

## TD 6 : Diffraction de poudre

### 1 Cas d'un cubique face centrée

On s'intéresse à un cristal cubique face centré, dont on a passé la poudre sur un diffractomètre de rayons X. Le résultat est présenté Fig. 1

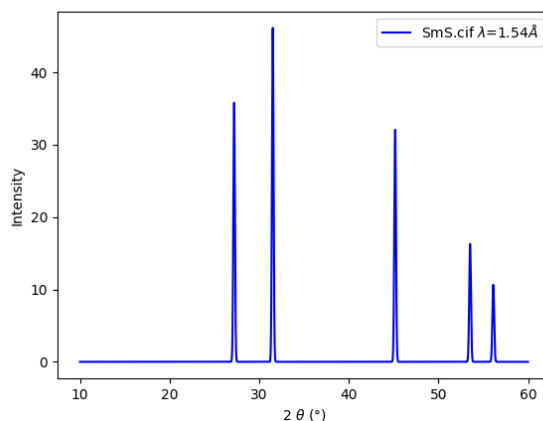


FIGURE 1 – Diffractogramme d'un cubique face centrée

1. Quelle est la condition d'existence des raies pour un cubique face centrée ?
2. Lister les raies (h,k,l) avec h k et l inférieur à 3 qui ne sont pas équivalentes
3. Barrer celles qui ne sont pas autorisées par le mode de réseau.
4. Donner la multiplicité pour chacune de ces raies
5. En partant de la formule générale pour la distance interréticulaire ci dessous, donner l'expression de  $d_{hkl}$  pour un cubique en fonction de a, h, k et l.

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{\sqrt{h^2a^{*2} + k^2b^{*2} + l^2c^{*2} + 2hka^*b^*\cos\gamma^* + 2hla^*c^*\cos\beta^* + 2klb^*c^*\cos\alpha^*}}$$

6. Calculer  $d_{hkl}$  pour chaque raie en fonction de a.
7. Trier ces raies par  $d_{hkl}$  décroissant
8. En déduire l'indexation des 3 premiers pics ( $2\theta$  les plus petits).
9. Rappeler la loi de Bragg.
10. Sachant que le premier pic est situé en  $2\theta = 27.2$ , et que la longueur d'onde des rayons X utilisés est de 1.54, en déduire le paramètre de maille  $a$  de la maille cubique.

### 2 $Al_2Ni_3$

$Al_2Ni_3$  cristallise dans le groupe d'espace  $Cmmm$ , avec  $a=6.64$   $b=7.47$ ,  $c=3.76$  et les angles à  $90^\circ$ . Le motif est constitué de 2 atomes d'Aluminium : Al (0,0,22,1/2) et (0,1/2,0) et 3 atomes de Nickel : Ni (0,0,0), (0.22,1/2,0) et (1/4,1/4,0).

1. Donner le système cristallin et le mode de réseau.
2. Donner les conditions d'existence sur les (h,k,l) dues au mode de réseau.
3. Lister les raies existantes : on se limitera à  $h+k+l < 3$ .
4. Indiquer leurs multiplicités.
5. Trier les raies existantes par ordre de  $d_{hkl}$  décroissant.

