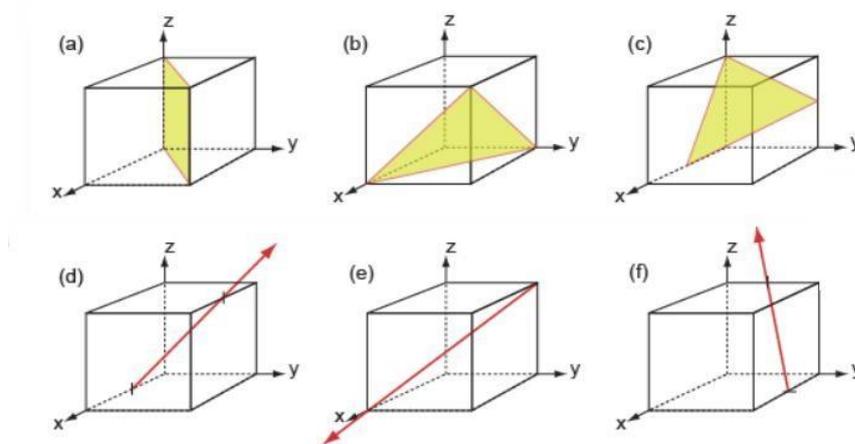


**TD DE CRISTALLOGRAPHIE GEOMETRIQUE 1 : SERIE N° 1**

**EXERCICE 1 : L'ETAT CRISTALLIN.**

1. Représenter sur une maille cubique les rangées et plans réticulaires suivants donnés par  $[010]$ ,  $[1\bar{1}1]$ ,  $[120]$  et  $(110)$ ,  $(1\bar{1}1)$ ,  $(112)$ .
2. Déterminer les indices de Miller des rangées et plans réticulaires représentés sur les figures ci-après :



3. Dans une maille cubique, montrer que la rangée  $[110]$  est normale au plan  $(110)$ . Conclure.
  - Montrer que ce plan contient les rangées  $[001]$ ,  $[1\bar{1}0]$   $[\bar{1}11]$ .
4. Montrer que les rangées  $[3\bar{1}\bar{2}]$ ,  $[20\bar{1}]$ ,  $[\bar{1}95]$  sont coplanaires. Et préciser les indices du plan contenant ces rangées.
5. Déterminer l'ordre et les indices de Miller d'un plan réticulaire passant par les nœuds  $(1,2,\bar{2})$ ,  $(1,2,0)$  et  $(1,1,3)$ , conclure.
  - A quel plan réticulaire de la même famille appartient le nœud :  $(4,\bar{2},3)$ .

**EXERCICE 2 : MODES DE RESEAUX, R.D. ET R.R.**

1. Donner pour chacun des 7 systèmes cristallins les modes de réseau compatibles.
2. Dans une maille quadratique, montrer que les modes de réseau permis sont seulement les modes P et I.
3. Montrer qu'une maille cubique à faces centrées CFC contient une maille rhomboédrique R.
  - Déterminer la relation entre les paramètres des 2 mailles.
  - Déterminer la matrice de passage : CFC vers R.
  - Donner les indices de Miller dans le réseau R des plans  $(111)$  dans CFC.
4. Etablir les conditions d'existence des plans réticulaires pour chaque mode du réseau : CS, CC, CFC.

### EXERCICE 3 : CALCULS DANS LE R.D.

1. Pour un cristal monoclinique dont l'angle  $\beta$  vaut  $94,12^\circ$ , on a déterminé par diffraction des rayons X (technique utilisée pour analyser la structure de matériaux cristallins) les paramètres des rangées suivantes :

$$[100] = 5,81 \text{ \AA} ; [010] = 8,23 \text{ \AA} ; [001] = 6,11 \text{ \AA}$$

$$[110] = 5,04 \text{ \AA} ; [011] = 10,3 \text{ \AA} ; [101] = 8,76 \text{ \AA}$$

