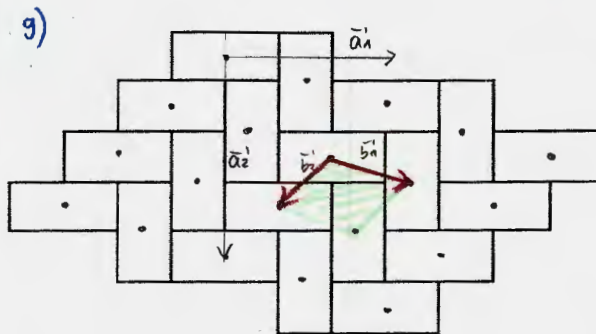
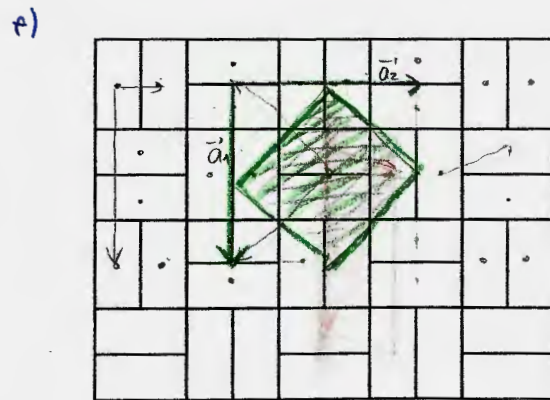
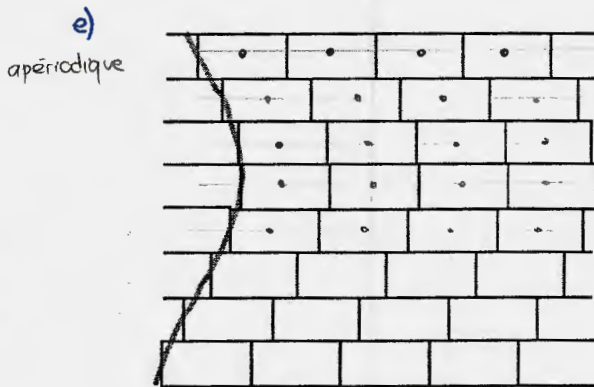
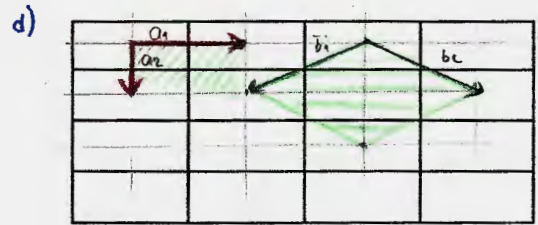
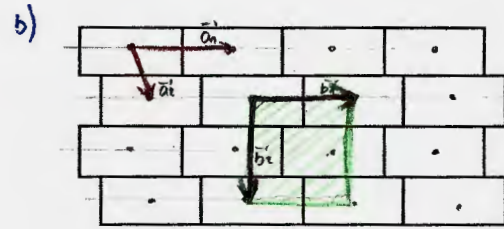
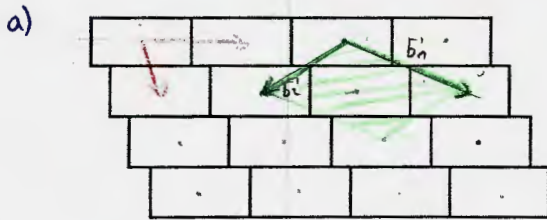


Exercices "Structure de la matière condensée"

Structures périodiques et aperiódiques

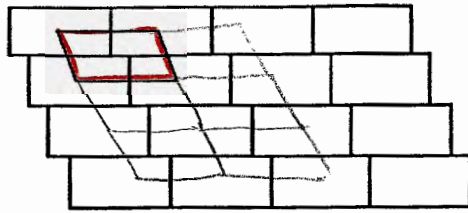
par déf. de la maille : 3 noeuds.
chercher la struct. qui se répète.

Choisissez diverses mailles simples et multiples dans les pavages de briques ci-dessous. Dans quels pavages pouvez-vous choisir des mailles rectangulaires ou carrées? Un des pavages est aperiódique; montrez que la structure y est quand-même ordonnée.

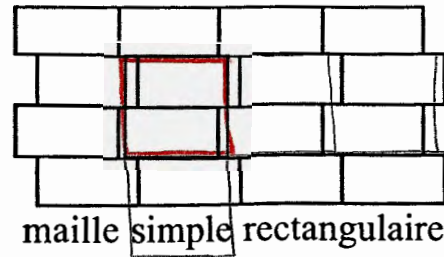


les mailles cristallographiques sont celles qui ont le plus petit volume, les mailles avec ⊕ de 1 noeud au milieu sont fausses.

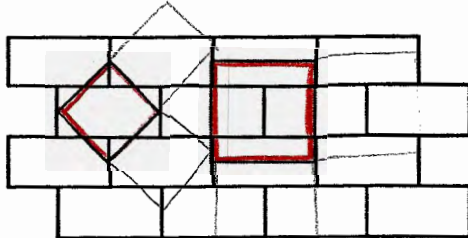
Corrigé "Structures périodiques et apériodiques"



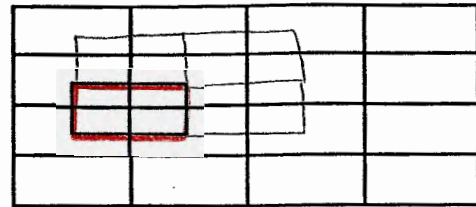
maille simple oblique



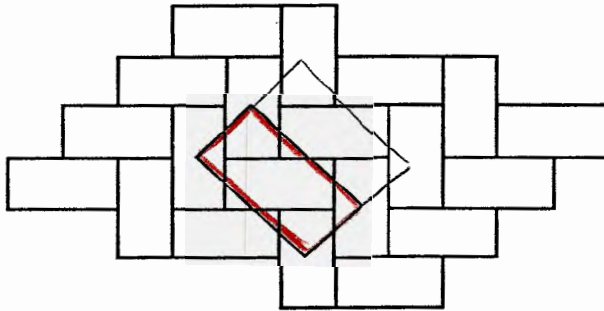
maille simple rectangulaire



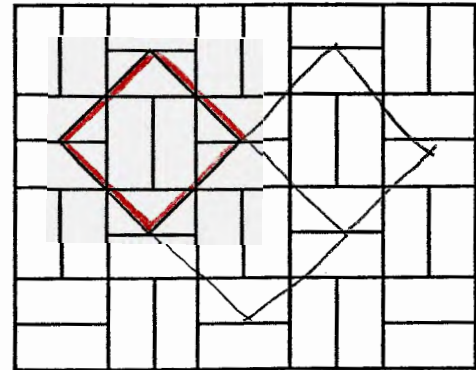
maille simple losange
ou maille centrée rectangulaire



