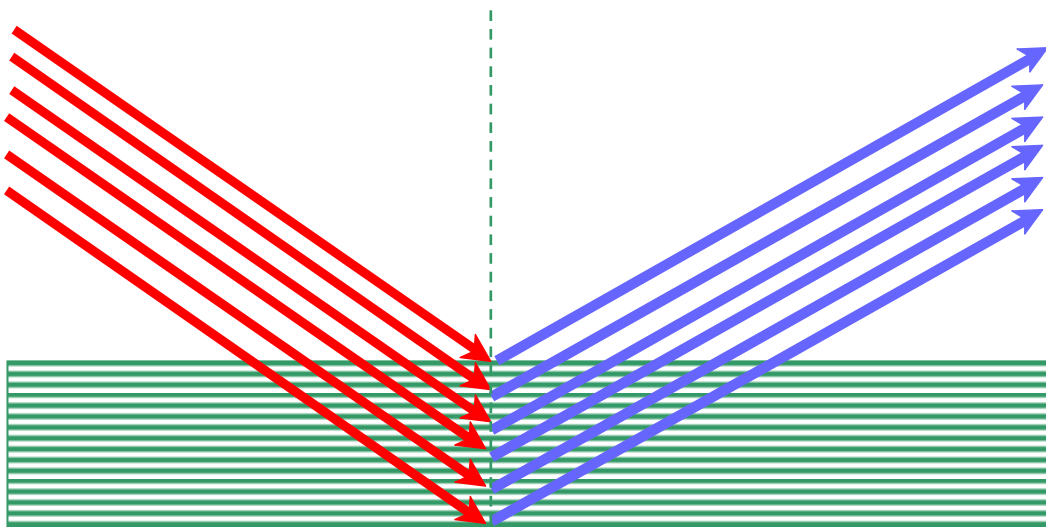

Université Abdelhamid Ibn Badis Mostaganem
Faculté des Sciences exactes et de l'informatique
Département de Chimie

3^{ème} année licence (LMD)

Cristallographie géométrique

Cours



Réalisé par : *TABTI Charef*

Avant propos

Ce polycopié traite la cristallographie géométrique, ce cours et ses applications sont destinés à la 3^{ème} année licence doctorat master (LMD) chimie fondamentale de l'université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem, les exercices proposés sont des applications directes du cours pour approfondir les connaissances et l'initiation à la résolution des problèmes pratiques. Le programme de ce polycopié est officiel, il comporte sept termes réparti comme suit, le premier terme abordera les éléments de symétrie des, le second terme est relatif au notion fondamentale de réseaux cristallines et détermination des systèmes et classes des groupes de symétrie ponctuelle, le terme trois est consacré aux étude de la symétrie de position la projection stéréographique fera l'objet du quatrième terme, terme cinq abordera la projection stéréographique standard d'un cristal cubique, le sixième terme qui concerne la déduction des indices de Miller et septième huitième terme abordera le détermination des angles eu utilisant l'appareil a rayons x et je termine ce polycopié par le huitième terme l'examen du cristal d'halite NaCl par la méthode de poudre DEBYE SHERER.

Sommaire

- 1 Les éléments de symétrie des cristaux.....
- 2 Réseaux cristallines, détermination des systèmes.....
et des classes des groupes de symétrie ponctuelle
- 3 Etude de la symétrie de position.....
4. Projection stéréographique.....
5. Projection stéréographique standard d'un cristal cubique
.....
- 6 Dédution des indices de millier, symboles de forme et détermination des unités axiales
d'orthoclase d'après la projection stéréographique en utilisant réseau de
Wulff.....
- 7 Détermination des angles 2θ en utilisant l'appareil à rayons x.....
- 8 Examen du cristal d'halite (NaCl) par la méthode des poudres de Debye-
Scherer.....

Introduction

Les applications de cristallographie géométrique sont une forme d'enseignement qui permet d'appliquer les connaissances apprises pendant les cours théoriques de la 3^{ème} année licence ou d'introduire des notions classiques et nouvelles. Ils servent à mesurer leurs niveaux d'assimilation en les mettant dans des conditions de recherche et en les incitant à se surpasser. La séance du cours concerne un nombre réduit des étudiants afin de garantir un meilleur suivi et de faciliter la concentration.

Les cristaux sont des solides qui ont des faces cristallines généralement planes et polies, développent des formes géométriques et font entre elles des angles parfaitement définis. Cependant, le plus important, c'est qu'ils ont une structure interne ordonnée. Ainsi, le solide de forme polyédrique ayant un ordre interne périodique tridimensionnel de ses atomes, ions et molécules peut être considéré comme un cristal. Toutes les formes cristallines présentes dans la nature se regroupent en 7 systèmes cristallins ; ce sont les 7 formes primitives de base grâce à des faces nouvelles qui apparaissent sur les arêtes et/ou sur les sommets, les faces nouvelles obéissant toujours au degré de symétrie du solide initial. Ces sept systèmes sont divisés en 32 groupes ponctuels (groupes de symétrie) qui définissent les éléments de symétrie. Ces opérations de symétrie chez les cristaux sont des opérations géométriques (rotation et réflexion) qui amènent en correspondance des sommets, des arêtes ou des plans cristallins. Cependant, la forme externe d'un solide cristallin peut ne pas avoir la forme géométrique de la maille primitive. Par exemple tous les systèmes cubiques dont la maille est cubique n'auront pas forcément une forme cubique. Mais, ils garderont la même symétrie. Pour cette raison, la morphologie cristalline est importante car elle permet d'identifier les espèces cristallines à partir de son étude.

LES ELEMENTS DE SYMETRIE DES CRISTAUX

Les cristaux ce sont les corps homogènes, anisotropiques dont le trait le mieux perceptible est la forme extérieure qui se produit en façon spontané. Ils ont la composition chimique bien déterminée et aussi caractéristiques propriétés physiques.

Les cristaux sont limités par les faces qui se coupent le long des arêtes. Les arêtes se coupent en sommets.

Régularité de la dislocation des éléments de la surface des cristaux (les faces, les arêtes, les sommets) et des propriétés physiques c'est ka symétrie. Ce peut être la symétrie des propriétés physiques.

Il y a des opérations de la symétrie qui sont différentes. Les points, droites et plans qui laissent immobiles pendant les opérations sont nommés les éléments de la symétrie.

Le rotation c'est l'opération de la symétrie qui se fonde sur le tour autour de la ligne nommée l'axe de la symétrie.

L'axe de la symétrie c'est le direction autour de quelle pendant le tour de cristal a l'angle $360^\circ/n$ il y a n fois la répétition des situations spéciales des tous les éléments de la surface : n'est pas toujours la nombre entière : 2, 3, 4, 6. L'axe est signé 1, 2, 3, 4, 6 ou L^1 , L^2 , L^3 , L^4 et L^6 .

Miroir ou le plan de symétrie divise le cristal au deux parts égales en relation comme le sujet et leur réflexion dans le miroir. Le miroir est désigné par la lettre P ou m ;

Le centre de symétrie c'est le point au centre du cristal par qui on peut conduire des demi-droites qui réunissent les éléments, convenables des surfaces du cristal dans les distances égaux en relation du centre. Dans le cristal qui a le centre de symétrie toutes les faces sont deux à deux parallèles.

Les espèces des axes de symétrie

L'axe de symétrie de l'ordre 1 est équivalent du manque de la symétrie. L'ordre 1 est l'opération d'identité.

Les axes polaires ce sont les axes qui lient les différents éléments de la surface du cristal, comme le sommet avec le centre de la face.

Les axes inverses se forment par l'action couplée des axes directs et du centre de symétrie.

Les axes de miroir: se forment par action couplé des axes directs et du miroir perpendiculaire.

Table 1. Les symboles graphiques et en chiffres des axes directs de la symétrie:

Symboles en chiffres des axes de symétrie	Symboles graphiques des axes	Dénomination
1 ou L^1	—	—
2 ou L^2	●	L'axe de l'ordre 2
3 ou L^3	▲	L'axe de l'ordre 3
4 ou L^4	◆	L'axe de l'ordre 4
6 ou L^6	⬡	L'axe de l'ordre 6

L'axe de l'ordre deux qui se trouve au plan du dessin on présente



Comme :  ou 

Table 2. Les axes polaires L_p

L_p^2	●
L_p^3	▲
L_p^4	◆
L_p^6	⬡

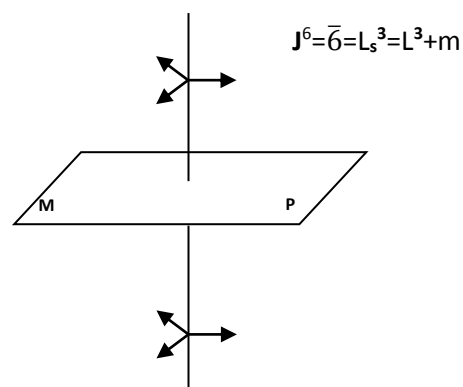







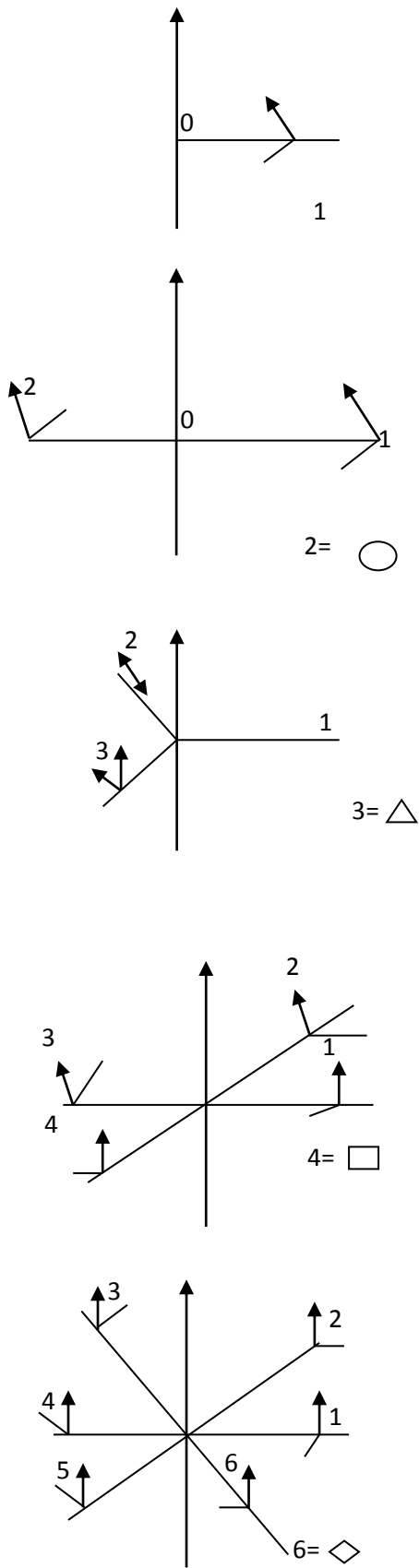


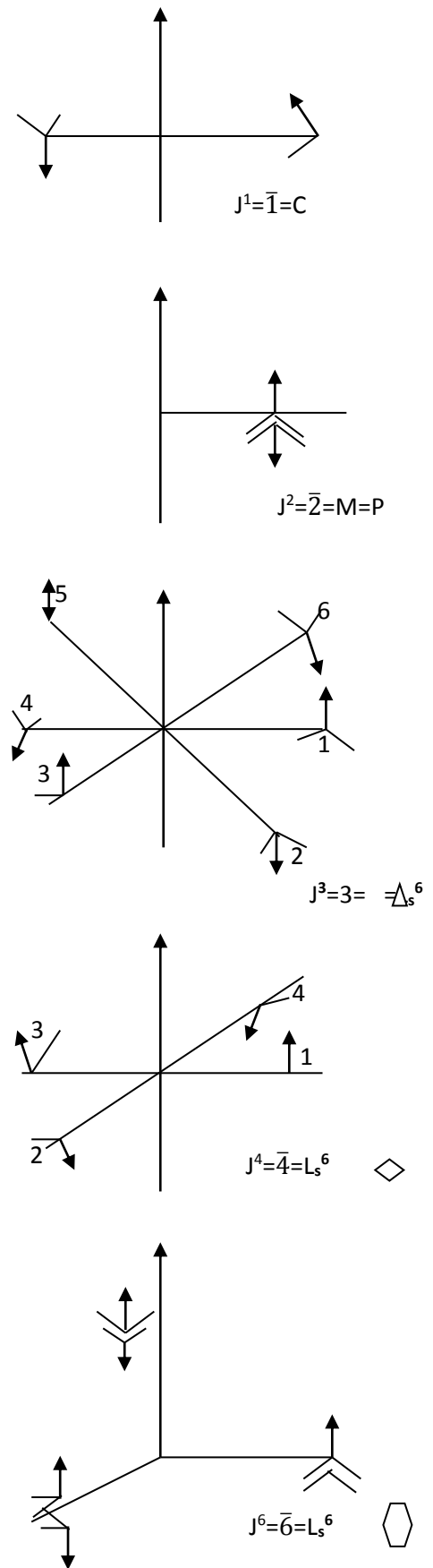
Table 3. Les symboles graphiques et les chiffres des axes de miroir :

Axe inverses		Axes de miroir	
Symboles en chiffres	Symbole graphique	Symboles en chiffres	Symbole graphique
$\bar{1} = J^1$ corresponde C		L_s^2 corresponde C	
$\bar{2} = J^2$ corresponde L_p^2		L_s^3 corresponde $\bar{6}$	
$\bar{3} = J^3$ corresponde L_p^3		$L_s^4 J^1$ corresponde $\bar{4}$	
$\bar{4} = J^4$ corresponde L_p^4		L_s^6 corresponde $\bar{3}$	
$\bar{6} = J^6$ corresponde L_p^6			

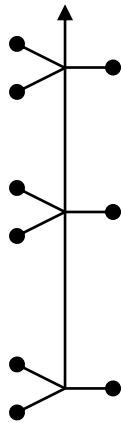
Symétrie directe



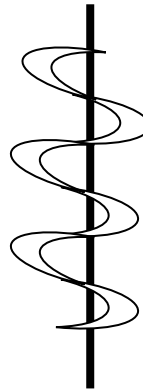
symétrie inverse



Les axes hélicoïdaux se sont des axes de rotation à l'angle de $360^\circ/n$ suivie d'une translation parallèle a cet axe.