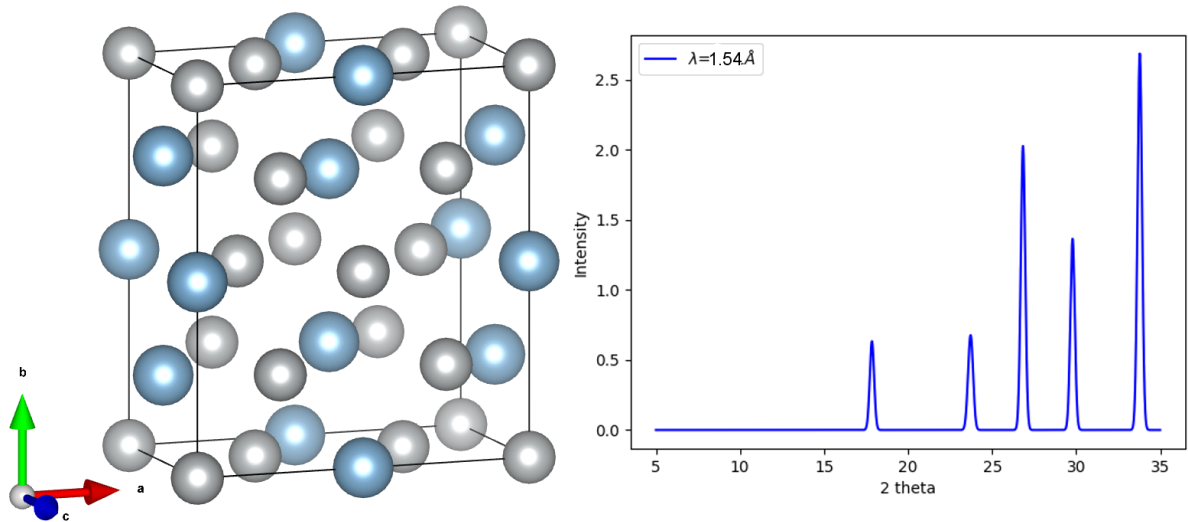


FIGURE 2 – Structure de  $Al_2Ni_3$  et diffractogramme associé ( $\lambda=1.54\text{\AA}$ )

6. Indexer les 5 premières raies visibles sur le diffractogramme.
7. Sachant que les angles des 5 premières raies visibles se situent à des angles de  $17.85^\circ$ ,  $23.7^\circ$ ,  $26.84^\circ$ ,  $29.78^\circ$ ,  $33.78^\circ$ , vérifier la valeur de  $a$  donnée dans l'énoncé.
8. Calculer facteur de structure  $F_{hkl}$  en fonction de  $h, k$ , et  $l$ .

### 3 $CrNi_2$

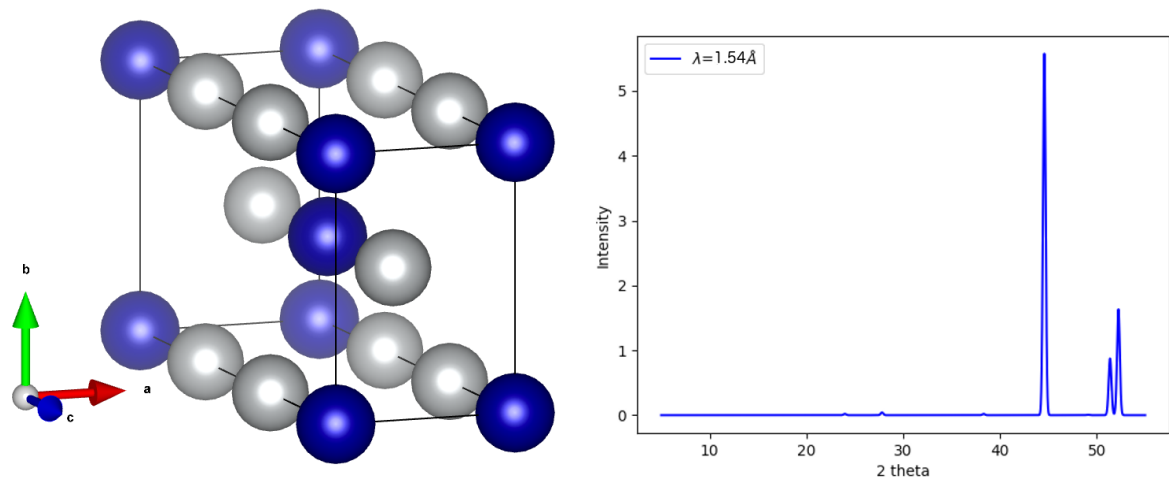


FIGURE 3 – Structure de  $CrNi_2$  et diffractogramme associé ( $\lambda=1.54\text{\AA}$ )

$CrNi_2$  cristallise dans le groupe d'espace  $Immm$ , avec  $a=2.47$ ,  $b=3.55$ ,  $c=7.42$  et les angles à  $90^\circ$ .

