ECOLE NATIONALE POLYTECHNIQUE 2005/2006
Département Génie Minier
Cristallographie – 3ème année

TD 4 : Etude des cristaux par les rayons X

Exercice 1

1) Déterminer la valeur en degrés de l'angle de diffraction θ de Bragg par réflexion sur les plans d'équidistance d, d'indices de Miller (111) dans un cube. On donne : a = 3,60 Å et λ = 0,710 Å.

2) La baryte ($BaSO_4$) possède une maille primitive orthorhombique ayant les paramètres suivants : a = 7.157 Å, b = 8.884Å, et c = 5.457Å. Calculer l'angle 2θ de Bragg par réflexion de la raie du cuivre Kα (λ = 1.5405 Å) sur les plans d'indices de Miller suivants : (002) et (110).

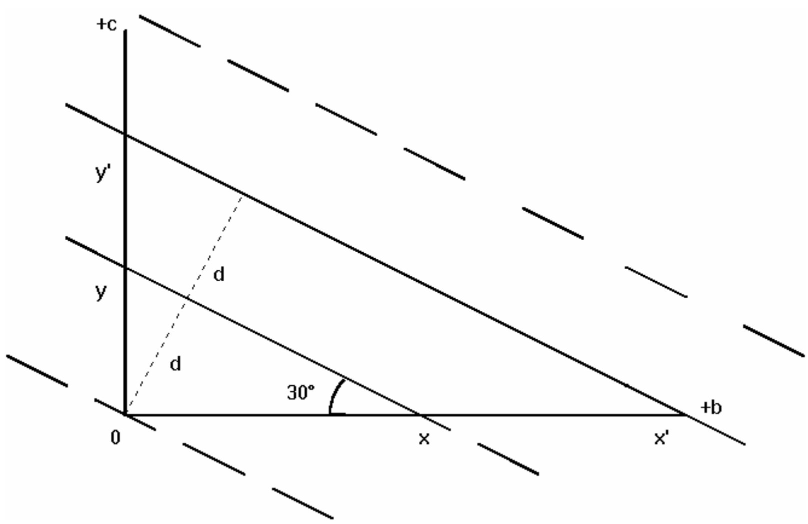
Exercice 2

Le spectre de raies X d'un cristal cubique utilisant la radiation λ = 1,5418Å a donné des raies pour les valeurs suivantes de θ: 21,8°; 25,4°; 37,2°; 45,4°; 47,8°; 58,8°; 68,6°; 72,7°.

1) Indexer les raies, c'est à dire les indices h,k,l des plans produisant ces raies.
2) Calculer la longueur de l'arête de la maille.
3) Identifier le type de réseau.

Exercice 3

xy, x'y', etc. représentent des plans atomiques parallèles dans un cristal orthorhombique (voir figure). Les mesures de la diffraction des rayons X indiquent un angle de diffraction θ de 30° par réflexion de la raie du cuivre Kα (λ = 1.5405 Å) sur le premier plan (réflexion de premier ordre). Les dimensions de la maille élémentaire du cristal sont 10,0 Å, 6,16 Å et 5,34 Å. Déterminer les indices de Miller du plan xy.



Exercice 4

On donne les angles de diffraction et les intensités des raies pour le spectre de poudre d'un minéral inconnu A réalisé avec une anticathode de cuivre (longueur d'onde $\lambda_{Cu} = 1.5406$ Å).

Numéro de la raie	2θ	I	hkl
1	24,502	1	
2	28,368	100	
3	40,541	37	
4	50,211	10	
5	58,691	5	
6	66,440	9	
7	73,801	5	
8	87,765	1	
9	94,654	2	

1- Tracer sur un papier millimètre le diffractogramme correspondant
2- Déterminer la nature du réseau
3- Indexer le spectre
4- Calculer le paramètre de la maille a
5- Déterminer la nature du minéral en se basant sur les données du tableau suivant :