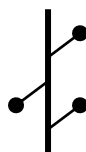
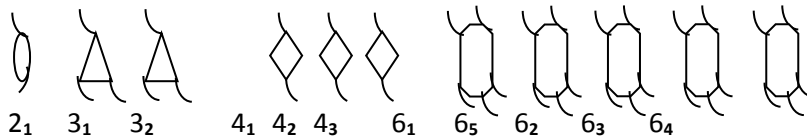


L'axe de rotation simple d'ordre trois

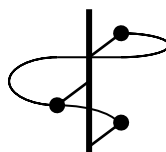


L'axe hélicoïdal

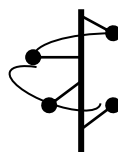
Les symboles graphiques et en chiffres ces axes hélicoïdaux de la symétrie.



2_1

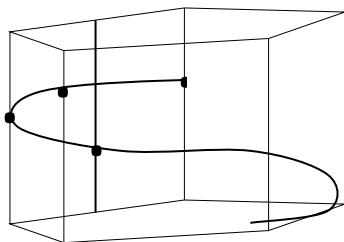


3_1

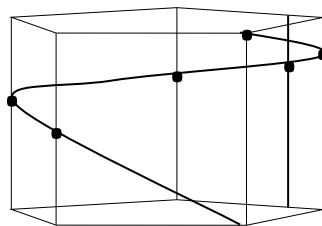


4_1

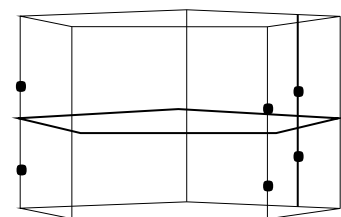
L'axe 6_1 : 1/6 pas a droite



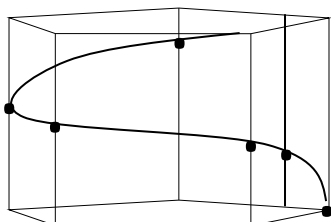
L'axe 6_5 : 1/6 pas a gauche



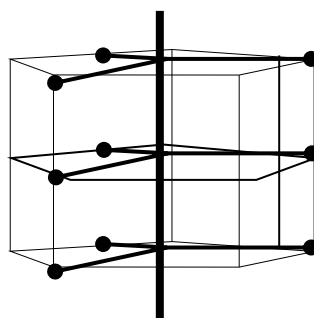
L'axe inverse $\bar{6} = M^3$



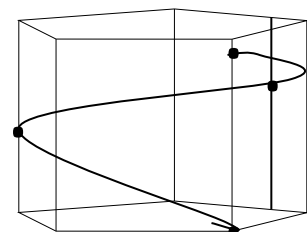
L'axe 6_2 : 1/3 pas a droite



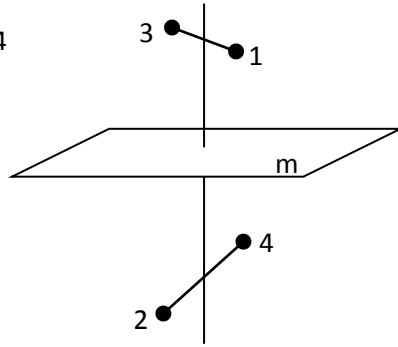
L'axe 6_3



L'axe 6_4 : 1/3 pas a gauche



$$J^4 = 4$$



$$J^3 = 3 = L_5^6$$

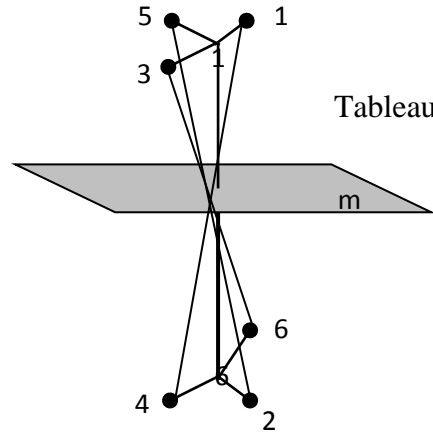
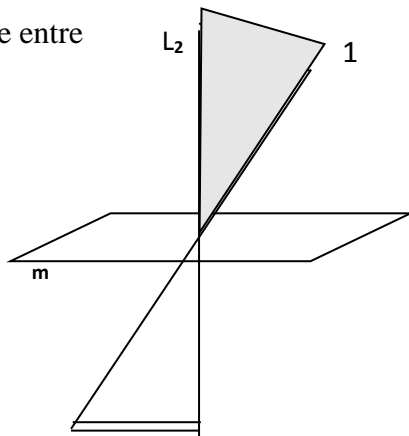
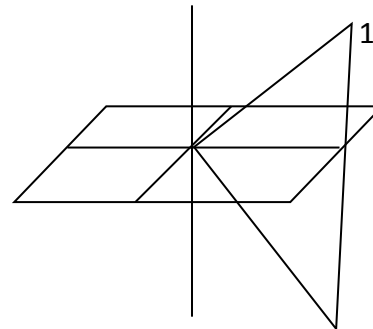


Tableau 6

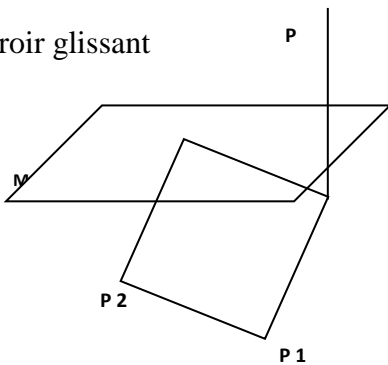
Analogie entre
 L^2 et C



Analogie entre
 J^2 et M



Miroir glissant



L'opération de miroir/ plan de symétrie / avec glissement consiste à un mirage par rapport à un plan M suivi d'une translation parallèle à ce miroir

Symétrie directe. Les opérations de symétrie directe sont des rotations autour d'un axe passant par un point fixe de la figure, point de concours des demi-droites équivalentes. L'axe de rotation est d'ordre n si la rotation minimale qui amené la figure en coïncidence avec elle-même est égale à $360^\circ/n$. sa notation descriptive est A_n , ou L_n ou n dans les sources scientifiques différents. L'ordre de symétrie n des axes de rotation doit être compatible avec la triple périodicité du réseau cristallin.(1, 2, 3, 4, 6).

Symétrie inverse: les opérations de symétrie inverse sont composées par une rotation de $360^\circ/n$ autour d'une axe, suivie d'une inversion de centre I placé sur cet axe. ($\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$)

L'ordre $\bar{1}$ est l'opération symétrie par rapport à un point C : $\bar{1} = C = L^2_s$

L'ordre $\bar{2}$ est l'opération symétrique par rapport à un plan, qui est plutôt notre (miroir) : $\bar{2} = m$

L'axe inverse $\bar{3}$ est équivalent à un axe direct 3 plus un centre de symétrie l'axe inverse $\bar{4}$ comprend un axe direct d'ordre 2 colinéaire.

L'axe $\bar{6}$ est équivalent à un axe direct 3 perpendiculaire à un miroir : $\bar{6} = 3/m$. Les différentes axes directs et inverses possèdent chacun un symbole graphique qui est représenté sur les tableaux 2- 4.

GROUPES PONCTUELS DE SYMETRIE (G.P.S)

Il y a 32 groupes de symétries. Les cristaux sont divisés en groupes selon les éléments de symétries comme C, m, les axes directs, les axes inverses ;

Si le miroir m contient un axe n la notation descriptive peut être :

$A_n m, L^n m$ ou $n m$ (terme dernier selon notation Hermann-Mauguin)

Si le miroir m est perpendiculaire à un axe n on le note :

$A_n/m, L^n/m$ ou n/m (terme dernier la notation Hermann-Mauguin).

S'il existe plusieurs axes d'ordre 2 non équivalents ou plusieurs miroirs non équivalents, les symboles sont différenciés par les signes prime (') et seconde ('').

MODE OPERATION :

1. En utilisant des modèles des cristaux trouvez les axes de la symétrie directe A_2, A_3, A_4, A_6 .
2. Trouvez les modèles avec les axes inverses ou polaires.
3. Trouvez sans les modèles les miroirs, et déterminez ou manquez les miroirs.
4. Indiquez les modèles ou manquez qui n'ont pas de centre de symétrie.
5. Déterminez des axes d'ordre 2 non équivalents.
6. En utilisant le tableau des classes des groupes ponctuels classez les modèles parmi les correspondantes.

Système	Classe des groupes de symétrie ponctuelle	Notation Schönflies	Notation Hermann-Mauguin	Notation R.hAMAR
Triclinique	Pedionale Pinacoidale	C_1 C_i	1 $\bar{1}$	A_1 C
Monoclinique	Sfanoidale Domatique prismatique	C_2 C_s C_{2h}	2 m 2/m	A_2 N $A_2/M.C$
Quadratique Tetragonale	Pyramide quadratique Bisfenoïde quadratique Oc quadratique Pyramide ditrigonale Trapézoèdre quadratique Bipyramide diquadratique	C_4 S_4 C_{4h} D_{2d} C_{4v} D_4 D_{4h}	4 $\bar{4}$ 4/m $\bar{4}$ m 4mm 422 4/m2/m2/m	A_4 A_4 $A_4/M.C$ $A_4.2A'_2.2M''$ $A_4.2A'_2.2A_2''$ $A_4.2A'_2.2A_2''$ $A_4.2A'_2.2A_2''$
Rhomboédrique	Rhomboédrique Pyramide rhomboédrique Pyramide trigonale Trapézoèdre trigonale Scalenodre trigonale	C_3 C_{3i} C_{3v} D_3 D_{3d}	$\bar{3}$ 3 3m 32 $\bar{3}m$	A_3 C A_3 $A_3.3m$ $A_3.3A'_2$ $A_3.3A'/3M'.C$
hexagonal	Bipyramide trigonale Pyramide hexagonale Bipyramide trigonale Pyramide hexagonale Bipyramide trigonale Trapézoèdre hexagonale Bipyramide trigonale	C_{3h} C_6 C_{6h} D_{3h} C_{6v} D_6 D_{6h}	6 6 6/m 62m 6mm 622 6/m2/m2/m	A_3/M A_6 $A_6/M.C$ $A_3/M.3A'/3M''$ $A_6.3M'.3M''$ $A_6.3A'_2.3A''_2$ $A_6/M.3A'_2/3M'.3A_2''/3M''.C$
cubique		T T_h T_d O O_h	23 2/m3 43m 432 4/m32/m	$3A_2.4A'_3$ $3A_2.4A'_3.M.C$ $3A_4.4A'_3.6M$ $3A_4.4A_3.6A_2$ $3A_4/3M.4A_3.6A_2/6M_2.C$

RESEAUX CRISTALLINES, DETERMINATION DES SYSTEMES ET DES CLASSES DES GROUPES DE SYMETRIE PONCTUELS

Maille c'est l'unité microscopique qui reproduit le cristal dans les trois dimensions de l'espace. Les atomes ou molécules qui se reproduisent indéfiniment et régulièrement dans le cristal sont désignés par le terme motif. Pour repérer les atomes d'un motif il faut donner leurs trois coordonnées (x, y, z) en fonction des paramètres de la maille ($\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$). Si les atomes font partie du motif leurs trois coordonnées doivent chacun avoir entre 0 et 1.

$$OP(x, y, z) = x\vec{a} + y\vec{b} + z\vec{c}$$

Un réseau ponctuel est une répétition périodique de point. Il est uni-, bi-, du tridimensionnel ; en désigne des extrémités des vecteurs \vec{r} par le terme nœuds du réseau. Contrairement au motif le nœud n'a pas de réalité physique. Un nœud d'origine étant choisi, chaque nœud est repéré par ses coordonnées u, v, w.

La rangée du réseau est un ensemble de nœuds alignés. C'est une droite passant par des nœuds du réseau. La distance qui sépare deux nœuds consécutifs d'une rangée est appelée période ou paramètre de la rangée. On caractérise la rangée par les coordonnées de sa période disposées entre crochets [u, v, w] appliquant à un point donné l'ensemble des translations.

$$\vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

u, v, w : entiers, positives, négatifs ou nuls, $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ vecteurs donnés non coplanaires.

u, v, w : désignent le point donné

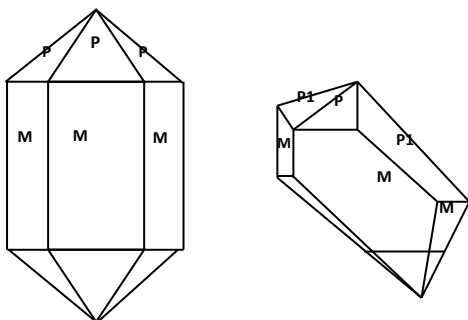
$[u, v, w]$: désigne une direction donnée.