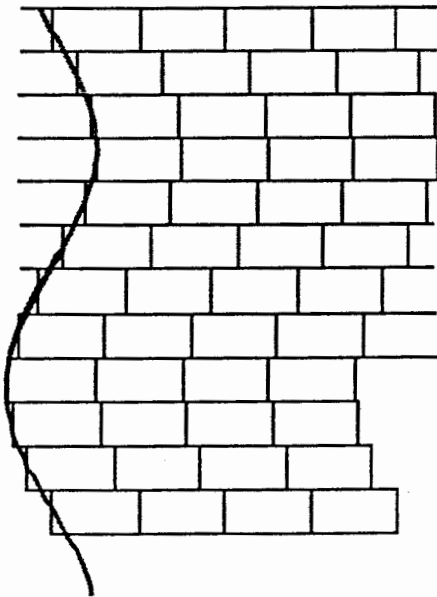
maille simple rectangulaire



maille simple rectangulaire



maille simple carrée



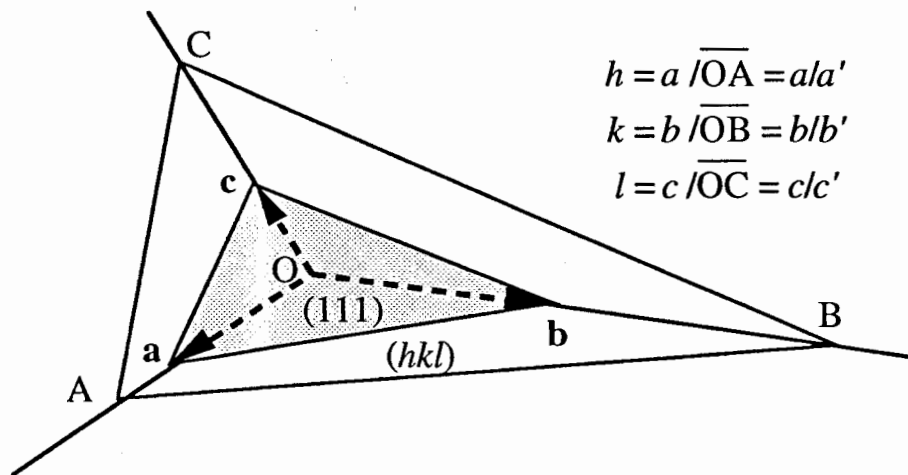
Structure apériodique:

Les positions des rangées de briques sont calculées à l'aide de la fonction sinus dont la période est complètement indépendante des dimensions d'une brique.

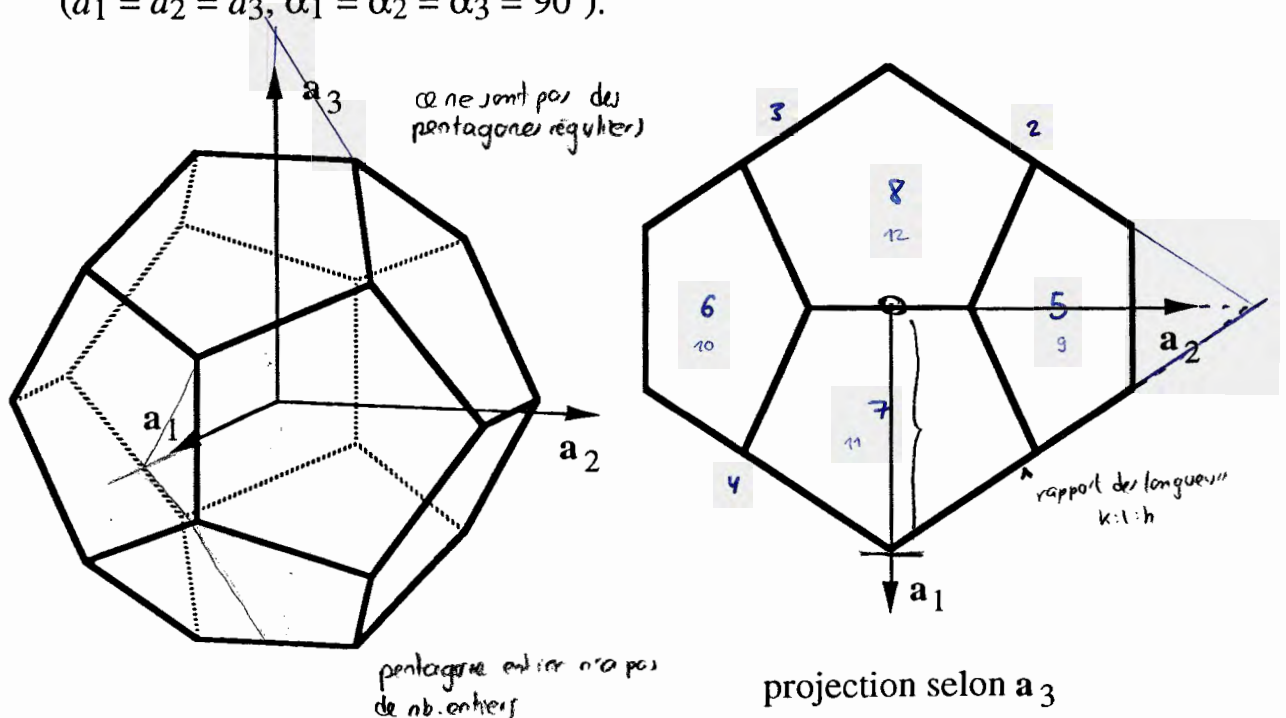
Exercices de cristallographie

Indices de Miller, métrique

Les indices de Miller (hkl) d'un plan sont égaux aux valeurs réciproques des segments $a' = OA$, $b' = OB$ et $c' = OC$ résultant des intersections du plan avec les axes du repère a, b, c . Le plan (111) définit les longueurs a, b et c .



- Donner les indices de Miller des 12 faces délimitant le dodécaèdre de la figure ci-dessous. Chaque face est parallèle à un des trois axes du repère ($a_1 = a_2 = a_3$, $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 90^\circ$).

