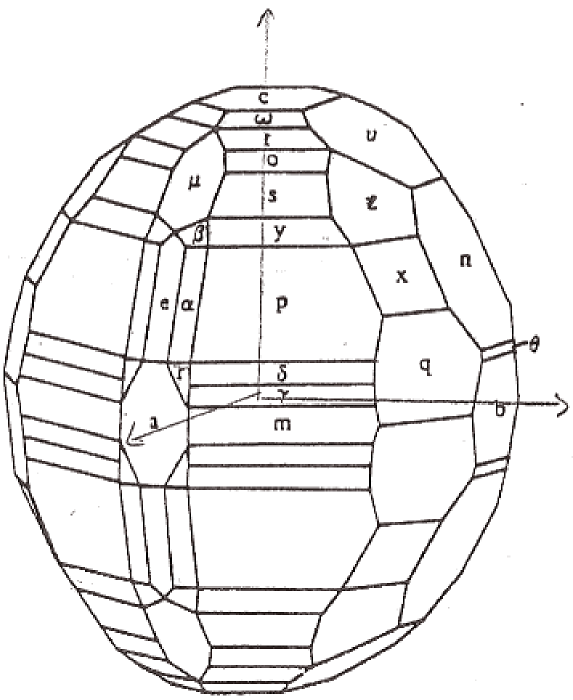
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique Ecole Nationale Polytechnique Département Génie Minier *Cristallographie- Minéralogie (3ème année)*	18/03/2009
Epreuve de Moyenne Durée n°2 Durée de l'épreuve : 2 heures	

Exercice 1 (5 pt)

Le cristal de soufre représenté sur la figure ci-dessous appartient à la classe mmm du système orthorhombique. On choisit p comme face paramétrique (111) et les notations (100) pour a, (010) pour b, (001) pour c. On a alors les proportions suivantes entre les paramètres du réseau : a/b = 0,814 ; c/b = 1,906.



1. Les faces c, ω, t, o, s, y, p, δ, γ, m sont en zone. A quelle zone appartiennent-elles ? On mesure dans cette zone les angles suivants entre les différentes faces et la face m : c = 90° ; ω = 66,58° ; t = 58°,88, o = 52°,86, s = 44°,72, y = 33°,43, p = 18°,26, δ = 9°,37, γ = 6°,28, m = 0°. Les faces a, m, b sont également en zone ; de quelle zone ?. Trouver les indices de la face m.

2. Représenter les pôles des faces c, ω, t, o, s, y, p, δ, γ, m en projection stéréographique à l'aide de l'abaque de Wulff

3. Les indices de Miller de la face α sont : (313). Projeter la face α sur le canevas de Wulff. En déduire l'angle entre α et a.

Exercice 2 (6 pt)

Par rapport à un repère <u>orthonormé</u> $(O\vec{x}\,\vec{y}\,\vec{z})$ [$|\vec{x}| = |\vec{y}| = |\vec{z}| = 1$Å et $(\vec{x},\vec{y}) = (\vec{x},\vec{z}) = (\vec{y},\vec{z}) = 90°$] on considère le réseau ayant les vecteurs primitifs suivants :

$$\vec{a} = a\vec{x} \quad ; \quad \vec{b} = \frac{a}{2}\vec{y} \quad ; \quad \vec{c} = \left(-\frac{a}{2}\vec{x} + \frac{a}{3}\vec{z}\right)$$

1- Identifier le système cristallin
2- Trouver les vecteurs du réseau réciproque
3- Trouver les vecteurs des normales aux plans (123) et $(3\bar{1}\bar{1})$
4- Trouver l'angle (123) ^ $(3\bar{1}\bar{1})$.

5- Application numérique : si a = $\sqrt{127,25}$, déterminez l'angle de diffraction θ engendré par les plans d'indices de Miller (123) si on utilise une anticathode de cuivre (λ = 1,54 Å).

Exercice 3 (9 pt)

La structure du titanate de Baryum peut être décrite de la façon suivante : les ions O^{2-} et les ions Ba^{2+} forment un réseau cubique à faces centrées, les centres des ions Ba^{2+} étant aux sommets du cube et les centres des ions O^{2-} étant aux milieux des faces ; les ions Ti^{4+} occupent le centre du cube.

1) Effectuer une projection de la structure sur le plan (001) et donner les coordonnées réduites des atomes (utilisez des couleurs différentes pour chaque ion).
2) Donner la formule chimique simple du composé (justifiez votre réponse).
3) Quelle est la coordinence des ions titane et des ions baryum ? Dans cette question, on suppose que les rayons des cations et anions ne sont pas connus (faites des schémas pour justifier votre réponse).
4) Déterminez le type de liaison Ba-O et Ti-O selon la deuxième loi de Pauling. Justifiez votre réponse (faites des schémas pour illustrer votre réponse).
5) Dans une structure idéale les anions sont tangents aux cations. Montrer que dans ce cas il existe une relation entre les rayons ioniques : $r(Ba^{2+}) + r(O^{2-}) = k.[\ r(Ti^{4+}) + r(O^{2-})]$ et déterminer la valeur de k.
6) En réalité les rayons ioniques, dans l'échelle de Pauling, sont les suivants :

ion	Ti^{4+}	Ba^{2+}	O^{2-}
r (pm)	68	135	140

- En utilisant les rayons des atomes de la structure, la relation précédente est-elle vérifiée ?
- On donne la masse volumique de ce composé m_v = 6,08 $g.cm^{-3}$, calculer le paramètre de la maille.
- Quels cations sont, en réalité, tangents aux anions ?
- Déterminez la compacité du composé.

Masses atomiques en $g.mol^{-1}$: Ti : 47,90 ; Ba : 137,34 ; O : 16,00. Nombre d'Avogadro = $6.02*10^{23}\ mol^{-1}$. 1 pm = 10^{-12} m.

BONNE CHANCE

MOULLEY CHARAF CHABOU