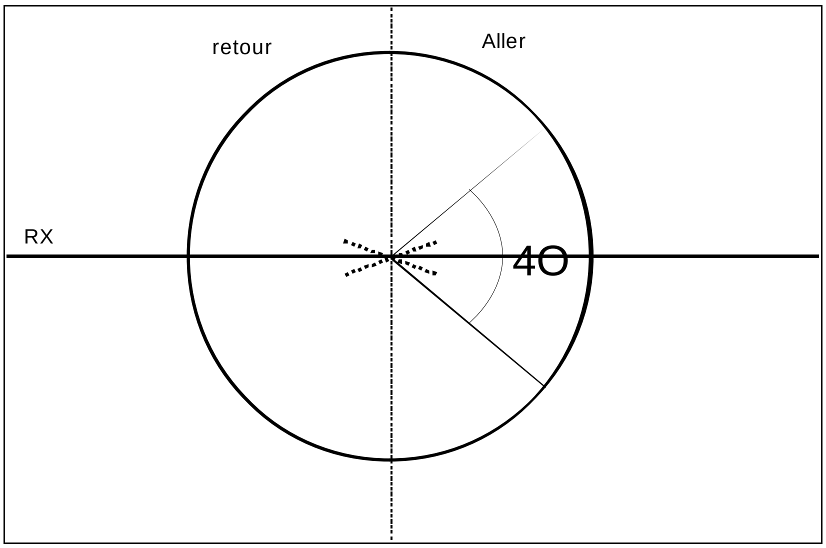
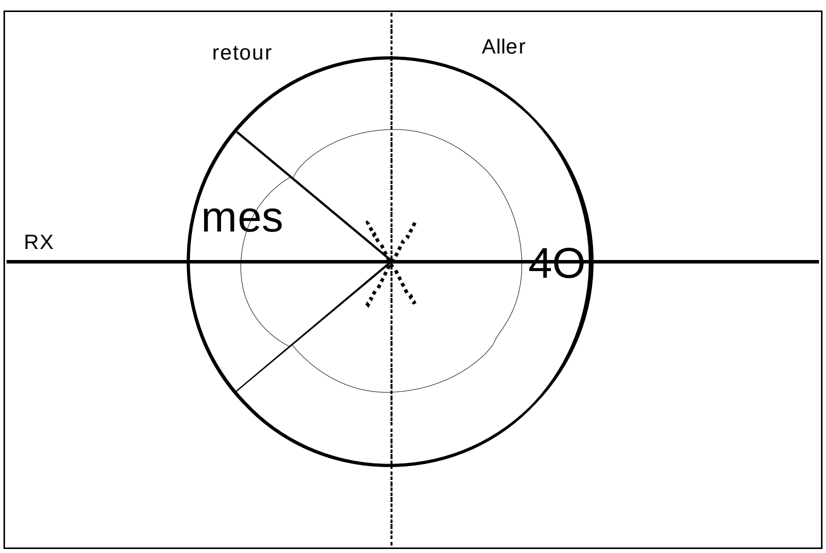
Séances 13, 14 et 15 :

1) Sur le schéma ci-dessous, deux familles de plans de mêmes indices {hkl}, remplissant les conditions de Bragg mais orientées différemment par rapport au faisceau incident, sont représentées. Construisez les rayons diffractés et exprimez l'angle entre ces deux faisceaux en terme de θ.

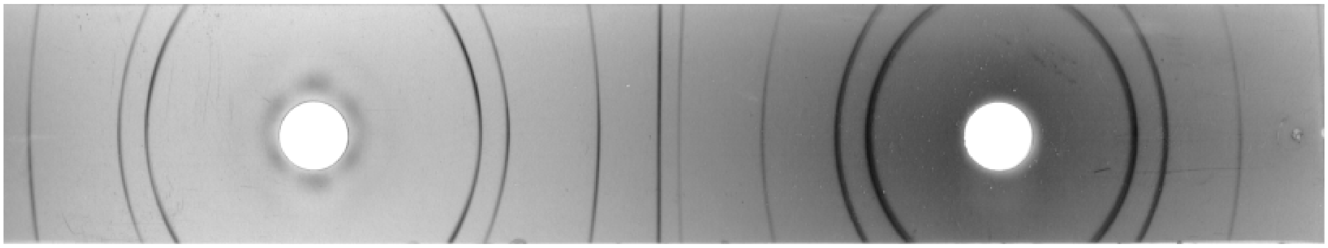


2) A partir de quel angle entre les familles de plans {hkl} et les rayons X aura-t-on des raies en retour dans la caméra de Debey-Sherrer. Exprimez, pour ces cas là, l'angle entre les deux faisceaux en terme de θ.

Lorsque θ vaut 45°, 4θ vaut 180°. Les raies retours apparaissent donc à partir de cette angles. 4θ=360-l'angles mesuré.



3) Sur le film ci-dessous, en tenant compte de l'existence d'anneaux directs et en retour, mesurez les angles des cônes de diffraction.



Remarque : les mesures sur un film photocopié sont très imprécises. Je vous donne ici les mesures que l'on obtenue sur le film directement.

On mesure en mm les largeurs des cônes de diffractions. On multiplie ces largeurspar 2 pour travailler en degrés. On calcul suivant les règles établies aux exercices précédents en fonction du type de raies (aller et retour).

4) Pour chacun des anneaux, calculez les d/n à partir de la formule de Bragg.

$\frac{d}{n} = \frac{\lambda}{2\sin\theta}$ avec λ la raie kα du cuivre 1.54Å.

5) Identifiez le minéral à l'aide des tables de référence. Remarque : on utilisera la méthode des trois raies les plus intenses pour faire l'identification.