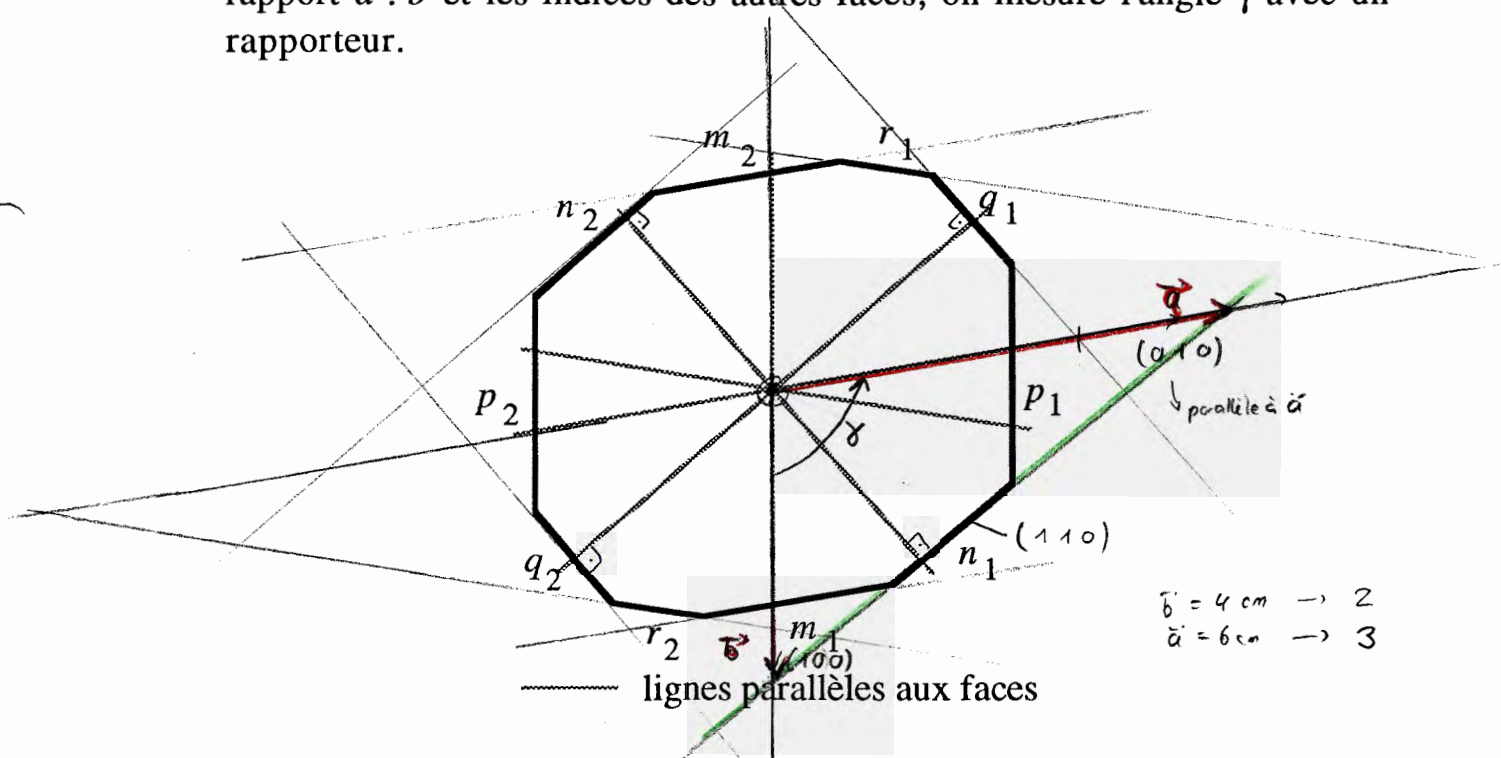


- Calculer les angles entre les faces du dodécaèdre ayant une arête commune.

comme les vecteurs \perp aux faces représentent ces faces, l'angle se calcule par la relation connue: $\cos \alpha = \frac{a \cdot b}{\|a\| \cdot \|b\|}$ avec $a, b \in V^*$

3. Un repère dit *orthorhombique* est caractérisé par $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. Calculer l'angle entre la normale à la face (113) et la direction [113] pour $a : b : c = 2 : 3 : 4$. Calculer également les angles entre (131) et [131], ainsi qu'entre (311) et [311]. - repère réciproque

4. Donner les indices des faces du prisme de la figure ci-dessous (projection selon c). On définit le système de coordonnées en choisissant les trois faces (100), (010) et (110), c étant perpendiculaire au plan du dessin. En mesurant les longueurs des intersections des faces avec a et b, on obtient le rapport $a : b$ et les indices des autres faces; on mesure l'angle γ avec un rapporteur.



5. Soient ϕ_1, ϕ_2 et ϕ_3 les angles entre la normale à la face (111) et les axes $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ et \mathbf{a}_3 d'un repère quelconque non-unitaire. Montrer que le rapport des normes $a_1 : a_2 : a_3 = 1/\cos\phi_1 : 1/\cos\phi_2 : 1/\cos\phi_3$. Soient ψ_1, ψ_2 et ψ_3 les angles entre la normale à la face (123) et les axes $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ et \mathbf{a}_3 . Donnez les rapports $a_1 : a_2 : a_3$ en fonction de ces angles.

