

Exercice 1 :

Un diagramme de diffraction aux rayonnements X d'un cristal cubique utilisant la radiation $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$ a donné des raies correspondant aux angles suivants:

N° de la raie	1	2	3	4	5	6	7	8
θ°	21.8	25.4	37.2	45.4	47.8	58.8	68.6	72.7

1. Déterminer les indices h, k, l des plans produisant ces raies.
2. Identifier la structure de ce cristal.
3. Calculer le paramètre de la maille de ce réseau.

Exercice2 :

- 1) Etablir le facteur de structure du réseau CC
- 2) Trouver la condition pour que $F_{hkl} = 0$

Exercice3 :

L'énergie de cohésion à l'équilibre est : $U(r_0) = U_0$.

L'expression de cette énergie est de la forme :

$$U(r) = A \exp(r/r_0) - \frac{B}{r^2}$$

Exprimer les constantes A et B en fonction de r_0 et U_0

Bonne Chance

EX 1:
1) θ°

θ°	$\sin^2 \theta$	$\frac{4 \sin^2 \theta}{\lambda^2}$ (1)	N (2)	hkl	a (Å) (3)
21.8	0.1379	0.12346	3	111	3.5912
25.4	0.1840	0.13103	4	200	3.5902
37.2	0.3633	0.16165	8	220	3.6022
45.4	0.5070	0.18350	11	311	3.5866
47.8	0.5488	0.19236	12	222	3.6006
58.8	0.7316	0.2340	16	400	3.6008
68.6	0.8668	0.2620	19	331	3.6048
79.7	0.9115	0.3374	20	420	3.6067

$$\frac{4}{\lambda^2} = 1.16866 / \frac{N_2}{N_1} \times 1.33, \quad \frac{N_2}{N_1} \times 2 \neq 2.166$$

on a pour le système cubique:

$$d = \frac{a}{\sqrt{N}} = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} \rightarrow a_i = \frac{\lambda \sqrt{N_i}}{2 \sin \theta_i}$$

$$3) a_{\text{moy}} = \frac{\sum a_i}{n} = \frac{a + \dots + a_8}{8} = \boxed{3.5979 \text{ \AA}} \quad (1)$$

2) Le réseau est CFC (1)

Ex 9:

$$\text{on a: } F_{hkl} = \sum_{j=1}^s f_j e^{i2\pi(x_j h + y_j k + z_j l)}$$

$$s=2: \begin{cases} (0, 0, 0) \\ (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \end{cases} \quad \textcircled{1}$$

$$\text{d'où: } F_{hkl} = f_1 + f_2 e^{i\pi(h+k+l)} \quad / \quad f_1 = f_2 = f$$

$$\text{Alors: } \boxed{F_{hkl} = f(1 + e^{i\pi(h+k+l)})} \quad \textcircled{1}$$

est le facteur de structure du réseau CC.

$$F_{hkl} = 0 \text{ si } (1 + e^{i\pi(h+k+l)}) = 0 \quad \textcircled{1}$$

$$\text{d'où: } e^{i\pi(h+k+l)} = -1 \rightarrow \cos \pi(h+k+l) = -1$$

$$\text{Alors: } \pi(h+k+l) = (2n+1)\pi \quad / \quad n \in \mathbb{Z}$$

$$\text{d'où: } \boxed{h+k+l = 2n+1} \quad \textcircled{1}$$

la condition pour que $F_{hkl} = 0$ est
soit la somme des h, k, l est impair $\textcircled{1}$

EX 3:

on a: $U(r_0) = U_0$ et $U(r) = A e^{\frac{r}{r_0}} - \frac{B}{r^2}$

à l'équilibre: $\frac{dU(r)}{dr} \Big|_{r_0} = 0$ (1)

dér: $\frac{dU(r)}{dr} \Big|_{r_0} = \frac{A}{r_0} e^{\frac{r_0}{r_0}} + \frac{B}{r_0^3} = 0$

Alors: $\frac{A e}{r_0} = -\frac{B}{r_0^3} \rightarrow A = -\frac{B}{e r_0^2}$ (1)

et pour: $U(r_0) = U_0 \rightarrow -\frac{B e}{e r_0^2} - \frac{B}{r_0^2} = U_0$

d'où: $-\frac{2B}{r_0^2} = U_0 \rightarrow B = -\frac{1}{2} r_0^2 U_0$ (1)

et $A = \frac{r_0^2 U_0}{2e} = \frac{U_0}{2e}$ / $e = 2,71$ (1)

}