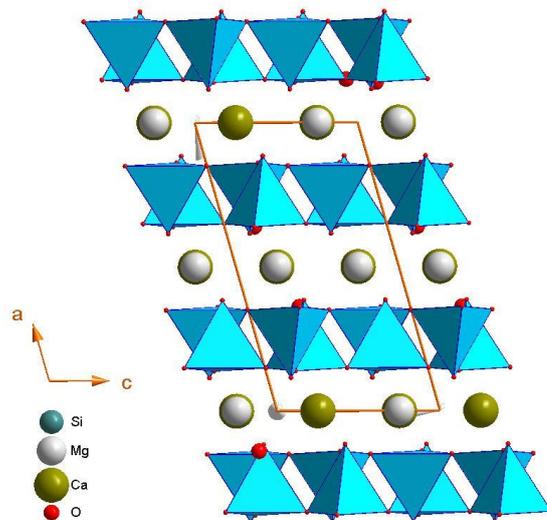
- Quel est le type du réseau de ce cristal ?
2. Dans un cristal hexagonal on a mesuré par diffraction les paramètres des rangées :

$$[101] = 6,16 \text{ \AA} \text{ et } [110] = 6,22 \text{ \AA}.$$

- Calculer la valeur du rapport  $c/a$ .

### EXERCICE 4 : CALCULS DANS LE R.R.

On souhaite étudier la structure cristalline du Diopside qui est un composé minéral appartenant au groupe des silicates et possédant une maille monoclinique dont l'angle  $\beta$  vaut  $105,63^\circ$  (projection ci-après).



Pour cette structure, on a déterminé par diffraction des rayons X les paramètres des rangées suivantes :  $[100] = 9,74 \text{ \AA}$  ;  $[010] = 8,89 \text{ \AA}$  ;  $[001] = 5,25 \text{ \AA}$  ;  $[110] = 6,59 \text{ \AA}$

1. Identifier, après calcul, le mode du réseau de Bravais de ce cristal ?
2. Trouver les dimensions du réseau réciproque dans le cas de ce minéral.
3. Trouver l'expression de l'équidistance  $d_{hkl}$  des plans réticulaires de la famille  $\{hkl\}$  en fonction des paramètres du réseau.
4. Etablissez la formule qui donne l'angle entre deux plans dans un réseau monoclinique.

**TD DE CRISTALLOGRAPHIE GEOMETRIQUE 1 : SERIE N° 2**

**EXERCICE 1 : REPRESENTATIONS ET PRODUITS DES ELEMENTS DE SYMETRIE.**

- Donner la représentation matricielle et les coordonnées des positions équivalentes relatives à chacun des éléments de symétrie suivants (passants par l'origine de la maille) :
  - Axes de rotation : 2 et  $\bar{2}$  dans une maille monoclinique.
  - Axes de rotation : 4 et  $\bar{4}$  dans une maille quadratique.
  - Axes de rotation : 3 et  $\bar{3}$  dans une maille cubique et hexagonale.
  - Axes hélicoïdaux :  $4_1$ ,  $4_2$ ,  $4_3$  selon la direction [001] d'une maille cubique.
  - Un miroir  $m \perp [001]$ . Et un 2<sup>ème</sup> perpendiculaire  $\perp [110]$ .
  - Un plan de glissement  $a, b \perp [001]$  et un plan de glissement  $c \perp [100]$ .
  - Un plan de glissement  $n \perp [100]$ , un 2<sup>ème</sup>  $\perp [010]$  et un 3<sup>ème</sup>  $\perp [001]$ .

Retrouver les représentations matricielles après un changement de position vers  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ .

- Déterminer la symétrie globale résultante et tracer les projections stéréographiques correspondantes aux produits entre les éléments de symétrie :
  - 2 axes binaires sécants séparés par un angle  $\alpha=90^\circ$ .
  - 2 miroirs sécants séparés par un angle  $\alpha=90^\circ$ .
  - 1 axe binaire et un miroir perpendiculaire.

- Les matrices ci-après correspondent à deux opérations de symétrie cristalline.

$$M_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad t_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{2} \\ 1 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad M_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad t_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{2} \\ 1 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Pour chacune des 2 matrices, identifier la nature, la direction et la position dans la maille de l'élément de symétrie correspondant.

