

UNIVERSITE SIDI MOHAMED BEN ABDELLAH
FACULTE DES SCIENCES DHAR MEHRAZ -FES

ANNEE UNIVERSITAIRE 2019-2020

SERIE N°1
TD DE CRISTALLOGRAPHIE
FILIERES SMP-SMC - SEMESTRE 4

Voir mes vidéos sur ma chaîne Youtube sur le lien suivant :

<https://www.youtube.com/channel/UCN2kUQPmrWy4zfn86lhYhZw>

I- RANGEES ET PLANS RETICULAIRES :

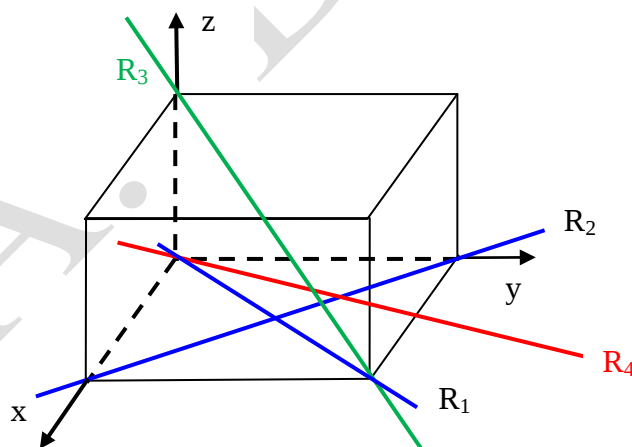
1) Indexer les rangées réticulaires passant par les couples de nœuds N_1 et N_2 suivants :

a- $N_1 : 211$ et $N_2 : 340$

b- $N_1 : 412$ et $N_2 : 658$

Préciser dans chaque cas l'ordre du nœud N_2 par rapport au nœud N_1 et donner le paramètre (ou période) de la rangée considérée si le système cristallin est orthorhombique.

2) Indexer les rangées cristallographiques représentées dans la maille suivante :



3) Indexer puis dessiner les plans réticulaires qui coupent les axes Ox , Oy et Oz respectivement aux points A, B et C tels que :

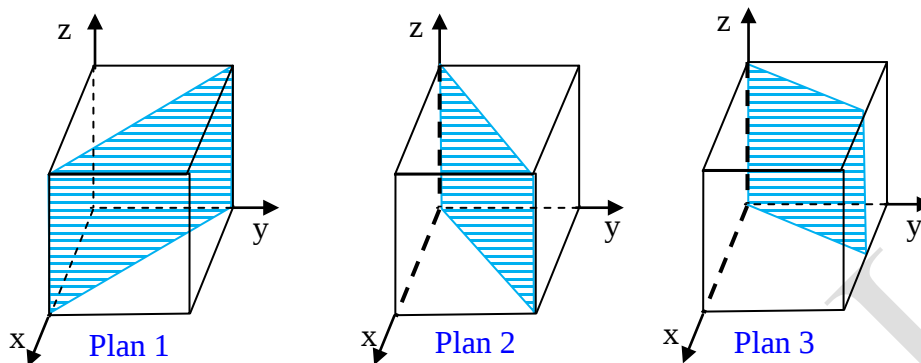
Plan 1 : $OA = 2a$ $OB = \infty$ $OC = c$

Plan 2 : $OA = 3a$ $OB = 6b$ $OC = 2c$

Préciser l'ordre des plans 1 et 2 dans les familles aux quelles ils appartiennent puis dessiner dans chaque cas l'intersection avec la maille du plan représentant la famille réticulaire trouvée.

Donner les équations cartésiennes du plan central de la famille à laquelle appartient le plan 1 ainsi que les équations des deux plans se trouvant de part et d'autre du plan central.

- 4) A quelles familles réticulaires appartiennent les plans schématisés sur les figures ci-dessous (plans hachurés) :



II- RESEAUX DE BRAVAIS :

- 1) Quel est le nombre de réseaux de Bravais ? préciser les systèmes auxquels ils sont attribués.
- 2) Certains modes de Bravais n'existent pas dans certains systèmes cristallins. Ainsi, par exemple, les modes F et C (A ou B) n'existent pas dans le système quadratique. Expliquer pour quelle raison.
- 3) Quel est l'effet de l'action du mode des modes de réseau de Bravais I (centré), C (bases centrées C) et F (faces centrées) sur une position atomique (x,y,z) ?

III- RELATIONS ENTRE LES RESEAUX DIRECT ET RECIPROQUE :

- 1) Montrer que la rangée réticulaire $[hkl]^*$ du réseau réciproque est perpendiculaire à la famille de plans réticulaires (hkl) du réseau direct.
- 2) Montrer que la distance inter-réticulaire d_{hkl} de la famille (hkl) du réseau direct correspond à l'inverse de la période n^*_{hkl} de la rangée $[hkl]^*$ du réseau réciproque c'est-à-dire que : $d_{hkl} = 1/n^*_{hkl}$.
- 3) Déterminer, en utilisant le réseau réciproque, l'expression de la distance inter-réticulaire d'une famille donnée en fonction des paramètres des réseaux orthorhombique, quadratique et cubique.
- 4) Quels angles forment entre elles les rangées, du système hexagonal, suivantes :
 - a- $[100]$ et $[100]^*$?
 - b- $[010]$ et $[010]^*$?
 - c- $[001]$ et $[001]^*$?

NB : la connaissance des angles ci-dessus est nécessaire pour établir l'expression de d_{hkl} dans le cas du système hexagonal.

IV- DIFFRACTION DES RAYONS X :

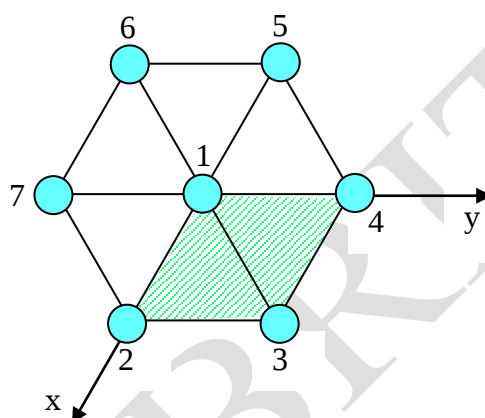
- 1) Démontrer la relation de diffraction de Bragg.

- 2) Représenter la figure de diffraction avec une différence de marche $\delta = 2\lambda$. Conclure.
- 3) Représenter la figure de diffraction avec une différence de marche $\delta = 1,5\lambda$. Conclure.

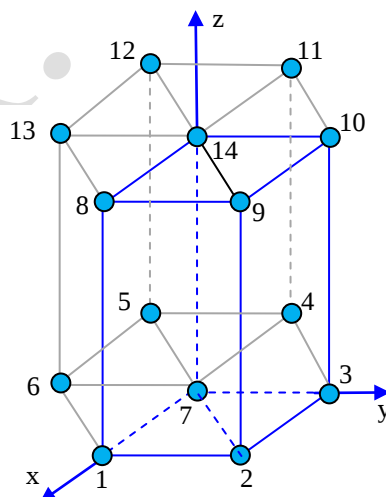
V- SYMETRIE CRISTALLINE :

- 1) Montrer que les seuls ordres possibles pour les axes directs (ou inverses) sont les ordres 1, 2, 3, 4 et 6.
- 2) Donner les positions équivalentes à une position atomique (x,y,z) si celle-ci subit l'action de l'un des axes de symétrie $\bar{1}$ et $\bar{2}$ (ces derniers sont orientés suivant l'axe Oz). En déduire les éléments de symétrie équivalents aux axes $\bar{1}$ et $\bar{2}$.
- 3) Tous les axes de réflexion rotatoire sont équivalents à un axe de symétrie direct ou inverse ou à une combinaison de ces axes. Ainsi $3' \equiv \bar{6} \equiv 3/m$ et $6' \equiv \bar{3} \equiv 3+\bar{1}$, à quoi correspond alors les axes 1', 2' et 4'.
- 4) Sachant que la première image, dans le sens direct, par l'axe 3 (orienté suivant Oz) de la position (x,y,z) est ($\bar{y}$, x-y,z), donner les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) :
 - a- Par l'axe 3. Faire la représentation graphique des positions équivalentes autour de l'axe 3.
 - b- Par l'axe $\bar{3}$. Projeter sur le plan (xOy) les positions équivalentes autour de l'axe $\bar{3}$.
 - c- Par l'axe 3_1 . Faire la représentation graphique des positions équivalentes autour de l'axe 3_1 .
 - d- Par l'axe 3_2 . Faire la représentation graphique des positions équivalentes autour de l'axe 3_2 .
- 5) Donner les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) générées :
 - a- par l'axe 4 orienté suivant Oz.
 - b- par l'axe $\bar{4}$. orienté suivant Oz.
 - c- par l'axe 4_1 orienté suivant Oz. Faire un schéma en perspective montrant ces images.
 - d- par l'axe 4_3 orienté suivant Oz. Faire un schéma en perspective montrant ces images.
 - e- Quelle est la différence entre les axes 4_1 et 4_3 ?
- 6) Représenter sur une maille tous les éléments de symétrie d'orientation du système cubique.
- 7) Quels sont, parmi les éléments de symétrie de la question précédente, ceux contenus dans l'intersection du premier plan de la famille réticulaire (011) avec la maille cubique.
- 8) Quelles sont les directions principales du système quadratique ?

- 9) Quels sont les différents éléments de symétrie ponctuelle du système quadratique ? indexer ces éléments de symétrie.
- 10) Quelles sont les directions principales du système hexagonal ?
- 11) A quelles familles réticulaires appartiennent les miroirs perpendiculaires aux axes de la 3^{ème} direction principale du système hexagonal ?
- 12) Préciser les images, par l'un des axes d'ordre 2 de la troisième direction principale du système hexagonal, de chacune des positions de la base d'une maille hexagonale reportées sur la figure suivante :



- 13) Préciser les images, par rapport au miroir perpendiculaire à l'axe $[1\ 2\ 0]$, de chacun des atomes reportés sur la maille hexagonale usuelle suivante :



- 14) A quel système cristallin fait partie le groupe d'espace $I4_1$ (justifier votre réponse) ? Donner les positions équivalentes à la position (x,y,z) dans ce groupe d'espace.
- 15) A quel système cristallin fait partie le groupe d'espace $Cmca$ (justifier votre réponse) ? Donner les positions équivalentes à la position (x,y,z) dans ce groupe d'espace.

SOLUTION

I- RANGÉES ET PLANS RETICULAIRES :

1) Indexer les rangées réticulaires passant par les couples de nœuds N_1 et N_2 suivants :

a- $N_1 : 211$ et $N_2 : 340$

b- $N_1 : 412$ et $N_2 : 658$

Préciser dans chaque cas l'ordre du nœud N_2 par rapport au nœud N_1 et donner le paramètre (ou période) de la rangée considérée si le système cristallin est orthorhombique.

SOLUTION

a- $N_1 : 211$ et $N_2 : 340$

La rangée réticulaire passant par le couple de nœuds 211 et 340 ne passe pas par l'origine. Pour la faire passer par l'origine, celle-ci peut être prise en N_1 , dans ce cas les coordonnées de N_2 deviennent : $u = 3 - 2 = 1$, $v = 4 - 1 = 3$ et $w = 0 - 1 = -1$. Les nombres **u, v et w sont premiers entre eux**. Le nœud N_2 est alors le nœud le plus proche de l'origine. Les coordonnées du 1^{er} nœud après l'origine seront alors 13-1. La rangée réticulaire en question sera alors notée [13-1] qu'on note [13 $\bar{1}$].

REMARQUE

☞ Si c'est N_2 qu'on prend comme origine, les coordonnées de N_1 deviennent dans le nouveau repère : $u' = 2 - 3 = -1$, $v' = 1 - 4 = -3$ et $w' = 1 - 0 = 1$. Dans ce cas, la rangée réticulaire en question sera notée [$\bar{1}\bar{3}1$]. En fait [13 $\bar{1}$] et [$\bar{1}\bar{3}1$] représentent la même rangée réticulaire et de façon générale $[uvw] = [\bar{u}\bar{v}\bar{w}]$

Le paramètre (ou période) de la rangée [uvw] est donné par la relation :

$$p = |\vec{N}|$$

$\vec{N}$ est le vecteur directeur de la rangée [uvw] tel que : $\vec{N} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$

$$p = [(u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c})(u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c})]^{1/2} \\ = [u^2\vec{a}^2 + v^2\vec{b}^2 + w^2\vec{c}^2 + 2uv\vec{a}\vec{b} + 2uw\vec{a}\vec{c} + 2vw\vec{b}\vec{c}]^{1/2}$$

Si le système est orthorhombique, $a \neq b \neq c$ et $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. Dans ce cas, l'expression de p devient :

$$p = [u^2a^2 + v^2b^2 + w^2c^2]^{1/2}$$

Le paramètre (ou période) de la rangée [13 $\bar{1}$] est alors :

$$p = [a^2 + 9b^2 + c^2]^{1/2}$$

b- N1 : 412 et N2 : 658

La rangée réticulaire passant par le couple de nœuds 412 et 658 ne passe pas par l'origine. Pour la faire passer par l'origine, celle-ci peut être prise en N_1 , dans ce cas les coordonnées de N_2 deviennent : $u' = 6 - 4 = 2$, $v' = 5 - 1 = 4$ et $w' = 8 - 2 = 6$. Les nombres u , v et w ne sont pas premiers entre eux, puisqu'ils sont divisibles par 2. Le nœud N_2 n'est pas alors le nœud le plus proche de l'origine mais plutôt le deuxième. Les coordonnées du 1^{er} nœud après l'origine seront alors 123. La rangée réticulaire en question sera alors notée [123].

REMARQUE

☞ Si c'est N_2 qu'on prend comme origine, les coordonnées de N_1 deviennent dans le nouveau repère : $u' = 4 - 6 = -2$, $v' = 1 - 5 = -4$ et $w' = 2 - 8 = -6$. Dans ce cas, la rangée réticulaire en question sera notée $[\bar{1}\bar{2}\bar{3}]$. En fait [123] et $[\bar{1}\bar{2}\bar{3}]$ représentent la même rangée réticulaire et de façon générale $[uvw] = [\bar{u}\bar{v}\bar{w}]$

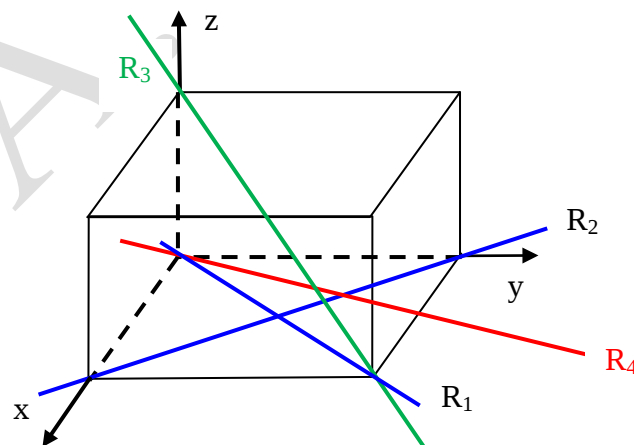
Comme le système est orthorhombique, l'expression de p est :

$$p = [u^2a^2 + v^2b^2 + w^2c^2]^{1/2} \text{ (voir la question précédente).}$$

Le paramètre (ou période) de la rangée [123] est alors :

$$p = [a^2 + 4b^2 + 9c^2]^{1/2}$$

2) Indexer les rangées cristallographiques représentées dans la maille suivante :



SOLUTION

a- La rangée R_1 est la rangée centrale de la base (a,b) puisqu'elle passe par l'origine du repère.

Comme les coordonnées du 1^{er} nœud après l'origine est 110, la rangée R_1 sera alors notée [110] (ou $[\bar{1}\bar{1}0]$).

- b- La rangée R_2 est la rangée non centrale de la base (a,b), elle passe par les nœuds de coordonnées 100 et 010. Si on prend le premier nœud comme origine, les coordonnées du deuxième nœud deviennent -110. Ces coordonnées sont premières entre elles, la rangée R_2 sera alors notée $[\bar{1}10]$ (ou $[1\bar{1}0]$: indexation qu'on trouve si on prend 010 comme origine)).