Il s'agit du cuivre.

6) Le minéral que vous venez d'identifier cristallise dans le système cubique avec pour paramètre de réseau a=3.6150Å. En comparant les valeurs de d/n obtenues à partir de la loi de Bragg avec les valeurs de d/n obtenues à l'aide de la formule de l'équidistance, déterminez les indices de Laue de toutes les raies.

$$\frac{n^2}{d^2}a^2 = n^2h^2 + n^2k^2 + n^2h^2$$

mm	4O	O	d/n	n2h2+n2k2+n2l2	laues
43.28	86.56	21.64	2.088	3	111
50.41	100.83	25.21	1.808	4	200
74.1	148.2	37.05	1.278	8	220
89.89	179.78	44.95	1.09	11	311
81.13	197.74	49.43	1.0136	12	222
63.15	233.7	58.43	0.9038	16	400
43.6	272.8	68.2	0.8293	19	331
35.42	289.17	72.29	0.8083	20	420

7) A partir du facteur de structure, déterminez quelles raies seront absentes en fonction du type de réseau cubique.

$$F_{hkl} = \sum_i f_n e^{2\pi i(x_i h + y_i k + z_i l)}$$

Pour le système cubique simple, 1 atome en (000)

$$F_{hkl} = f_n e^{2\pi\pi^* 0} = f_n$$

Il n'y a donc pas de conditions d'existences sur hkl

Pour le système cubique centré, 1 atome en (000) et 1 atome en (½ ½ ½)

$$F_{hkl} = fn\left(1 + e^{\pi i(h+k+l)}\right)$$

Pour qu'il y aie diffraction, il faut des plans hkl d'indices de Laue de même parité.

Pour le système cubique à faces centrées, 1 atome en (000) et 3 atomes aux centres des faces (½ ½ 0) (0 ½ ½) (½ 0 ½).

$$F_{hkl} = f_n\left(1 + e^{\pi i(h+k)} + e^{\pi i(h+l)} + e^{\pi i(k+l)}\right)$$

Les indices de Laue des plans doivent être de même parités.

8) En fonction des raies présentes dans l'exercice 6, déterminez le type de réseau cubique de ce minéral.

Cubique faces centrées

9) On réalise une expérience de Debey-Scherrer sur une poudre de blende (minéral cubique) en utilisant un rayonnement X monochromatique de λ=1.5418Å (le périmètre de la chambre vaut 360mm). On obtient 8 anneaux de diffraction dont les d/n valent :

   3,12 ; 2,71 ; 1,91 ; 1,63 ; 1,35 ; 1,24 ; 1,10 ; 1,04

   a. Calculez en mm les diamètres angulaires de ces anneaux tels que mesurés directement sur le film.

d/n	O	mm
3.12	14.29	57.15
2.71	16.51	66.03
1.91	23.77	95.1

1.63	28.19	112.76
1.35	34.78	139.1
1.24	38.38	153.55
1.1	44.43	177.71
1.04	47.76	168.94

b. Parmi ces anneaux, combien y en a-t-il en retour ? Donnez leurs d/n

Il y a une seul raie en retour avec un d/n de 1.04

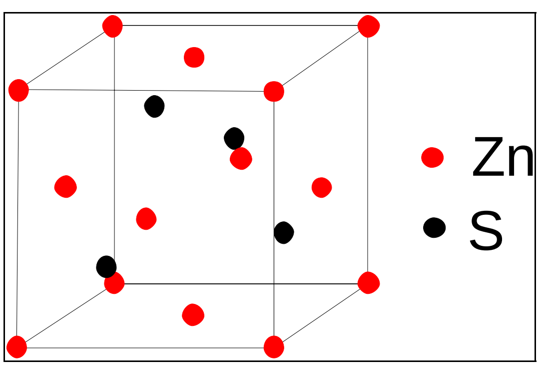
c. Recherchez les indices de Laue de chacun des 8 anneaux (a_{blende} =5,41Å)

d/n	n2h2+n2k2+n2l2	Laue
3.12	3	111
2.71	4	200
1.91	8	220
1.63	11	311
1.35	16	400
1.24	19	331
1.1	24	422
1.04	27	333

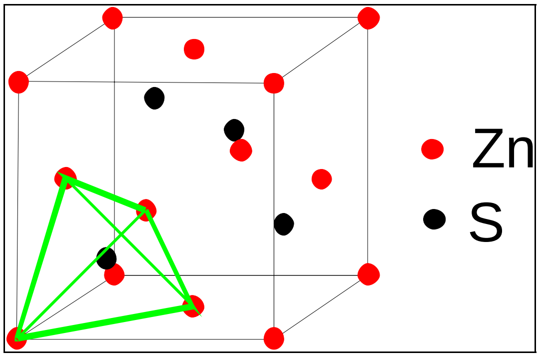
d. De cette succession d'indices de Laue, déduisez-en le mode de réseau auquel appartient la blende et expliquez

Tous les indices de Laue sont de même parité, c'est donc un cubique faces centrées.

e. Compte tenu du motif cristallin de la Blende (Zn en 000 et S en ¼¼¼), dessinez sa maille élémentaire.



f. Déterminez les polyèdres de coordinence de Zn et de S ainsi que leur coordinence



g. Calculez la masse volumique

$$\text{densité} = \frac{(4*65.39 + 4*32.066)*1.66054.10^{-27}}{5.41^3*10^{-30}} = 4088\text{kg/m}^3$$

h. Calculez la distance Zn-S

$$d_{c-c} = \sqrt{\left(\frac{5.41}{4}\right)^2 + \left(\frac{5.41}{4}\right)^2 + \left(\frac{5.41}{4}\right)^2} = 2.34\text{A}$$