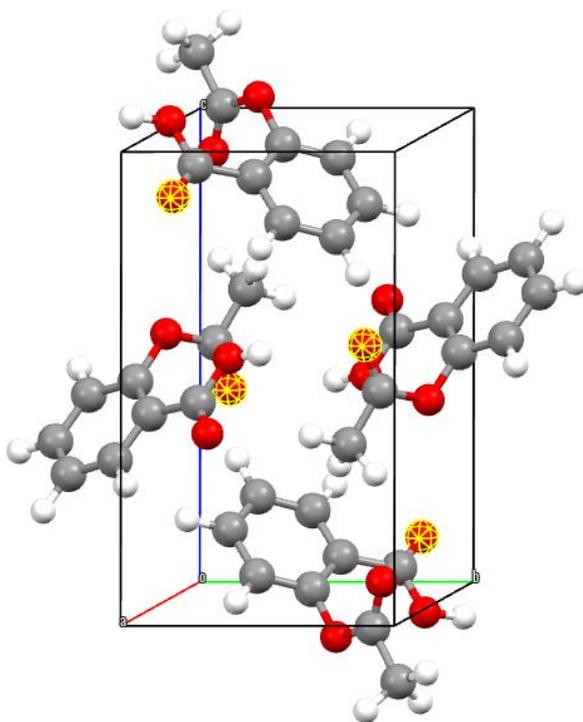
- En utilisant la représentation matricielle montrer que l'existence de deux axes orthogonaux d'ordre 4 implique l'existence de 4 axes ternaires et préciser leurs orientations.

## EXERCICE 2 : CLASSES CRISTALLINES ET GROUPES D'ESPACE.

1. Donner les projections stéréographiques des 7 classes cristallines du système quadratique. Déterminer l'ordre de chaque groupe.  
Identifier le groupe holoèdre et donner les coordonnées des positions équivalentes générées par le groupe.
2. Déterminer les groupes d'espace qui dérivent du groupe ponctuel 6 du système hexagonal. Faire le même travail pour les groupes d'espace qui dérivent de la classe cristalline m.
3. Peut-on envisager l'existence des groupes d'espace Pmbm et F4<sub>1</sub>dc ?

## EXERCICE 3 : ETUDE DE GROUPES D'ESPACE.

1. Soit le groupe d'espace Cmc2<sub>1</sub>.  
À quel réseau de Bravais et quel système cristallin se rapporte-t-il ?  
Expliciter la notation en précisant la nature des éléments de symétrie selon les directions cristallographiques.  
Effectuer une représentation projetée selon l'axe c de la maille orthorhombique avec les éléments de symétrie  
Placer un point en position général (x, y, z) et trouver tous ses équivalents par symétrie. Quels nouveaux éléments de symétrie sont apparus ?  
Indiquer les positions de quelques coordonnées particulières.
2. On souhait étudier la symétrie de la structure cristalline de l'aspirine.  
Par diffraction des rayons X nous avons déterminé l'ensemble des positions équivalentes de l'un des atomes d'oxygène de la molécule dans toute la maille.



O4(1) : (0.40, 0.78, 0.04)

O4(2) : (0.60, 0.28, 0.46)

O4(3) : (0.60, 0.22, 0.96)

O4(4) : (0.40, 0.72, 0.54)

- Déterminer les relations entre l'ensemble des positions équivalentes.
- Déterminer les matrices de passage entre la première et les 3 autres positions équivalentes.
- Déterminer la nature, la direction et la position de l'ensemble des éléments de symétrie présents dans la structure de l'aspirine. Déduire le système cristallin.
- Construire la projection du groupe d'espace. Déduire la notation de ce groupe.