La loi de conscience des angles dit que les angles formés par les directions des normales à faces du cristal soient deux à deux égales. Dans certains cristaux le développement relatif des faces correspondantes peuvent être très différent et cependant le faisceau des normales aux faces constitue une figure géométrique invariable (Fig.1)

Les cristaux peuvent avoir la forme primitive limitée par les faces principales et les formes avec troncatures (Fig.2).

Les traits physiques comme clivage de la calcite (Fig.3) peuvent être parallèles aux directions principales du réseau cristallin.

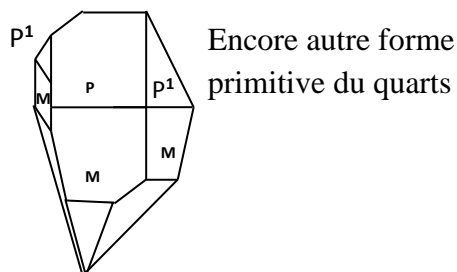
Figure .1



Cristal des quarts sous forme primitive.

Dans les cristaux grandeur des faces n'est pas le même mais les angles entre les faces ou entre les arrêts sont les mêmes les mêmes dans tous les cristaux de la même sorte. La forme extérieure du cristal de quarts peut être différent mais les angles entre analogues faces sont toujours les mêmes.

Autre forme extérieure des quarts sous forme primitive.



Encore autre forme primitive du quarts

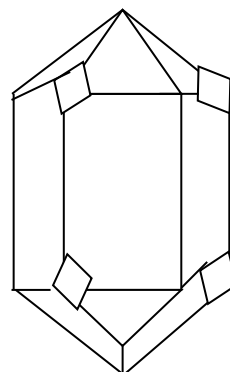
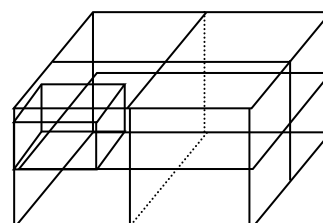
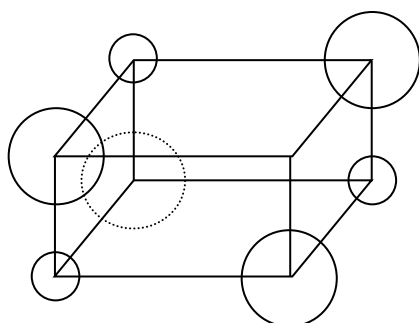


Figure 2

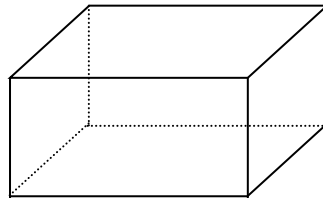
La forme du cristal du quart avec troncature.



Maille élémentaire du cristal de calcite

Structure rhomboédrique.

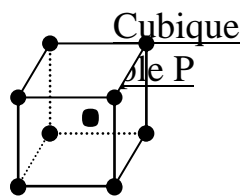
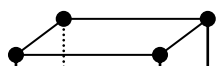
$$\alpha = \beta = \gamma = 75^\circ$$



Clivage d'un cristal du calcite

Figure 3

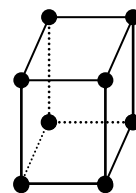
Forme cubique primitive de sel gemme



$$a_1 = a_2 = c$$

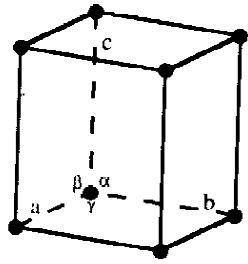
$$\alpha = \beta = 90^\circ$$

$$\gamma = 120^\circ$$

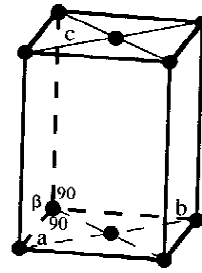
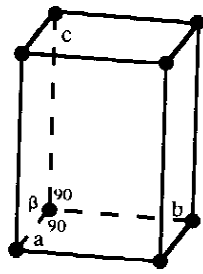


Rhomboédrique simple

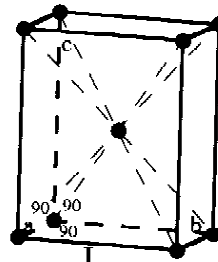
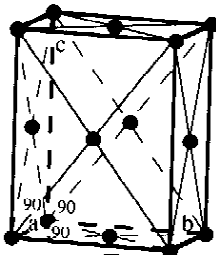
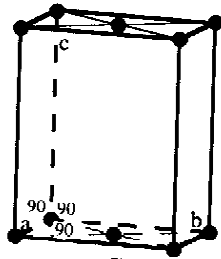
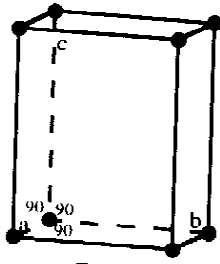
Quadratique



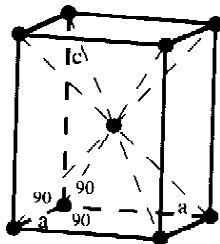
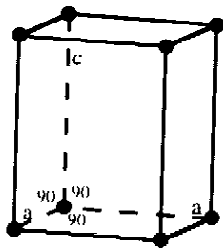
Triclinique P



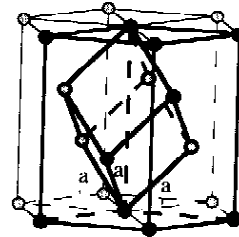
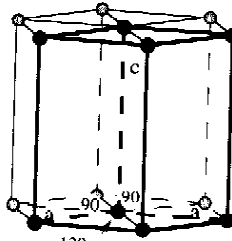
P C
Monoclinique



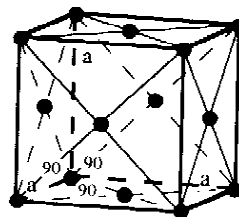
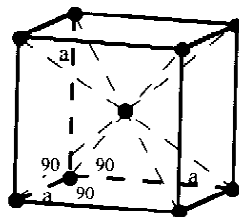
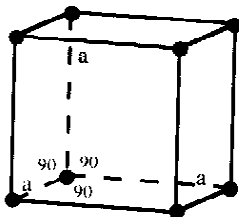
P C F I
Orthorhombique



P I
Tétragonal

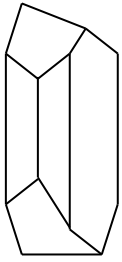


120°
Héxagonal P Rhomboédrique R



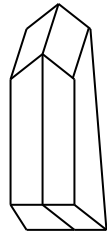
P I F
Cubique

Exemples des classes des groupes ponctuelles



1

albite
 $\text{Na (Al Si}_3\text{ O}_8)$
 S. triclinique
 C. pinacoidale.

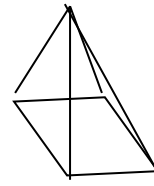


M

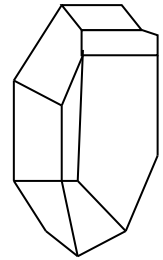
Scolecite
 $\text{Ca (Al}_2\text{ Si}_3\text{ O}_{10})$
 $3\text{H}_2\text{O}$
 S. monoclinique
 C. domatique.



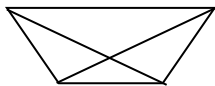
gypse
 $\text{Ca SO}_4 2\text{H}_2\text{O}$
 S. monoclinique
 C. prismatique.



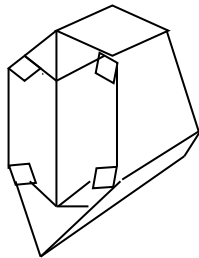
pyramide. mm
 $L^2 p_3 2 \pi$



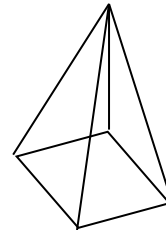
Hemina*C.de
 bipyramide
 dihexagonal 6/mm
 C. doàmatique.
 Orthographique



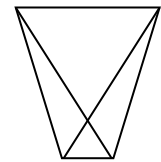
s. orthorhombique
 c. bisfenoide.
 Orthorhombique 222



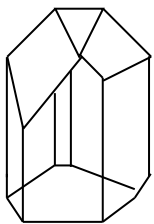
S. orthorhombique
 C. bipyramide.
 Orthorhombique
 $mmn 3L^2 3 C$
 Aragonite
 CaCO_3



S. quadratique
 C. de pyramide.
 quadratique
 $4 L^4_p$

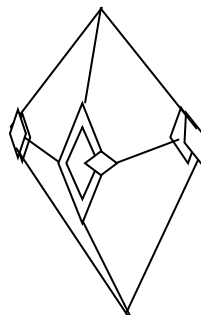


s. quadratique
 c. de bisfenoide.
 quadratique
 $222 3L^2$

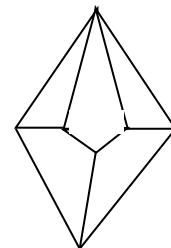


Epsomite
 $\text{AgSO}_4 7\text{H}_2\text{O}$
 c. bisfenoide
 Orthorhombique

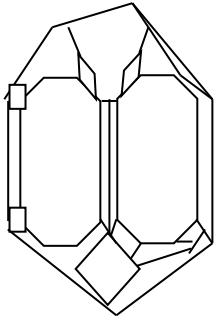
Scheelite



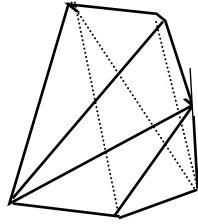
C. quadratique
 C. de bipyramide
 quadratique
 $4/m L^4, M, C$



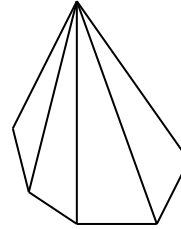
c. quadratique
 C. de trapézoèdre
 Quadratique
 $422 L^4 4H^2$



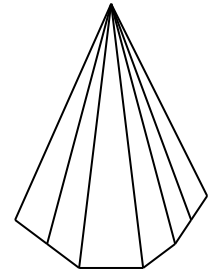
S. quadratique
C. de bipyramide
Diquadratiue4/mmm



C. de bipyramide
Diquadratiue4/mmm
ide dihexagonal 6mm



S. quadratique
C. de pyramide
Biquadratique
4mm



S. hexagonal
C. de pyramide
dihexagonal 6mm

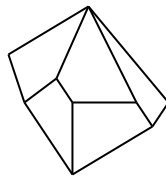
S. quadratique
S. rhomboédrique
C. de pyramide

dirhomboédrique 3

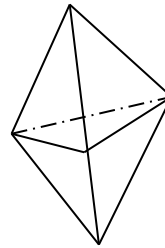
C. de scalenoedre

Quadratique

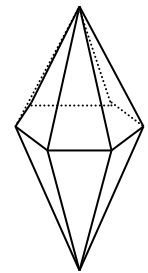
4 2m



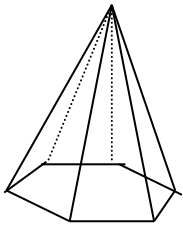
S. hexagonal
C. de trapézoèdre
hexagonal



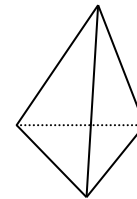
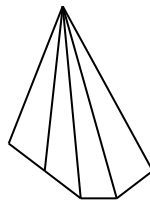
S. hexagonal
C. de bipyramide
Trigonal 6



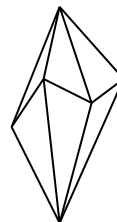
S.
hexagonal
C. de
bipyramide
Hexagonal 6/m



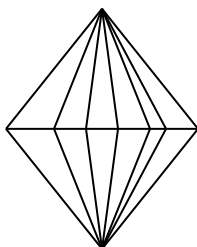
C. hexagonal
C. de pyramide
hexagonal 6



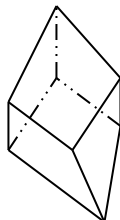
S. rhomboédrique
C. de pyramide
rhomboédrique 3



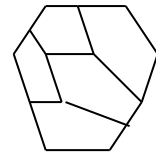
S. rhomboédrique
C. de scalenoédre rhomboédrique 3 m



C.de bipyramide
dihixagonal 6/mm



S. rhomboédrique
C. de pyramide
dirhomboédrique 3



S. rhomboédrique

C. de trapézoèdre

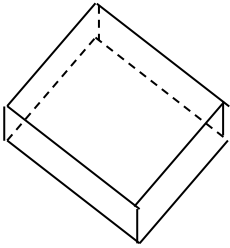
Rhomboédrique

32

S. cubique

C. de pentagonotitraedre

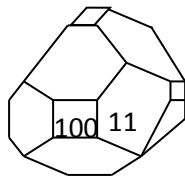
P3



S.

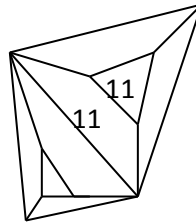
rhomboédrique

C. de rhomboèdre 3



S. cubique

C. di **hexoctaedre

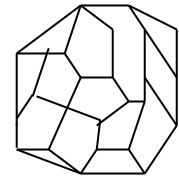


S. cubique

C. de hexatitradore

4 3m

sphalerite ***



S. cubique

C. de pentagotrioctaedre 43

Étude de la symétrie de position

Les groupes plans 2D

I. Choix de mailles

Observer la figure supposée infinie et représentant un dessin périodique du « symétrie aspect of M.C. ESHER'S periodic drawings »

Représenter sur un papier calque à l'aide de traits de couleurs différentes :

- Deux vecteurs de base \vec{a} et \vec{b} définissant une maille simple que l'on notée M. Le choix de vecteurs est il unique ? Dans le cas contraire, représenter deux autres vecteurs \vec{a}' et \vec{b}' définissant également une maille simple notée M'.
- Deux vecteurs du réseau décrits à partir des translations :

$$\vec{n}_{uv} = u\vec{a} + v\vec{b}$$

et donnant une maille multiple que l'on notée M''

Calculer la multiplicité de la maille M''

Préciser dans cette maille, les indices des nœuds extrémités des vecteurs \vec{a} , \vec{b} , \vec{a}' et \vec{b}'

Identifier, parmi les trois mailles M, M', M'' la maille conventionnelle.