REMARQUES

Comme pour les diagonales de la face (a,b), on démontre que :

☞ Les diagonales de la face (b,c) sont $[011]$ (ou $[0\bar{1}\bar{1}]$) et $[01\bar{1}]$ (ou $[0\bar{1}1]$).

☞ Les diagonales de la face (a,c) sont $[101]$ (ou $[\bar{1}0\bar{1}]$) et $[10\bar{1}]$ (ou $[\bar{1}01]$).

- c- La rangée R_3 est l'une des 4 diagonales principales de la maille. R_3 passe par les nœuds de coordonnées 110 et 001. Si on prend le premier nœud comme origine, les coordonnées du deuxième nœud deviennent -1-11. Ces coordonnées sont premières entre elles, la rangée R_3 sera alors notée $[\bar{1}\bar{1}1]$ (ou $[11\bar{1}]$: indexation qu'on trouve si on prend 001 comme origine)).

REMARQUE

☞ Comme pour la diagonale principale R_3 de la maille, on démontre que les trois autres diagonales principales de la maille sont :

$[111]$ (ou $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$) , $[1\bar{1}\bar{1}]$ (ou $[\bar{1}11]$) et $[\bar{1}1\bar{1}]$ (ou $[1\bar{1}1]$).

- d- La rangée R_4 est une rangée équivalente à la rangée centrale qui passe par l'origine 000 et le point de coordonnées $\frac{1}{2} 1 0$, or ce point n'est pas un nœud puisque les coordonnées d'un nœud doivent être entiers. Si on prolonge la droite, elle va passer par le point de coordonnées $2 \times \frac{1}{2}, 2 \times 1, 2 \times 0$ soit 1,2,0. Ces coordonnées sont cette fois celle d'un nœud puisque elles sont entières et comme 1,2,0 sont premiers entre eux, la rangée R_4 sera alors notée $[120]$ (ou $[\bar{1}\bar{2}0]$).

- 3) Indexer la famille de plans réticulaires dont l'un des plans coupe les axes Ox, Oy et Oz respectivement aux points A, B et C tels que :

$$\text{Plan 1 : } OA = 2a \quad OB = \infty \quad OC = c$$

$$\text{Plan 2 : } OA = 3a \quad OB = 6b \quad OC = 2c$$

Préciser l'ordre des plans 1 et 2 dans les familles aux quelles ils appartiennent puis dessiner dans chaque cas l'intersection avec la maille du plan représentant la famille réticulaire trouvée.

Donner les équations cartésiennes du plan central de la famille à laquelle appartient le plan 1 ainsi que les équations des deux plans se trouvant de part et d'autre du plan central.

SOLUTION

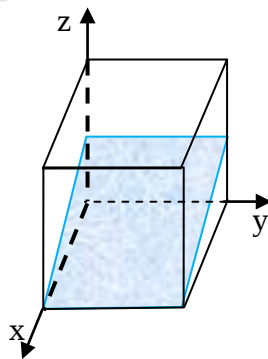
a- **Plan1** : Plan réticulaire tels que : $OA = 2a$, $OB = \infty$ et $OC = c$:

Le plan réticulaire qui coupe les axes cristallographiques Ox , Oy et Oz , respectivement aux points A , B et C tels que : $OA = 2a$, $OB = \infty$ et $OC = c$ a pour indices de Miller h , k et l tels que : $OA = a/h$, $OB = b/k$ et $OC = c/l$. On en déduit alors que les indices de Miller h , k et l du plan réticulaire considéré sont : $h = 1/2$, $k = 0$ et $l = 1$. Comme l'indice $h = 1/2$, n'est pas entier (les trois indices seront notés dans ce cas h' , k' et l' : $h' = 1/2$, $k' = 0$ et $l' = 1$), on en conclut que le plan réticulaire considéré n'est pas le plan le plus proche de l'origine de la maille mais plutôt le 2^{ème} (puisque la 1^{ère} valeur entière de h s'obtient en multipliant $1/2$ par 2). Or, le plan réticulaire représentant une famille donnée est le plan le plus proche de l'origine (1^{er} plan). Les indices de Miller h , k et l du plan réticulaire recherché (le plan le plus proche de l'origine) s'obtiennent en multipliant les indices obtenus plus haut (h' , k' et l') par 2 (pour rendre h' entier), soit :

$$h = h' \times 2 = (1/2) \times 2 = 1, k = k' \times 2 = 0 \times 2 = 0 \text{ et } l = l' \times 2 = 1 \times 2 = 2.$$

La famille réticulaire recherchée sera alors notée $(1\ 0\ 2)$: son plan le plus proche de l'origine coupe les axes cristallographiques Ox , Oy et Oz , respectivement aux points A , B et C tels que :

$$OA = a, OB = \infty (\Rightarrow \text{plan // à } Oy) \text{ et } OC = c/2.$$



Intersection avec la maille du plan représentant la famille réticulaire (102) .

Donner les équations cartésiennes du plan central de la famille à laquelle appartient le plan 1 ainsi que les équations des deux plans se trouvant de part et d'autre du plan central.

RAPPEL :

L'équation cartésienne du plan central (càd plan passant par l'origine) d'une famille réticulaire (hkl) donnée est :

$$hx + ky + lz = 0$$

Les équations cartésiennes des premiers plans encadrant le plan central sont :

$$hx + ky + lz = -1.$$

et

$$hx + ky + lz = +1.$$

APPLICATION

L'équation cartésienne du plan central de la famille (102) est :

$$x + 2z = 0$$

Les équations cartésiennes des plans encadrant le plan central de la famille (102) sont :

$$x + 2z = -1$$

et

$$x + 2z = 1$$

b- Plan2 : Plan réticulaire tels que : $OA = 3a$, $OB = 6b$ et $OC = 2c$:

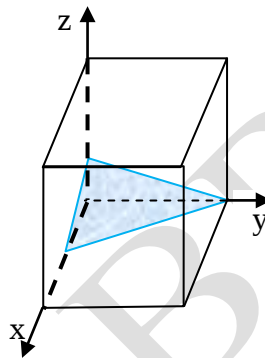
Les indices de Miller h, k et l de la famille réticulaire dont l'un des plans coupe les axes Ox, Oy et Oz respectivement aux points A, B et C tels que : $OA = 3a$, $OB = 6b$ et $OC = 2c$, s'obtiennent en écrivant que : $OA = a/h = a$, $OB = b/k = b$ et $OC = c/l$, soient :

$h = 1/3$, $k = 1/6$ et $l = 1/2$. Ces indices ne sont pas premiers entre eux, dans ce cas on note ces indices h' , k' et l' (càd : $h' = 1/3$, $k' = 1/6$ et $l' = 1/2$) et non h , k et l . Pour obtenir alors des indices h , k et l premiers entre eux, on multiplie les indices h' , k' et l' par 6 (ce nombre est le plus petit multiple commun des dénominateurs 3, 6 et 2) : le plan réticulaire considéré n'est pas alors le plan le plus proche de l'origine de la maille mais plutôt le 6^{ème} (puisque pour obtenir des indices h , k et l premiers entre eux, on multiplie les indices h' , k' et l' par 6). Les indices de Miller de la famille représentée par le plan 2 sont alors :

$h = 2$, $k = 1$ et $l = 3$ et la famille sera notée alors (2 1 3).

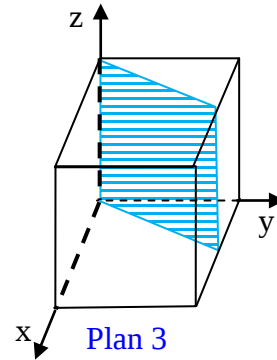
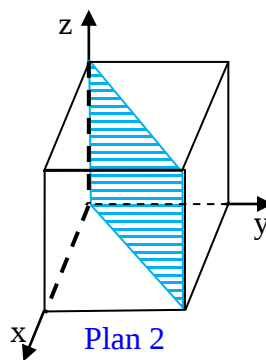
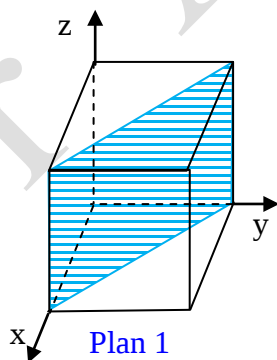
Le plan de la famille réticulaire (2 1 3) le plus proche de l'origine coupe les axes cristallographiques Ox, Oy et Oz, respectivement aux points A, B et C tels que :

$OA = a/2$, $OB = b$ et $OC = c/3$.



Intersection avec la maille du plan représentant la famille réticulaire (213).

- 4) A quelles familles réticulaires appartiennent les plans schématisés sur les figures ci-dessous (plans hachurés) :



SOLUTION**a. Plan 1**

Le plan 1 coupe les axes de la maille aux points A, B et C tels que :

$$OA = a \quad OB = b \quad \text{et} \quad Oc = \infty c$$

Or $OA = a/h$, $OB = b/k$ et $OC = c/l$ on en déduit alors que :

$$h = 1, k = 1 \text{ et } l = 0$$

La famille à laquelle fait partie le plan 1 sera alors notée (110). Cette famille est l'une des deux familles diagonales de la base (a,b).

Comme h, k et l sont entiers premiers entre eux, le plan 1 vient juste après le plan central de la famille réticulaire (110).

b. Plan 2

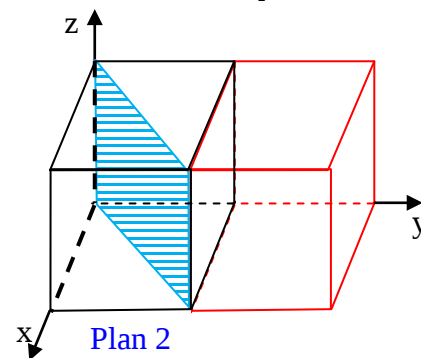
Le plan 2 est le plan central d'une famille donnée. Pour indexer cette famille, il faut repérer le plan 2 par rapport à une autre maille pour qu'il ne soit plus considéré comme plan central, par exemple celle se trouvant à droite de la maille initiale et ayant donc pour origine le point de coordonnées (0, 1, 0).

Dans ces conditions, le plan 2 coupe les axes de la nouvelle maille aux points A, B et C tels que :

$$OA = a \quad OB = -b \quad \text{et} \quad Oc = \infty c$$

Or $OA = a/h$, $OB = b/k$ et $OC = c/l$ on en déduit alors que :

$$h = 1, k = -1 \text{ et } l = 0$$

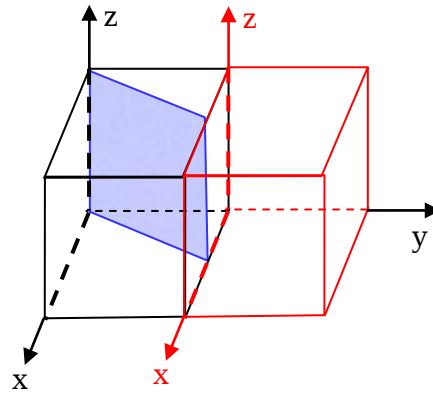


La famille à laquelle fait partie le plan 2 sera alors notée (1-10) ou $(1\bar{1}0)$ ($\equiv (\bar{1}10)$).

Cette famille est la 2^{ème} famille diagonale de la base (a,b).

REMARQUE

☞ Si on essaie d'indexer la famille recherchée en utilisant le plan central, et non pas celui qui vient juste après, on aura : $OA = a/h = 0$, $OB = b/k = 0$ et $Oc = \infty c$ ce qui conduit à $h=\infty$, $k=\infty$ et $l = 0$. Or le fait d'avoir l'un des indices égal à ∞ pose un problème comme celui qu'on peut avoir lors du calcul des distances inter-réticulaires d_{hkl} . Ainsi et à titre d'exemple si le réseau est cubique l'expression de d_{hkl} est $d_{hkl} = a / (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$ (voir question III-3), si donc h, k ou l est égal à ∞ , d_{hkl} sera nulle ce qui est aberrant puisque toute famille (hkl) doit avoir une distance inter-réticulaire d_{hkl} non nulle.

a- Plan 3 :