definition entre face, normale de face

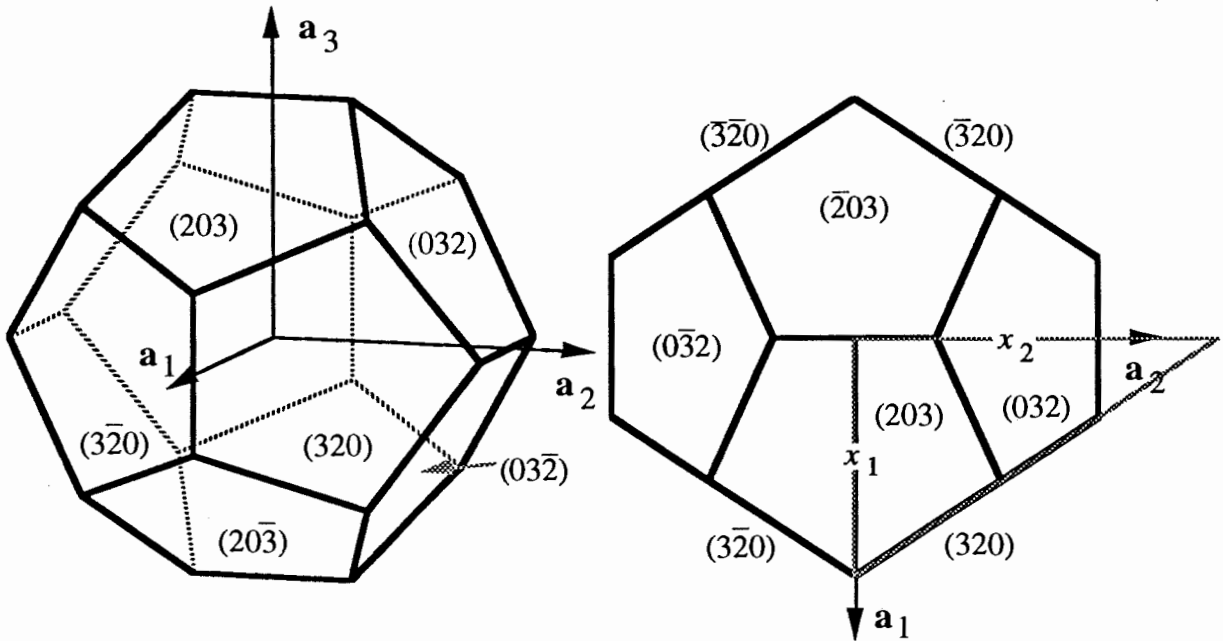
6. Trouvez la condition nécessaire pour que trois faces $(h_1, k_1, l_1), (h_2, k_2, l_2)$ et (h_3, k_3, l_3) appartiennent à une même zone, c'est-à-dire soient parallèles à une même direction.

parallèles \Rightarrow lin. dep. $\Rightarrow \det \begin{pmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \\ h_3 & k_3 & l_3 \end{pmatrix} = 0$.

Cristallographie I: corrigé

Indices de Miller, métrique

1.



On mesure le rapport $x_1 : x_2 \approx 0.66 \approx 2:3$, d'où $h : k = 3 : 2$.
 Pour chaque face (hkl) , il y a une contre-face $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$.

2. L'angle ρ entre deux faces $(h_1 k_1 l_1)$ et $(h_2 k_2 l_2)$ est donné par

$$\cos \rho = \frac{\mathbf{r}_1^* \cdot \mathbf{r}_2^*}{r_1^* r_2^*} \text{ où } \mathbf{r}_i^* = h_i \mathbf{a}^* + k_i \mathbf{b}^* + l_i \mathbf{c}^*; r_i^* = \|\mathbf{r}_i^*\|. \quad \mathbf{r}_i^* \cdot \mathbf{r}_j^* = \begin{pmatrix} h_i & a^* \\ k_i & b^* \\ l_i & c^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_j & a^* \\ k_j & b^* \\ l_j & c^* \end{pmatrix}$$

$$= h_i h_j a^* a^* + k_i k_j b^* b^* + l_i l_j c^* c^* = h_i h_j \|a^*\|^2 + k_i k_j \|b^*\|^2 + l_i l_j \|c^*\|^2$$

Puisque $a_1 = a_2 = a_3$ et $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 90^\circ$, on obtient $a_1^* = a_2^* = a_3^* = 1/a$,
 $\mathbf{r}_1^* \cdot \mathbf{r}_2^* = (h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2)/a^2$, $r_i^{*2} = (h_i^2 + k_i^2 + l_i^2)/a^2$; $\cos(320/203) = \cos(320/032) = \cos(320, 032) = \cos(320, 203) = 6/13$; $\cos(320/320) = 5/13$. Les angles correspondants sont 62.51° et 67.38° .

3. L'angle ψ_{113} entre les vecteurs $\mathbf{R}^* = \mathbf{a}^* + \mathbf{b}^* + 3\mathbf{c}^*$ [normale à la face (113)] et $\mathbf{R} = \mathbf{a} + \mathbf{b} + 3\mathbf{c}$ est $\cos \psi_{113} = (\mathbf{R} \cdot \mathbf{R}^*) / (R R^*)$. Le repère réciproque est orthogonal comme l'est le repère $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$. En posant $a = 2k$, $b = 3k$, $c = 4k$: $a^* = \|b \times c\| / (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}) = 12k^2 / 24k^3 = 1/(2k)$, $b^* = 1/(3k)$, $c^* = 1/(4k)$. $\mathbf{R} \cdot \mathbf{R}^* = 11$, $R^2 = a^2 + b^2 + 9c^2 = 157$, $R^{*2} = a^{*2} + b^{*2} + 9c^{*2} = 133/(144)$. D'où $\cos \psi_{113} = 0,913478$; $\psi_{113} = 24,01^\circ$. De manière analogue, on obtient $\psi_{131} = 17,18^\circ$ et $\psi_{311} = 25,22^\circ$.

non: $R^2: \dots k^2$
 $R^{*2}: \dots 1/k^2$

5. $\cos\phi_1 = (r_{111}^* \cdot a_1) / (r_{111}^* a_1) = 1 / (r_{111}^* a_1)$; $r_{111}^* = a_1^* + a_2^* + a_3^*$;
 $\cos\phi_2 = (r_{111}^* \cdot a_2) / (r_{111}^* a_2) = 1 / (r_{111}^* a_2)$;
 $\cos\phi_3 = (r_{111}^* \cdot a_3) / (r_{111}^* a_3) = 1 / (r_{111}^* a_3)$;
 d'où $\cos\phi_1 : \cos\phi_2 : \cos\phi_3 = 1/a_1 : 1/a_2 : 1/a_3$.

De manière analogue, on obtient

$\cos\psi_1 = (r_{123}^* \cdot a_1) / (r_{123}^* a_1) = 1 / (r_{123}^* a_1)$;
 $\cos\psi_2 = 2 / (r_{123}^* a_2)$; $\cos\psi_3 = 3 / (r_{123}^* a_3)$;
 $a_1 : a_2 : a_3 = 1/\cos\psi_1 : 2/\cos\psi_2 : 3/\cos\psi_3$.

6. Les trois vecteurs $r_i^* = h_i a^* + k_i b^* + l_i c^*$ sont coplanaires, $(r_1^* \times r_2^*) \cdot r_3^* = 0$.

$r_1^* \times r_2^* = \{(k_1 l_2 - k_2 l_1)a + (l_1 h_2 - l_2 h_1)b + (h_1 k_2 - h_2 k_1)c\} / (a \ b \ c)$;
 $(r_1^* \times r_2^*) \cdot r_3^* = \{h_3(k_1 l_2 - k_2 l_1) + k_3(l_1 h_2 - l_2 h_1) + l_3(h_1 k_2 - h_2 k_1)\} / (a \ b \ c)$.

