Solution de la série N°3

EXERCICE 1

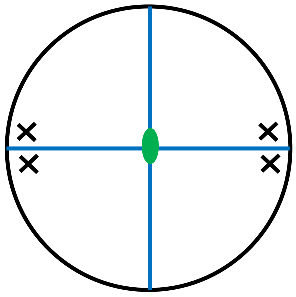
- Un groupe est dit symmorphique si les éléments de symétrie représentatifs du groupe sont tous propres.
- Un groupe est dit centro-symétrique s'il présente un centre de symétrie (représentation stéréographique de la classe cristalline correspondante présente un centre de symétrie).

Groupe d'espace	symmorphique	La classe	Centro-symétrique
P mm2	oui	mm2	non
C mc2_1	non	mm2	non
I $\frac{4}{m}$	oui	$\frac{4}{m}$	oui
P$4_2 2_1$2	non	422	non
P 6_3/m	non	$\frac{6}{m}$	oui

mm2

Système orthorhombique

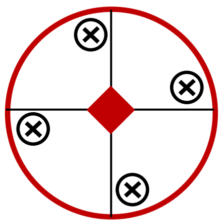
m ⊥ [100] ; m ⊥ [010] 2 // [001]



$$\frac{4}{m}$$

Système quadratique

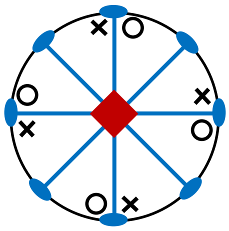
4 // [001] ; m ⊥ [001]



422

Système quadratique

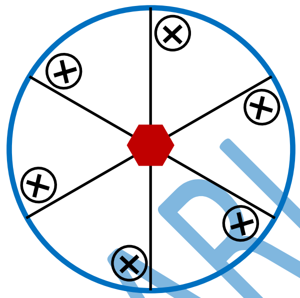
4 // [001] ; 2 // [100] ; 2 // [110]



$$\frac{6}{m}$$

Système hexagonal

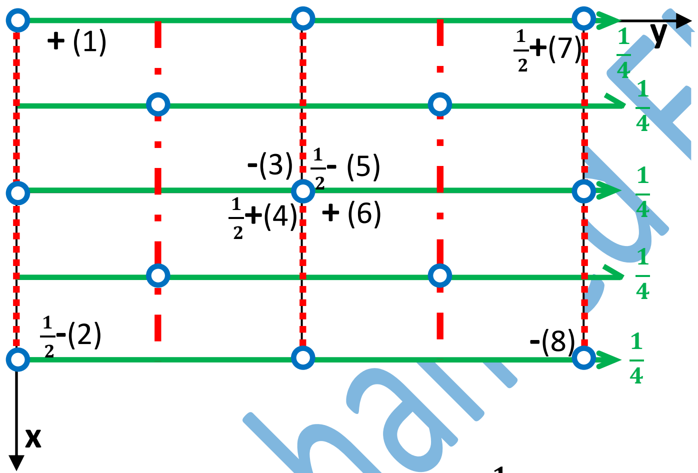
6 // [001] ; m $\perp$ [001]



EXERCICE 2

1-

2-



$(1) = (x,y,z)$ $\qquad$ $(2) = (\bar{x}, y, \frac{1}{2} - z)$

$(3) = (\frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} - y, \bar{z})$ $\qquad$ $(4) = (\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} + z)$

$(5) = (\frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - z)$ $\qquad$ $(6) = (\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + y, z)$

$(7) = (x, \bar{y}, \frac{1}{2} + z)$ $\qquad$ $(8) = (\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$

$$(1)\ (x,y,z) \xrightarrow{A2\ //\ Oy\ (z_0 = \frac{1}{4})} (2)\ (\bar{x}, y, \frac{1}{2} - z)$$

$$(1)\ (x,y,z) \xrightarrow{i\ (x_0 = \frac{1}{4},\ y_0 = \frac{1}{4},\ z_0 = 0)} (3)\ (\frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} - y, \bar{z})$$

$$(1)\ (x,y,z) \xrightarrow{n \perp Oy\ (y_0 = \frac{1}{4})} (4)\ (\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} + z)$$

$$(1)\ (x,y,z) \xrightarrow{2_1\ //\ Oy\ (z_0 = \frac{1}{4})} (5)\ (\frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - z)$$

$$(1)\ (x,y,z) \xrightarrow{\text{mode C}} (6)\ (\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + y, z)$$

$$(1) = (x,y,z) \xrightarrow{c \perp Oy \text{ à l'origine}} (7) = (x, \bar{y}, \frac{1}{2} + z)$$

$$(1) = (x,y,z) \xrightarrow{i\ (0, 0, 0)} (8) = (\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$$