II. Recherche du groupe ponctuel 2D

Représenter sur un papier calque à l'aide de traits de couleurs différentes :

- Le motif : rechercher sa symétrie et préciser l'unité asymétrique.
- La maille représentative de la symétrie du réseau : identifier le réseau, le système et rechercher les éléments de symétrie

Identifier le groupe ponctuel 2D et donner sa notation conformément aux symboles MAUGUIN.

III. Recherche du groupe-plan 2D

Représenter sur un papier calque à l'aide de traits de couleurs différentes la projection cotée de tous les éléments de symétrie en distinguant éléments de symétrie d'orientation et élément de symétrie de position.

Identifier le groupe-plan 2D et donner sa notation conformément aux conventions de l'union internationale de cristallographie.

IV Construction d'un dessin périodique

Observer le motif représentant

- L'agrandissement d'entités végétales ou minérales (HAECKEL)

- L'agrandissement d'entités géométriques choisies dans l'art arabe (PRISE D'AVENNE) et islamique (PAPADOPOULO)

Rechercher la symétrie du motif et en donner le groupe ponctuel 2D.

En utilisant le motif précédent représenter sur papier calque un dessin périodique supposé infini

- Dont la symétrie de réseau est inférieure à celle du motif.
- Dont la symétrie de réseau est supérieure à celle du motif.

Dont la symétrie de réseau est identique à celle du motif.

Identifier le groupe plan 2D de chaque dessin.

Les directions privilégiées 2D

directions système	1 ^{ère}	2 ^{ème}	3 ^{ème}
oblique			
rectangles	Axe de symétrie de plus grand ordre	Axe \vec{a} Ou axe \vec{b}	Direction à 45° de la 2 ^{ème}
hexagonal	Axe de symétrie de plus grand ordre	Axe \vec{a} Ou axe \vec{b}	Direction à 30° de la 2 ^{ème}
carré	Axe de symétrie de plus grand ordre	Axe \vec{a} Ou axe \vec{b}	Direction à 45° de la 2 ^{ème}

Les groupes plans 2D

Système	Groupes plans
Oblique	P2
Rectangle	P2 Pm Pg Pmm Pmg Pgg Cm Cmm
Hexagonal	P3 P31m P3m1 P6 P6m
Carré	P4 P4m P4g

Étude de la symétrie d'orientation

Les groupes ponctuels 3D

I Combinaison des éléments de symétrie

Construire à l'aide de tiges et de boules de même couleur un modèle orthorhombique (modèle 1)

Construire d'autres modèles orthorhombiques en plaçant des boules de couleurs différentes sur :

- Deux sommets situés sur le même arrêt (modèle 2).
- Deux sommets situés sur une diagonale de face (modèle 3).
- Deux sommets situés sur une diagonale du prisme (modèle 4).

Rechercher les éléments de symétrie des modèles 1, 2, 3 et 4.

Calculer l'ordre des groupes ponctuels correspondants.

Construire des modèles orthorhombiques où l'on trouvera associés 2 éléments de symétrie des modèles 2, 3 ou 4. Dans quel cas (modèle 5) la présence de ces 2 éléments de symétrie entraîne un changement dans le système.

En faire la démonstration par l'écriture des positions équivalentes et l'identification du système.

Montrer qu'il suffit d'ajouter un élément de symétrie à ceux du modèle 5 pour obtenir tous les éléments de symétrie du modèle 1. En faire la démonstration par l'écriture des positions équivalentes.

Construire en utilisant des boules de couleurs différentes deux modèles qui entraînent la plus basse symétrie (modèles 6 et 7).

II Étude de formes cristallines générales

Observer la forme cristalline donnée et procéder aux manipulations suivantes :

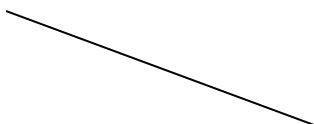
Rechercher tous les éléments de symétrie, les identifier et identifier le système.

Identifier le groupe ponctuel 3D et calculer son ordre. Dans le cas où l'ordre trouvé est inférieur à 16, établir la table de multiplication de ce groupe ponctuel. Dans le cas où l'ordre trouvé est supérieur à 160 donner la liste des sous-groupes. Et établir la table de multiplication du sous-groupe propre de plus grand ordre.

Observer la forme cristalline donnée, en vous aidant du tableau des classes cristallines, préciser le type de symétrie.

Représenter la projection stéréographique de tous les éléments de symétrie.

Les directions Privilégiées 3D



directions système	1 ^{ère}	2 ^{ème}	3 ^{ème}
triclinique			
monoclinique	Axe \bar{b}	Axe \bar{b}	Axe \bar{c}
orthorhombique	Axe \bar{a}	Axe \bar{a} ou	Direction à 45° de la
quadratique	Axe \bar{c}	Axe \bar{b}	2 ^{ème}
Hexagonal et rhomboédrique	Axe de symétrie de plus grand ordre [100]	Axe \bar{a} ou Axe \bar{b} [111]	Direction à 30° de la 2 ^{ème} [110]
cubique			

LES GROUPES PONCTUELS

1. Citer les éléments de symétrie que l'on peut rencontrer dans une molécule.

2. Étudier la symétrie des molécules suivantes (utiliser les modèles):

- Molécule H_2O
- Molécule CH_4
- Molécule Cl CH_3
- Molécule $\text{Cl}_2 \text{CH}_3$
- Molécule NH_3
- Molécule C_6H_6

Établir la table de Multiplication des Molécules H_2O , C_6H_6 et CH_4 ...

3. Construire des Molécule avec la symétrie des groupes ponctuels suivant:

- 2, 3, 4
- $2/m$ $2/m$ $2/m$

Sur ces différents modèles, identifier les éléments de symétrie.



système cubique



système hexagonal



modèle quadratique



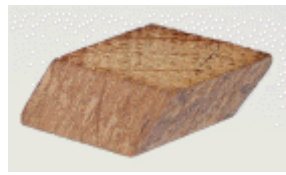
modèle
orthorhombique



système
rhomboédrique



système
monoclinique



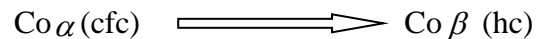
système triclinique

Polymorphisme

A basse température les cristaux tendent à prendre la structure la plus compacte possible, car elle correspond à l'état énergétique le plus bas. Sous l'effet de la pression ou pour une température plus forte, le même élément peut adopter une structure cristalline différente.

Ce phénomène est appelé P o l y m o r p h i s m e.

Ainsi pour le cobalt, la forme basse température cfc Co se transforme à la température de 495°C en forme β hexagonale compacte.



Cette transformation dite allotropique est rendue possible par la grande similitude des deux structures.

MODE OPERATION

1. en utilisant des modèles des réseaux de Bravais écrivez tous les réseaux et classifiez le dans les systèmes cristallins.
2. Quels sont les traits principaux des trapézoèdres (quadratique, hexagonale, rhomboédrique) ? – dessinez tous les modèles ensemble.
3. Quelle vous connaissez scalenoedres ; dessinez ensemble.
4. Quels sont les traits des pyramides – écrivez.
5. Classez les modèles dans les groupes ponctuelles et dessinez; trouvez et écrivez les éléments du symétrie pour chaque model.
6. Définies la différence entre x, y, z et u, v, w.

PROJECTION STEREOGRAPHIQUE

Les problèmes cristallographiques rendent souvent nécessaire une représentation plane des directions, plans et zones des cristaux. On utilise à cet effet les propriétés de la transformation géométrique nommée INVERSION.

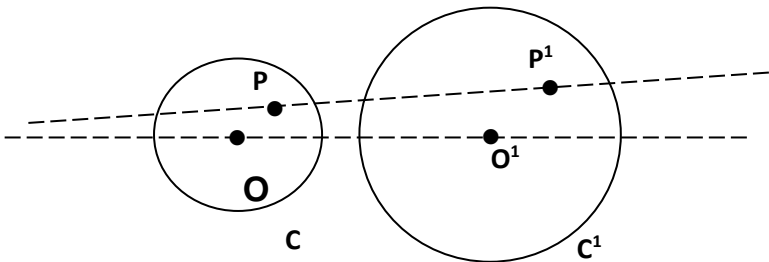
A – L'inversion

1. Définition

L'inversion est une transformation géométrique, munie d'un centre d'inversion I et d'une constante d'inversion K, qui transforme tout point P de l'espace en un point P', suivant la réalisation suivante :

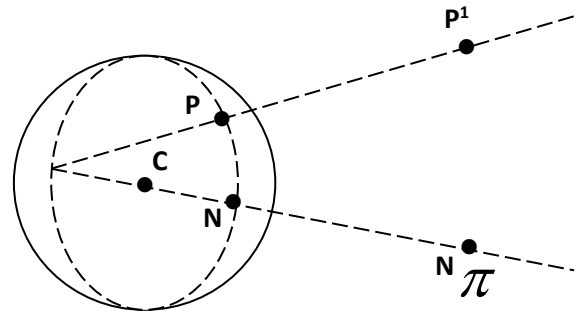
$$\overline{IP} \cdot \overline{IP'} = k$$

Des que C' soit situé sur la droite passant par I et C, l'inversion de centre I transforme une sphère de centre C en autre sphère de centre C'.



Inversion d'une sphère

Centre d'inversion quelconque



Inversion d'une sphère

Centre d'inversion sur la sphère

Si le centre d'inversion se trouve sur la sphère de centre C, celle-ci se transforme en un plan π tel que la droite IC lui soit perpendiculaire en un point C'.

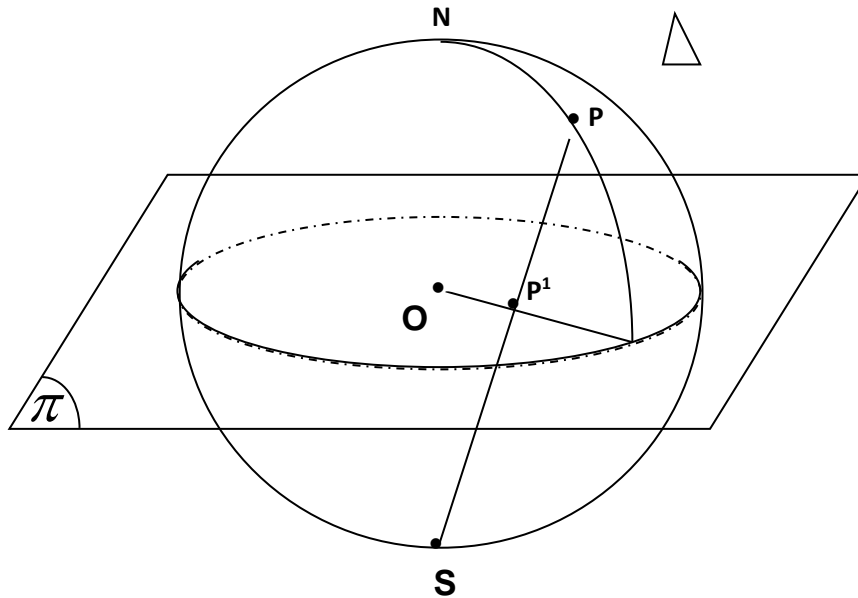
$$\overline{IC} \cdot \overline{IC'} = k$$

L'inversion est une transformation géométrique qui conserve les angles.

B – La projection stéréographique

1. Définition

La projection stéréographique est un cas particulier de l'inversion géométrique d'une sphère de rayon R , représenté sur la figure.



Projection stéréographique du pôle d'un axe P

Le centre d'inversion est situé sur la sphère en point S appelé pôle sud de la sphère de référence.

La constante d'inversion est égale à $k = 2R^2$

Ainsi le pôle nord N de la sphère se place en O, centre de la sphère initiale. La sphère se transforme donc en son plan équatorial tel que :

$$S\bar{p}' \cdot S\bar{p} = 2R^2$$

Le grand cercle équatorial reste invariable dans la projection.

2. Projection stéréographique d'un cristal.

Soit la sphère de référence décrite plus haut.

Dans certains cas à limite la projection stéréographique à la portion du plan équatorial situé à l'intérieur du grand cercle équatorial, formé par l'intersection du plan équatorial et la sphère supérieure (hémisphère nord) situé au dessus du plan équatorial, mais on peut faire la projection des deux hémisphères en donnant les signes différents pour les points de

projection du hémisphère nord et hémisphère sud. Dans le cas de la projection d'hémisphère sud en considère comme le centre d'inversion le pôle N.

Au centre O de la projection (de la sphère de référence) en place la maille du réseau du bravais correspondant au cristal à étudier, de telle sorte que son origine coïncide avec le centre de la sphère de référence.

Si l'axe principal du cristal coïncide avec l'axe SN de la sphère de référence, la projection obtenue sera appelée « projection stéréographique standard ».

3. Projection stéréographique d'une direction cristallographique. (Par exemple un pôle d'un axe P)

Soit un axe cristallographique Δ du cristal passant par le centre de la sphère de référence (et aussi par l'origine du réseau). Cet axe (Δ) crève la sphère en un point P.

Le point P est le pôle de l'axe (Δ) sur la sphère de référence.

Elevons la droite SP : elle coupe le plan équatorial (π) en point P'.

Le point P' est l'image de l'axe (Δ) dans la projection stéréographique.

