BENOSMANE Ali chimie fondamentale/Semestre 6/TP Cristalographie

Matricule	Note	Section	Groupe
232334059903	17.0	section 01	groupe 1
222234048805	18.0	section 01	groupe 1
232334057917	11.0	section 01	groupe 1
25034006320	10.0	section 01	groupe 1
232334054005	13.0	section 01	groupe 1
222234028315	11.0	section 01	groupe 1
2501405253	10.0	section 01	groupe 1
232334048219	12.5	section 01	groupe 1
222234053305	0.5	section 01	groupe 1
232334058319	12.5	section 01	groupe 1
212134001049	10.0	section 01	groupe 1
181834008610	12.0	section 01	groupe 1
232334017114	14.5	section 01	groupe 1
202034007660		section 01	groupe 1
222234009114	10.0	section 01	groupe 1
232334098508	10.0	section 01	groupe 1
232334005819	2.5	section 01	groupe 1
232334058910	10.0	section 01	groupe 1
191934002440		section 01	groupe 1
232334058405	10.0	section 01	groupe 1
212134009574	5.0	section 01	groupe 1
2598485795	11.5	section 01	groupe 1
222234010301	18.0	section 01	groupe 1
232334052509	11.0	section 01	groupe 1

BENOSMANE Ali chimie fondamentale/Semestre 6/ TD Cristalographie/groupe 1

Matricule	Note	Section	Groupe
232334059903	14.0	section 01	groupe 1
222234048805	14.0	section 01	groupe 1
232334057917	12.5	section 01	groupe 1
25034006320	14.0	section 01	groupe 1
232334054005	13.0	section 01	groupe 1
222234028315	12.0	section 01	groupe 1
2501405253	12.0	section 01	groupe 1
232334048219	12.5	section 01	groupe 1
222234053305	0.0	section 01	groupe 1
232334058319	14.0	section 01	groupe 1
212134001049	10.0	section 01	groupe 1
181834008610	13.0	section 01	groupe 1
232334017114	16.5	section 01	groupe 1
202034007660	0.0	section 01	groupe 1
222234009114	10.0	section 01	groupe 1
232334098508	12.0	section 01	groupe 1
232334005819	0.5	section 01	groupe 1
232334058910	11.0	section 01	groupe 1
191934002440	0.0	section 01	groupe 1
232334058405	12.5	section 01	groupe 1
212134009574	6.0	section 01	groupe 1
2598485795	12.0	section 01	groupe 1
222234010301	16.0	section 01	groupe 1
232334052509	11.5	section 01	groupe 1

BENOSMANE Ali chimie fondamentale/Semestre 6/Cristalographie/groupe 1

Matricule	Note	Absent	Section	Groupe
232334059903	9.5		section 01	groupe 1
222234048805	11.5		section 01	groupe 1
232334057917	5.0		section 01	groupe 1
25034006320	3.5		section 01	groupe 1
232334054005	5.5		section 01	groupe 1
222234028315	4.0		section 01	groupe 1
2501405253	3.5		section 01	groupe 1
232334048219	5.5		section 01	groupe 1
222234053305	3.0		section 01	groupe 1
232334058319	9.0		section 01	groupe 1
212134001049	4.5		section 01	groupe 1
181834008610	4.0		section 01	groupe 1
232334017114	12.5		section 01	groupe 1
202034007660			section 01	groupe 1
222234009114	2.5		section 01	groupe 1
232334098508	3.0		section 01	groupe 1
232334005819	3.0		section 01	groupe 1
232334058910	10.5		section 01	groupe 1
191934002440	5.0		section 01	groupe 1
232334058405	9.0		section 01	groupe 1
212134009574	6.0		section 01	groupe 1
2598485795	4.0		section 01	groupe 1
222234010301	17.5		section 01	groupe 1
232334052509	5.5		section 01	groupe 1

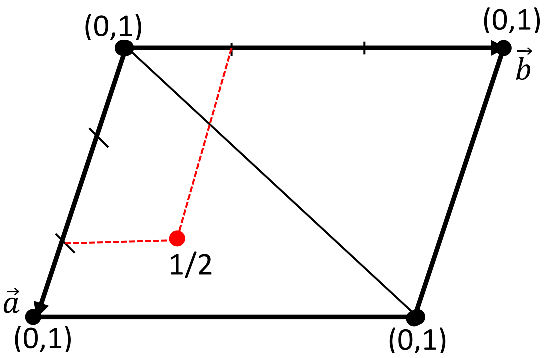
3ème année (Chimie fondamentale).

<u>Corrigé type de l' examen : Examen de: Cristallographie.</u>

<u>Solution01:</u> …….(06.00pts)

Le magnésium cristallise dans une maille hexagonale compacte (HC).