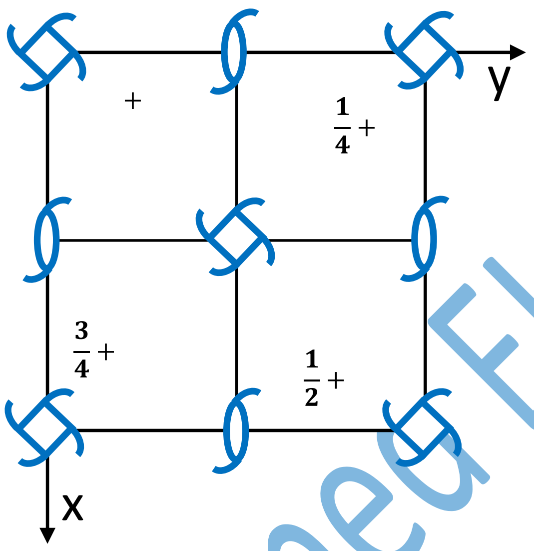
3- L'orientation cristallographique pour le monoclinique est [010]. On a : A2 et 2_1 // [010] donc A2 emporte sur 2_1
c et n $\perp$ [010] donc c emporte sur n
le mode de réseau est C

$\Rightarrow$ le groupe d'espace est C^2_c

EXERCICE 3

1- La classe cristalline est 4 $\Rightarrow$ le système cristallin est le quadratique de mode P $\Rightarrow$ 4_3 est // à la direction [001].

2-



3- (1) = (x,y,z) ; (2) = ($\bar{y}$,x,$\frac{3}{4}$+z) ; (3) = (y,-x,$\frac{1}{4}$+z) ; (4) = ($\bar{x}$,$\bar{y}$,$\frac{1}{2}$+z)

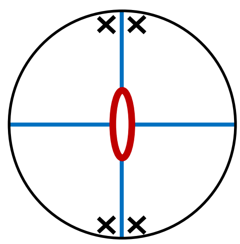
La multiplicité est 4.

4- L'élément de symétrie mentionné dans $P4_3$ entraine l'existence d'un axe hélicoïdal 2_1.

EXERCICE 4

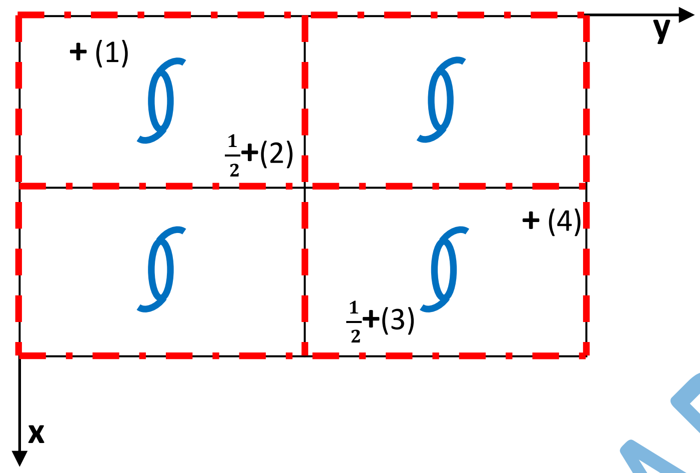
1-

- $Pna2_1$ $\Rightarrow$ classe mm2 $\Rightarrow$ système orthorhombique
  donc n $\perp$ [100] ; a $\perp$ [010] et 2_1 // [001]
  mode de réseau P (4 points équivalents).
- $Cmc2_1$ $\Rightarrow$ classe mm2 $\Rightarrow$ système orthorhombique
  donc m $\perp$ [100] ; c $\perp$ [010] et 2_1 // [001]
  mode de réseau C (4 × 2 = 8 points équivalents).