## TD DE CRISTALLOGRAPHIE GEOMETRIQUE 1 : SERIE N° 3

### EXERCICE 1 : DIFFRACTION DES RAYONS X.

La baryte ( $\text{BaSO}_4$ ) possède une maille primitive orthorhombique ayant les paramètres suivants :  $a = 7.157 \text{ \AA}$ ,  $b = 8.884 \text{ \AA}$ , et  $c = 5.457 \text{ \AA}$ . Calculer l'angle  $2\theta$  de Bragg par réflexion de la raie du cuivre  $K\alpha$  ( $\lambda = 1.5405 \text{ \AA}$ ) sur les plans d'indices de Miller suivants : (002) et (110).

### EXERCICE 2 : SEQUENCES DES RAIES MODES DU RESEAU CUBIQUE.

Remplir le tableau suivant pour les 10 premières raies de diffraction relatives aux réseaux cubiques : CS, CC et CFC.

(hkl)	$h^2+k^2+l^2$	N° raie réseau CS	N° raie réseau CC	N° raie réseau CFC

### EXERCICE 3 : INDEXATION D'UN DIFFRACTOGRAMME DE POUDRE.

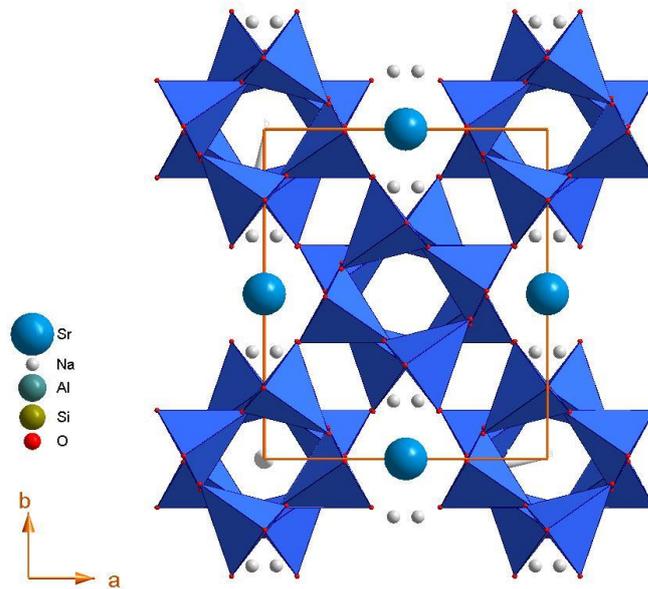
On donne les angles de diffraction et les intensités des raies pour le diffractogramme de poudre d'un minéral inconnu réalisé avec une anticathode en cuivre ( $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$ ) :

Raie	$2\theta$ (°)	I (%)
1	24.502	1
2	28.368	100
3	40.541	37
4	50.211	10
5	58.691	5
6	66.440	9
7	73.801	5
8	87.765	1
9	94.651	2

1. Déterminer la nature du réseau.
2. Indexer le diffractogramme.
3. Calculer le paramètre de la maille a.

## EXAMEN DE LA SESSION ORDINAIRE 2017-2018.

La Stronalsite  $\text{Na}_2\text{SrAl}_4\text{Si}_4\text{O}_{16}$  (un minéral naturel appartenant au groupe des feldspaths) cristallise dans le groupe d'espace  $Iba2$  :



1- Identifier le mode de réseau, la classe cristalline et le système cristallin de ce groupe d'espace ?

2- Construire la projection stéréographique du groupe ponctuel, est-ce que c'est groupe holoèdre ? Déduire le nombre des positions équivalentes du groupe d'espace.

3- Donner les représentations matricielles des éléments de symétrie générateurs du groupe d'espace et les coordonnées des positions équivalentes.

Origine : Plan de glissement  $b$  ( $x=1/4$ ), plan de glissement  $a$  ( $y=1/4$ ), axe 2 ( $x=0, y=0$ ).

4- Construire la projection du groupe d'espace. Déterminer la nature et la position des éléments de symétrie cachés de ce groupe.

5- Donner l'expression matricielle (sans démonstration) du tenseur métrique directe  $T$  et réciproque  $T^*$ . Déterminer l'expression de la distance interréticulaire dans le système cristallin étudié.

6- Déterminer les indices de la rangée d'intersection des deux plans réticulaires  $(110)$  et  $(112)$ .