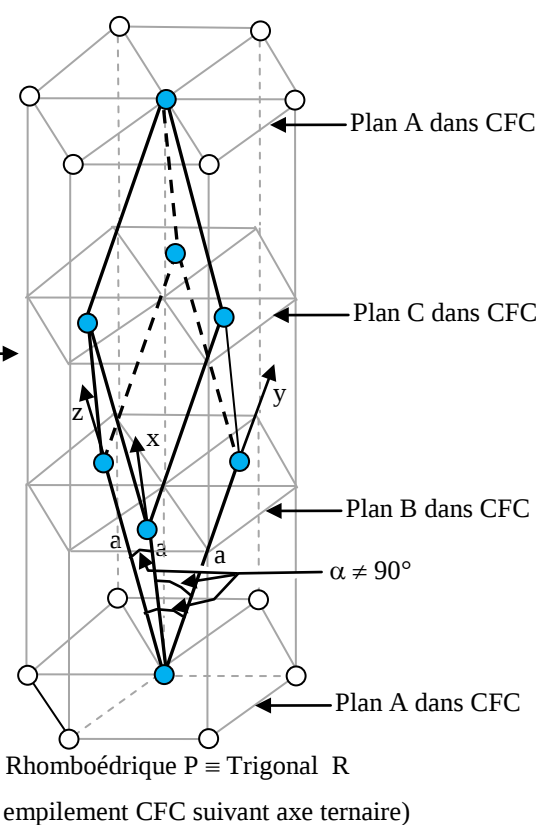
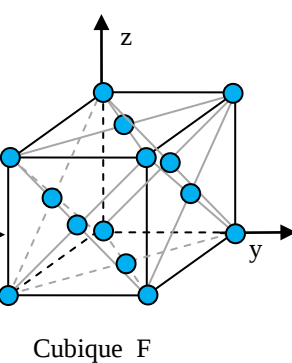
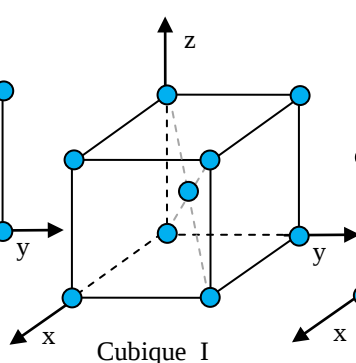
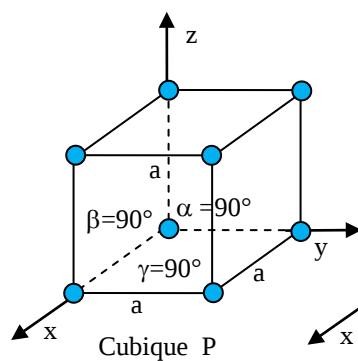
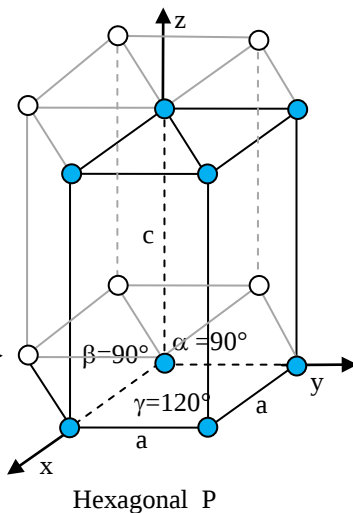
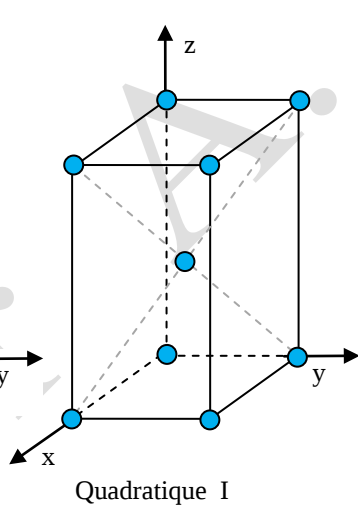
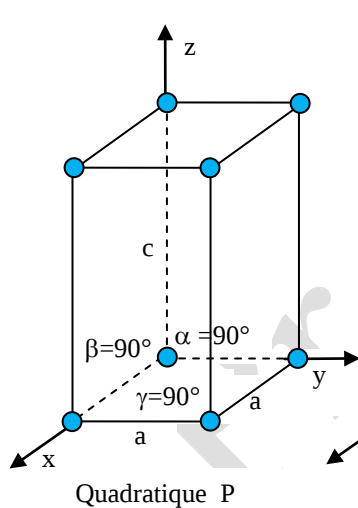
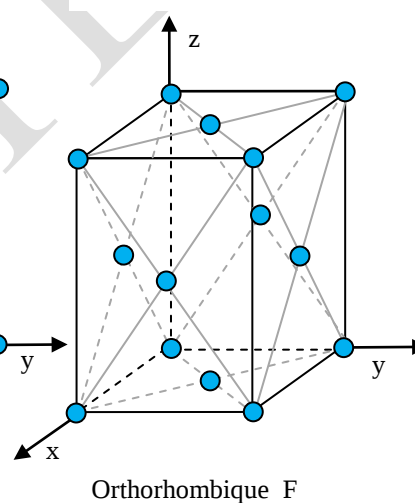
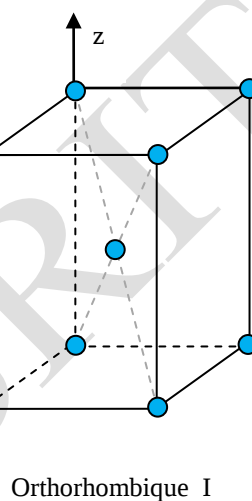
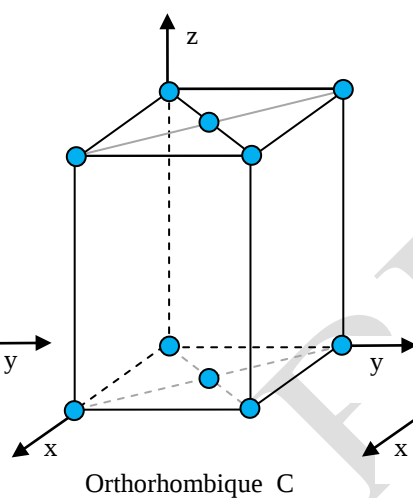
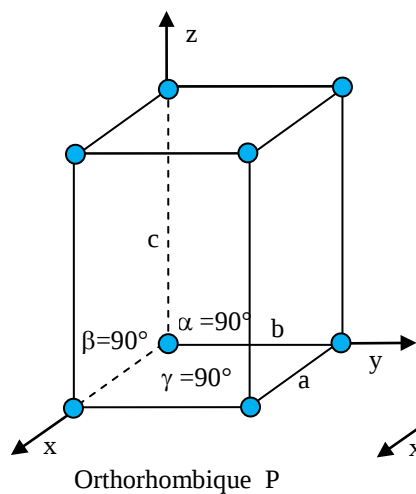
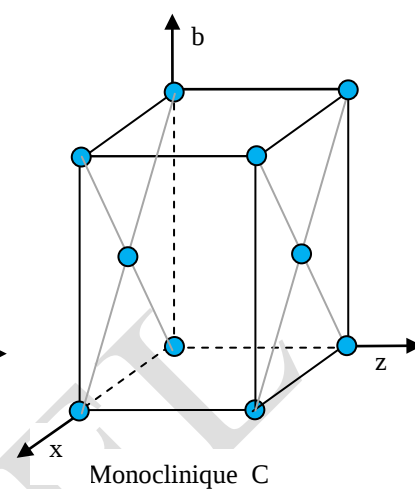
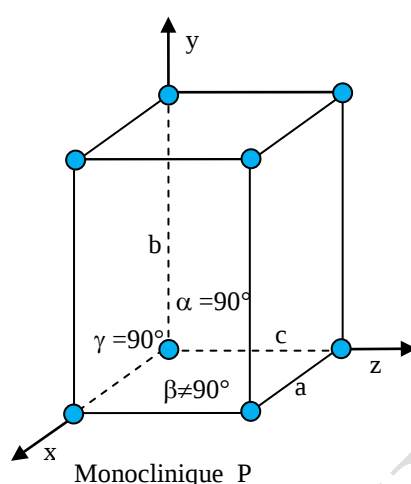
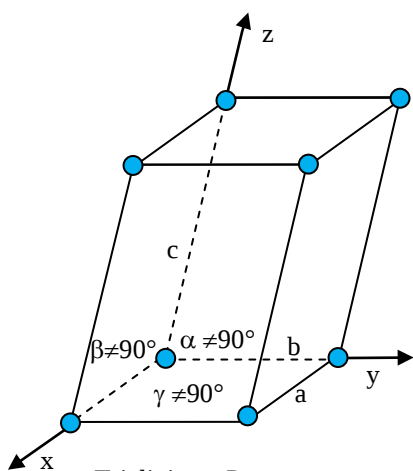
Le plan 3 est le plan central d'une famille réticulaire donnée, pour indexer cette famille, il faut repérer le plan 1 par rapport à une autre maille. L'une des mailles qu'on peut considérer est celle dont l'origine est le point de coordonnées 010 (maille rouge sur le dessin). Par rapport à cette maille, le plan hachuré passe par $OA = a/2$, $OB = -b$ et $OC = \infty$. La famille réticulaire à laquelle fait partie le plan 1 est donc la famille $(2\bar{1}0)$ ou $(\bar{2}10)$.

II- RESEAUX DE BRAVAIS :

1) Quel est le nombre de réseaux de Bravais ? préciser les systèmes auxquels ils sont attribués.

SOLUTION

Les réseaux de Bravais sont au nombre de 14 et sont répartis sur les sept systèmes cristallins comme suit :



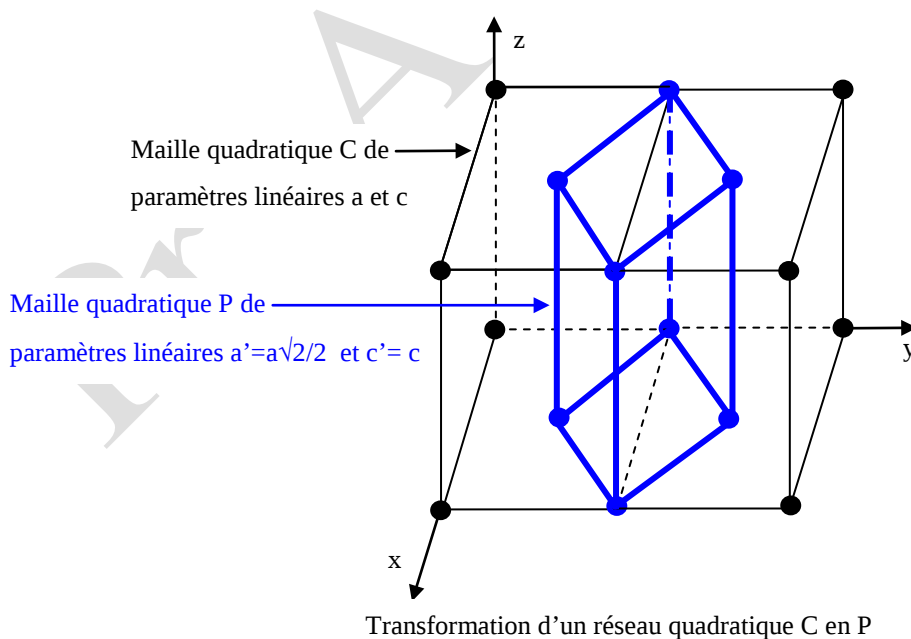
- 2) Certains modes de réseaux de Bravais n'existent pas dans certains systèmes cristallins. Ainsi, par exemple, les modes F et C (A ou B) n'existent pas dans le système quadratique. Expliquer pour quelle raison.

SOLUTION

En général, si un mode de réseau de Bravais donné n'existe pas dans un système cristallin donné, c'est parce que la maille qui représente ce mode peut être remplacée par une maille de multiplicité plus petite (càd contenant moins d'atomes) compatible avec un autre mode du même système cristallin.

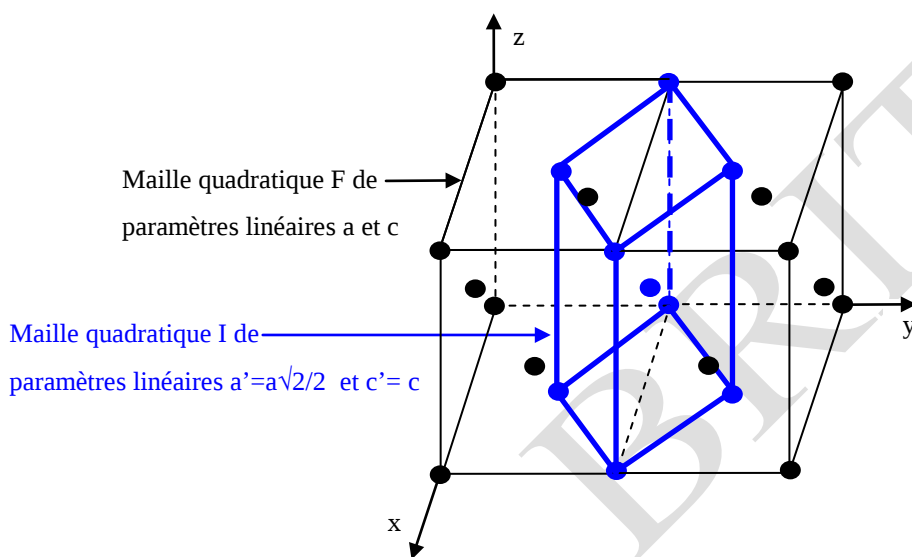
a- Inexistence du réseau quadratique bases centrées C :

Si nous considérons par exemple un réseau quadratique bases centrées C, la maille de paramètres a et c est une maille qui contient 2 atomes (8 sommets participent à la maille avec $1/8$ et 2 faces participent à la maille avec $1/2$, soit $8 \times 1/8 + 2 \times 1/2 = 2$ atomes maille), ce réseau sera remplacé par un réseau quadratique primitif (réseau décrit par une maille simple de paramètres $a' = a\sqrt{2}/2$ et $c' = c$ où les atomes ne sont que sur les sommets ce qui donne $8 \times 1/8 = 1$ atome maille: maille tracée en bleu) comme le montre la figure suivante :



b- Inexistence du réseau quadratique à faces centrées F :

De même, si nous considérons un **réseau quadratique à faces centrées F**, la maille de paramètres a et c est une maille qui contient 4 atomes (8 sommets participent à la maille avec $1/8$ et 6 faces participent à la maille avec $1/2$, soit $8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4$ **atomes maille**), ce réseau sera remplacé par un **réseau quadratique centré I** (réseau décrit par une maille de paramètres $a' = a\sqrt{2}/2$ et $c' = c$ contenant des atomes sur les sommets et participant à la maille avec $1/8$ et un atome au centre de la maille et appartient à 100% à la maille ce qui donne $8 \times 1/8 + 1 \times 1 = 2$ **atomes maille**: **maille tracée en bleu**) comme le montre la figure suivante :



Transformation d'un réseau quadratique F en I

- 3) Quel est l'effet de l'action du mode des modes de réseau de Bravais I (centré), C (bases centrées C) et F (faces centrées) sur une position atomique (x, y, z) ?

SOLUTION

- a- Quand le mode de réseau de Bravais est I (centré), une position atomique (x, y, z) aura une position équivalente qu'on obtient par la translation : $(+1/2, +1/2, +1/2)$. La position en question est alors :

$$(x + 1/2, y + 1/2, z + 1/2)$$

NB :

Si $(x, y, z) = (0, 0, 0) \Rightarrow$ la position équivalente aura comme coordonnées : $(+1/2, +1/2, +1/2)$.

- b- Quand le mode de réseau de Bravais est C (bases centrées C), une position atomique (x,y,z) aura une position équivalente qu'on obtient par la translation : $(+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, 0)$. La position en question sont alors :

$$(x+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}, z)$$

NB :

Si $(x, y, z) = (0, 0, 0) \Rightarrow$ la position équivalente aura comme coordonnées : $(+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, 0)$.

REMARQUES

- ☞ Si le mode de réseau de Bravais est A (bases centrées A), une position atomique (x,y,z) aura une position équivalente qu'on obtient par la translation : $(0, +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2})$. La position en question est alors :

$$(x, y+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2})$$

NB :

Si $(x, y, z) = (0, 0, 0) \Rightarrow$ la position équivalente aura comme coordonnées : $(0, +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2})$.

- ☞ Si le mode de réseau de Bravais est B (bases centrées B), une position atomique (x,y,z) aura une position équivalente qu'on obtient par la translation : $(+\frac{1}{2}, 0, +\frac{1}{2})$. La position en question est alors :

$$(x+\frac{1}{2}, y, z+\frac{1}{2})$$

NB :

Si $(x, y, z) = (0, 0, 0) \Rightarrow$ la position équivalente aura comme coordonnées : $(+\frac{1}{2}, 0, +\frac{1}{2})$.

- c- Quand le mode de réseau de Bravais est F (faces centrées), une position atomique (x,y,z) aura trois positions équivalentes qu'on obtient par les translations : $(+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, 0)$, $(+\frac{1}{2}, 0, +\frac{1}{2})$ et $(0, +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2})$. Les positions en question sont alors :

$$(x+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}, z), (x+\frac{1}{2}, y, z+\frac{1}{2}) \text{ et } (x, y+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2})$$

NB :

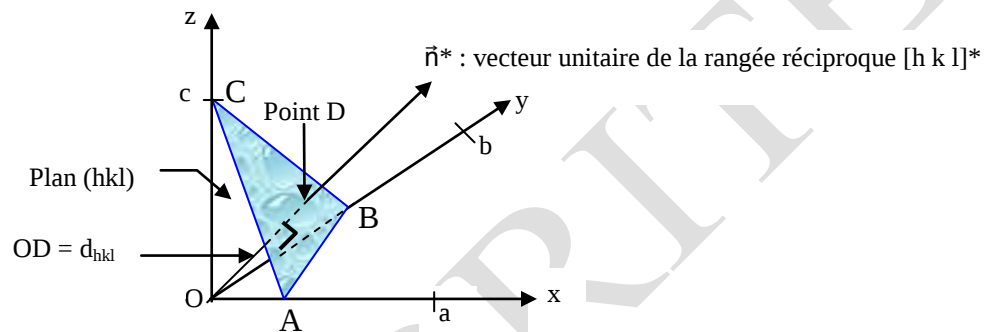
Si $(x, y, z) = (0, 0, 0) \Rightarrow$ les trois positions équivalentes auront comme coordonnées : $(+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, 0)$, $(+\frac{1}{2}, 0, +\frac{1}{2})$ et $(0, +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2})$.

III- RELATIONS ENTRE LES RESEAUX DIRECT ET RECIPROQUE :

- 1) Montrer qu'une rangée réticulaire $[hkl]^*$ du réseau réciproque est perpendiculaire à la famille de plans réticulaires (hkl) du réseau direct.