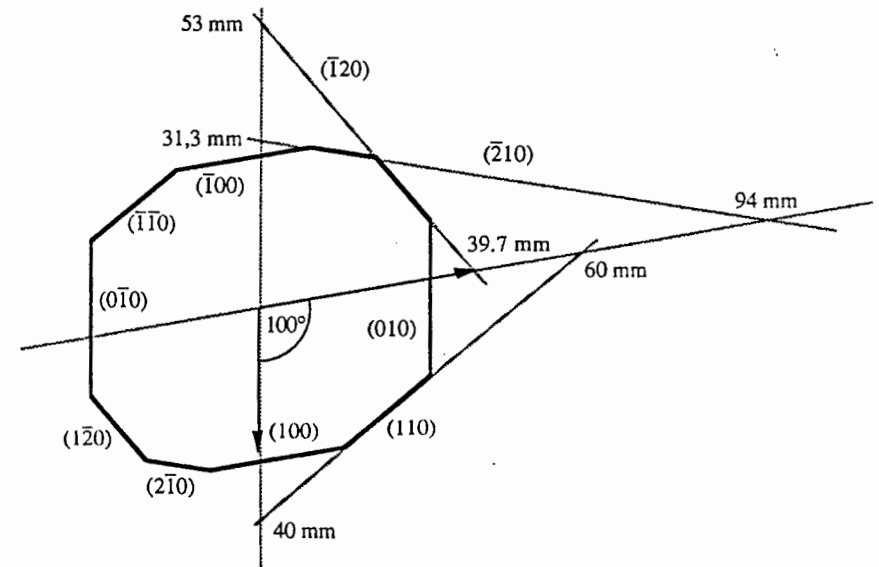
Cette condition est exprimée par le déterminant

$$D = \begin{vmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \\ h_3 & k_3 & l_3 \end{vmatrix} = 0.$$

4. En choisissant $m_1 = (100)$, $p_1 = (010)$, $n_1 = (110)$, on obtient les rapports suivants des segments résultants des intersections des plans avec les axes du repère:
 $n_1: a/b \approx 2/3$; $q_1: a'/b' \approx -4/3$; $r_1: a'/b' \approx -1/3$.

Il en résulte que le repère est défini par $a : b = 2 : 3$, $\gamma = 100^\circ$. Les rapports des indices sont $h/k = (b'/a')(a/b)$. Avec les formules du problème 5, on calcule les angles suivants:

$(110)/a: 40,47^\circ$; $(\bar{1}20)/a = 130,34^\circ$; $(\bar{2}10)/a = 170,79^\circ$;
 $(110)/b: 59,53^\circ$; $(\bar{1}20)/b = 30,34^\circ$; $(\bar{2}10)/b = 70,79^\circ$.



Evidemment, on peut choisir d'autres faces pour définir le repère; les indices sont toujours rationnels. Par exemple, en choisissant $q_2 = (100)$, $n_1 = (010)$, $m_1 = (110)$, on obtient $r_2 = (210)$, $p_1 = (\bar{2}10)$; $a : b = 1,7 : 1$; $\gamma = 89,86^\circ$.

Exercice 5 : série n°2 : plus clairement

On veut l'angle entre la face $(hke) = (113)$ et la direction $[113]$, donc on va avoir besoin du vecteur normal à la face dans le réseau réciproque. On a :

$$\begin{aligned} \cos \alpha &= \frac{r_1 \cdot r_2^*}{\|r_1\| \cdot \|r_2^*\|} & ; \quad r_1 &= h_1 \cdot a + k_1 \cdot b + \ell_1 \cdot c \\ & & r_2 &= h_2 \cdot a^* + k_2 \cdot b^* + \ell_2 \cdot c^* \\ &= \frac{h_1 \cdot h_2 \cdot a \cdot a^* + k_1 \cdot k_2 \cdot b \cdot b^* + \ell_1 \cdot \ell_2 \cdot c \cdot c^*}{\sqrt{r_1^2 \cdot r_1} \sqrt{r_2^{*2} \cdot r_2^*}} \\ &= \frac{h_1 \cdot h_2 + k_1 \cdot k_2 + \ell_1 \cdot \ell_2}{\sqrt{h_1^2 \|a\|^2 + k_1^2 \|b\|^2 + \ell_1^2 \|c\|^2} \cdot \sqrt{(h_2 k_2 \ell_2) M^* (h_2 k_2 \ell_2)}} \end{aligned}$$

Avec : $M = \begin{pmatrix} \|a\|^2 & 0 & 0 \\ 0 & \|b\|^2 & 0 \\ 0 & 0 & \|c\|^2 \end{pmatrix}$; $M^* = M^{-1} = \begin{pmatrix} 1/\|a\|^2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/\|b\|^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/\|c\|^2 \end{pmatrix}$

$$\cos \alpha = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + \ell_1 \ell_2}{\sqrt{h_1^2 \|a\|^2 + k_1^2 \|b\|^2 + \ell_1^2 \|c\|^2} \sqrt{\frac{h_2^2}{\|a\|^2} + \frac{k_2^2}{\|b\|^2} + \frac{\ell_2^2}{\|c\|^2}}}$$

Mais ici : $h_1 = h_2 = h$; $k_1 = k_2 = k$; $\ell_1 = \ell_2 = \ell$, alors :

$$\cos \alpha = \frac{h^2 + k^2 + \ell^2}{\sqrt{h^2 \|a\|^2 + k^2 \|b\|^2 + \ell^2 \|c\|^2} \sqrt{h^2 / \|a\|^2 + k^2 / \|b\|^2 + \ell^2 / \|c\|^2}}$$

On nous dit que : $\|a\| : \|b\| : \|c\| = 2 : 3 : 4$, donc : $\|a\| = \lambda \cdot 2$; $\|b\| = \lambda \cdot 3$; $\|c\| = \lambda \cdot 4$, alors :

$$\cos(\alpha) = \frac{h^2 + k^2 + \ell^2}{\sqrt{4h^2 + 9k^2 + 16\ell^2} \sqrt{\frac{h^2}{4} + \frac{k^2}{9} + \frac{\ell^2}{16}}} \quad (1)$$

Il suffit de remplacer dans l'expression de (1) les valeurs (hke) désirées.

PHYSIQUE QUANTIQUE

Exercice 7 Le théorème du moment cinétique

Montrer que la relation $\frac{dL}{dt} = M$ (théorème du moment cinétique) de la mécanique classique, reste valable pour les valeurs moyennes des opérateurs correspondants en mécanique quantique.