4. Projection stéréographique d'un plan réticulaire.

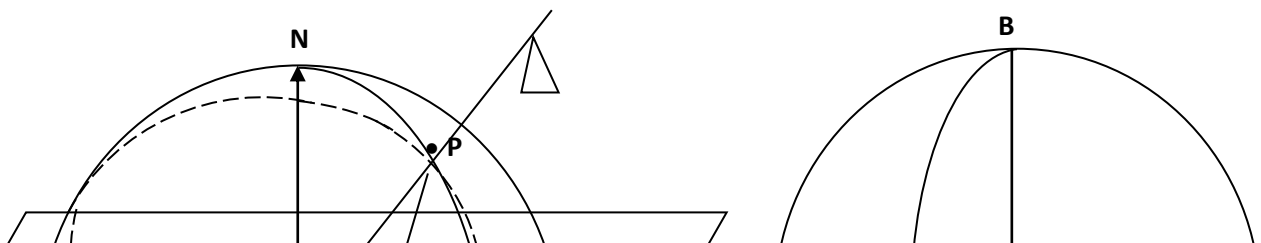
Soit le plan (M) de la famille considérée, contenant le centre O de la sphère de référence. Il découpe sur cette sphère un grand cercle (C) centré en O. l'inverse de ce grand cercle (C) est un cercle (C') qui possède en commun avec (C) deux points A et B, invariants car situés sur le grand cercle équatorial.

L'arc de cercle (C') situé sur le disque limité par le grand cercle équatorial est l'image du plan (M) dans la projection stéréographique.

Il est souvent plus pratique de caractériser le plan (M) par le pôle (P) de l'axe (Δ) qui lui est normal, et qui passe par O.

Le point P' obtenu sur la projection est l'image de l'axe (Δ) qui lui est normal, et qui passe par O.

Le point P' obtenu sur la projection est l'image de l'axe (Δ), normal au plan (M). il caractérise ce plan dans la projection stéréographique.



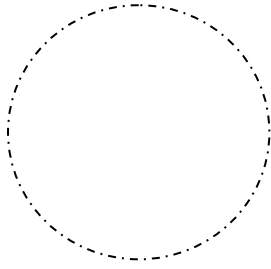
Projection stéréographique d'un plan

(001) cubique

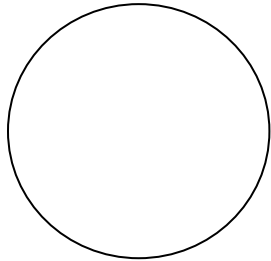
Les signes conventionaux utilisés en faisant la projection stéréographique.

Pôle de la face, ou la direction perpendiculaire (normale) à la face en plan équatorial, ou en crevant l'hémisphère nord.

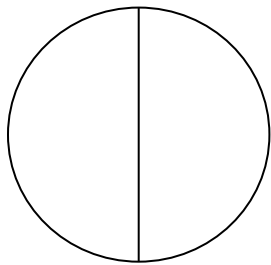
Pôle de la face qui creve l'hémisphère sud de la sphère de projection.



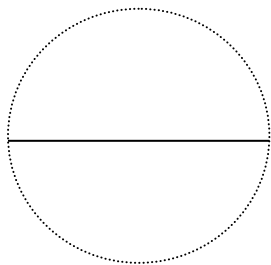
Plan équatorial de la projection stéréographique du cristal qui ne possède pas le miroir 001



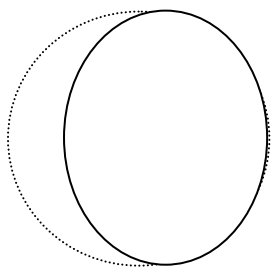
Plan équatorial de la projection stéréographique du cristal qui possède le miroir 001



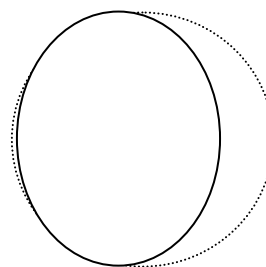
Projection du miroir 001 et 010



Projection du miroir 100



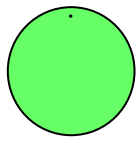
Miroir 011



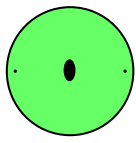
Miroir $0\bar{1}1$

Représentation des groupes ponctuels de symétrie. L'usage de la projection stéréographique est très commode pour représenter les différents groupes de symétrie.

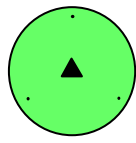
Les tableaux au dessous représentent les éléments de symétrie des groupes.



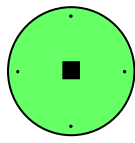
1



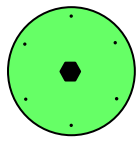
2



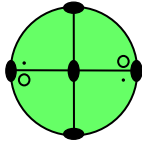
3



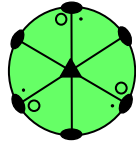
4



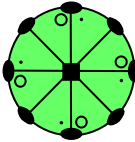
6



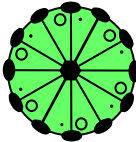
222



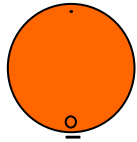
32



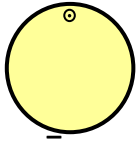
422



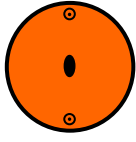
622



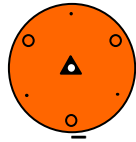
1



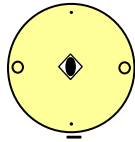
2=m



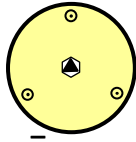
2/m



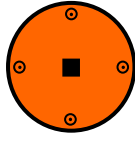
3



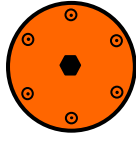
4



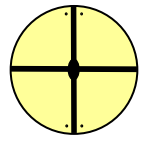
6=3/m



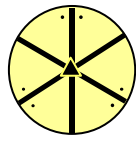
4/m



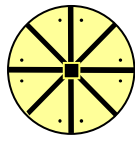
6/m



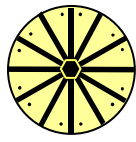
2mm



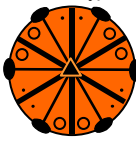
3m



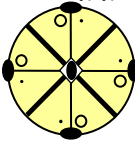
4mm



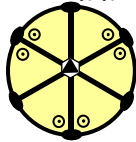
6mm



3m



42m (4m2)



62m (6m2)



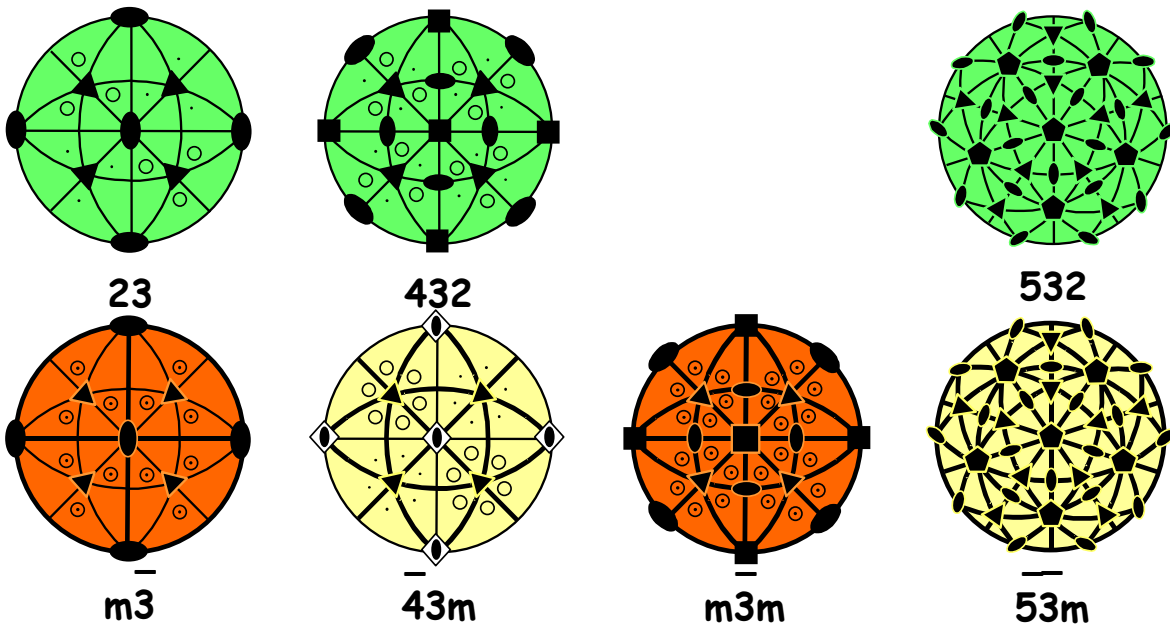
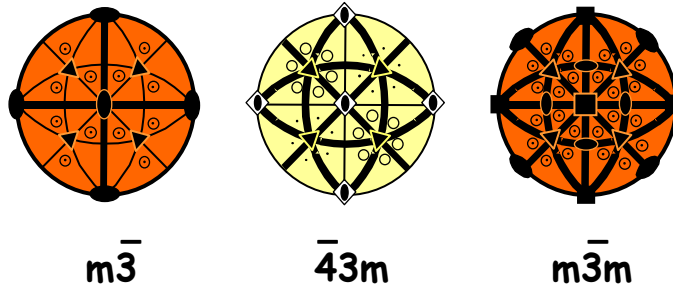
mmm



4/mmm



6/mmm



Mode opératoire

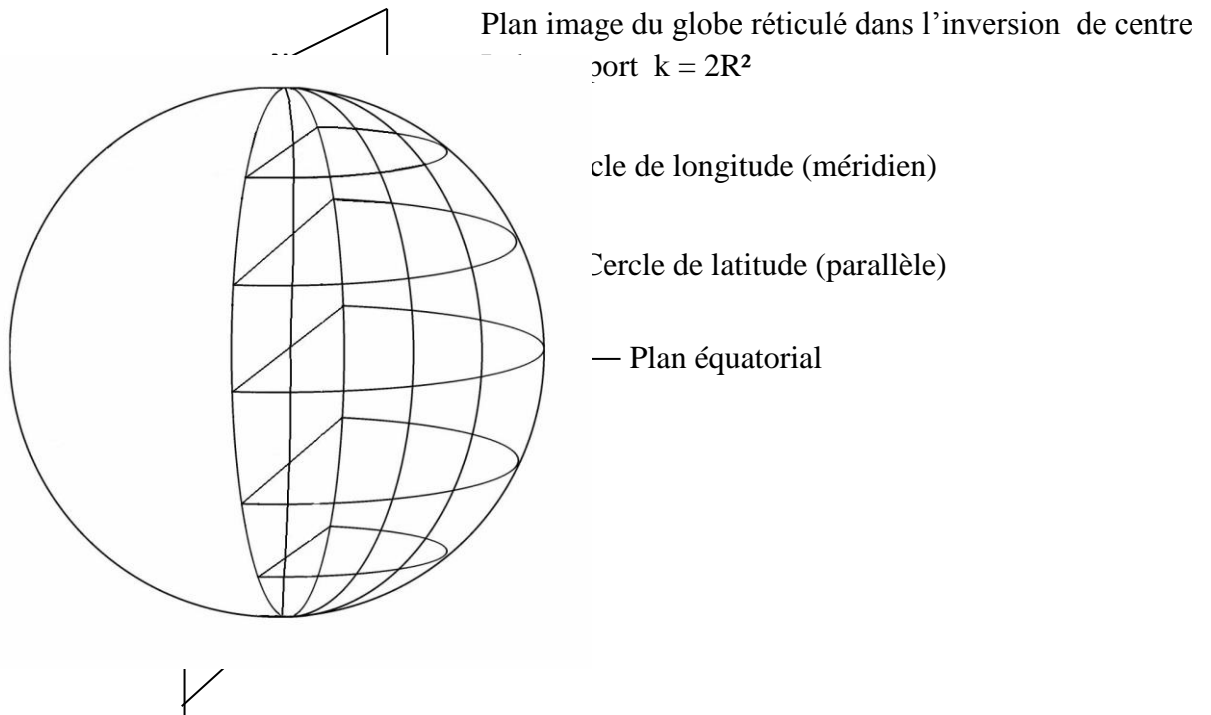
1. faites la projection stéréographique de l'axe 001, 100, 010, 110, 11, 101.
2. faites la projection stéréographique de plan 001, 100, 010, 110, 11, 101.
3. faites la projection stéréographique des tous les modèles disponible

PROJECTION STEREOGRAPHIQUE STANDARD D'UN CRISTAL CUBIQUE EN UTILISANT LE RESEAU DU MULFF

1. Globe réticulé et réseau stéréographique

a/ Le globe réticulé

Soit un globe sphérique comme celui utiliser par les géographes



Sur ce globe en définit un grand cercle appelé équateur perpendiculaire à un axe dont le point d'intersection O est le centre de la sphère. Cet axe perce la sphère en deux points qui sont les pôles nord et sud du globe.