SOLUTION

Soient $\vec{n}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$ le vecteur unitaire de la rangée réciproque $[h k l]^*$, et A, B et C les points d'intersection du 1^{er} plan de la famille réticulaire $(h k l)$ avec les axes Ox, Oy et Oz du réseau direct :



Calculons les produits scalaires $\vec{n}^* \cdot \vec{AB}$ et $\vec{n}^* \cdot \vec{AC}$:

$$\vec{AB} = \vec{AO} + \vec{OB} = -\vec{OA} + \vec{OB} = -\vec{a}/h + \vec{b}/k$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \vec{n}^* \cdot \vec{AB} &= (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \times (-\vec{a}/h + \vec{b}/k) \\ &= -\vec{a}^* \cdot \vec{a} + (h/k)\vec{a}^* \cdot \vec{b} - (k/h)\vec{b}^* \cdot \vec{a} + \vec{b}^* \cdot \vec{b} - (l/h)\vec{c}^* \cdot \vec{a} + (l/k)\vec{c}^* \cdot \vec{b} \end{aligned}$$

En utilisant les formules reliant l'espace direct et l'espace réciproque, $\vec{n}^* \cdot \vec{AB}$ devient :

$$\vec{n}^* \cdot \vec{AB} = -1+0-0+1-0+0 = 0$$

$\Rightarrow$

$$\vec{n}^* \perp \vec{AB} \quad (1)$$

De même :

$$\vec{AC} = \vec{AO} + \vec{OC} = -\vec{OA} + \vec{OC} = -\vec{a}/h + \vec{c}/l$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \vec{n}^* \cdot \vec{AC} &= (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \times (-\vec{a}/h + \vec{c}/l) \\ &= -\vec{a}^* \cdot \vec{a} + (h/l)\vec{a}^* \cdot \vec{c} - (k/h)\vec{b}^* \cdot \vec{a} + (k/l)\vec{b}^* \cdot \vec{c} - (l/h)\vec{c}^* \cdot \vec{a} + \vec{c}^* \cdot \vec{c} \end{aligned}$$

En utilisant les formules reliant l'espace direct et l'espace réciproque, $\vec{n}^* \cdot \vec{AC}$ devient :

$$\vec{n}^* \cdot \vec{AC} = -1+0-0+0-0+1 = 0$$

$\Rightarrow$

$$\vec{n}^* \perp \vec{AC} \quad (2)$$

(1) et (2) $\Rightarrow \vec{n}^* \perp \text{plan (ABC)}$ soit :

$$\vec{n}^* \perp (hkl).$$

- 2) Montrer que la distance inter-réticulaire d_{hkl} de la famille (hkl) du réseau direct correspond à l'inverse de la période n^*_{hkl} de la rangée $[hkl]^*$ du réseau réciproque càd que : $d_{hkl} = 1/n^*_{hkl}$.

SOLUTION

Soient $\vec{n}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$ le vecteur unitaire de la rangée réciproque $[h \ k \ l]^*$, et A, B et C les points d'intersection du 1^{er} plan de la famille réticulaire (h k l) avec les axes Ox, Oy et Oz du réseau direct :

$$\begin{aligned} \vec{OA} \cdot \vec{n}^* &= |\vec{OA}| \times |\vec{n}^*| \times \cos(\vec{OA}, \vec{n}^*) = |\vec{OA}| \times \cos(\vec{OA}, \vec{n}^*) \times |\vec{n}^*| \\ &= (\text{projection de } \vec{OA} / \vec{n}^*) \times |\vec{n}^*| = OD \times |\vec{n}^*| \text{ or } OD = d_{hkl} \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\vec{OA} \cdot \vec{n}^* = d_{hkl} \times |\vec{n}^*| \quad (1)$$

D'autre part,

$$\begin{aligned} \vec{OA} \cdot \vec{n}^* &= (\vec{a}/h) \cdot (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \\ &= \vec{a}\vec{a}^* + (k/h)\vec{a}\vec{b}^* + (l/h)\vec{a}\vec{c}^* \end{aligned}$$

En utilisant les formules reliant l'espace direct et l'espace réciproque, $\vec{OA} \cdot \vec{n}^*$ devient :

$$\vec{OA} \cdot \vec{n}^* = 1+0+0 \text{ soit :}$$

$$\vec{OA} \cdot \vec{n}^* = 1 \quad (2)$$

(1) et (2) $\Rightarrow$

$$d_{hkl} \times |\vec{n}^*| = 1$$

soit :

$$d_{hkl} = 1/n^*_{hkl}$$

- 3) Déterminer, en utilisant le réseau réciproque, l'expression de la distance inter-réticulaire d'une famille donnée en fonction des paramètres d'un réseau cubique.

SOLUTION

Nous avons vu à la question précédente que d_{hkl} et n_{hkl}^* sont reliés par la relation :

$$d_{hkl} \cdot n_{hkl}^* = 1 \Rightarrow d_{hkl} = 1/n_{hkl}^*$$

$$\text{or } \vec{n}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

$$\Rightarrow n^* = [h^2 \vec{a}^{*2} + k^2 \vec{b}^{*2} + l^2 \vec{c}^{*2} + 2hk \vec{a}^* \vec{b}^* + 2hl \vec{a}^* \vec{c}^* + 2kl \vec{b}^* \vec{c}^*]^{1/2} \text{ soit :}$$

$$n^* = [h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hk a^* b^* \cos \gamma^* + 2hl a^* c^* \cos \beta^* + 2kl b^* c^* \cos \alpha^*]^{1/2}.$$

Donc :

$$d_{hkl} = [h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hk a^* b^* \cos \gamma^* + 2hl a^* c^* \cos \beta^* + 2kl b^* c^* \cos \alpha^*]^{-1/2}$$

En utilisant les formules reliant l'espace direct et l'espace réciproque, d_{hkl} devient :

$$d_{hkl} = [(h^2 / (a^2 \cos^2(\vec{a}, \vec{a}^*))) + (k^2 / (b^2 \cos^2(\vec{b}, \vec{b}^*))) + (l^2 / (c^2 \cos^2(\vec{c}, \vec{c}^*))) - (2hk \cos \gamma / ((ab \cos(\vec{a}, \vec{a}^*) \cos(\vec{b}, \vec{b}^*))) - (2hl \cos \beta / ((ac \cos(\vec{a}, \vec{a}^*) \cos(\vec{c}, \vec{c}^*))) - (2kl \cos \alpha / ((bc \cos(\vec{b}, \vec{b}^*) \cos(\vec{c}, \vec{c}^*))))]^{-1/2}.$$

Dans le cas du système orthorhombique :

$$d_{hkl} = [h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2}]^{-1/2}$$

soit :

$$d_{hkl} = [(h^2 / a^2) + (k^2 / b^2) + (l^2 / c^2)]^{-1/2}$$

Dans le cas du système quadratique :

$$d_{hkl} = [(h^2 + k^2) a^{*2} + (l^2 c^{*2})]^{-1/2}$$

soit :

$$d_{hkl} = [(h^2 + k^2) / a^2 + (l^2 / c^2)]^{-1/2}$$

Dans le cas du système cubique :

$$d_{hkl} = [(h^2 + k^2 + l^2) a^{*2}]^{-1/2}$$

$$= [(h^2 + k^2 + l^2) / a^2]^{-1/2}$$

soit :

$$d_{hkl} = a / (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$$

4) Quels angles forment entre elles les rangées, du système hexagonal, suivantes :

a- $[100]$ et $[100]^*$?

b- $[010]$ et $[010]^*$?

c- $[001]$ et $[001]^*$?

NB : la connaissance des angles ci-dessus est nécessaire pour établir l'expression de d_{hkl} dans le cas du système hexagonal.

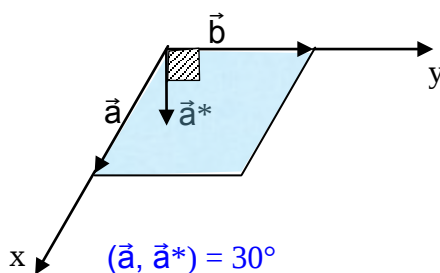
SOLUTION

RAPPEL

👉 Le réseau hexagonal est décrit par une maille dont les paramètres linéaires et angulaires sont comme suit : $a = b \neq c$ et $\alpha = \beta = 90^\circ$ et $\gamma = 120^\circ$.

a- angles entre les rangées $[100]$ et $[100]^*$ du système hexagonal :

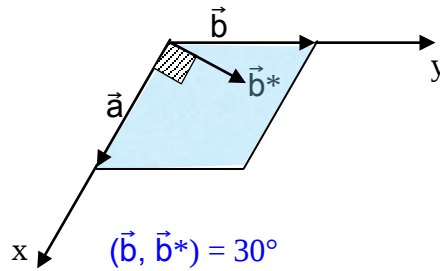
Dans le système hexagonal, la rangée $[100]$, qui n'est autre que l'axe Ox , fait un angle de 120° avec la face (b,c) . Pour ce qui concerne la rangée $[100]^*$, elle est toujours perpendiculaire à la face (b,c) quel que soit le système cristallin (et non pas uniquement dans le cas du système hexagonal), par conséquent dans le cas du système hexagonal, l'angle entre les rangées $[100]^*$ et $[100]$ est égal à $30^\circ (=120-90)$.



b- angles entre les rangées $[010]$ et $[010]^*$ du système hexagonal :

Dans le système hexagonal, la rangée $[010]$, qui n'est autre que l'axe Oy , fait un angle de 120° avec la face (a,c) . Pour ce qui concerne la rangée $[010]^*$, elle est toujours perpendiculaire à la face (a,c) quel que soit le système cristallin (et non pas uniquement dans

le cas du système hexagonal), par conséquent dans le cas du système hexagonal, l'angle entre les rangées $[010]^*$ et $[010]$ est égal à $30^\circ (= 120-90)$.



c- angles entre les rangées $[001]$ et $[001]^*$ du système hexagonal :

Dans le système hexagonal, la rangée $[001]$, qui n'est autre que l'axe Oz , est perpendiculaire à la base (a,b) . Pour ce qui concerne la rangée $[001]^*$, elle est toujours perpendiculaire à la base (a,b) quel que soit le système cristallin (et non pas uniquement dans le cas du système hexagonal), par conséquent dans le cas du système hexagonal $[001]$ et $[001]^*$ sont colinéaires et de ce fait l'angle entre les deux rangées est nul.

NB : la connaissance des angles ci-dessus est nécessaire pour établir l'expression de d_{hkl} dans le cas du système hexagonal. En effet :

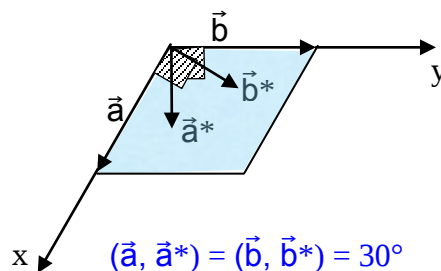
D'après la question 3, l'expression de d_{hkl} est la suivante :

$$d_{hkl} = [(h^2 / (a^2 \cos^2(\vec{a}, \vec{a}^*)) + (k^2 / (b^2 \cos^2(\vec{b}, \vec{b}^*)) + (l^2 / (c^2 \cos^2(\vec{c}, \vec{c}^*))) - (2hkc \cos \gamma / ((ab \cos(\vec{a}, \vec{a}^*) \cos(\vec{b}, \vec{b}^*))) - (2hlc \cos \beta / ((ac \cos(\vec{a}, \vec{a}^*) \cos(\vec{c}, \vec{c}^*))) - (2klc \cos \alpha / ((bc \cos(\vec{b}, \vec{b}^*) \cos(\vec{c}, \vec{c}^*))))]^{-1/2}.$$

D'après la question a- ci-dessus, $\cos(\vec{a}, \vec{a}^*)$ va avoir comme expression :

$$\cos(\vec{a}, \vec{a}^*) = \cos 30^\circ = 3^{1/2}/2$$

$$\cos(\vec{a}, \vec{a}^*) = \cos(\vec{b}, \vec{b}^*) = \cos 30^\circ = 3^{1/2}/2$$



De même d'après les questions **b-** et **c-** ci-dessus, $\cos(\vec{b}, \vec{b}^*)$ et $\cos(\vec{c}, \vec{c}^*)$ vont avoir comme expression :

$$\cos(\vec{b}, \vec{b}^*) = \cos 30^\circ = 3^{1/2}/2 \quad \text{et} \quad \cos(\vec{c}, \vec{c}^*) = \cos 0^\circ = 1$$

Tenant compte des résultats des questions précédentes et du fait que $a = b$, $\cos(120^\circ) = -1/2$ et $\cos(90^\circ) = 0$, l'expression de la distance inter-réticulaire d'une famille donnée en fonction des paramètres directs de la maille hexagonale sera :

$$d_{hkl} = [(h^2 / (a^2 \times 3/4)) + (k^2 / (a^2 \times 3/4)) + (l^2 / (c^2)) - (2hk \cos(120^\circ) / ((a^2 \times 3/4)) - (2hl \cos 90^\circ / (ac \ 3^{1/2}/2)) - (2kl \cos 90^\circ / (bc \ 3^{1/2}/2))]^{-1/2}.$$

Comme $\cos(120^\circ) = -1/2$ et $\cos 90^\circ = 0$

L'expression de d_{hkl} devient :

$$d_{hkl} = [((h^2 + k^2) / (a^2 \times 3/4)) + (l^2 / (c^2)) + (hk / (a^2 \times 3/4))]$$

soit enfin :

$$d_{hkl} = [4(h^2 + k^2) / (3a^2) + (l^2 / (c^2)) + (4hk / (3a^2))]$$

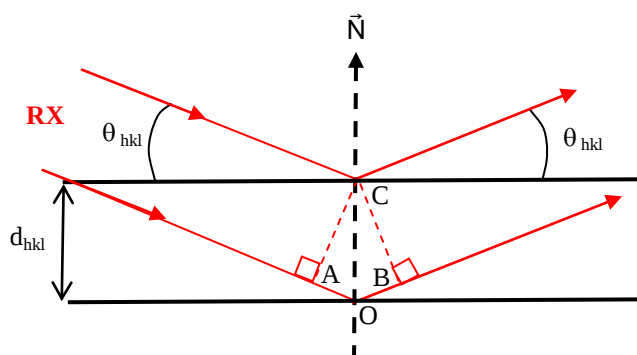
Ou :

$$d_{hkl} = [(4(h^2 + k^2) + hk) / (3a^2) + (l^2 / (c^2))]$$

IV- DIFFRACTION DES RAYONS X :

1) Démontrer la relation de diffraction de Bragg.

SOLUTION



Sur la figure on voit que la différence de marche entre le rayon incident et le rayon diffracté est :

$$\delta = AO + OB = d_{hkl} \sin\theta_{hkl} + d_{hkl} \sin\theta_{hkl} = 2 d_{hkl} \sin\theta_{hkl}.$$

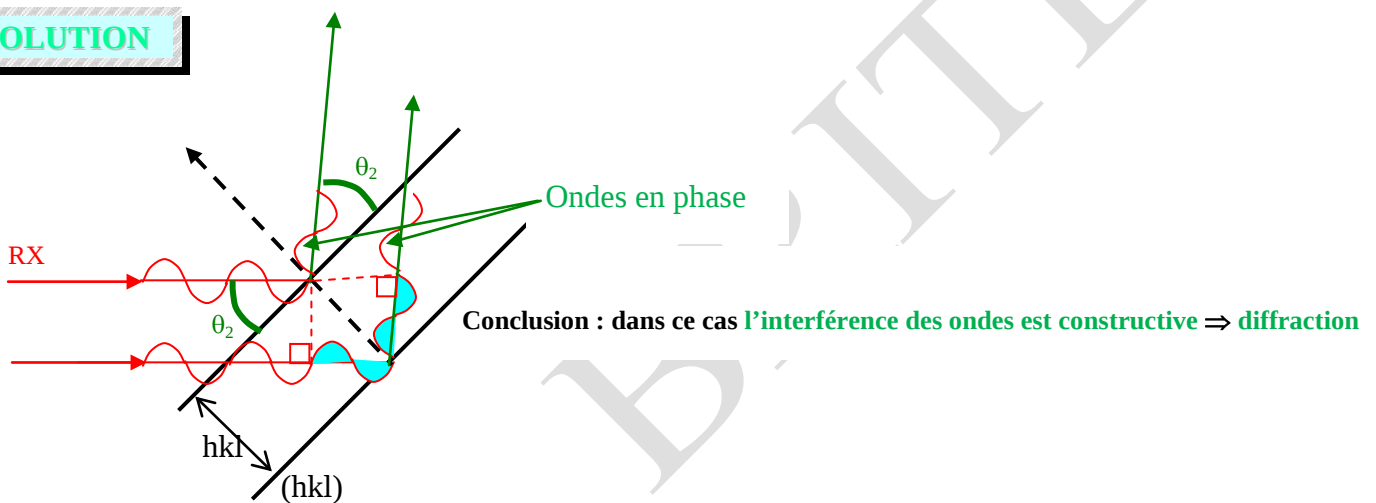
Pour que l'interférence soit constructive, il faudrait que : $\delta = n \lambda$, par conséquent on devrait avoir :

$$2 d_{hkl} \sin\theta_{hkl} = n \lambda$$

n (entier) étant l'ordre de la réflexion.