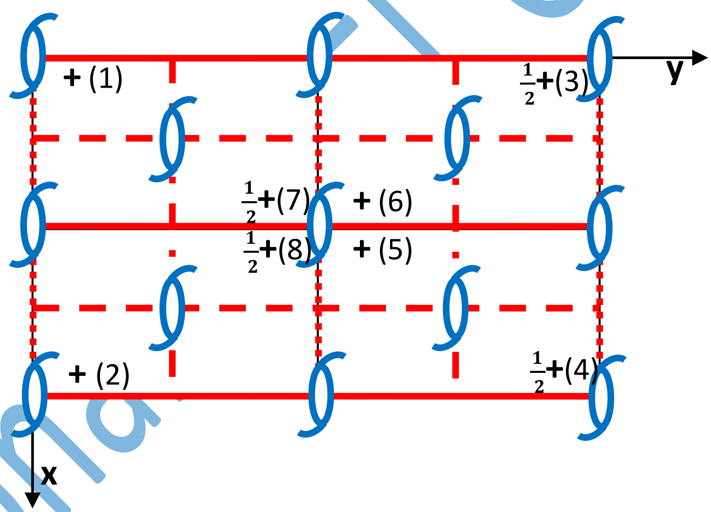
2-

- $Pna2_1$



- L'axe 2_1 est en dehors de l'intersection des plans de glissement n et a.
- Les éléments de symétrie n, a et 2_1 n'entrainent pas d'autres éléments de symétrie.

- $Cmc2_1$



- L'axe 2_1 est l'intersection du plan de glissement c et le miroir m.
- Les éléments de symétrie m, c et 2_1 entrainent d'autres éléments de symétrie : b $\perp$ Ox et n $\perp$ Oy et un second 2_1 // Oz.

3- Les points équivalents :

- $Pna2_1$: (x,y,z) ; $(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}+z)$; $(\bar{x}, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}+z)$; $(\frac{1}{2}+x, \bar{y}, z)$
- $Cmc2_1$: (x,y,z) ; $(\bar{x}, y, z)$; $(x, \bar{y}, \frac{1}{2}+z)$; $(\bar{x}, \bar{y}, \frac{1}{2}+z)$; $(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}+y, z)$;
  $(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}+y, z)$; $(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}+z)$; $(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}+z)$

4- Si on prend l'origine de la maille sur l'axe 2_1 :

- pour $Cmc2_1$: ne changent pas
- pour $Pna2_1$: (x,y,z) ; $(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}+z)$; $(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-y, z)$; $(\bar{x}, \bar{y}, \frac{1}{2}+z)$

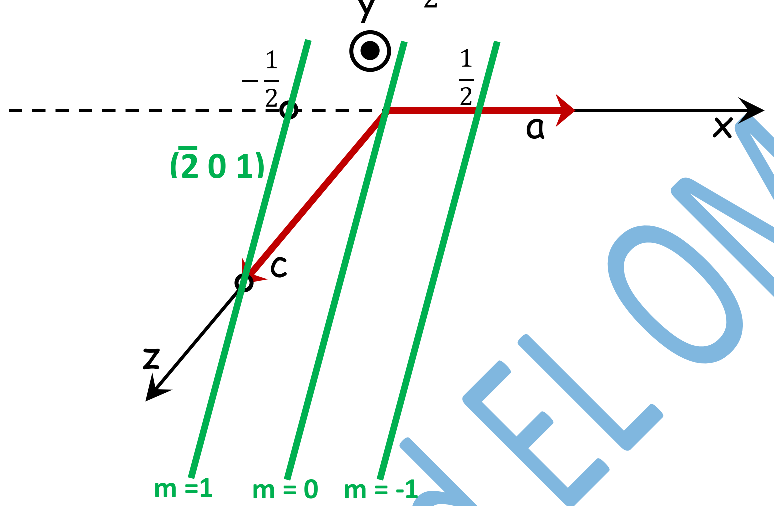
5- Positions particulières :

- $Pna2_1$: (0,0,z) ; $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}+z)$; $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},z)$; $(0,0,\frac{1}{2}+z)$
- $Cmc2_1$: (0,0,z) ; $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},z)$; $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}+z)$; $(0,0,\frac{1}{2}+z)$

EXERCICE 5

1- Système monoclinique ⇨ $a \neq b \neq c \quad \alpha = \gamma = \frac{\pi}{2}$ et $\beta \neq \frac{\pi}{2}$

Le plan $(\bar{2}\ 0\ 1)$ coupe : Ox en $-\frac{a}{2}$; Oy à ∞ et Oz en c.



