Par exemple pour les plans 1 et 2 :

hkl	Le premier plan coupe l'axe des x en	Le premier plan coupe l'axe des y en	Le premier plan coupe l'axe des z en
211	1/2	1	1
$\bar{2}11$	-1/2	1	1

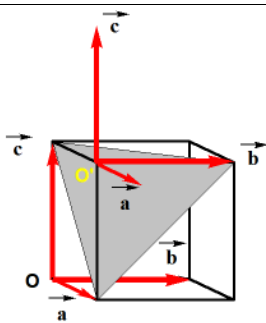
Voir question 2)

2) Dans cette question, le plus simple est de dessiner le premier plan après l'origine.

Plan	hkl	Le premier plan coupe l'axe des x en	Le premier plan coupe l'axe des y en	Le premier plan coupe l'axe des z en
1	3 2 1	1/3	1/2	1
2	1 0 0	1	∞	∞
3	1 0 2	1	∞	1/2
4	0 1 $\bar{2}$	∞	1	-1/2

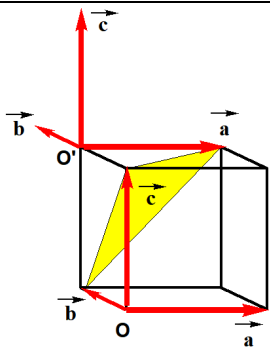


3)



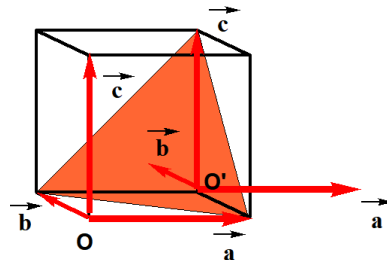
Un changement d'origine O en O' permet de déterminer l'intersection du plan avec les axes O'x, O'y et O'z

- 1) intersections avec les axes $\begin{matrix} x & y & z \\ -1 & 1 & -1 \end{matrix}$
- 2) inverses des intersections : $\begin{matrix} -1 & 1 & -1 \end{matrix}$
- 3) réductions des fractions : $\begin{matrix} -1 & 1 & -1 \end{matrix}$
- 4) Indices de Miller du plan : $(\bar{1} \ 1 \ \bar{1})$



Un changement d'origine O en O' permet de déterminer l'intersection du plan avec les axes O'x, O'y et O'z

- 1) intersections avec les axes $\begin{matrix} x & y & z \\ 1 & -1 & -1 \end{matrix}$
- 2) inverses des intersections : $\begin{matrix} 1 & -1 & -1 \end{matrix}$
- 3) réductions des fractions : $\begin{matrix} 1 & -1 & -1 \end{matrix}$
- 4) Indices de Miller du plan : $(1 \ \bar{1} \ \bar{1})$

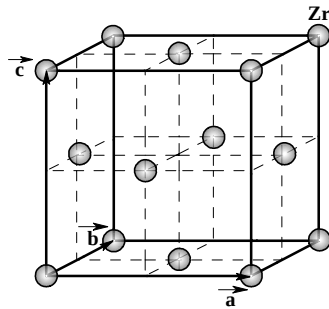


Un changement d'origine O en O' permet de déterminer l'intersection du plan avec les axes O'x, O'y et O'z

- 1) intersections avec les axes $\begin{matrix} x & y & z \\ -1 & -1 & 1 \end{matrix}$
- 2) inverses des intersections : $\begin{matrix} -1 & -1 & 1 \end{matrix}$
- 3) réductions des fractions : $\begin{matrix} -1 & -1 & 1 \end{matrix}$
- 4) Indices de Miller du plan : $(\bar{1} \ \bar{1} \ 1)$

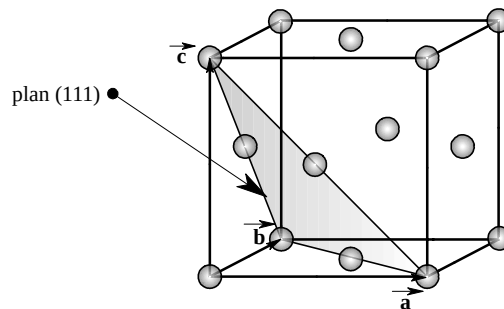
EX 3. Coordonnées réduites, mode de réseau, distance réticulaire

1)



2) Le mode de réseau du zirconium est F.