<u>1-</u> Représenter la projection de la maille élémentaire sur le plan (001) indiquer les coordonnées des atomes. **<u>01.00 pts</u>**



00.50

Coordonnées des atomes : 0.50

(0 0 0), (2/3 1/3 1/2)

<u>2-</u> Décrire les caractéristiques du réseau réciproque associé. **<u>03.00 pts</u>**

Une maille hexagonale : RD $\int_{\alpha=\beta=\frac{\pi}{2},\ \gamma=\frac{2\pi}{3}}^{a=b=c}$ et RR : $\int_{\alpha*=\beta*=\frac{\pi}{2},}^{a*=b*=c*}$ 00.50

La relation entre RD et RR est donnée :

$\vec{a}\,.\,\overrightarrow{a^*} = \vec{b}\,.\,\overrightarrow{b^*} = \vec{c}\,.\,\overrightarrow{c^*} = 1$ 00.50

$\vec{b}\,.\,\overrightarrow{a^*} = \vec{c}\,.\,\overrightarrow{a^*} = \vec{a}\,.\,\overrightarrow{b^*} = \vec{c}\,.\,\overrightarrow{b^*} = \vec{a}\,.\,\overrightarrow{c^*} = \vec{b}\,.\,\overrightarrow{c^*} = 0$

<u>Pour c :</u>

On a : $\vec{c} \perp \vec{a}$, : $\vec{c} \perp \vec{b}$ et : $\overrightarrow{c^*} \perp \vec{a}$, : $\overrightarrow{c^*} \perp \vec{b} \Rightarrow$: $\vec{c} \,//\, \overrightarrow{c^*}$ 00.50

Donc : $c^* = \frac{1}{c}$

<u>Pour a, b :</u>

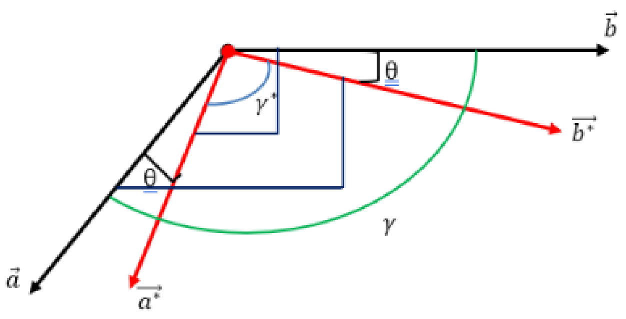
Soit le plan principal (001) de la maille élémentaire

$\vec{a}\,.\,\overrightarrow{a^*} = a\,.\,a^*.\cos\theta = 1 \quad \Rightarrow a^* = \dfrac{1}{a\cos\theta}$ 00.50

$\int_{\theta+\ \gamma*=\frac{\pi}{2}}^{2\ \theta+\ \gamma*=\gamma} \quad \Rightarrow \theta = \gamma - \frac{\pi}{2}$ et $\gamma * = \pi - \gamma$ 00.50

Donc $a^* = \dfrac{1}{a\cos(\gamma - \frac{\pi}{2})} = \dfrac{1}{a\sin(\gamma)}$

De même façon, on trouve : $b^* = \dfrac{1}{b\sin(\gamma)}$ 00.50



3- Établir l'expression générale de la distance interréticulaire d_{hkl} en fonction des paramètres a,b,c,α,β,γ,h,k,l **02.00 pts**

On a : $d_{hkl} = \frac{1}{ON}$, sachant que $\overrightarrow{ON}$ est une rangée de RR, tels que : $\overrightarrow{ON} = h\overrightarrow{a^*} + k\overrightarrow{b^*} + l\overrightarrow{c^*}$ 00.50

$$\Rightarrow d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{(h\overrightarrow{a^*}+k\overrightarrow{b^*}+l\overrightarrow{c^*})^2}} = \frac{1}{\sqrt{(ha^*)^2+(kb^*)^2+(lc^*)^2+2kha^*b^*\cos\gamma^*+2hla^*c^*\cos\beta^*+2klb^*c^*\cos\alpha^*}}$$ 01.00

Par la simplification, on trouve $d_{hkl} = \frac{a\sin\gamma}{\sqrt{(h)^2+(k)^2+(l)^2-2kh\cos\gamma+(\frac{l}{c})^2}}$ 00.50

Solution02: ....(07.00pts)

1- Quels sont les autres éléments de symétrie éventuellement présents dans les composés A et B: **03.00 pts**

Composé A : **2** // [010] + m ⊥ [010]

$$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix} \xrightarrow[\theta=\frac{2\pi}{2}]{\mathbf{2}\ //\ [010]} \begin{pmatrix}\bar{1}&0&0\\0&1&0\\0&0&\bar{1}\end{pmatrix} M_1$$ 00.50

$$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix} \xrightarrow{\mathrm{m}\ \perp\ [010]} \begin{pmatrix}1&0&0\\0&\bar{1}&0\\0&0&1\end{pmatrix} M_2$$ 00.50

$$M_1 * M_2 = \begin{pmatrix}\bar{1}&0&0\\0&\bar{1}&0\\0&0&\bar{1}\end{pmatrix} = i \text{ centre d'inversion}$$ 00.50