2-

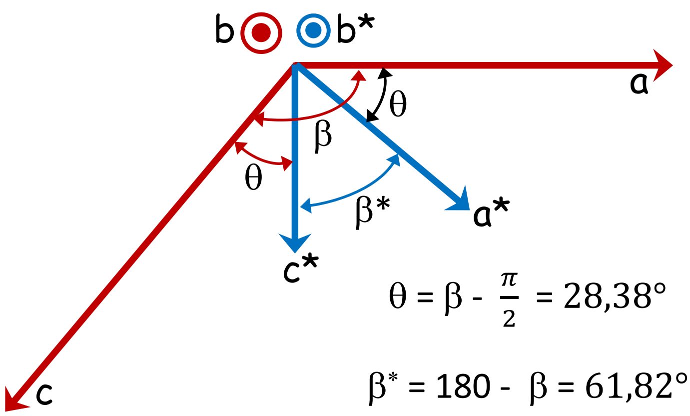
$$\vec{a}^* . \vec{a} = \vec{b}^* . \vec{b} = \vec{c}^* . \vec{c} = 1$$

$$\vec{a}^* . \vec{b} = \vec{a}^* . \vec{c} = 0 \quad ⇨ \quad \vec{a}^* \perp \vec{b} \text{ et } \vec{c}$$

$$\vec{b}^* . \vec{a} = \vec{b}^* . \vec{c} = 0 \quad ⇨ \quad \vec{b}^* \perp \vec{a} \text{ et } \vec{c}$$

$$\vec{c}^* . \vec{a} = \vec{c}^* . \vec{b} = 0 \quad ⇨ \quad \vec{c}^* \perp \vec{a} \text{ et } \vec{b}$$

$$\alpha + \alpha^* = \beta + \beta^* = \gamma + \gamma^* = \pi$$



$$\theta = \beta - \frac{\pi}{2} = 28{,}38°$$

$$\beta^* = 180 - \beta = 61{,}82°$$

$$\alpha^* = \gamma^* = 90°$$

3- $\vec{a} \,.\, \vec{a}^* = a.a^*\cos(\theta) = 1 \Rightarrow a^* = \dfrac{1}{a\ \cos(\theta)} = 2\ nm^{-1}$

$\vec{b}^* \,.\, \vec{b} = 1 \Rightarrow b^* = \dfrac{1}{b} = 0{,}66\ nm^{-1}$

$\vec{c} \,.\, \vec{c}^* = c.c^*\cos(\theta) = 1 \Rightarrow c^* = \dfrac{1}{c\ \cos(\theta)} = 1{,}75\ nm^{-1}$

EXERCICE 6

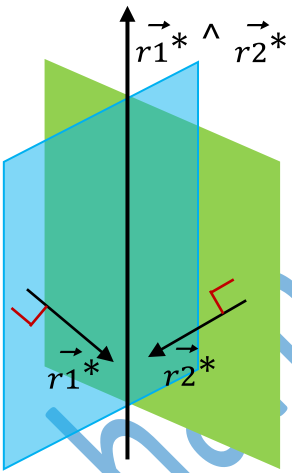
- Les deux familles de plans (110) et (111).

Le plan réticulaire (110) a pour normale $\vec{r1}^*$.

Le plan réticulaire (111) a pour normale $\vec{r2}^*$.