Minéral	**Valeurs de d**
Apatite	2,81(x) 2,78(6) 2,72(6) 3,44(4) 1,84(4) 1,94(3) 2,63(3) 2,26(2)
Baryte	3,45(x) 3,10(x) 2,12(8) 2,11(8) 3,32(7) 3,90(5) 2,84(5) 2,73(5)
Calcite	3,04(x) 2,29(2) 2,10(2) 1,91(2) 1,88(2) 2,50(1) 3,86(1) 1,60(1)
Dolomite	2,89(x) 1,79(3) 2,19(3) 1,78(3) 1,80(2) 2,02(2) 1,39(2) 2,67(1)
Gypse	7,56(x) 3,06(6) 4,27(5) 2,68(3) 2,87(3) 3,79(2) 1,90(2) 2,08(1)
Halite	2,82(x) 1,99(6) 1,63(2) 3,26(1) 1,26(1) 1,15(1) 1,41(1) 0,89(1)
Quartz	3,34(x) 4,26(4) 1,82(2) 1,54(2) 2,46(1) 2,28(1) 1,38(1) 2,13(1)
Sylvite	3,14(x) 2,22(3) 1,81(1) 1,40(1) 1,28(1) 1,57(1) 1,04(1) 0,99(1)
Topaze	2,94(x) 3,20(7) 3,69(6) 2,36(5) 2,11(4) 3,04(4) 1,67(3) 2,38(3)

Tableau. Les valeurs de d de quelques minéraux. Les chiffres entre parenthèses indiquent l'intensité idéale des pics relative au pic le plus intense du minéral. x = 100 % (plus intense) ; 9 = 90 %, 8 = 80 %, etc..

Exercice 5

Par rapport à un repère orthonormé (O**XY**), les vecteurs fondamentaux d'un réseau cristallin sont définis par :

a = 2**X** et **b** = **X** + 2**Y**

1) Trouver les vecteurs fondamentaux **a*** et **b*** du réseau réciproque (**a*** et **b*** seront exprimés en fonction de **X** et **Y**). (2 pt)

2) Calculer la distance inter-réticulaire entre les plans (32) du cristal.

3) Déterminer l'angle φ entre les plans (32) et (21).

(Attention : **a, b, a*, b*, X** et **Y** sont des vecteurs).

Exercice 6

Par rapport à un repère orthonormé $(O\vec{x}\,\vec{y}\,\vec{z})$ $[|\vec{x}| = |\vec{y}| = |\vec{z}| = 1Å$ et $(\vec{x},\vec{y}) = (\vec{x},\vec{z}) = (\vec{y},\vec{z}) = 90°]$, les vecteurs fondamentaux du réseau réciproque d'une maille cristalline sont définis par:

$$\vec{a}^* = \frac{\sqrt{3}}{3}\vec{y} \quad ; \quad \vec{b}^* = \frac{1}{2}\vec{x} + \frac{\sqrt{3}}{6}\vec{y} \quad ; \quad \vec{c}^* = \frac{1}{5}\vec{z}$$

1) Déterminer, en Å, les paramètres de la maille cristalline (a,b,c).
2) Déterminer le système cristallin du minéral. Justifiez votre réponse
3) En utilisant les expressions de $\vec{a}^*$, $\vec{b}^*$ et $\vec{c}^*$, donnez l'expression de la distance d entre les plans du cristal en fonction des indices de Miller (hkl).
4) Le diffractogramme du cristal présente trois pics d'intensité 10, 40 et 100 correspondants aux plans d'indices de Miller (110), (102) et (103) respectivement. Représenter sur un papier millimétré le diffractogramme I = f (2θ). On utilise une anticathode de cuivre pour la production des rayons X ($\lambda_{Cu} =$ 1,5405 Å).

Exercice 7

1- Trouver, dans un réseau hexagonal, l'expression de l'équidistance d_{hkl} des plans réticulaires de la famille (hkl) en fonction des paramètres a et c du réseau.
(Commencez par déterminer les caractéristiques du réseau réciproque hexagonal)

Application : calculer la distance entre les plans réticulaires (001) dans un réseau hexagonal, sachant que a = 4Å et c = 2 Å.

2- Etablissez la formule qui donne l'angle entre deux plans dans un réseau hexagonal.

Application : Supposons que a/c = 0,65, Calculez l'angle entre les plans (101) et (111).

Exercice 8

Définissez la notion de réseau réciproque d'un cristal. Le diopside est un minéral monoclinique possédant les paramètres suivants : a = 9.746 Å, b = 8.899Å, c = 5.251 Å, $\beta = 105.63°$.

1- Trouver les dimensions du réseau réciproque et illustrer par des digrammes la relation qui existe entre le réseau direct et le réseau réciproque dans le cas de ce minéral.
2- Trouver l'expression de l'équidistance d_{hkl} des plans réticulaires de la famille (hkl) en fonction des paramètres du réseau.
3- Etablissez la formule qui donne l'angle entre deux plans dans un réseau monoclinique.
4- Application. Calculer : - la distance réticulaire dans la direction [101], t(101) ; - la distance réticulaire $d_{(132)}$; - l'angle (132) : [101].