Indications :

- 1) Rappel : $L = r \wedge p$ et $M = r \wedge F$ où $F = -\nabla V$.
quantique *classique*
- 2) Remplacer la quantité de mouvement classique p par l'opérateur $-i\hbar\nabla$ en mécanique quantique.
- 3) La valeur moyenne de l'observable $A(x)$ est donnée par

$$\langle A(x) \rangle = \int dx^3 \psi^*(x) A(x) \psi(x)$$

où ψ et ψ^* obéissent à l'équation de Schrödinger.

- 4) Identité vectorielle utile :

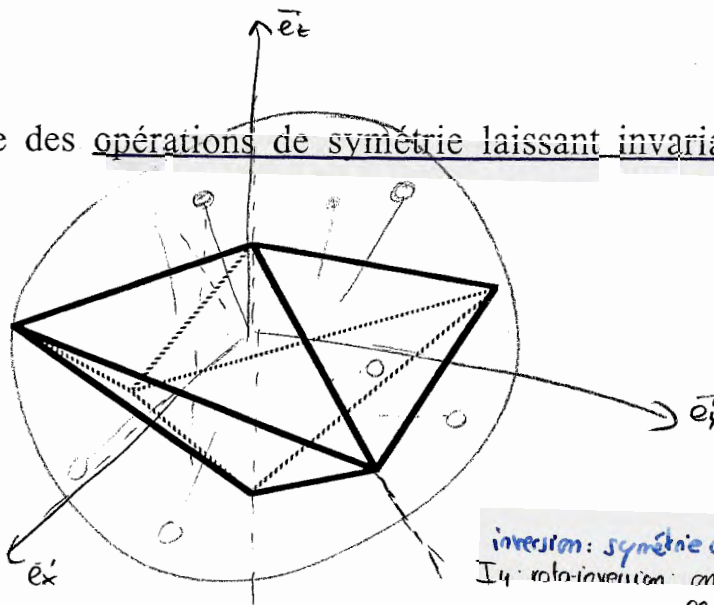
$$\nabla(a(x)b(x)) = (\nabla a(x))b(x) + a(x)(\nabla b(x))$$

Exercices de cristallographie

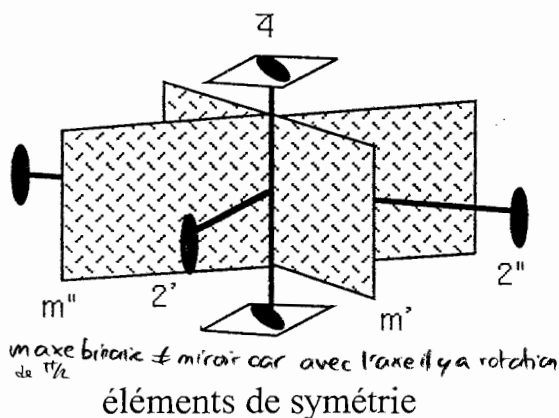
Théorie des groupes

- 1) Enumérez l'ensemble des opérations de symétrie laissant invariant le polyèdre ci-dessous.

intersections des normales aux faces et de la sphère (project. stéréographique)

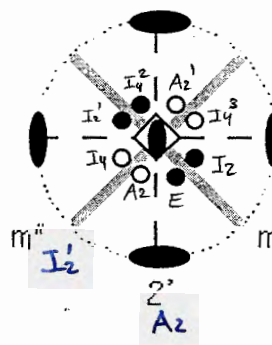


$\bar{4}2m$



inversion: symétrie centrale

I_4 : rota-inversion: on arrive d'abord en I_4^3 , puis on fait une inversion des coordonnées et on arrive en I_4 .



projection stéréographique $I_2' = \text{miroir } \sigma_{m'}$
 $A_2 = \text{rota-inversion (axe binaire par 2)}$

A_2' sur un axe et de sym. qui engendrent les plans σ et σ' ce que on doit faire c'est pour chaque point tracer une op. de symétrie sp. ex. $I_4 = \text{rotation de } \frac{360^\circ}{4}$ et inversion

- 2) Etablissez la table de multiplication du groupe ainsi obtenu. Pour un groupe à 2 opérations par exemple, la table de multiplication a la forme:

	E	A
E	E	A
A	A	E

- 3) Le groupe ainsi obtenu est-il abélien (commutatif)? Quelles sont les caractéristiques de la table de multiplication d'un groupe abélien?
- 4) Certaines opérations du groupe peuvent s'exprimer à partir d'autres opérations du groupe. Trouvez 2 opérations générant l'ensemble des opérations du groupe.
- 5) Prouvez, à l'aide de la définition d'un groupe que chaque opération ne peut apparaître qu'une seule fois dans chaque ligne et chaque colonne de la table de multiplication.

- 6) Trouvez des sous-ensembles de 2 opérations formant un groupe. Trouvez des sous-ensembles de 4 opérations formant un groupe. Ce sont des sous-groupes.
- 7) Trouvez l'ensemble des classes d'équivalence du groupe. La classe de l'opération A est par définition l'ensemble des opérations $B = XAX^{-1}$, X parcourant l'ensemble des opérations du groupe.
- 8) Représentez les opérations de symétrie par des matrices en choisissant un système de coordonnées. Montrez par quelques exemples de multiplication de matrices que le groupe matriciel donne la même table de multiplication que celle trouvée dans 2).

Corrigé de cristallographie

Théorie des groupes

- 1) Les éléments de symétrie laissant invariant le polyèdre sont un axe de roto-inversion $\bar{4}$, 2 axes binaires et 2 plans de réflexion. On a donc les opérations de symétrie

$$\{E, I_4, I_4^2 = A_2, I_4^3 = I_4^{-1}, A_2', A_2'', I_2', I_2''\}$$

- 2) Table de multiplication

	E	I_4	A_2	I_4^{-1}	A_2'	A_2''	I_2'	I_2''	1 ^{ère} opération
E	E	I_4	A_2	I_4^{-1}	A_2'	A_2''	I_2'	I_2''	
I_4	I_4	A_2	I_4^{-1}	E	I_2'	I_2''	A_2''	A_2'	
A_2	A_2	I_4^{-1}	E	I_4	A_2''	A_2'	I_2''	I_2'	
I_4^{-1}	I_4^{-1}	E	I_4	A_2	I_2''	I_2'	A_2'	A_2''	
A_2'	A_2'	I_2''	A_2''	I_2'	E	A_2	I_4^{-1}	I_4	
A_2''	A_2''	I_2'	A_2'	I_2''	A_2	E	I_4	I_4^{-1}	
I_2'	I_2'	A_2'	I_2''	A_2''	I_4	I_4^{-1}	E	A_2	
I_2''	I_2''	A_2''	I_2'	A_2'	I_4^{-1}	I_4	A_2	E	

2^{ème} opération

- 3) Le groupe est non abélien. La table de multiplication d'un groupe abélien est symétrique par rapport à la diagonale principale.
- 4) (A_2', I_2') ou (A_2', I_4) ou (I_2', I_4) .
- 5) S'il y avait 2 éléments identiques b_i dans la i -ème ligne ou la i -ème colonne de la table de multiplication, on aurait alors pour deux éléments différents a_j et a_k ($j \neq k$)

$$b_i = a_j \cdot a_i = a_k \cdot a_i$$

En multipliant par a_i^{-1} et utilisant l'unicité de l'inverse de tout élément

$$b_i a_i^{-1} = a_j \cdot a_i \cdot a_i^{-1} = a_j = a_k \cdot a_i \cdot a_i^{-1} = a_k$$

d'où contradiction.