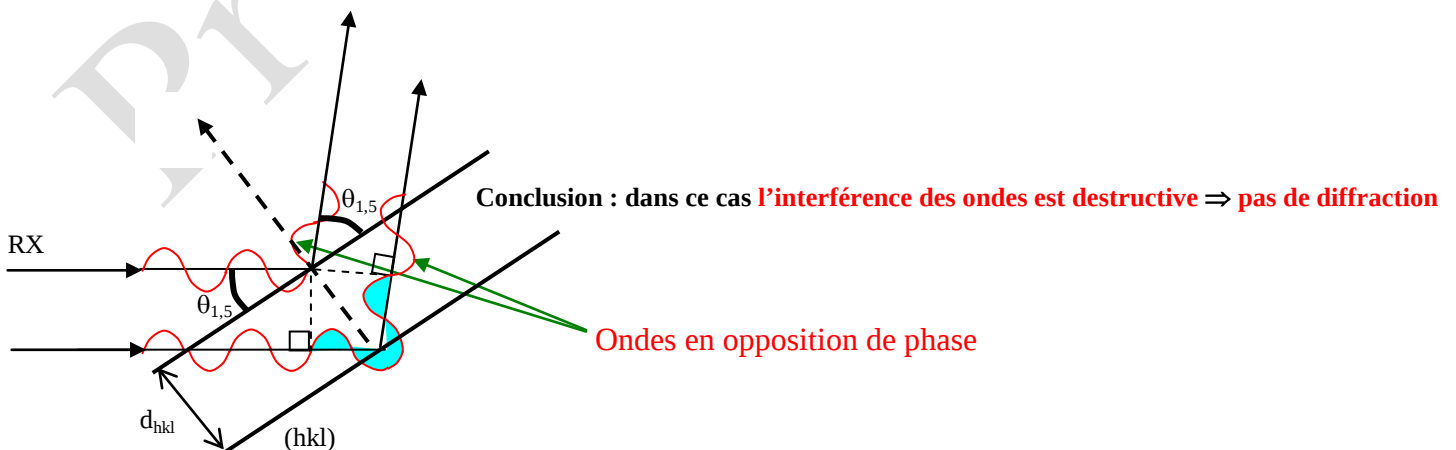
2) Représenter la figure de diffraction avec une différence de marche $\delta = 2\lambda$. Conclure.

SOLUTION



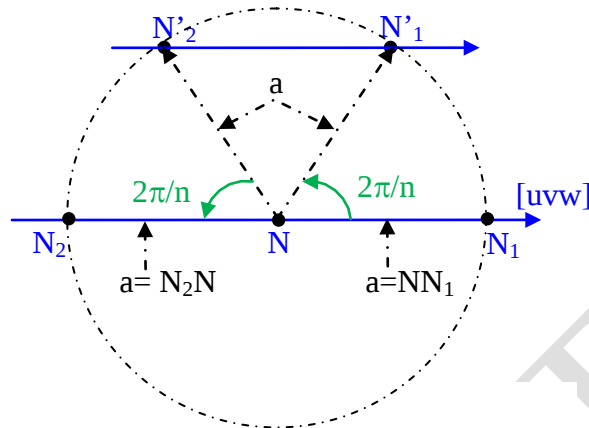
3) Représenter la figure de diffraction avec une différence de marche $\delta = 1,5\lambda$. Conclure.

SOLUTION



V- SYMETRIE CRISTALLINE :

- 1) Montrer que les seuls ordres possibles pour les axes directs (ou inverses) sont les ordres 1, 2, 3, 4 et 6.

SOLUTION

Considérons un axe C_n perpendiculaire au plan de la figure et traversant le nœud N , ce dernier faisant partie d'une rangée réticulaire $[uvw]$ de paramètre (ou période) a . Les nœuds N'_1 et N_2 sont respectivement les images par l'axe C_n des nœuds N_1 et N'_2 (N_1 et N_2 appartiennent à la rangée $[uvw]$ et sont symétriques par rapport au nœud N). Les nœuds N'_1 et N'_2 , ayant le même écartement par rapport à la rangée contenant N_1 et N_2 , se trouvent alors sur une rangée équivalente à la rangée passant par N_1 et N_2 (rangée $[uvw]$) et de ce fait elle lui est parallèle. Il en résulte que :

$$N'_1 N'_2 = m a \quad (1)$$

avec m nombre entier positif, négatif ou nul selon que l'angle $2\pi/n$ est aigu, obtus ou nul.

D'autre part, le triangle $NN'_1N'_2$ nous permet d'écrire que :

$$(N'_1 N'_2)/2 = a \cos(2\pi/n) \text{ soit :}$$

$$N'_1 N'_2 = 2a \cos(2\pi/n) \quad (2)$$

$$\cos(2\pi/n) = m/2$$

(1) et (2) $\Rightarrow$

$$-1 \leq m/2 \leq +1 \Rightarrow -2 \leq m \leq +2$$

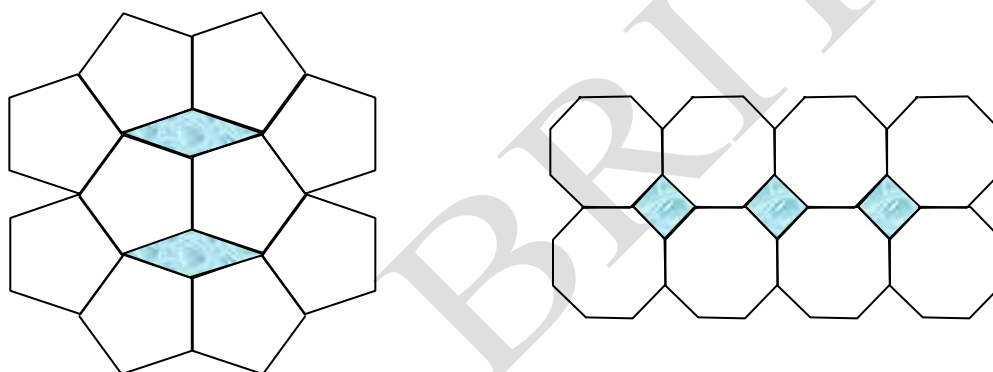
$$\rightarrow \text{si } m = -2 \Rightarrow \cos 2\pi/n = -1 \Rightarrow 2\pi/n = \pi = 2\pi/2 \Rightarrow n = 2$$

$$\rightarrow \text{si } m = -1 \Rightarrow \cos 2\pi/n = -1/2 \Rightarrow 2\pi/n = 2\pi/3 \Rightarrow n = 3$$

$$\begin{aligned}
 \rightarrow \text{ si } m = 0 & \Rightarrow \cos 2\pi/n = 0 & \Rightarrow 2\pi/n = \pi/2 = 2\pi/4 & \Rightarrow \underline{n = 4} \\
 \rightarrow \text{ si } m = 1 & \Rightarrow \cos 2\pi/n = 1/2 & \Rightarrow 2\pi/n = \pi/3 = 2\pi/6 & \Rightarrow \underline{n = 6} \\
 \rightarrow \text{ si } m = +2 & \Rightarrow \cos 2\pi/n = 1 & \Rightarrow 2\pi/n = 2\pi = 2\pi/1 & \Rightarrow \underline{n = 1}
 \end{aligned}$$

Les axes d'ordre 2, 3, 4 et 6 sont donc les seuls axes compatibles avec la périodicité d'un réseau cristallin.

L'existence des seuls axes 2, 3, 4 et 6 peut également s'expliquer en considérant les figures suivantes qui représentent la juxtaposition de mailles formant un réseau plan hypothétique. Comme on le sait, il ne peut exister de vide entre ces mailles, et l'existence d'axes d'ordre 5 ou supérieur à 6 dans ces mailles implique nécessairement l'existence de vides (parties en gris sur les figures suivantes). Le fait qu'il soit impossible de couvrir un plan en juxtaposant des pentagones réguliers ou des polygones réguliers à plus de 6 côtés, sans laisser de vide, confirme donc l'absence de ces éléments de symétrie dans le réseau cristallin.



- 2) Donner les positions équivalentes à une position atomique (x,y,z) si celle-ci subit l'action de l'un des axes de symétrie $\bar{1}$ et $\bar{2}$ (ces derniers sont orientés suivant l'axe Oz). En déduire les éléments de symétrie équivalents aux axes $\bar{1}$ et $\bar{2}$.

RAPPEL :

- ☞ Un axe de rotation d'ordre n fait coïncider le cristal avec lui-même après une rotation, dans le sens trigonométrique, d'angle $2\pi/n$, n est un nombre entier positif.
- ☞ Un axe de rotation-inversion (dite aussi roto-inversion ou inversion rotatoire) fait coïncider le cristal avec lui-même après une rotation d'angle $2\pi/n$ autour de l'axe, dans le sens trigonométrique, suivie d'une symétrie (ou inversion) par rapport à un point situé sur cet axe.

a- Les positions équivalentes par l'axe $\bar{1}$ sont les suivantes :

Si l'axe d'ordre n est l'axe Oz et le centre d'inversion pour les axes inverses est situé en (0, 0, 0), on peut écrire alors que :

Les positions équivalentes par l'axe $\bar{1}$ sont les suivantes :

$$(x,y,z) \xrightarrow{1} (x,y,z) \xrightarrow{\text{inversion par rapport à l'origine}} (\bar{x},\bar{y},\bar{z})$$

$$\Rightarrow \bar{1} \equiv i \text{ (inversion)}$$

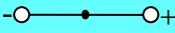
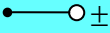
b- Les positions équivalentes par l'axe $\bar{2}$ sont les suivantes :

$$(x,y,z) \xrightarrow{\bar{2}} (\bar{x},\bar{y},z) \xrightarrow{\text{inversion par rapport à l'origine}} (x,y,\bar{z})$$

$$\Rightarrow \bar{2} \equiv m \text{ (miroir)}$$

$$(\bar{2} = Oz \Rightarrow m = xOy)$$

n	Positions générées par les axes $\bar{1}$ et $\bar{2}$ (l'axe d'ordre n est l'axe Oz et le centre d'inversion pour les axes inverses est situé en (0, 0, 0))			
$\bar{1} = i$	(x,y,z)	($\bar{x},\bar{y},\bar{z}$)		
$\bar{2} = m$	(x,y,z)	(x,y, $\bar{z}$)		

Représentation de la projection des positions générées par les axes $\bar{1}$ et $\bar{2}$ (l'axe d'ordre $\bar{n} = Oz$ et cet axe est $\perp$ à la feuille et passe par le point noir des représentations ci-dessous)		
axes	$\bar{1}$	$\bar{2}$
Positions équivalentes		

3) Tous les axes de réflexion rotatoire sont équivalents à un axe de symétrie direct ou inverse ou à une combinaison de ces axes. Ainsi $3' \equiv \bar{6} \equiv 3/m$ et $6' \equiv \bar{3} \equiv 3+\bar{1}$, à quoi correspond alors les axes 1', 2' et 4'.

SOLUTION

RAPPEL

👉 Un axe de réflexion rotatoire (dite aussi roto-réflexion ou rotation-réflexion) fait coïncider le cristal avec lui-même après une rotation d'angle $2\pi/n$ autour de l'axe n, suivie d'une symétrie (ou réflexion) par rapport à un plan (miroir) perpendiculaire à cet axe.

a- Axe 1' :

Les positions équivalentes par l'axe 1' orienté suivant Oz sont les suivantes :

$$(x,y,z) \xrightarrow{1} (x,y,z) \xrightarrow{m \perp Oz} (x,y,\bar{z})$$

(x,y,z) a donc pour image $(x,y,\bar{z})$

$$\Rightarrow 1' \equiv m$$

b- Axe 2' :

Les positions équivalentes par l'axe 2' orienté suivant Oz sont les suivantes :

$$(x,y,z) \xrightarrow{2 // Oz} (\bar{x},\bar{y},z) \xrightarrow{m \perp Oz} (\bar{x},\bar{y},\bar{z})$$

(x,y,z) a donc pour image $(\bar{x},\bar{y},\bar{z})$

$$\Rightarrow 2' \equiv \bar{1}$$

c- Axe 4' :

Rappel : $(x,y,z) \xrightarrow{4 // Oz} (\bar{y},x,z) \xrightarrow{4 // Oz} (\bar{x},\bar{y},z) \xrightarrow{4 // Oz} (y,\bar{x},z)$

Donc les positions équivalentes par l'axe 4' orienté suivant Oz sont les suivantes :

$$\begin{aligned} (x,y,z) &\xrightarrow{4 // Oz} (\bar{y},x,z) \xrightarrow{m \perp Oz} (\bar{y},x,\bar{z}) \xrightarrow{4 // Oz} (\bar{x},\bar{y},\bar{z}) \xrightarrow{m \perp Oz} \\ &\xrightarrow{4 // Oz} (\bar{x},\bar{y},z) \xrightarrow{4 // Oz} (y,\bar{x},z) \xrightarrow{m \perp Oz} (y,\bar{x},\bar{z}) \xrightarrow{4 // Oz} (x,y,\bar{z}) \xrightarrow{m \perp Oz} \\ &\xrightarrow{4 // Oz} (x,y,z) \end{aligned}$$

Les images de la position (x,y,z) par l'axe 4' sont alors (**positions en bleu**) :

(x,y,z) , $(\bar{y},x,\bar{z})$, $(\bar{x},\bar{y},z)$ et $(y,\bar{x},\bar{z})$

Ces positions ne sont autres que les images de la position (x,y,z) par l'axe $\bar{4}$ (voir cours).

$$\Rightarrow 4' \equiv \bar{4}$$

REMARQUE

☞ Pour ce qui concerne les équivalences $3' \equiv \bar{6} \equiv 3/m$ et $6' \equiv \bar{3} \equiv 3+\bar{1}$, on peut les établir de la façon suivante :

d- Axe 3' :

Rappel : $(x,y,z) \xrightarrow{3 // Oz} (\bar{y},x-y,z) \xrightarrow{3 // Oz} (y-x,\bar{x},z)$

Donc les positions équivalentes par l'axe 3' orienté suivant Oz sont les suivantes :

$$\begin{aligned} (x,y,z) &\xrightarrow{3 // Oz} (\bar{y},x-y,z) \xrightarrow{m \perp Oz} (\bar{y},x-y,\bar{z}) \xrightarrow{3 // Oz} (y-x,\bar{x},\bar{z}) \xrightarrow{m \perp Oz} \\ &\xrightarrow{3 // Oz} (y-x,\bar{x},z) \xrightarrow{3 // Oz} (x,y,z) \xrightarrow{m \perp Oz} (x,y,\bar{z}) \xrightarrow{3 // Oz} \\ &(\bar{y},x-y,\bar{z}) \xrightarrow{m \perp Oz} (\bar{y},x-y,z) \xrightarrow{3 // Oz} (y-x,\bar{x},z) \xrightarrow{m \perp Oz} (y-x,\bar{x},\bar{z}) \\ &\xrightarrow{3 // Oz} (x,y,\bar{z}) \xrightarrow{m \perp Oz} (x,y,z) \end{aligned}$$

Conclusion :

Les images de la position (x,y,z) par l'axe $3'$ orienté suivant Oz sont (**positions en bleu**) :

$(\bar{y},x-y,\bar{z})$, $(y-x, \bar{x},z)$, $(x,y,\bar{z})$, $(\bar{y},x-y,z)$ et $(y-x,\bar{x},\bar{z})$

Ces positions ne sont autres que les images de la position (x,y,z) par l'axe $\bar{6}$ orienté suivant Oz (voir cours) .

$$\Rightarrow 3' \equiv \bar{6}$$

D'un autre côté, les trois positions à z positifs : (x,y,z) $(\bar{y},x-y, z)$ et $(y-x, \bar{x},z)$ sont images l'une de l'autre par l'axe $3//Oz$ et les trois positions à z négatifs $(x,y,\bar{z})$ $(\bar{y},x-y, \bar{z})$ et $(y-x, \bar{x},\bar{z})$ sont respectivement les images des positions précédentes par un miroir perpendiculaire à Oz ($m = xOy$) on en conclue donc que $3' \equiv 3/m$

Conclusion : $3' \equiv \bar{6} \equiv 3/m$

e- Axe 6' :**Rappel :**

$$(x,y,z) \xrightarrow{6//Oz} (x-y,x,z) \xrightarrow{6//Oz} (\bar{y},x-y,z) \xrightarrow{6//Oz} (\bar{x},\bar{y},z) \xrightarrow{6//Oz} (y-x, \bar{x},z) \xrightarrow{6//Oz} (y,y-x, z)$$

Donc les positions équivalentes par l'axe $6'$ orienté suivant Oz sont les suivantes :

$$\begin{aligned} (x,y,z) &\xrightarrow{6//Oz} (x-y,x,z) \xrightarrow{m \perp Oz} (x-y,x,\bar{z}) \xrightarrow{6//Oz} (\bar{y},x-y,\bar{z}) \xrightarrow{m \perp Oz} (\bar{y},x-y,z) \xrightarrow{6//Oz} (\bar{x},\bar{y},z) \xrightarrow{m \perp Oz} (\bar{x},\bar{y},\bar{z}) \xrightarrow{6//Oz} (y-x,\bar{x},\bar{z}) \\ &\xrightarrow{m \perp Oz} (y-x,\bar{x},z) \xrightarrow{6//Oz} (y,y-x, z) \xrightarrow{m \perp Oz} (y,y-x, \bar{z}) \xrightarrow{6//Oz} (x,y,\bar{z}) \xrightarrow{m \perp Oz} (x,y,z) \end{aligned}$$

Les images de la position (x,y,z) par l'axe $6'$ orienté suivant Oz sont alors (**positions en bleu**):

$(x-y,x,\bar{z})$, $(\bar{y},x-y,z)$, $(\bar{x},\bar{y},\bar{z})$, $(y-x,\bar{x},z)$ et $(y,y-x, \bar{z})$.

