

Séances 11 et 12 :

- 1) La formule de l'équidistance entre les familles de plans d'indice de Miller hkl pour le système cristallin triclinique est :

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{\frac{h^2}{a^2} \sin^2 \alpha + \frac{k^2}{b^2} \sin^2 \beta + \frac{l^2}{c^2} \sin^2 \gamma + 2 \frac{hk}{ab} (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) + 2 \frac{kl}{bc} (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) + 2 \frac{lh}{ca} (\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta)}{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}$$

La complexité de cette formule est due au fait qu'elle s'applique au système triclinique. Particularisez cette formule pour les systèmes monoclinique, orthorhombique, tétragonal, hexagonal et cubique.

$$\text{Monoclinique : } \frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} \sin^2 \gamma - 2 \frac{hk}{ab} \cos \gamma}{1 - \cos^2 \gamma}$$

$$\text{Orthorhombique : } \frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

$$\text{Rhomboédrique : } \frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{(h^2 + k^2 + l^2) \sin^2 \alpha + (2hk + kl + hl)(\cos^2 \alpha - \cos \alpha)}{a^2(1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha)}$$

$$\text{Hexagonal : } \frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4}{3} \frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

$$\text{Tétragonal : } \frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

$$\text{Cubique : } \frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$$

- 2) Vérifiez pour les 6 systèmes cristallins envisagés dans l'exercice précédent, en envisageant toutes les possibilités de permutations et de changements de signes des indices qui laissent d invariant, qu'on obtient le nombre et les indices de tous les plans équivalents correspondant à l'holoédrie associée à ce système.

Triclinique : 1 plan

Monoclinique : (hkl) et (-h-k-l)

Orthorhombique : (hkl), (-hkl), (h-kl), (hk-l), (-h-kl), (-hk-l), (h-k-l) et (-h-k-l)

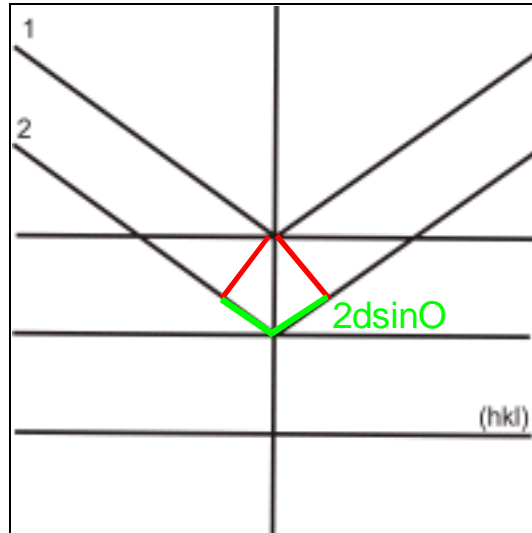
Rhomboédrique : (hkl), (-h-k-l), (hkl), (-h-l-k), (lkh), (-l-h-k), (lkh), (-l-k-h), (khl), (-k-h-l), (klh) et (-k-l-h)

Quadratique: 16 plans

Cubique: 48 plans.

Attention, pour le système hexagonal, il faudrait travailler avec le système à 4 indices que nous n'avons pas vu pour obtenir les 24 plans.

3) Sur le dessin ci-dessous, faites apparaître la longueur $2d \sin\theta$.



4) Que se passe-t-il lorsque la loi de Bragg est vérifiée ? Considérez un exemple où $d=2\text{\AA}$ et $\lambda=0.4\text{\AA}$.

$$N \cdot 0.4 = 2 \cdot 2 \cdot \sin\theta$$

5) Combien de réflexions peut-il y avoir dans ce cas ?

θ a comme valeur maximal 90°

pour $n=1, \theta=5.74^\circ$

$n=2, \theta=11.54^\circ$

$n=3, \theta=17.46^\circ$

$n=4, \theta=23.58^\circ$

$n=5, \theta=30^\circ$

$n=6, \theta=36.87^\circ$

$n=7, \theta=44.43^\circ$

$n=8, \theta=53.13^\circ$

$n=9, \theta=64.16^\circ$

$n=10, \theta=90^\circ$

Il peut donc y avoir 10 réflexions

6) Donnez les indices de Laue de toutes les réflexions possibles ainsi que les angles de Bragg correspondants.

$(hkl), (2h2k2l), (3h3k3l), (4h4k4l), (5h5k5l), (6h6k6l), (7h7k7l), (8h8k8l), (9h9k9l), (10h10k10l)$