- 6) Sous-groupes: $\{E, A_2\}$, $\{E, A_2'\}$, $\{E, A_2''\}$, $\{E, I_2'\}$, $\{E, I_2''\}$
 $\{E, A_2, A_2', A_2''\}$, $\{E, A_2, I_2', I_2''\}$, $\{E, I_4, A_2, \Gamma_4^1\}$.
- 7) Il existe 5 classes
 $\{E\}$, $\{A_2\}$, $\{I_4, \Gamma_4^1\}$,
 $\{A_2', A_2''\}$, $\{I_2', I_2''\}$.
- 8) En choisissant le repère **a, b** selon les axes binaires, **c** selon l'axe de roto-inversion $\bar{4}$, on obtient

E	I_4	A_2	Γ_4^1
$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$
A_2'	A_2''	I_2'	I_2''
$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

Les faces équivalentes par symétrie ont les indices de Miller $(h k l)$, $(\bar{k} h \bar{l})$, $(h \bar{k} l)$, $(k \bar{h} \bar{l})$, $(\bar{h} k \bar{l})$, $(h k l)$, $(k h l)$, $(k \bar{h} l)$.

Exercices de Cristallographie

p.253

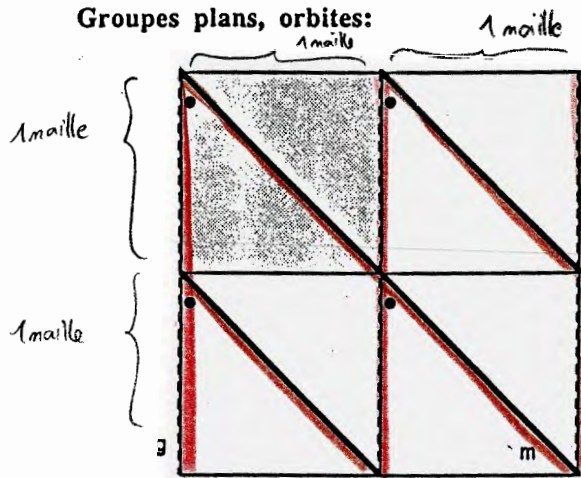
1. Groupes plans, orbites:

Déterminez les positions générales et spéciales (orbites) ainsi que les éléments de symétrie du groupe plan $p4gm$:

- 1) - Le groupe est généré par une ligne de réflexion avec glissement g parallèle à une arête, et une ligne de réflexion m parallèle à une diagonale d'un carré.
il y a plusieurs manières de les choisir
- 2) - Dessinez sur papier quadrillé quatre mailles carrées de 20×20 unités; dessinez les deux éléments générateurs qui s'intersectent en $(0, 0)$.
- 3) - Marquez un point de position générale dans une maille (p.ex. avec les coordonnées $x = 3/20$ et $y = 1/20$) et marquez les points équivalents par translation; évitez de choisir des coordonnées particulières comme $1/2$ ou $1/4$.
- 4) - Déterminez les deux points générés par les lignes m et g ; déterminez leurs coordonnées (p.ex. m génère le point y, x).
- 5) - Continuez à générer d'autres points équivalents en appliquant g aux points obtenus par m , et m aux points obtenus par g ; notez leurs coordonnées. Marquez les points équivalents par translation.
- 6) - Après avoir déterminé l'orbite complète, marquez tous les éléments de symétrie dans le dessin (axes 4 et 2 , lignes m et g).
*2: axe binaire
4: axe quaternaire*
- 7) - Déplacez l'origine du système de coordonnées dans un point de rotation quaternaire; calculez les coordonnées de l'orbite par rapport à cette origine.
- 8) - Déterminez les coordonnées de toutes les orbites spéciales et les symétries correspondantes des sites.
l'intersection de 2 miroirs est un axe d'ordre 2.

Solutions (groupes plans, classes cubiques)

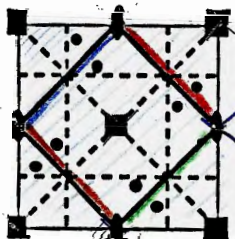
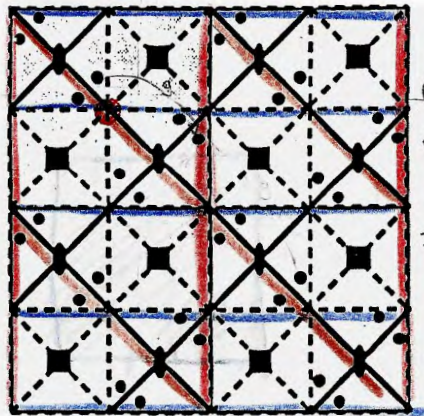
Groupes plans, orbites:



Éléments de symétrie générateurs:
 - réseau carré
 - ligne g
 - ligne m.

● un point en position générale.

⚠ on applique ces opérations que sur une seule maille, par rapport au centre.