1. Donner le système cristallin et le mode de réseau.
2. Combien y a t il de noeuds, de Cr et de Ni par maille élémentaire ?
3. En déduire le motif constitué de 3 atomes dont on donnera les coordonnées. Indication, un atome de Ni est situé en  $(0,0,1/3)$ .
4. Donner les conditions d'existence sur les  $(h,k,l)$  dues au mode de réseau.
5. Lister les raies existantes : on se limitera à  $h$  et  $k \leq 1$  et  $l \leq 2$ .

6. Indiquer leurs multiplicités.
7. Trier les raies existantes par ordre de  $d_{hkl}$  décroissant.
8. Calculer l'angle  $2\theta$  attendu pour chacune de ces raies pour une longueur d'onde  $\lambda=1.54\text{\AA}$ . Les retrouve-t-on sur le diffractogramme? Que dire de l'intensité des 4 première raies par rapport à la quatrième.
9. Calculer facteur de structure  $F_{hkl}$  en fonction de h,k, et l.
10. Calculer l'intensité des raies (0,0,2) et (1,1,0) en prenant  $f_{Ni}=28$  et  $f_{Cr}=24$ .

## 4 Le germanium

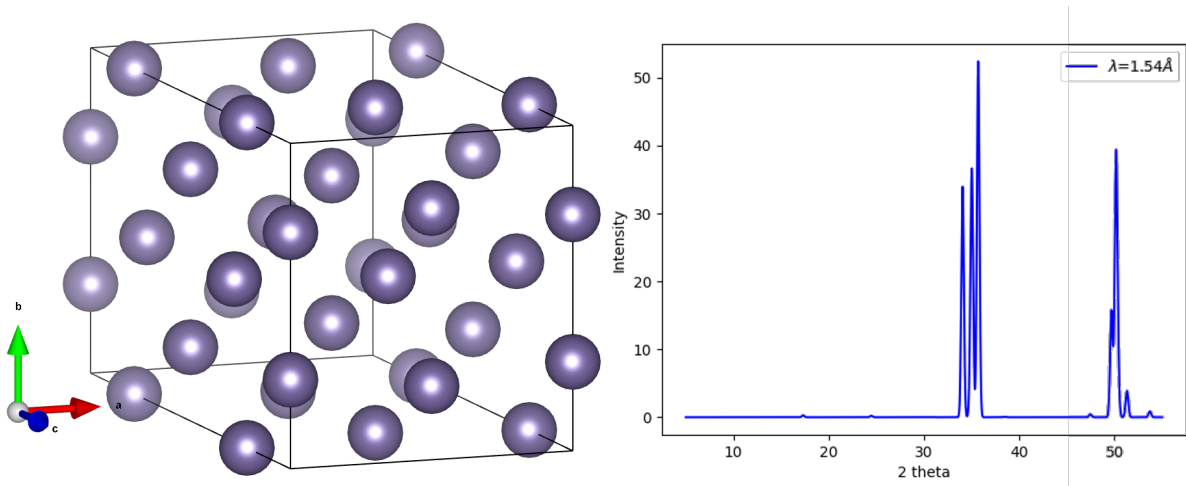


FIGURE 4 – Structure de *Ge* et diffractogramme associé ( $\lambda=1.54\text{\AA}$ )

Le germanium *Ge* cristallise dans le groupe d'espace  $Fmmm$ , avec  $a=5.26$ ,  $b=5.77$  et  $c= 10.23$ , les angles étant à  $90^\circ$ . Le motif est constitué de 2 atomes en  $(0,0,z)$  et  $(0,y,1/2)$ .

1. Donner le système cristallin et le mode de réseau.
2. Combien y a t il de noeuds par maille élémentaire?
3. Donner les conditions d'existence sur les  $(h,k,l)$  dues au mode de réseau.
4. Lister les raies existantes : on se limitera à  $h+k+l \leq 4$ .
5. Indiquer leurs multiplicités.
6. Trier les raies existantes par ordre de  $d_{hkl}$  décroissant.
7. Calculer facteur de structure  $F_{hkl}$  en fonction de h,k, et l, y et z.
8. La valeur de z semble proche de  $1/4$ , calculer le facteur de structure dans cette hypothèse.
9. En déduire l'intensité de la raie (0,0,2) dans le cas. En comparant avec l'expérience, que peut-on conclure sur l'hypothèse  $z=1/4$ .