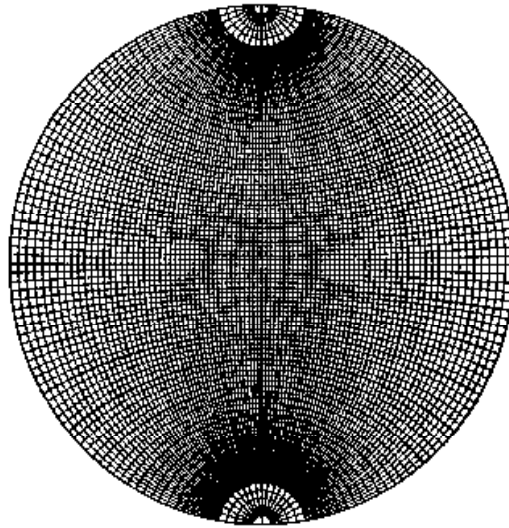
Les grands cercles passant par les pôles M et S sont appelés cercles d'égal longitude, ou méridiens. Les petits cercles situés dans des plans par la projection stéréographique d'un tel globe permet d'obtenir des disques eux aussi réticulés.

b/ Le réseau polaire ou équatorial

Si le centre d'inversion est placé sur un pôle, sa projection sera un réseau plan contenu dans le plan équatorial. Les méridiens sont transformés en droites passant toutes par le centre du réseau et les parallèles deviennent des cercles concentriques.

C/ Le réseau de wulff, ou réseau méridien

Ce réseau correspond à la projection du globe dans un plan méridien, obtenu en plaçant le centre d'inversion sur l'équateur du globe.



Réseau stéréographique de Wulff

Alors l'axe Nord – Sud est dans le plan de projection et reste invariant.

Les méridiens deviennent des de cercles limités par les deux pôles sauf celui qui est normal au plan de projection qui devient segment de droite.

Les parallèles se transforment eux aussi en gros de cercle sauf l'équateur qui donne une droite. Méridiens et parallèles restent perpendiculaires entre eux. Un tel réseau permet d'effectuer des mesures angulaires avec une précision de l'ordre du degré.

2. Propriétés du réseau de wulff.

a/ mesure de l'angle existant entre deux pôles.

Soient deux pôles représentés sur une projection stéréographique.

L'angle existant entre les deux axes correspondants est égal à leur différence de latitude si ces deux points sont sur le même méridien.

Pour résoudre ce problème, on pose sur la projection initiale un réseau de Wulff centré au même point O. Ce réseau reproduit sur papier transparent laisse voir la projection de départ.

On fait tourner le réseau de Wulff autour du point O jusqu'à ce que les deux points intéressants soient situés sur le même grand cercle limité par ces points.

b/ trace d'un plan dont on connaît le rôle P, ou

tracé de la zone de plan dont l'axe commun correspondant au pôle I.

Le grand cercle cherché passe par les pôles N et S et par le point de l'équateur situé à 90° du point de concours du grand cercle et de l'équateur.

c/ projection stéréographique standard d'un cristal cubique.

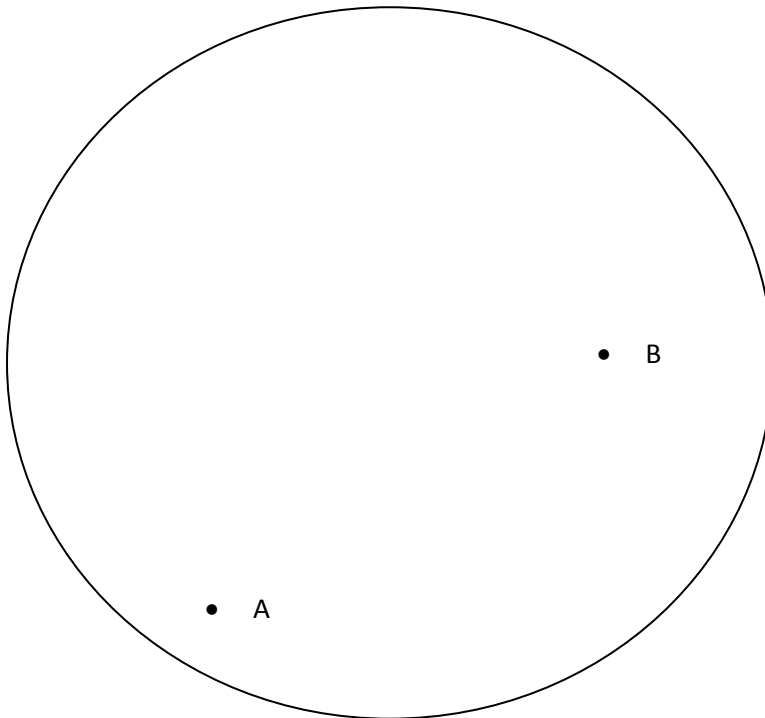
La projection standard (001) d'un cristal cubique, est telle que le plan (001) de ce cristal est parallèle au plan de projection. Elle est représentée en façon schématique dans les explications pour T.P; N° 4.

Le tableau au dessous donne les valeurs possibles des angles ; entre les différents pôles. Les valeurs angulaires peuvent se calculer à l'aide du formulaire :

$$\cos \theta = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)}}$$

SUCCESSION D'ACTION

1. Il y a deux pôles A et B. En utilisant réseau de Wulff Mesure l'angle entre eux.



2. Si point B est le pôle d'un plan dessinez cet plan.

(H K L)	(hkl)	Valeur des angles entre plan (HKL) et (hkl)
100	100	0°
	110	15°
	111	34° 14'
	210	26° 34'
	211	35° 16'
	221	48° 11'
	311	25° 14'
110	110	0°
	111	35° 16'
	210	18° 26'
	211	30° 01'
	221	19° 28'
	311	31° 29'
111	111	0°
	210	39° 14'
	211	19° 28'
	221	15° 48'
	311	29° 39'
210	210	0°
	211	24° 06'
	221	26° 34'
	311	19° 17'
211	211	0°
	221	17° 43'
	311	10° 00'
221	221	0°
311	311	0°

Angles entre plan cristallographiques pour les cristaux appartenant au système cubique.

3. en utilisant tableau au dessus dessinez la projection stéréographique du cristal cubique.

Vérifiez les résultats en comparant avec la figure au dessous.

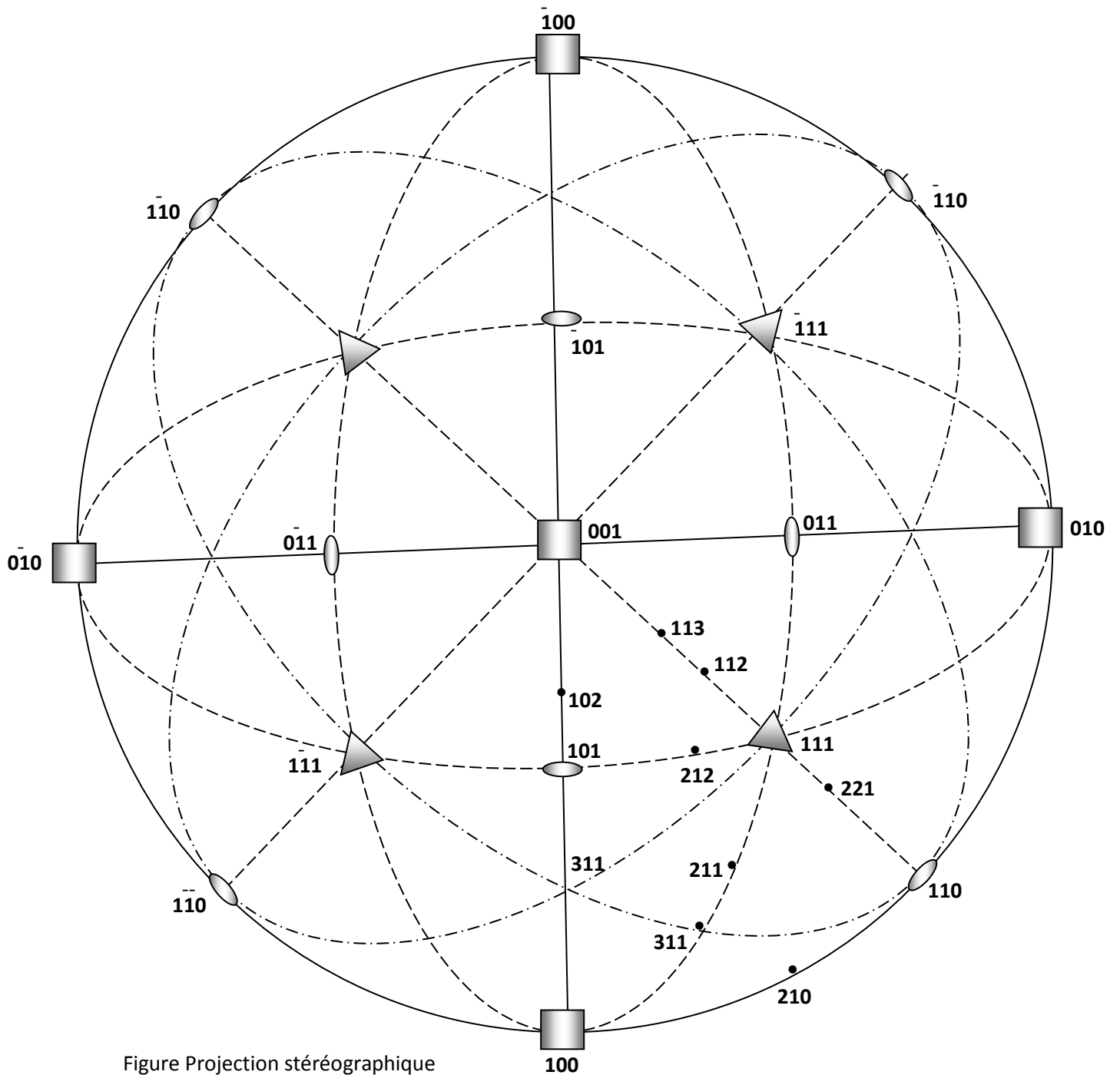
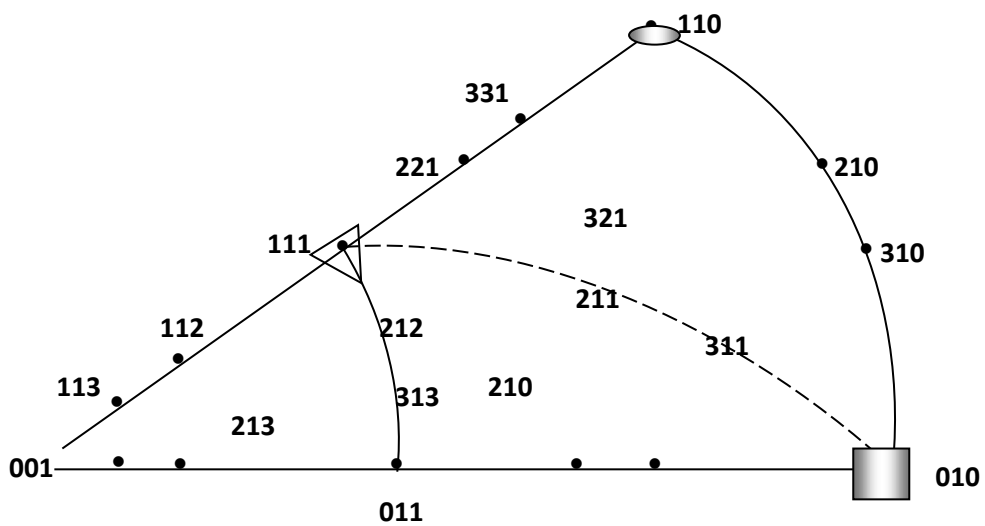


Figure Projection stéréographique

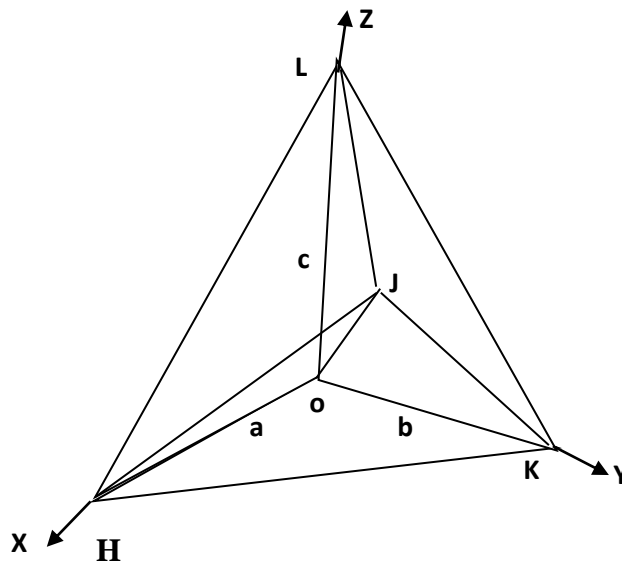


**DEDUCTION DES INDICES DE MILIER, SYMBOLES DE FORME ET
DETERMINATION DES UNITES AXIALES D'ORTOCLASE
D'APRES LA PROJECTION STEREOGRAPHIQUE EN UTILISANT
RESEAU DE WUFF**

1 Compte des unités axiales et indices des faces des cristaux

En principe les cristaux sont caractérisés par les résultats des mesures des angles perpendiculaires (normales) à faces. De ça raison est indispensable la connaissance du mode du compte des unités axiales et des indices des faces en utilisant les résultats des measurements des angles sur les cristaux.

a/ calcul les unités axiales



Dans ce but il faut examiner le système des trois axes cristallographiques X, Y et Z, quelconque face HKL et ligne normale a cette face menée de point initial du système des axes cristallographiques O. Point J c'est le point de percement de la face HKL par normale OJ. Dans les triangles OHJ, OKJ et OLJ les angles $OJH = OJK = OJL = 90^\circ$, puisque OJ est perpendiculaire a plan HKL.

OJ forme avec les axes X,Y et Z les angles (JOX),(JOY) et (JOZ).

$$\frac{OJ}{OH} = \cos(JOX) \quad \frac{OJ}{OK} = \cos(JOK) \quad \frac{OJ}{OL} = \cos(JOZ)$$

$$\text{D'ou } OK : OK : OL = a : b : c = \frac{1}{\cos(JOX)} : \frac{1}{\cos(JOY)} : \frac{1}{\cos(JOZ)}$$

La grandeur des paramètres a, b, c de la face est proportionnel réciproquement a la valeur des cosinus des angles entre des axes cristallographiques et la normale de ca face.