$\vec{r1}^*$ et $\vec{r2}^*$ étant des vecteurs réciproques alors :

$$\vec{r}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$



Alors la rangée sera supportée par la direction du produit vectoriel $\vec{r1}^* \wedge \vec{r2}^*$. Or :

$\vec{r1}^* = \vec{a}^* + \vec{b}^*$

$\vec{r2}^* = \vec{a}^* + \vec{b}^* + \vec{c}^*$

$\vec{r1}^* \wedge \vec{r2}^* = (\vec{a}^* + \vec{b}^*) \wedge (\vec{a}^* + \vec{b}^* + \vec{c}^*) = (\vec{a}^* \wedge \vec{b}^*) + (\vec{a}^* \wedge \vec{c}^*) + (\vec{b}^* \wedge \vec{a}^*) + (\vec{b}^* \wedge \vec{c}^*)$

$= (\vec{a}^* \wedge \vec{c}^*) + (\vec{b}^* \wedge \vec{c}^*)$

$V^* = (\vec{a}^* \wedge \vec{b}^*) \,.\, \vec{c}^* = (\vec{b}^* \wedge \vec{c}^*) \,.\, \vec{a}^* = (\vec{c}^* \wedge \vec{a}^*) \,.\, \vec{b}^*$

$\vec{r1}^* \wedge \vec{r2}^* = V^* (\vec{a}^* - \vec{b}^*)$

➪ La rangée commune aux deux familles de plans (110) et (111) est : $[1\bar{1}0] \equiv [\bar{1}10]$.

- Les deux familles de plans $(1\bar{1}0)$ et (111)

$\vec{r1}^* = \vec{a}^* - \vec{b}^*$

$\vec{r2}^* = \vec{a}^* + \vec{b}^* + \vec{c}^*$

$\vec{r1}^* \wedge \vec{r2}^* = (\vec{a}^* - \vec{b}^*) \wedge (\vec{a}^* + \vec{b}^* + \vec{c}^*) = (\vec{a}^* \wedge \vec{b}^*) + (\vec{a}^* \wedge \vec{c}^*) - (\vec{b}^* \wedge \vec{a}^*) - (\vec{b}^* \wedge \vec{c}^*)$

$= V^* (-\vec{a}^* - \vec{b}^* + 2\vec{c}^*)$

➪ La rangée commune aux deux familles de plans $(1\bar{1}0)$ et (111) est : $[\bar{1}\bar{1}2] \equiv [11\bar{2}]$.

EXERCICE 7

1- $2d_{hkl} \sin(\theta) = \lambda$ ➪ $d_{hkl} = \dfrac{\lambda}{2.\sin(\theta)}$

$d_{200} = 2{,}714$ Å

$d_{105} = 2{,}211$ Å

$d_{211} = 2{,}069$ Å

2- Système orthorhombique ➪ $a \neq b \neq c$ et $\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$

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

- $d_{200} = \dfrac{1}{\sqrt{\frac{2^2}{a^2}}} = \dfrac{a}{2}$ ➪ $a = 2\, d_{200} = 5{,}428$ Å

- $d_{105} = \dfrac{1}{\sqrt{\frac{1^2}{a^2} + \frac{5^2}{c^2}}}$ ➪ $\left(\dfrac{1}{d_{105}}\right)^2 = \dfrac{1}{a^2} + \dfrac{25}{c^2}$ ➪ $\dfrac{25}{c^2} = \left(\dfrac{1}{d_{105}}\right)^2 - \dfrac{1}{a^2} = \dfrac{a^2 - d_{105}^2}{a^2 d_{105}^2}$

⇨ $c = 5\,\dfrac{a d_{105}}{\sqrt{a^2 - d_{105}^2}}$ = 12,108 Å

- $d_{211} = \dfrac{1}{\sqrt{\frac{2^2}{a^2} + \frac{1^2}{b^2} + \frac{1^2}{c^2}}} = \dfrac{1}{\sqrt{\frac{4}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2}}}$

  ⇨ $\left(\dfrac{1}{d_{211}}\right)^2 = \dfrac{4}{a^2} + \dfrac{1}{b^2} + \dfrac{1}{c^2}$ ⇨ $\dfrac{1}{b^2} = \left(\dfrac{1}{d_{211}}\right)^2 - \dfrac{4}{a^2} - \dfrac{1}{c^2}$

  ⇨ b = 3,334 Å

- Volume de la maille = $(\vec{a} \wedge \vec{b}) \cdot \vec{c}$ = a.b.c = 219,06 Å^3