Composé B : **4** // [001] + **2** // [100]

$$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix} \xrightarrow[\theta=\frac{2\pi}{4}]{\mathbf{4}\ //\ [001]} \begin{pmatrix}0&1&0\\\bar{1}&0&0\\0&0&1\end{pmatrix} M_1$$ 00.50

$$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix} \xrightarrow[\theta=\frac{2\pi}{2}]{\mathbf{2}\ //\ [100]} \begin{pmatrix}1&0&0\\0&\bar{1}&0\\0&0&\bar{1}\end{pmatrix} M_2$$ 00.50

$$M_1 * M_2 = \begin{pmatrix}0&\bar{1}&0\\\bar{1}&0&0\\0&0&\bar{1}\end{pmatrix} = un\ axe\ 2\ //\ [1\bar{1}0]$$ 00.50

2- Quels sont les systèmes cristallins auxquels appartiennent A et B **01.00 pts**

Composé A : Les éléments de symétrie présents sont : **2** // [010] + m ⊥ [010] 00.50

⇒ GPS= 2/m ⇒ le système monoclinique

Composé B : Les éléments de symétrie présents sont : **4** // [001] + **2** // [100] + 2 // [$1\bar{1}0$] 00.50

⇒ GPS= 422 ⇒ le système quadratique

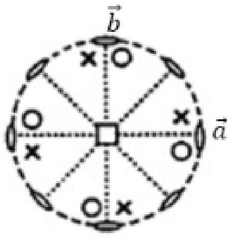
3- Indiquer les caractéristiques du réseau réciproque associé dans le composé B **01.50 pts**

Le composé B avec une maille quadratique de paramètres $\int_{\alpha=\beta=\gamma=\frac{\pi}{2},}^{a=b\neq c}$ est un système droit 00.50

$$\Rightarrow \int_{\alpha*=\beta*=\gamma*\frac{\pi}{2},}^{a*=b*=\frac{1}{a'},\ c*=\frac{1}{c}}$$ 01.00

4- Déterminer les degrés de symétrie de B **01.50 pts**

La projection stéréographique sur le plan (001) de GPS= 422 00.50
avec **4** // [001] + **2** // [100] + 2 // [1$\bar{1}$0]



01.00

d= 8

Solution03: ....(07.00pts)

03.00 pts

1-

a- Quelle est la notation de Hermann-Mauguin du groupe ?

x,y,z $\xrightarrow[\theta=\frac{2\pi}{2}]{2\,//\,[010]}$ $\bar{x},y,\bar{z}$, x,y,z $\xrightarrow{m\perp[010]}$ x, $\bar{y}$, z , $\bar{x},y,\bar{z}$ $\xrightarrow{m\perp[010]}$ $\bar{x},\bar{y},\bar{z}$ 01.00

x,y,z $\xrightarrow[\frac{1}{2}+x,\frac{1}{2}+y]{\text{Reseau C}}$ $1/2+x, 1/2+y, z$, $\bar{x},y,\bar{z}$ $\xrightarrow[\frac{1}{2}+x,\frac{1}{2}+y]{\text{Reseau C}}$ 1/2-x,1/2+y, $\bar{z}$ La notation est : $C_{2/m}$ 01.00

x, $\bar{y}$, z $\xrightarrow[\frac{1}{2}+x,\frac{1}{2}+y]{\text{Reseau C}}$ 1/2+x,1/2-y,z , $\bar{x},\bar{y},\bar{z}$ $\xrightarrow[\frac{1}{2}+x,\frac{1}{2}+y]{\text{Reseau C}}$ 1/2-x,1/2-y, $\bar{z}$ 01.00

b- Ecrire les conditions d'extinctions systématiques pour ce groupe **02.00 pts**

Condition de présence ⇒ $F_{hkl} \neq 0$

Le réseau de bravais est C ⇒ 2 positions : (xyz), (x+1/2 y+1/2 z) 00.50

Dans ce cas, la formule du facteur de structure est la suivante :

$$F_{hkl}= f_j e^{2\pi i(hx_j+ky_j+lz_j)} + f_j e^{2\pi i(h(x_j+1/2)+k(y_j+1/2)+lz_j)} = f_j e^{2\pi i(hx_j+ky_j+lz_j)}\left[1+e^{2\pi i(\frac{h}{2}+\frac{k}{2})}\right]$$ 01.00

$$F_{hkl}\neq 0 \Rightarrow \left[1+e^{2\pi i\left(\frac{h}{2}+\frac{k}{2}\right)}\right]\neq 0 \Rightarrow h+k=2n.$$ 00.50

2- Calculer les paramètres de la maille **02.00 pts**

Les données : RX ⊥ [100] , **λ = 1,54 Å . D = 2R= 100 mm, n=2, y= 31.70**

D'abord, on applique la méthode du cristal tournant pour calculer le paramètre $a \perp$ RX 00.50

$$a=\frac{n\lambda}{\sin\left(artg\left(\frac{y}{2R}\right)\right)}=\frac{2\,.1.54}{\sin\left(artg\left(\frac{31.70}{100}\right)\right)}= 10.23\ \text{Å}$$; Une maille cubique est donc : $\int_{\alpha=\beta=\gamma=\frac{\pi}{2},}^{a=b=c=\ 10.23\ \text{Å}}$ 01.50