En multipliant d'expression susdit par cos (JOY) on obtient :

$$\frac{\cos(JOY)}{\cos(JOX)} : 1 : \frac{\cos(JOY)}{\cos(JOZ)}$$

L'expression dernière détermine la relation des unités axiales comptée a la base des résultats des mesures des angles entre normale de la face et les axes cristallographiques.

b/ calcule des indices des faces des cristaux

Les segments a, b et c que la face HKL coupe sur les axes cristallographiques sont les paramètres de la face. Dans le système des trois axes cristallographiques l'espace se divise à huit parts. Les signes des paramètres déterminent dans laquelle part se trouve le pôle de la face. La relation a : b : c des paramètres comme la relation des unités axiales ne se change pas pendant accroissement du cristal, parce que les faces se déplacent parallèlement.

Les relations a' : b' : c' = ra : rb : rc correspondent a la face parallèle a la précédente. Les relations a'' : b'' : c'' = ma : nb : pc correspondent de la face qui ne pas parallèle a la précédéent.

La relation m : n : p qui peut être réduit aux simples nombres entiers est nommée mesurable relation des indices :

Pour comparer la relation des situation mutuelle des faces d'un cristal nous recevons l'un des face unitaire servent au détermination de la situation relative des autres faces dans l'espace.

Quand la face HKL est la face unitaire et face H'K'L' est l'autre qui n'est pas parallèle a la précédente on fait la relation des paramètres de ces deux faces :

$$\frac{a}{a'} : \frac{b}{b'} : \frac{c}{c'} = h : k : l = \frac{OH}{OH'} : \frac{OK}{OK'} : \frac{OL}{OL'}$$

h, k, l sont les indices de Millier des faces du cristal

La relation des paramètres de la face unitaire aux paramètres de la face quelconque d'un cristal (les indices de Miller) sont des nombres entières ;

La relation des indices prisant parenthèse c'est le symbole de la face.

Si nous allons déterminer par la lettre D le point du percement de la face quelconque h'k'l' par la ligne normale a cette face menée de point initial du système des axes cristallographiques O et par les signes (DOX), (DOY), (DOZ)- les angles que fait cette normale avec les axes X, Y et Z :

$$h : k : l = \frac{\cos(DOX)}{\cos(JOX)} : \frac{\cos(DOY)}{\cos(JOY)} : \frac{\cos(DOZ)}{\cos(JOZ)}$$

Cette formule serve pour le compte des indices de la face quelconque du cristal a la base da la projection stéréographique. Les grandeurs des angles (DOX), (DOY), (DOZ) , (JOX), (JOY) et (JOZ) sont déterminées avec l'aide du réseau de wulff. Les valeurs on détermine aux parallèles après aménagement du pôle de la face donné et du pôle de l'axe cristallographique correspondante au le même méridien.

2. L'exemple de déduction des symboles de forme et des unîtes axiales sur le cristal d'orthoclase.

Nous mesurons les angles être des faces d'un cristal d'orthoclase.

On mesure les angles entre les normales de faces en servons de goniomètre manuel.

On obtient les valeurs :

$l : l = 61^\circ$	$P : x = 45^\circ$
$P : l = 68^\circ$	$l : x = 69^\circ$
$l : M = 59^\circ$	$P : y = 80^\circ$
$P : n = 45^\circ$	$O : x = 87^\circ$

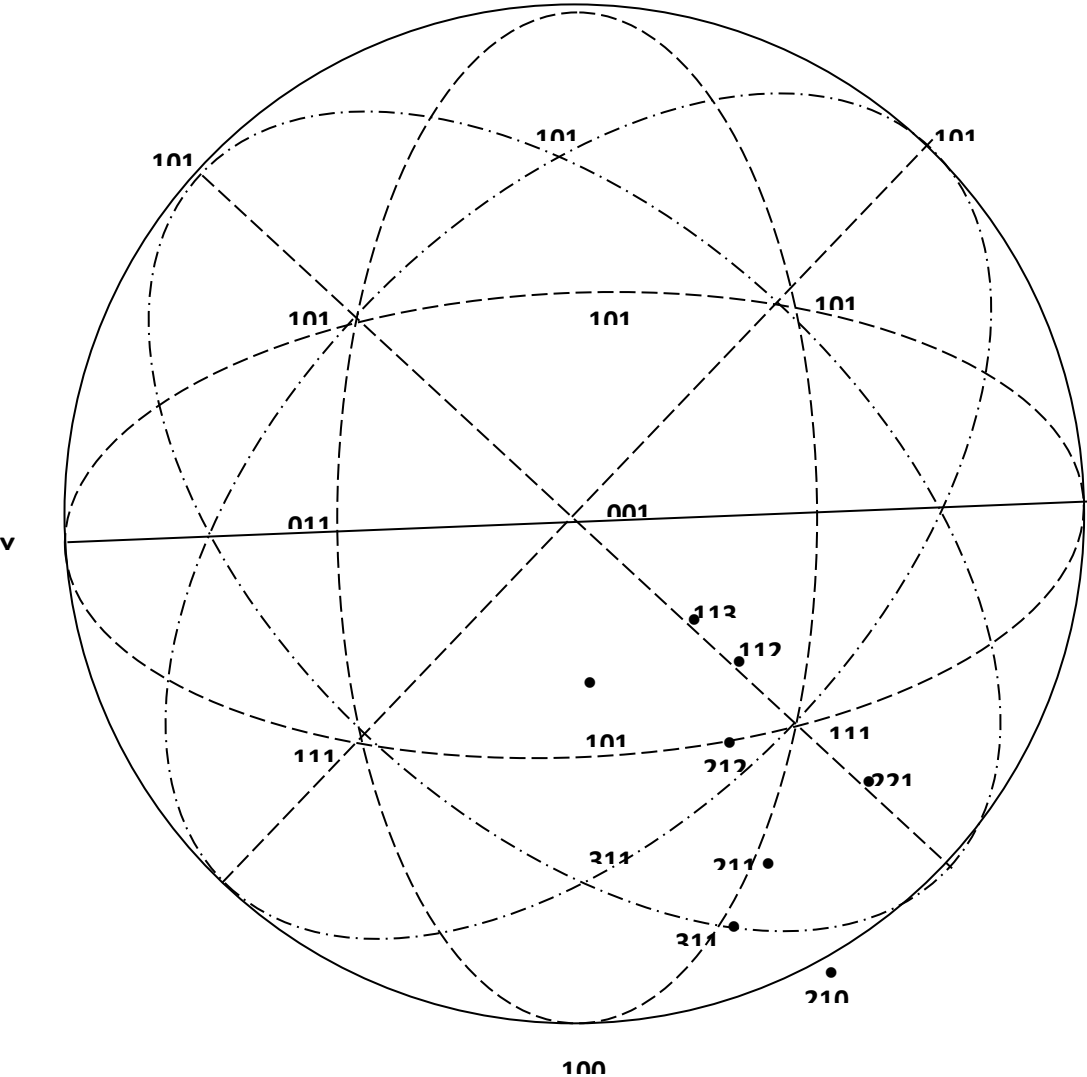
Par le signe l : M on désigne l'angle compris entre normale de la face l et normale de la face M.

A la base de ces résultats on dresse la projection stéréographique du cristal. A cet effet au réseau de wulff on mette la feuille de papier a calquer de dessin qui au centre s'attache a la planche à dessin. / Avec l'épingle /. Sur la calque on dessine le cercle de projection, le même que sur le réseau de wulff.

Pour la réalisation de la projection on monte le cristal comme ça que les faces désignées par les lettre M et l doivent être perpendiculaires au plan de projection. La face P doit d'être dirigée en pente en direction de personne qui exécute la projection.

Les faces M et l forment la zone des plans perpendiculaire a la plan de projection. Leurs arrêts se range perpendiculairement a la surface de la calque, en conséquence de quoi les normales a faces sont parallèles a la plan de dessin. Les pôles des ces faces sont donc situés sur le cercle de la projection. Les pôles des faces M se trouvent au équateur et les pôles des faces l à la distance 59° que des pôles des faces M. ce distance on mesure la long du cercle de la projection sur les parallèles du réseau de wulff.

Les faces P, x et y forment la zone des plans visible pour observatoire avec l'axe parallèles au plan de dessin. A la projection coup de cet axe se présente comme équateur. La direction de l'axe de cette zone des plans est perpendiculaire aux les faces M donc est conforme avec la direction des normales de ces plans. La projection de la zone des plans formée par les faces P,x et y est la droite qui lie les pôles N, et S du réseau de wulff. Les projections des pôles P,x et y sont situés sur la projection de la zone de plan P,x et y .



Les faces F formé avec les faces L l'angle 68° . Dans le but de mesure d c distance angulaire en tournant la calque en détourne le pôle de la face L et le pôle géographique de la calque de Wuff et a pris en compte sur le méridien la distance 68° et se trace la parallèle correspondants le couple parallèle avec la projection de la zone des plans Fxy donne le point recherché. Le pôle de la face pz qui se trouve au bas cristal on trouve a la même façon en commençant de la face L qui se trouve à l'autre côté de cristal.

Le pôle de la face x on peut trouver a la même façon au que plus comme en découpant le long de la zone de plan PXYI' angle pxy 45° ; le pôle de la face y est éloigné à 80° du pôle de la face p.

On observant le cristal projeté on peut remarquer que les arrêts des faces M N P sont parallèles. Ces faces forment la zone des plans mnp. En bout de biffage de la projection du cercle de cette zone des plans on tourne le calque tel le position dans laquelle les pôles des faces PM vont se trouver sur l'un méridien. Ce méridien est la projection de la zone des plans mnp on apporte zone dans plans a la projection sur la ca que. Les pôles des faces n sont en distance 45° du pôle de face P. cet angle on mesure de long du méridien du réseau de Wuff.

Après on dessine la zone des plans mox. Les pôles des faces m et x doivent se trouver sur le même méridien, l'angle entre 0 et x est 27° sur la projection, on voit bien la situation symétrique des pôles des faces situées sur inférieure et supérieure hémisphère par rapport au centre de la projection.

En déterminant le calque, on peut se convaincre que les pôles des faces l n o y sont situés sur le même méridien du réseau du Wuff. C'est la preuve que ces faces forment la zone des planes inoy : difficilement visible au premier coup d'œil.

Sur la projection d'orthoclase, on peut vérifier la raison de la loi des zones des plans, qui dit, que chaque face du chaque cristal doit appartenir au... des zones des plans.

Face	M	P	X	L	N	O	y
Zone des plans	ml	pxy	pxy	ml	mnp	nox	pxy
	mnp	mnp	mox	lnoy	lnoy	lnoy	lnoy
	mox						

Dans le cas discuté les axes cristallographiques sont parallèles a trois arrêts du cristal qui ne sont pas dans la même plan.

L'axe z est toujours orientée perpendiculairement au plan de la projection et correspond à l'axe de la zone des plans lml. Les pôles de l'axe z se trouvent au centre du cercle de la projection en distance 90° des pôles des faces x et l.

L'axe y est marqué par la zone des plans pxy, donc le pôle de l'axe x se trouve sur la projection de la zone des plans pxy en distance 90° des pôles des faces pn m.

En suite on remarque à la projection les éléments de symétrie géométrique nettement l'axe l2 de la direction en accord avec l'axe cristallographique y. on marque encore le miroir, dans lequel est situé l'axe cristallographique x. le miroir on marque par la ligne continue.

Après avoir fait la projection du cristal on procède au calcul des indices des faces. Pour cela il faut connaître les angles entre les normales des faces et les axes cristallographiques. On relève ces angles en façon suivant :

On tournant la calque l'un après l'autre on ramène les pôles des axes cristallographiques et les pôles des faces sur le même méridien et aux les parallèles on déchiffre les angles cherchés. Les résultats de ces mesurèrent avec les valeurs des cosinus correspondantes sont établis dans le tableau : les angles entre normales des faces du cristal et les axes xyz

Axe	X	Y	Z	X	Y	z
Formule de la face	Grandeur d'angle			Valeur de cosinus		
o_1	47	63	36	0,682	0,454	0,802
n_1	90	45	59	0,000	0,707	0,643
l_1	39	59	90			0,000
x_1	10	90	54		0,000	
y_1	10	90	54		0,000	
M_1	90	0	90	0,000	1,000	0,000
P_1	90	90	90			

Compléter le tableau 1

Comme la face unitaire nous cliçons l'une des faces qui coupe tous les trois axes cristallographiques. Dans ce cas c'est face o. les indices des faces comptez en utilisant l'équation :

$$h : k : l = \frac{\cos(DOX)}{\cos(JOX)} : \frac{\cos(DOY)}{\cos(JOY)} : \frac{\cos(DOZ)}{\cos(JOZ)}$$

Décompte des symboles des faces et des formes des plans

Face	Action			Résultat			Symbole de la face	Symbole de la forme
o ₁	0,682/0,682	0,454/0,454	0,809/0,809	1	1	1	(111)	<111>
n ₁	0,600/0,682	0,707/0,454	0,643/0,809	0	1,56	0,79	(021)	<021>
l ₁								
x ₁								
y ₁								
M ₁								
P ₁								

Compléter le tableau 1

Donne la projection stéréographique on peut aussi compter les angles entre les axes cristallographiques, dans le cas d'orthoclase, l'angle entre l'axe x et y = 90° ; z et y = 90°, entre x et z = 180 - 64 = 116°

Enfin, on compte les unités axiales de la face unitaire selon la formule :

$$a : b : c = \frac{1}{\cos(JOX)} : \frac{1}{\cos(JOY)} : \frac{1}{\cos(JOZ)}$$

Comptez

Et la relation des unités axiales

$$\frac{\cos(JOY)}{\cos(JOX)} : 1 : \frac{\cos(JOY)}{\cos(JOZ)}$$

DETERMINATION DES ANGLES 2θ EN UTILISANT L'APPAREIL A RAYONS X

L'appareil (110,220, 240V, 50-60Hz, 80VA) fonctionne avec un tube a rayons X pourvu d'une anticathode en cuivre ($\lambda_{K\alpha} = 1,5418 \text{ \AA}$). A une haute tension (commutable) de 20/30KV pour un courant du tube (réglable) d'environ 0.05 mA. La haute tension et le courant du tube sont les deux stabilisés. La puissance rayonnante étant faible on peut protéger le plateau d'expérimentation rond et horizontal par un couvercle en matière plastique transparent. Le tube à rayons X est enfermé dans un dôme transparent de verre plombifère et se trouve sur le plateau d'expérimentation verticale. Même pendant l'émission des rayons X. On peut observer de tous les côtés le montage expérimental.