3)



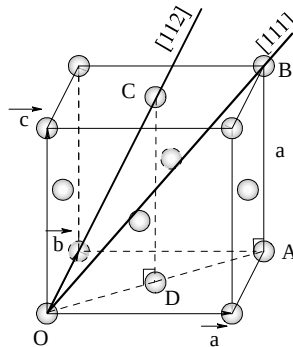
4) Pour la maille cubique on a :

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

Application numérique :

$$d_{111} = \frac{4,53}{\sqrt{3}} = 2,62 \text{ Å}.$$

5)



$$\begin{aligned} OA &= a\sqrt{2} \\ OD &= \frac{a\sqrt{2}}{2} \\ OB &= a\sqrt{3} \end{aligned}$$

Deux atomes consécutifs sur la rangée [111] sont séparés par la distance $OB = a \times \sqrt{3}$

Deux atomes consécutifs sur la rangée [112] sont séparés par la distance $OC = \sqrt{OD^2 + DC^2}$

$$OC = \sqrt{\left(a \times \frac{\sqrt{2}}{2}\right)^2 + a^2} = a \times \frac{\sqrt{6}}{2} = a \times \sqrt{\frac{3}{2}}$$

EX 4. Relation de Bragg

1) D'après la relation de Bragg : $2 \times d_{hkl} \times \sin(\theta_{hkl}) = n_D \times \lambda$

En plus pour un système cubique, le paramètre «a» de la maille est relié à la distance d_{hkl} par la relation :



$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

Des deux relations ci-dessus on déduit : $a = \frac{\lambda \times \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}{2 \times \sin(\theta_{hkl})}$

Application numérique :

$$a = \frac{1,94 \times \sqrt{3}}{2 \times \sin(19,63)} = 5 \text{ \AA}$$

2) Par définition, $\rho = \frac{n_{atom}(\underline{A}) \times M_{\underline{A}}}{N_A \times a^3}$

$$n_{atom}(\underline{A}) = \frac{8}{8} + \frac{6}{2} = 4$$

Application numérique :

$$\rho = \frac{4 \times 63,5}{6,02 \times 10^{23} \times (5 \times 10^{-8})^3} = 3,4 \text{ g.cm}^{-3}$$

3) Dans un cubique à faces centrées, les atomes se touchent selon la diagonale d'une face : $a \times \sqrt{2} = 4 \times R_A$

Il vient : $R_A = \frac{a \times \sqrt{2}}{4}$

Application numérique :

$$R_A = \frac{5 \times \sqrt{2}}{4} = 1,77 \text{ \AA}$$

EX 5. Masse volumique, coordinence, compacité.

1) Par définition, $\rho = \frac{n_{atom}(W) \times M_W}{N_A \times a^3}$

Il vient alors : $M_W = \frac{\rho \times N_A \times a^3}{n_{atom}(W)}$

$$n_{atom}(W) = 8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$$

Application numérique :

$$M_W = \frac{19,16 \times 6,02 \times 10^{23} \times (3,17 \times 10^{-8})^3}{2} = 183,71 \text{ g.mol}^{-1}$$

2) Pour un atome donné, la coordinence est le nombre de voisins les plus proches.

3) La coordinence de W est 8.

4) Par définition, la compacité s'écrit :

$$\zeta = \frac{n_{atom}(W) \times \frac{4}{3} \times \pi \times R_W^3}{a^3}$$

Application numérique :

$$\zeta = \frac{2 \times \frac{4}{3} \times \pi \times (137)^3}{(317)^3} = 0,68$$