Ces positions ne sont autres que les images de la position (x,y,z) par l'axe $\bar{3}$ orienté suivant Oz (voir cours ou question 4) b- suivante).

D'un autre côté, les trois positions à z positifs : (x,y,z) $(\bar{y},x-y, z)$ et $(y-x, \bar{x},z)$ sont images l'une de l'autre par l'axe $3//Oz$ et les trois positions à z négatifs $(\bar{x},\bar{y},\bar{z})$, $(y,y-x, \bar{z})$ et $(x-y,x,\bar{z})$ sont respectivement les images des positions précédentes par un centre d'inversion situé à l'origine de la maille on en conclue donc que $6' \equiv 3+\bar{1}$

Conclusion : $6' \equiv \bar{3} \equiv 3+\bar{1}$

4) Sachant que la première image, dans le sens direct, par l'axe 3 (orienté suivant Oz) de la position (x,y,z) est $(\bar{y}, x-y, z)$, donner les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) :

- a- Par l'axe 3. Faire la représentation graphique des positions équivalentes autour de l'axe 3.
- b- Par l'axe $\bar{3}$. Projeter sur le plan (xOy) les positions équivalentes autour de l'axe $\bar{3}$.
- c- Par l'axe 3_1 . Faire la représentation graphique des positions équivalentes autour de l'axe 3_1 .
- d- Par l'axe 3_2 . Faire la représentation graphique des positions équivalentes autour de l'axe 3_2 .

SOLUTION

a- coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) par l'axe 3 orienté suivant Oz :

La 1^{ère} image, dans le sens direct, par l'axe 3 orienté suivant Oz de la position (x,y,z) est $(\bar{y}, x-y, z)$. Si on note cette image (x',y',z') , alors son image par l'axe 3 serait $(\bar{y}', x'-y', z')$ soit $(-(x-y), (\bar{y}-(x-y)), z)$ soit $(y-x, \bar{x}, z)$ (de la même façon l'image de $(y-x, \bar{x}, z)$ est (x,y,z)).

En conclusion la position (x,y,z) et ses images, dans le sens direct, par l'axe 3 orienté suivant Oz sont :

$(x,y,z), (\bar{y}, x-y, z)$ et $(y-x, \bar{x}, z)$,

La représentation graphique des positions équivalentes autour de l'axe 3 // Oz est la suivante :

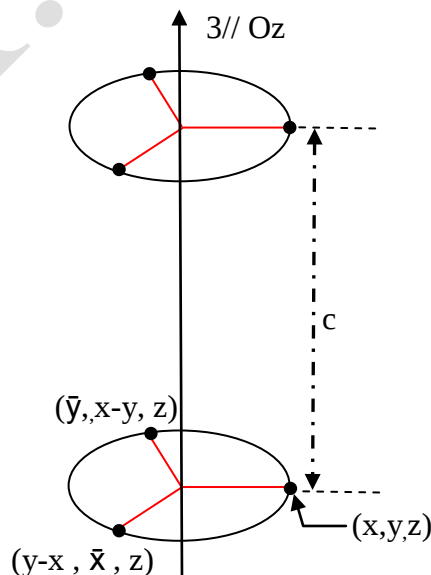


Schéma montrant les images de (x,y,z) par l'axe 3 orienté suivant Oz

b- Par l'axe $\bar{3}$. Projeter sur le plan (xOy) les positions équivalentes autour de l'axe $\bar{3}$.

D'après la question précédente :

$$(x,y,z) \xrightarrow{3 // Oz} (\bar{y}, x-y, z) \xrightarrow{3 // Oz} (y-x, \bar{x}, z)$$

Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) générées par l'axe $\bar{3}$ sont étroitement liées aux coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) générées par l'axe 3.

Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) par l'axe $\bar{3}$ orienté suivant Oz s'obtiennent en faisant une **rotation de $2\pi/3$ autour de Oz suivie d'une inversion par rapport à l'origine de cet axe**. Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) par l'axe $\bar{3} // Oz$ s'obtiennent alors comme suit :

$$\begin{aligned} (x,y,z) &\xrightarrow{3 // Oz} (\bar{y}, x-y, z) \xrightarrow{\text{inversion}/(0,0,0)} (y, y-x, \bar{z}) \xrightarrow{3 // Oz} \\ (x-y, x, \bar{z}) &\xrightarrow{\text{inversion}/(0,0,0)} (y-x, \bar{x}, z) \xrightarrow{3 // Oz} (x, y, z) \xrightarrow{\text{inversion}/(0,0,0)} \\ &\xrightarrow{(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})} \xrightarrow{3 // Oz} (y, y-x, \bar{z}) \xrightarrow{\text{inversion}/(0,0,0)} (\bar{y}, x-y, z) \xrightarrow{3 // Oz} \\ (y-x, \bar{x}, z) &\xrightarrow{\text{inversion}/(0,0,0)} (x-y, x, \bar{z}) \xrightarrow{3 // Oz} (\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}) \xrightarrow{\text{inversion}/(0,0,0)} \\ &\xrightarrow{(x,y,z)} \end{aligned}$$

Conclusion :

Les images de la position (x,y,z) par l'axe $\bar{3}$ orienté suivant Oz sont **(positions en bleu)** :

$$(y, y-x, \bar{z}), (y-x, \bar{x}, z), (\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}), (\bar{y}, x-y, z) \text{ et } (x-y, x, \bar{z})$$

c- coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) par l'axe 3_1 orienté suivant Oz :

Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) par l'axe $3_1 // Oz$ s'obtiennent en faisant une rotation de $2\pi/3$ autour de Oz suivie d'une translation de $1/3 \times c$ (**ce qui va conduire à ajouter $1/3$ à la coordonnées z**). Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) s'obtiennent alors comme suit :

$$\begin{aligned} (x,y,z) &\xrightarrow{3 // Oz} (\bar{y}, x-y, z) \xrightarrow{+1/3 \text{ suivant Oz}} (\bar{y}, x-y, z+1/3) \xrightarrow{3 // Oz} \\ (y-x, \bar{x}, z+1/3) &\xrightarrow{+1/3 \text{ suivant Oz}} (y-x, \bar{x}, z+2/3) \xrightarrow{3 // Oz} (x, y, z+2/3) \xrightarrow{+1/3 \text{ suivant Oz}} \\ &\xrightarrow{(x, y, z+3/3) \equiv (x, y, z+1) \equiv (x, y, z)}. \end{aligned}$$

Les positions équivalentes autour de l'axe $3_1 // Oz$ sont donc :

$$(x,y,z), (\bar{y}, x-y, z+1/3) \text{ et } (y-x, \bar{x}, z+2/3)$$

La représentation graphique des positions équivalentes autour de l'axe $3_1 // Oz$ est la suivante :

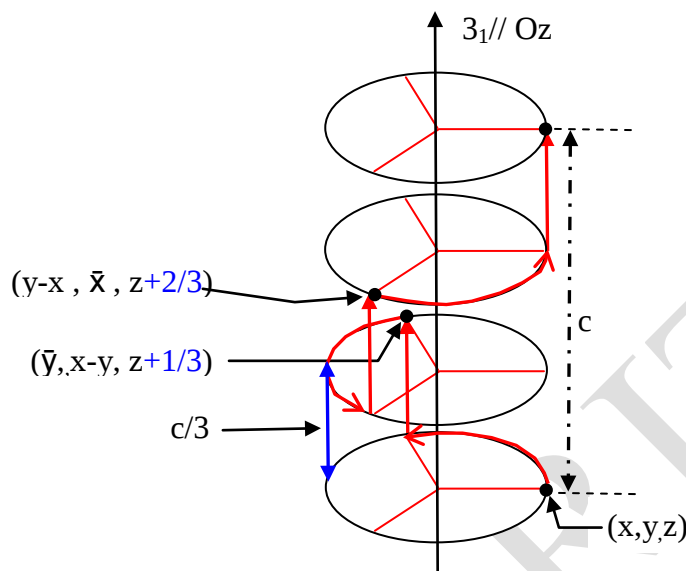


Schéma montrant les images de (x,y,z) par l'axe 3_1 orienté suivant Oz

d- coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) par l'axe 3_2 orienté suivant Oz :

Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) par l'axe $3_2 // Oz$ s'obtiennent en faisant une rotation de $2\pi/3$ autour de Oz suivie d'une translation de $2/3 \times c$ (ce qui va conduire à ajouter $2/3$ à la coordonnées z). Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) s'obtiennent alors comme suit :

$$\begin{aligned} (x,y,z) &\xrightarrow{3 // Oz} (\bar{y}, x-y, z) \xrightarrow{+2/3 \text{ suivant } Oz} (\bar{y}, x-y, z+2/3) \xrightarrow{3 // Oz} \\ (y-x, \bar{x}, z+2/3) &\xrightarrow{+2/3 \text{ suivant } Oz} (y-x, \bar{x}, z+4/3) \equiv (y-x, \bar{x}, z+1/3) \xrightarrow{3 // Oz} \\ &\rightarrow (x,y,z+1/3) \xrightarrow{+2/3 \text{ suivant } Oz} (x,y,z+3/3) \equiv (x,y,z+1) \equiv (x,y,z). \end{aligned}$$

Les positions équivalentes autour de l'axe $3_1 // Oz$ sont donc :

$$(x,y,z), (\bar{y}, x-y, z+2/3) \text{ et } (y-x, \bar{x}, z+1/3)$$

Le classement de ces positions en fonction de z croissant est le suivant :

$$(x,y,z), (y-x, \bar{x}, z+1/3) \text{ et } (\bar{y}, x-y, z+2/3)$$

L'axe 3_2 est appelé axe hélicoïdal **inverse** puisque le passage de l'une de ces positions à la suivante se fait dans le **sens trigonométrique indirect** (sens d'une aiguille d'une montre) comme le montre la figure suivante :

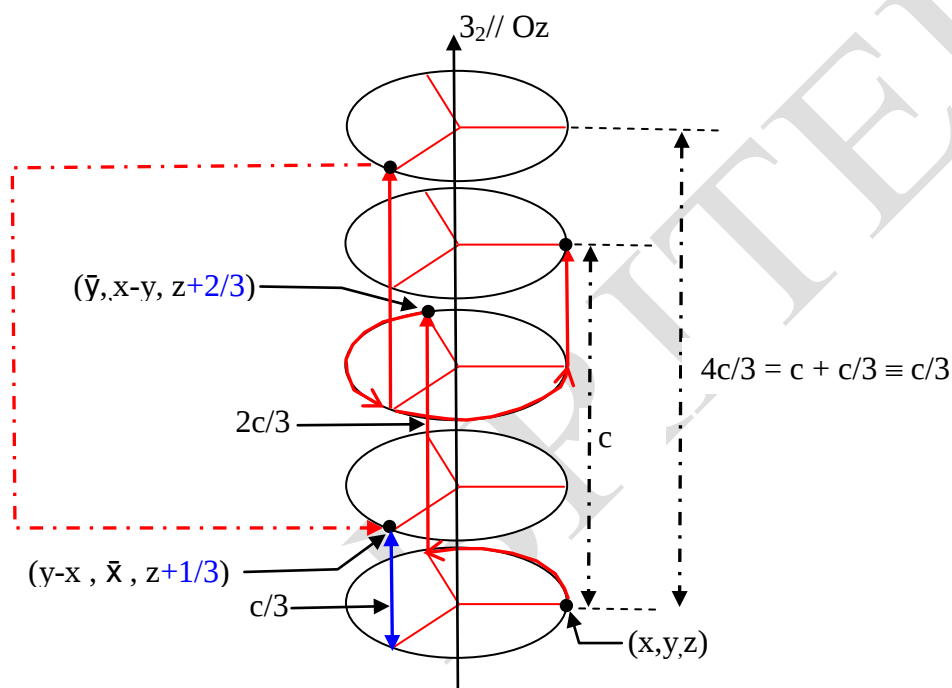


Schéma montrant les images de (x,y,z) par l'axe 3_2 orienté suivant Oz

5) Donner les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) générées :

- a- par l'axe 4 orienté suivant Oz .
- b- par l'axe $\bar{4}$ orienté suivant Oz .
- c- par l'axe 4_1 orienté suivant Oz . Faire un schéma en perspective montrant ces images.
- d- par l'axe 4_3 orienté suivant Oz . Faire un schéma en perspective montrant ces images. **1S 18-19**
- e- Quelle est la différence entre les axes 4_1 et 4_3 ?

SOLUTION

Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) par les axes $\bar{4}$, 4_1 et $4_3 // Oz$ sont liées aux coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) par l'axe $4 // Oz$.

a- coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) par l'axe 4 orienté suivant Oz.

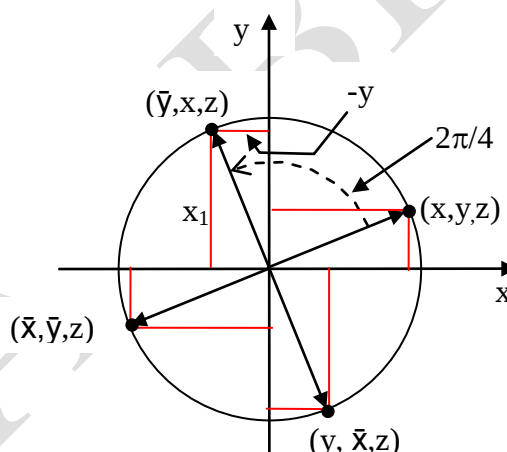
Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) par l'axe 4 // Oz s'obtiennent en faisant une rotation de $2\pi/4$ autour de Oz .

La 1^{ère} image, dans le sens direct, par l'axe 4 orienté suivant Oz de la position (x,y,z) est $(-y, x, z)$. Si on note cette image (x',y',z') , alors son image par l'axe 4 serait $(-y', x', z')$ soit $(-x, -y, z)$. Avec le même raisonnement l'image de $(-x, -y, z)$ par l'axe 4 est $(y, \bar{x}, z)$.

Les positions équivalentes autour de l'axe 4 // Oz sont donc les suivantes :

$(x,y,z), (\bar{y},x,z), (\bar{x},\bar{y},z)$ et $(y, \bar{x},z)$.