Le plateau d'expérimentation est rond puisque l'appareil a rayons X est conçu comme goniomètre à tube compteur. Le tube compteur est approprié pour démontrer les réflexions des rayons X sur des cristaux placés dans le port échantillon, étant donné que les angles de rotation du bras de mesure et du porte échantillon ; par une pince de serrage. Le tube compteur est inséré dans le bras de mesure. On peut aussi insérer les accessoires pour les mesures dans des cadres des diapositives.

L'appareil a hauteur 25cm, diamètre 37 cm et de poids 9kg. Le commutateur du temps avec possibilité de deux heures de temps d'interruption de travail facilite simple réglage et contrôle du temps d'exposition que prévient l'action continu pas contrôlé d'appareil.

Pendant l'expérience, il n'y a pas danger de radiation. En distance de 10 cm de la surface d'appareil la dose de radiation est moindre que 1./h.

EXAMEN DU CRISTAL D'HALITE (Na Cl) PAR LA METHODE DES POUDRES DE DEBYE-SCHERE

La méthode des poudres consiste en l'étude de la diffraction des rayons X par les solides cristallisés à l'état de microcristaux ou poudres. C'est la méthode d'examen des cristaux trop petits pour être déterminé par les méthodes de monocristaux. C'est aussi de déterminé des cristaux en solution solides, en roche composés des minéraux différents par exemple en roches argileuses. On peut déterminer la composition minéralogique des matières premières céramiques de la dimension des grains moindres $1 \mu\text{m}$.

Au lieu de cristal unique en utilise la préparation poly granulaire, préparé de la substance pulvérisée.

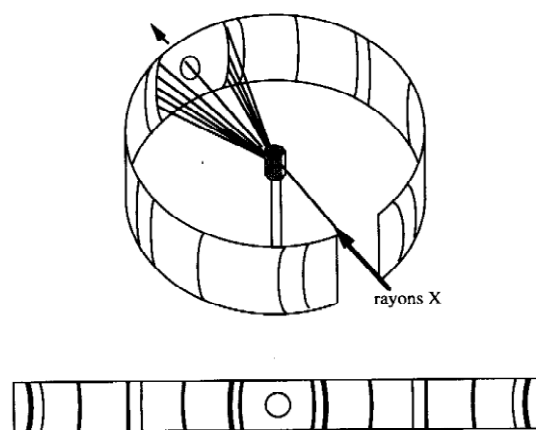
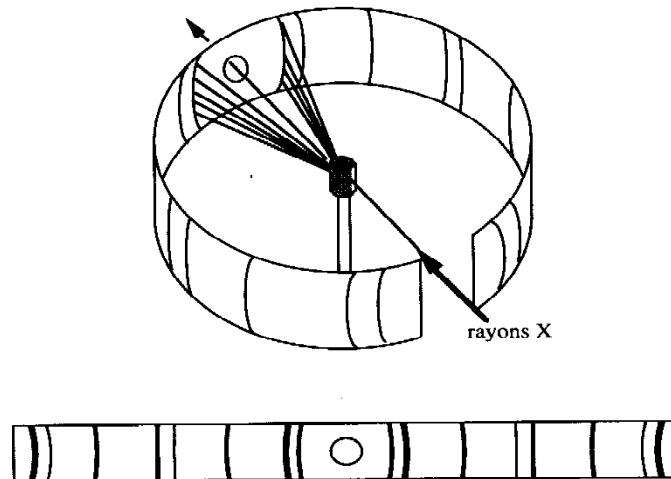


Fig. 1 la chambre debye-Scherrer

La méthode a la détermination des distances inter réticulaires, on utilise un rayonnement X incident monochromatique. L'obtention d'un rayon diffracté est subordonnée à l'existence d'un nœud du réseau réciproque sur la sphère d'EWALD. Dans la méthode les rayons X incidents arrivent sur un échantillon contenant un très grand nombre de cristaux orientés en façon différent, donc ayant tous les orientations possibles. Le nombre très élevé des réseaux réciproques correspondants de même distance inter réticulaire (de même origine I) et d'orientation multiples entraîne que le lieu géométrique d'un nœud hkl est une sphère du centre I et de rayons X. Cette sphère coupe la sphère d'EWALD suivant un cercle. Les rayons

X diffractées sont les génératrices des cônes issus de O, centre de la sphère d'EWALD, et s'appuyant sur ces cercles. La poudre est supposée placée au centre de la sphère d'EWALD. Il y aura autant de cônes que des nœuds hkl du réseau réciproque (qui correspondent à des distances inter réticulaires du cristal) dont la distance à l'origine est comprise entre zéro et $\frac{2}{\lambda}$, diamètre de la sphère d'EWALD. On peut vérifier cela à la figure au dessous.



Cônes de diffraction $h_1k_1l_1$ et $h_2k_2l_2$

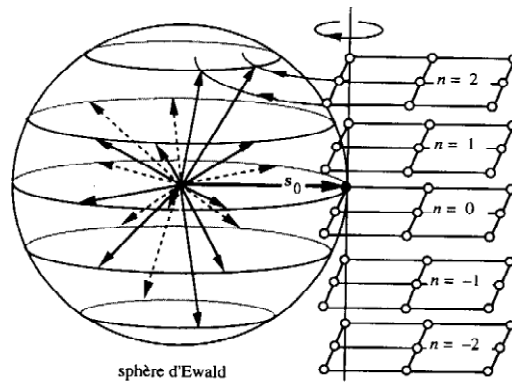
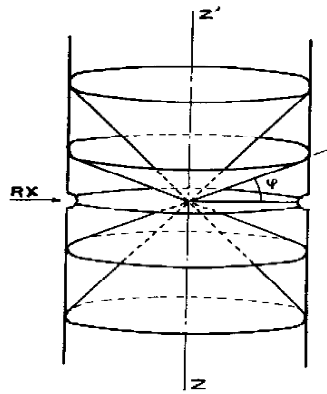
Sur intersection des sphères lieux géométriques des nœuds $h_1k_1l_1$ et $h_2k_2l_2$ avec la sphère d'EWALD.

En effet le nombre très élevé des orientations des microcristaux fait qu'il aura des plans réticulaires (hkl) toujours en position de diffraction.

A chaque angle de diffraction θ correspond une distance d telle que

$$\lambda = 2d \sin \theta$$

L'angle 2θ est compris entre 0 et π . Nombreuses positions des plans réticulaires en relations à rayonnement incidente entraînent que la figure a la symétrie de révolution autour des rayons X incidents



Le nombre de cônes diffractés dépend du nombre de valeurs des distances inter réticulaires qui vérifient :

$$\sin \theta < \frac{\lambda}{2d} < 1$$

Soit $d > \frac{\lambda}{2}$

La détection des rayons diffractés est photographique. Les rayons impressionnent un film. On obtient de raies diffractées enregistrées sur un film circulaire centré sur l'échantillon.

Comme on voit sur la figure4 l'échantillon est un bâtonnet ; le film, un cylindre ayant le bâtonnet pour axe. L'ensemble est contenu dans une enceinte fermée, la chambre debye Scherrer. L'impacte des rayons X diffractés est enregistré sur le film sous la forme de raies, courbés d'intersection des cônes diffractés et du film.

Le bâtonnet est dispersé sur une porte d'échantillon mobile de manière à tourné sur lui même au cours de la diffraction. Les rayons X incidents arrivent au niveau de l'échantillon dans un tube appelé collimateur :

Le faisceau direct (rayon émergent situé dans le prolongement du rayon incident) intense est absorbé dans une autre tube : le puits. Cette disposition qui isole le faisceau X limite la diffraction parasite.

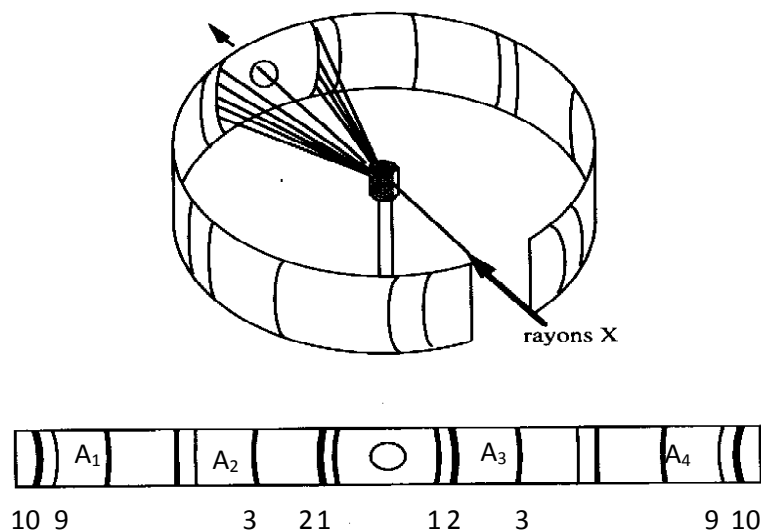
La confection du bâtonnet des poudres est affectée selon l'une ou l'autre de 2 façons dessinées figure 4

Fixation par une cire ou une graisse sur une mince tige de verre pyrex. Le support doit avoir une diffraction négligeable : c'est généralement un.....qui se suppose au raies de l'échantillon le polystyrène dissout dans du benzène convient au général pour fixer la poudre. Introduction de la poudre dans un tube de verre creux prévu a cette effet ; de diamètre quelques dixième de millimètre ; le verre de Lindemann.

Les montages du film dans la chambre debye Scherrer sont de 2 types.

Selon la disposition de l'ouverture du film par rapport au faisceau incident.

Montage peut être symétrique ou asymétrique en relation a rayonnement incident.



Le montage symétrique du film debye gramme du NaCl ($Co k_{\alpha}$), $\lambda = 1.7906$

Calcul des distances inter réticulaires

Soit $2d$ la distance de 2 raies identiques dans le montage normal. On voit que

Faites le tableau des angles dont valeurs multiples par coefficient de longueur de film. Après déterminer les valeurs de d pour chaque réflexe.

Nous connaissons que les valeurs d obtenus sont caractéristiques pour Halite NaCl, minéral, qui cristallise en système cubique.

Dans les cristaux du système cubique sont possibles trois réseaux

Cubique simple, cubique centré et cubique à faces centrées.

Les indices de Miller de ces réseaux :

simple	P	100	110	111	200	211	220	221	310	311				
centré	I		110		200	211	220	300	310					
A				111	200		220			311	420	422	333	440
faces														
centrés														

Le nombre des atomes dans la maille de NaCl est 8 (quatre ion Na^+ et quatre ion Cl^-).

Le volume moléculaire de NaCl est égal de la relation de la masse moléculaire à la densité.

Pour NaCl c'est :

$$v = \frac{58,45 \text{ g}}{2,17 \text{ g/cm}^3} = 26,93 \text{ cm}^3$$

Dans cette volume se trouve $N = 6,02 \cdot 10^{23}$ molécules NaCl ou quatre fois moins NaCl_4 ; le

volume $\text{NaCl}_4 = 4 \cdot 26,93 \text{ cm}^3$

Le volume de maille NaCl_4 est égale $\frac{4 \cdot 26,93}{6,02 \cdot 10^{23}} = 178,9 \cdot 10^{-24} \text{ cm}^3$

D'où $n_0 = \sqrt[3]{v_m} = \sqrt[3]{178,9 \cdot 10^{-24}} = 5,63$

Détermination des indices de Miller

Nous connaissons que :

Pour les cristaux $\frac{\sin^2 \theta_1}{\sin^2 \theta_2} = \frac{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2}{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}$

Ayant les angles θ on peut déterminer les relations des $\sin^2 \theta$ et trouver les valeurs minimales de $h^2 + k^2 + l^2$ d'où on peut indexer hkl.

hkl	$h^2 + k^2 + l^2$	hkl	$h^2 + k^2 + l^2$	hkl	$h^2 + k^2 + l^2$
100	1	211	6	220	12
110	2	220	9	400	16
111	3	310	10	331	19
200	4	311	11	420	20
				422	24
				333	27

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

1- Cristallographie géométrique et radiocristallographie. JEAN-JAQUES ROUSSEAU
Professeur à l'université du Maine Masson, Paris, 1995.

2- Propriétés physiques des cristaux. J. F. NYE, M. A., Ph., Di, Chargé de cours de
physique à l'université de Bristol. DUNOD, Paris 1961.

http://fr.wikipedia.org/wiki/Structure_cristalline.

http://fr.wikipedia.org/wiki/Rayon_X.

<http://fr.wikipedia.org/wiki/Cristallographie>