Schéma montrant ces images dans le plan xOy :



b- coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) par l'axe $\bar{4}$ orienté suivant Oz

Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) générées par l'axe $\bar{4}$ sont étroitement liées aux coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) générées par l'axe 4.

Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) par l'axe $\bar{4}$ orienté suivant Oz s'obtiennent en faisant une rotation de $2\pi/4$ autour de Oz suivie d'une inversion par rapport à l'origine de cet axe. Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) par l'axe $\bar{4}$ // Oz s'obtiennent alors comme suit :

$$\begin{aligned}
 (x,y,z) &\xrightarrow{4 // Oz} (\bar{y},x,z) \xrightarrow{\text{inversion}/(0,0,0)} (y,\bar{x},\bar{z}) \xrightarrow{4 // Oz} (x,y,\bar{z}) \\
 &\xrightarrow{\text{inversion}/(0,0,0)} (\bar{x},\bar{y},z) \xrightarrow{4 // Oz} (y,\bar{x},z) \xrightarrow{\text{inversion}/(0,0,0)} (\bar{y},x,\bar{z}) \\
 &\xrightarrow{4 // Oz} (\bar{x},\bar{y},\bar{z}) \xrightarrow{\text{inversion}/(0,0,0)} (x,y,z)
 \end{aligned}$$

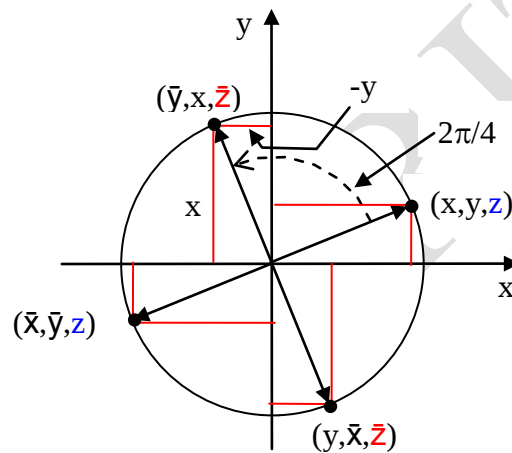
La position (x,y,z) et ses images par l'axe $\bar{4}$ sont alors (positions en bleu) :

$$(x,y,z), (y,\bar{x},\bar{z}), (\bar{x},\bar{y},z) \text{ et } (\bar{y},x,\bar{z})$$

(x,y,z) et $(\bar{x},\bar{y},z)$ ont la même coordonnée z

$(y,\bar{x},\bar{z})$ et $(\bar{y},x,\bar{z})$ ont la même coordonnée $\bar{z}$

Schéma montrant ces images dans le plan xOy :



c- coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) générées par l'axe 4_1 orienté suivant Oz :

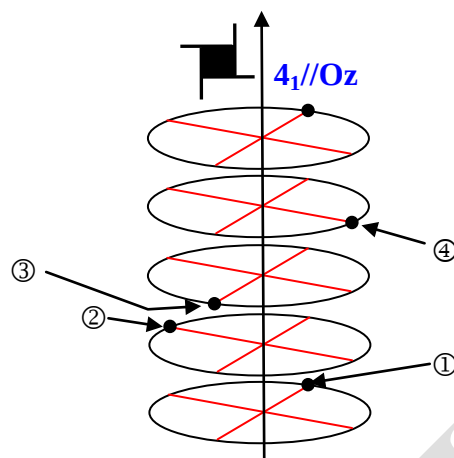
Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) par l'axe $4_1 // Oz$, s'obtiennent en faisant une rotation de $2\pi/4$ autour de Oz suivie d'une translation de $1/4$ c. Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x,y,z) sont alors :

$$\begin{aligned}
 (x,y,z) &\xrightarrow{4 // Oz} (\bar{y},x,z) \xrightarrow{+1/4 \text{ suivant } Oz} (\bar{y},x,z+1/4) \xrightarrow{4 // Oz} \\
 (\bar{x},\bar{y},z+1/4) &\xrightarrow{+1/4 \text{ suivant } Oz} (\bar{x},\bar{y},z+1/2) \xrightarrow{4 // Oz} (y,\bar{x},z+1/2) \xrightarrow{+1/4 \text{ suivant } Oz} \\
 (y,\bar{x},z+3/4) &\xrightarrow{4 // Oz} (x,y,z+3/4) \xrightarrow{+1/4 \text{ suivant } Oz} \\
 (x,y,z+1) &\equiv (x,y,z)
 \end{aligned}$$

Les positions équivalentes autour de l'axe $4_1 // Oz$ sont donc :

$$(x,y,z), (\bar{y},x,z+1/4), (\bar{x},\bar{y},z+1/2) \text{ et } (y,\bar{x},z+3/4)$$

L'axe 4_1 est appelé axe hélicoïdal **direct** puisque le passage de l'une de ces positions à la suivante dans le sens croissant de z se fait dans le **sens trigonométrique direct** (sens opposé au sens d'une aiguille d'une montre) comme le montre la figure suivante :



① : (x, y, z) ,

② : $(\bar{y}, x, z + \frac{1}{4})$,

③ : $(\bar{x}, \bar{y}, z + \frac{1}{2})$ et

Schéma en perspective montrant les images de la position (x, y, z) par l'axe 4_1

d- coordonnées des positions équivalentes à la position (x, y, z) générées par l'axe 4_3 orienté suivant Oz :

Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x, y, z) par l'axe $4_3 // Oz$ s'obtiennent en faisant une rotation de $2\pi/4$ autour de Oz suivie d'une translation de $\frac{3}{4}c$. Les coordonnées des positions équivalentes à la position (x, y, z) s'obtiennent alors comme suit :

$(x, y, z) \xrightarrow{4 // Oz} (\bar{y}, x, z) \xrightarrow{+3/4 \text{ suivant } Oz} (\bar{y}, x, z + 3/4) \xrightarrow{4 // Oz} (\bar{x}, \bar{y}, z + 3/4) \xrightarrow{+3/4 \text{ suivant } Oz} (\bar{x}, \bar{y}, z + 3/2) \equiv (\bar{x}, \bar{y}, z + 1/2) \xrightarrow{4 // Oz} (y, \bar{x}, z + 1/2) \xrightarrow{+3/4 \text{ suivant } Oz} (y, \bar{x}, z + 5/4) \equiv (y, \bar{x}, z + 1/4) \xrightarrow{4 // Oz} (x, y, z + 1/4) \xrightarrow{+3/4 \text{ suivant } Oz} (x, y, z + 1) \equiv (x, y, z)$

Les positions équivalentes autour de l'axe $4_3 // Oz$ sont donc :

$(x, y, z), (\bar{y}, x, z + 3/4), (\bar{x}, \bar{y}, z + 1/2) \text{ et } (y, \bar{x}, z + 1/4)$

Le classement de ces positions par z croissant donne :

$$(x,y,z), (y, \bar{x}, z+1/4), (\bar{x}, \bar{y}, z+1/2) \text{ et } (\bar{y}, x, z+3/4)$$

L'axe 4_3 est appelé axe hélicoïdal **inverse** puisque le passage de l'une de ces positions à la suivante dans le sens croissant de z se fait dans le **sens trigonométrique indirect** (sens d'une aiguille d'une montre) comme le montre la figure suivante :

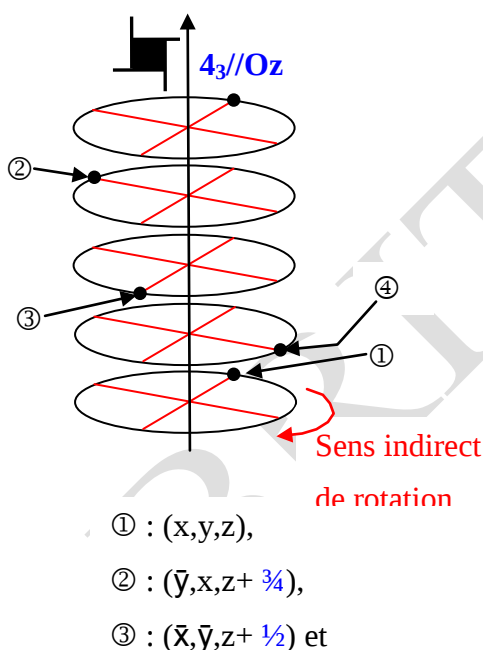


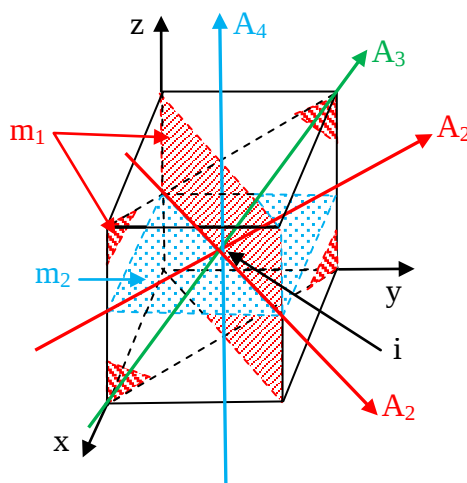
Schéma en perspective montrant les images de la position (x,y,z) par l'axe 4_3

e- Différence entre les axes 4_1 et 4_3 :

Comme nous l'avons signalé précédemment, le glissement suivant l'axe 4_1 se fait suivant une **hélice droite** (**sens direct de rotation**) contrairement au cas de l'axe 4_3 où le glissement se fait suivant une **hélice gauche** (**sens indirect de rotation**).

6) Représenter sur une maille tous les éléments de symétrie d'orientation du système cubique.

SOLUTION



Eléments de symétrie dans le système cubique

Les éléments de symétrie que contient un cube sont :

1. un centre d'inversion I au centre du cube
2. 6 axes directs d'ordres 2 (axes binaires). Ces axes passent par les milieux de deux arêtes opposées diagonalement (directions cristallographiques : $[110]$ et $[1\bar{1}0]$, $[101]$ et $[10\bar{1}]$, $[011]$ et $[01\bar{1}]$).
3. 4 axes directs d'ordres 3 (axes ternaires). Ces axes passent par deux sommets opposés diagonalement (directions cristallographiques : $[111]$, $[\bar{1}\bar{1}1]$, $[1\bar{1}\bar{1}]$ et $[11\bar{1}]$).
4. 3 axes directs d'ordres 4 (axes quaternaires). Ces axes passent par les centres de deux faces opposées (directions cristallographiques : $[100]$, $[010]$ et $[001]$).

REMARQUE

Les plans de symétrie (miroirs) sont tous perpendiculaires aux axes de symétrie d'ordre pair (il n'y a donc pas de miroirs perpendiculaires aux axes 3).

Conformément à la remarque précédente :

- a- il y a 6 axes directs d'ordres 2 $\Rightarrow$ Il y a 6 plans de symétrie (miroirs de type m_1) perpendiculaires aux axes 2. Ces miroirs appartiennent aux familles réticulaires : (110) , $(1\bar{1}0)$, (101) , $(10\bar{1})$, (011) et $(01\bar{1})$.
- b- il y a 3 axes directs d'ordres 4 $\Rightarrow$ Il y a 3 plans de symétrie (miroirs de type m_2) perpendiculaires aux axes 4. Ces miroirs appartiennent aux familles réticulaires : (100) , (010) et (001) .

En résumé, le cube contient les éléments de symétrie suivants :

$$I, 3A_4/m_2, 4A_3, 6A_2/m_1$$

Ces éléments forment la classe de symétrie du cube qu'on peut noter : $4/m \bar{3} 2/m$ (ou $m\bar{3}m$).

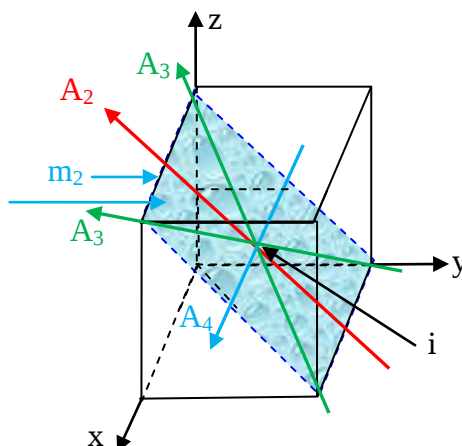
REMARQUE

la classe holoèdre (classe qui donne le maximum de positions équivalentes) du système cubique n'est pas $m\bar{3}m$ mais $m\bar{3}m$ puisque $m\bar{3}m$ engendre le double des positions de $m\bar{3}m$ ce qui est dû au fait que l'axe 3 engendre 3 positions équivalentes alors que l'axe $\bar{3}$ engendre 6 positions équivalentes.

- 7) Quels sont, parmi les éléments de symétrie de la question précédente, ceux contenus dans l'intersection du premier plan de la famille réticulaire (011) avec la maille cubique.

SOLUTION

Intersection du 1^{er} plan de la famille (011) avec la maille cubique



8) Quelles sont les directions principales du système quadratique ?

SOLUTION

Les directions principales du système quadratique sont :

1^{ère} direction : $[001]$ (axe Oz)

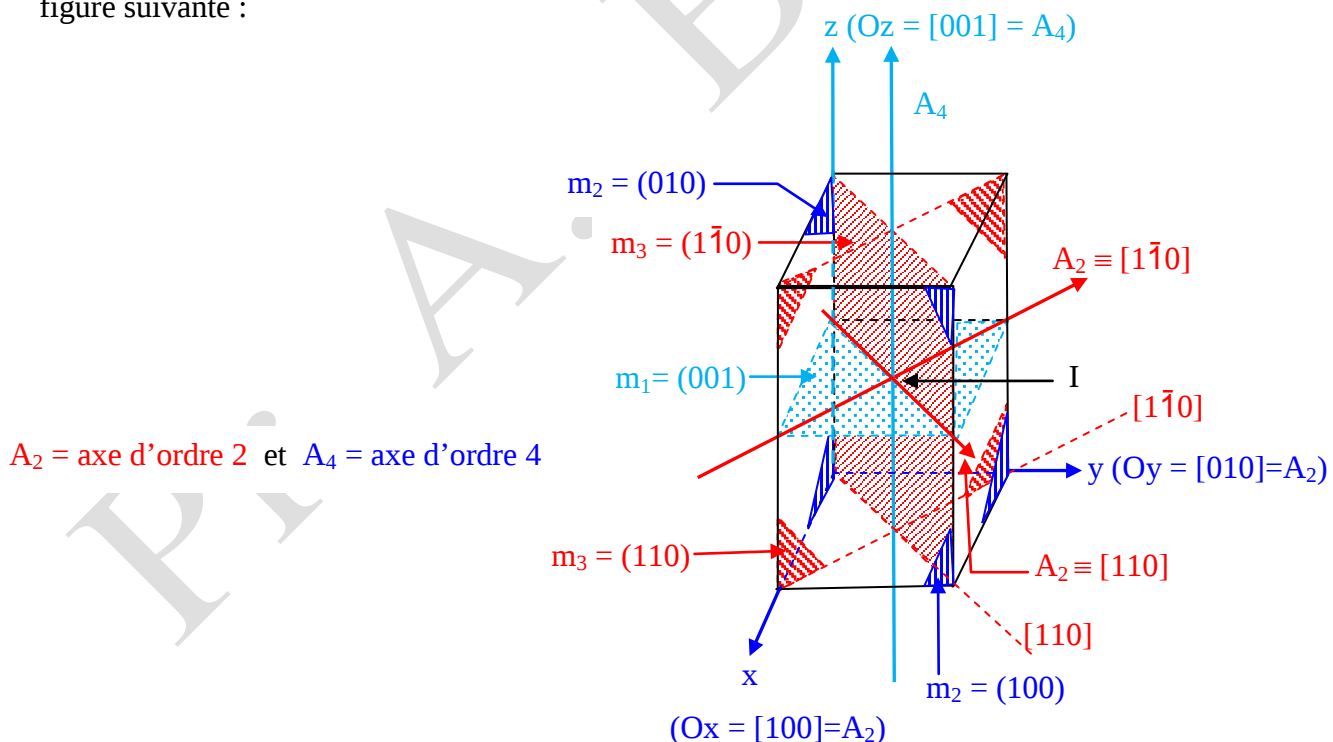
2^{ème} direction : $[100]$ et $[010]$ (axes Ox et Oy)

3^{ème} direction : $[110]$ et $[1\bar{1}0]$ (diagonales de la face (a,b)).

9) Quels sont les différents éléments de symétrie ponctuelle du système quadratique ? indexer ces éléments de symétrie.

SOLUTION

Les éléments de symétrie ponctuelle du système quadratique et leurs indexations sont reportés sur la figure suivante :



Eléments de symétrie ponctuelle du système quadratique

10) Quelles sont les directions principales du système hexagonal ?

SOLUTION

Les directions principales du système hexagonal sont :

1^{ère} direction : $[001]$ (axe Oz)

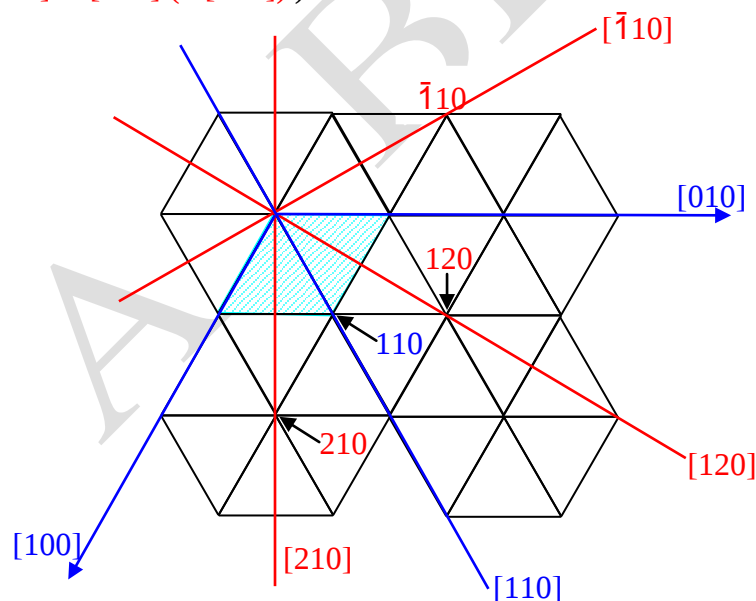
2^{ème} direction : $[100]$, $[010]$ et $[110]$

3^{ème} direction : $[210]$, $[120]$ et $[1\bar{1}0]$ ($\equiv [\bar{1}10]$).

11) A quelles familles réticulaires appartiennent les miroirs perpendiculaires aux axes de la 3^{ème} direction principale du système hexagonal ?

SOLUTION

Les axes de la 3^{ème} direction principale du système hexagonal sont ceux représentés en rouge sur la figure suivante (axes $[210]$, $[120]$ et $[1\bar{1}0]$ ($\equiv [\bar{1}10]$) :

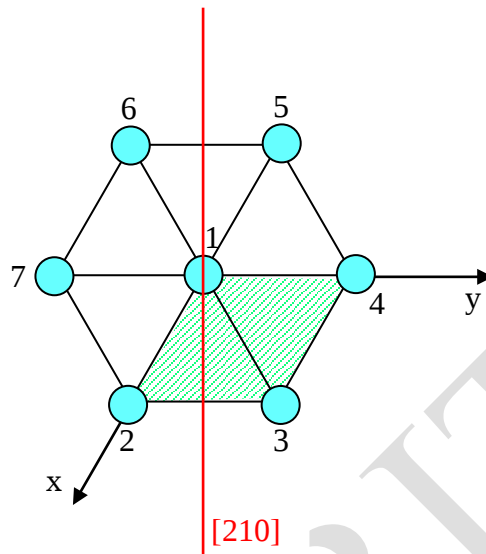


Le miroir perpendiculaire à l'axe $[210]$ fait partie de la famille réticulaire (100) (famille contenant les axes $[010]$ et $[001]$ c'est-à-dire la famille contenant la face (b,c)).

Le miroir perpendiculaire à l'axe $[120]$ fait partie de la famille réticulaire (010) (famille contenant les axes $[100]$ et $[001]$ c'est-à-dire la famille contenant la face (a,c)).

Le miroir perpendiculaire à l'axe $[1\bar{1}0]$ fait partie de la famille réticulaire diagonale $(\bar{1}10)$ (famille contenant les axes $[110]$ et $[001]$).

- 12) Préciser les images, par l'un des axes d'ordre 2 de la troisième direction principale du système hexagonal, de chacune des positions de la base d'une maille hexagonale reportées sur la figure suivante :

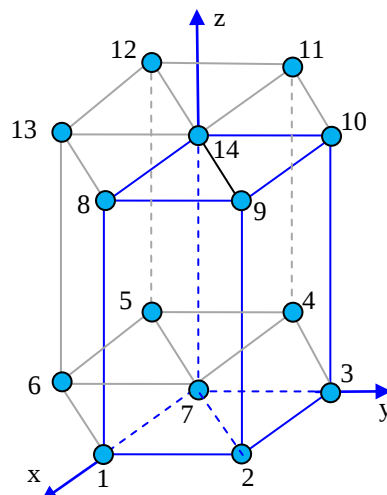


SOLUTION

Si on considère l'axe 2 orienté suivant la direction $[210]$:

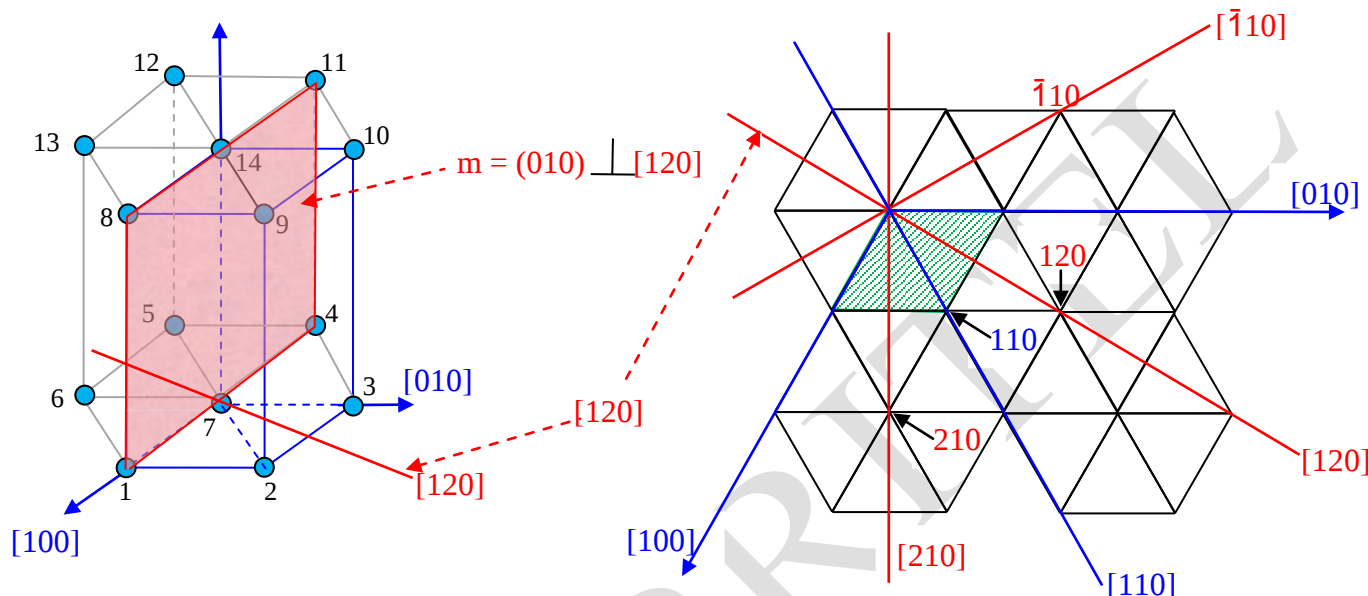
- L'atome 1 est sa propre image puisqu'il se trouve sur l'axe $[210]$.
- L'image de l'atome 2 est l'atome 3.
- L'image de l'atome 4 est l'atome 7.
- L'image de l'atome 5 est l'atome 6.

- 13) Préciser les images, par rapport au miroir perpendiculaire à l'axe $[1\ 2\ 0]$, de chacun des atomes reportés sur la maille hexagonale usuelle suivante :



SOLUTION

Le miroir traversant la maille usuelle de façon perpendiculaire à l'axe $[1\ 2\ 0]$ est le plan central de la famille (010) , c'est donc le plan (xOz) .



Si on considère le miroir (010) perpendiculaire à l'axe d'ordre 2 orienté suivant la direction $[120]$:

- Les images des atomes 1, 7, 4, 8, 14 et 11 sont eux même puisqu'ils se trouvent sur le miroir.
- L'image de l'atome 2 est l'atome 6.
- L'image de l'atome 3 est l'atome 5.
- L'image de l'atome 9 est l'atome 13.
- L'image de l'atome 10 est l'atome 12.

14) A quel système cristallin fait partie le groupe d'espace $I4_1$ (justifier votre réponse) ? Donner les positions équivalentes à la position (x,y,z) dans ce groupe d'espace.

SOLUTION

L'axe 4 peut se trouver dans les groupes d'espace quadratique ou cubique mais comme l'axe 4_1 est écrit à l'endroit réservé à la 1^{ère} direction principale et qu'il n'y a rien à la 2^{ème} direction principale c'est que le système est quadratique (dans les groupes cubiques, on peut avoir également l'axe 4_1 suivant la 1^{ère} direction principale, mais on a toujours un axe 3 suivant la 2^{ème} direction principale).

Les positions équivalentes à la position (x,y,z) par l'axe 4_1 sont les suivantes (voir question c de l'exercice 5):

$$(x,y,z), (\bar{y},x,z+\frac{1}{4}), (\bar{x},\bar{y},z+\frac{1}{2}) \text{ et } (y,\bar{x},z+\frac{3}{4}).$$

Comme le mode de Bravais est I (mode centré), chacune des positions ci-dessus possède une image par translation de $(+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2})$. [voir question 3) de l'exercice II sur les réseaux de Bravais]

La position générale du groupe $I4_1$ est donc de multiplicité 8 et ses coordonnées sont :

$$(x,y,z), (\bar{y},x,z+\frac{1}{4}), (\bar{x},\bar{y},z+\frac{1}{2}) \text{ et } (y,\bar{x},z+\frac{3}{4}).$$

$$(x+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}), (\bar{y}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},z+\frac{3}{4}), (\bar{x}+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2},z) \text{ et } (y+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{4}).$$

Notation abrégée :

Sur les tables internationales de cristallographie, ces positions sont indiquées de la façon suivante :

$$(x,y,z), (\bar{y},x,z+\frac{1}{4}), (\bar{x},\bar{y},z+\frac{1}{2}) \text{ et } (y,\bar{x},z+\frac{3}{4}).$$

$$(0,0,0)^+ , (\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})^+$$

- 15) A quel système cristallin fait partie le groupe d'espace $Cmca$ (justifier votre réponse) ? Donner les positions équivalentes à la position (x,y,z) dans ce groupe d'espace.

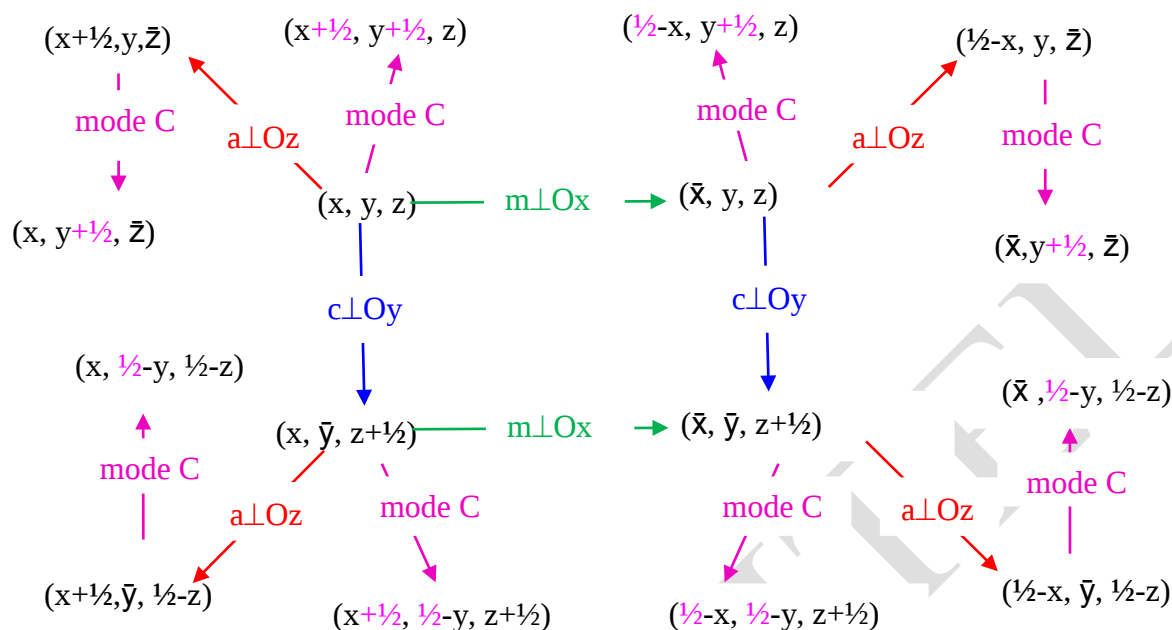
SOLUTION

Le groupe d'espace $Cmca$ est un groupe orthorhombique puisque sa classe de symétrie est mmm (il s'agit de la classe holoèdre du système orthorhombique : multiplicité 8 = multiplicité maximale).

La notation $Cmca$ signifie que :

- a- le réseau est bases centrées C
- b- il existe un miroir $m \perp Ox$ (pas de glissement)
- c- il existe un plan de glissement $c \perp Oy$ (glissement de $c/2$)
- d- il existe un plan de glissement $a \perp Oz$ (glissement de $a/2$)

Les positions équivalentes à la position (x,y,z) dans le groupe d'espace $Cmca$ sont illustrées alors par le schéma suivant :



NB : en cristallographie $0 \equiv 1$ et $-(x+1/2) = -x - 1/2 \equiv -x + 1/2$ qu'on peut écrire $\bar{x} + 1/2$ ou $1/2-x$

Le miroir m et les plans de glissements c et a conduisent donc à 8 positions équivalentes mais comme le mode de Bravais est C , chaque position (x,y,z) possède une image en $(x+1/2, y+1/2, z)$. [voir question 3) de l'exercice II sur les réseaux de Bravais].

La position générale du groupe $Cmca$ est donc de multiplicité 16 et ses coordonnées sont :

$(x,y,z),$	$(x,\bar{y},z+1/2),$	$(\bar{x},y,z),$	$(\bar{x}, \bar{y},z+1/2),$
$(x+1/2,y,\bar{z}),$	$(x+1/2,\bar{y},1/2-z),$	$(1/2-x,y,\bar{z}),$	$(1/2-x,\bar{y},1/2-z)$
$(x+1/2,y+1/2, z),$	$(x+1/2,1/2-y, z+1/2),$	$(1/2-x,y+1/2, z)$	$(1/2-x,1/2-y,z+1/2),$
$(x,y+1/2, \bar{z}),$	$(x,1/2-y, 1/2-z),$	$(\bar{x},y+1/2, \bar{z}),$	$(\bar{x},1/2-y,1/2-z)$

Notation abrégée :

Sur les tables internationales de cristallographie, ces positions sont indiquées de la façon suivante :

$(x,y,z),$	$(x,\bar{y},z+1/2),$	$(\bar{x},y, z),$	$(\bar{x},\bar{y},z+1/2),$
$(x+1/2,y,\bar{z}),$	$(x+1/2,\bar{y},1/2-z),$	$(1/2-x,y,\bar{z}),$	$(1/2-x,\bar{y},1/2-z)$

$(0,0,0)+, (1/2,1/2,0)+$

BONNE CHANCE ET BONNE REUSSITE

Pr Abderrafi BRITEL