Déplacer l'origine à $-\frac{1}{4}, \frac{1}{4}$:

x, y	$\frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} + x$
\bar{y}, x	$\frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y$
\bar{x}, \bar{y}	$\frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} - x$
y, \bar{x}	$\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y$

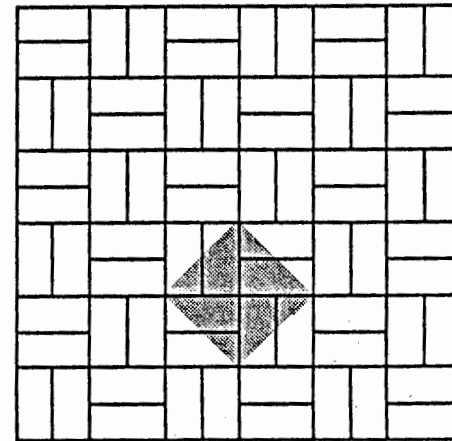
Positions spéciales:

⚠ on recalcule tout car par rapport à la nouvelle origine $(-\frac{1}{4}, \frac{1}{4})$

m	$x, \frac{1}{2} + x$ <small>vert</small>	$\frac{1}{2} - x, x$ <small>rouge</small>	$\bar{x}, \frac{1}{2} - x$ <small>bleu</small>	$\frac{1}{2} + x, \bar{x}$ <small>brun</small>
2mm	$\frac{1}{2}, 0$	$0, \frac{1}{2}$		
4	0, 0	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$		

symétrie du site

Exemple:



un carrelage de symétrie p4gm

Définition des positions spéciales et générales: p. 80
 - positions spéciales: - à voir: - nb. d'objet (dim orbite) / maille
 - symétrie du site

les pos. spéciales sont les positions pour lesquelles la symétrie générale est inférieure car ces sites ont une propre symétrie et donc les objets placés sur ces sites sont invariants par rapport à un type de symétrie leur orbite est restreint.

⚠ ça c'est la définition d'une ligne de glissement horizontal

Cristallographie générale

Exercice

$$x^2 + y^2 + z^2 = k + j$$

Structure de l'iode:

Les données cristallographiques de l'iode (par exemple R.W.G. Wyckoff, Crystal Structures vol. 1, p. 53) sont les suivantes:

Système cristallin
Groupe d'espace
Z (molécules/maille)
a $\rightarrow \neq$ atomes
b
c
Symbole de Wyckoff
Paramètres

orthorhombique $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Cmca mmm
4
7.270 Å
4.790 Å
9.793 Å
 $y = 0.1493; z = 0.1156$
 $8f$

veut dire que $y = 0,1493 \cdot b$
 $z = 0,1156 \cdot c$
ca veut dire que x est exprimé en fonction de y et z

i) A l'aide de ces données et des Tables Internationales, esquisser les projections de la structure de l'iode sur les plans (a,b), (b,c) et (c,a).

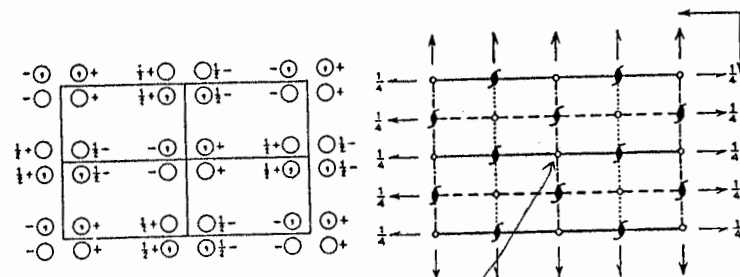
- ii) - Calculer la distance I - I intramoléculaire.
- iii) - Donner la symétrie d'une molécule d'iode à l'état gazeux et dans l'état cristallin.
- iv) - Décrire l'arrangement géométrique des centres des molécules.
- v) - Calculer les distances intermoléculaires les plus courtes.
- vi) - Calculer la masse volumique de l'iode à l'état solide (masse atomique de l'iode: 126.91).
- vii) - Identifier les éléments de symétrie dans les projections de la structure.

Orthorhombic mmm

$C2/m2/c2_1/a$

No. 64

$Cmca$
 D_{2h}^{18}



Origin at centre (2/m)

Number of positions, Wyckoff notation, and point symmetry

Co-ordinates of equivalent positions

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

Conditions limiting possible reflections

General:

$hkl: h+k=2n$
 $Ok_l: (k=2n)$
 $h0l: l=2n; (h=2n)$
 $hk0: h=2n; (k=2n)$
 $h00: (h=2n)$
 $Ok0: (k=2n)$
 $00l: (l=2n)$

Special: as above, plus no extra conditions

$hkl: h=2n; (k=2n)$

$hkl: k+l=2n; (l+h=2n)$

$hkl: h, l=2n; (k=2n)$

$hkl: k+l=2n; (l+h=2n)$

16 g 1 $x, y, z; \bar{x}, \bar{y}, \bar{z}; x, \frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}+z; x, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}-z;$
 $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}; \bar{x}, y, z; \bar{x}, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}-z; \bar{x}, \frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}+z.$

donne les distances

(a,b,c)

ajouter ces 8 positions équivalentes

g	f	m	$0, y, z; 0, \bar{y}, \bar{z}; \frac{1}{2}, y, \frac{1}{2}-z; (\frac{1}{2}, \bar{y}, \frac{1}{2}+z.$
8	e	2	$\frac{1}{2}, y, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \bar{y}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, y, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \bar{y}, \frac{1}{2}.$
8	d	2	$x, 0, 0; \bar{x}, 0, 0; x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \bar{x}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}.$
8	c	1	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}.$
4	b	2/m	$\frac{1}{2}, 0, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}.$
4	a	2/m	$0, 0, 0; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}.$

centre de molécules: on en fait 4, alors il n'y a plus avec pb, car a comest l'arrangement des molécules de I₂.

Symmetry of special projections

(001) $pmm; a'=a/2, b'=b/2$

(100) $pgm; b'=b/2, c'=c$

(010) $pnm; c'=c/2, a'=a/2$

Cristallographie générale

Solution

Structure de l'iode:

- Position 8f (symbole de Wyckoff) des atomes d'iode:

$$0, y, z; 0, \bar{y}, \bar{z}; \frac{1}{2}, y, \frac{1}{2} - z; \frac{1}{2}, \bar{y}, \frac{1}{2} + z;$$

$$\frac{1}{2}, \frac{1}{2} + y, z; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - y, -z; 0, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - z; 0, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} + z \text{ (maille centrée C)}$$

avec $y = 0.1493$, $z = 0.1156$

- Les atomes d'iode se trouvent dans des plans de symétrie m . Ils forment des molécules I_2 (haltères).

- Distance intramoléculaire I-I:

$$d = 2 \sqrt{(ax)^2 + (by)^2 + (cz)^2} = 2.678 \text{ \AA}$$

- Symétrie d'une haltère I-I dans l'état gazeux:
L'axe de l'haltère est d'ordre infini. Il existe un nombre infini de plans m parallèles à I-I, un nombre infini d'axes binaires perpendiculaires à I-I, un plan m perpendiculaire à I-I, et un centre de symétrie. C'est la symétrie d'un cylindre circulaire.

Symbole du groupe: $\infty \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ (abrégé: ∞/mmm).

- Les centres des molécules occupent la position 4a: $0,0,0; \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$.

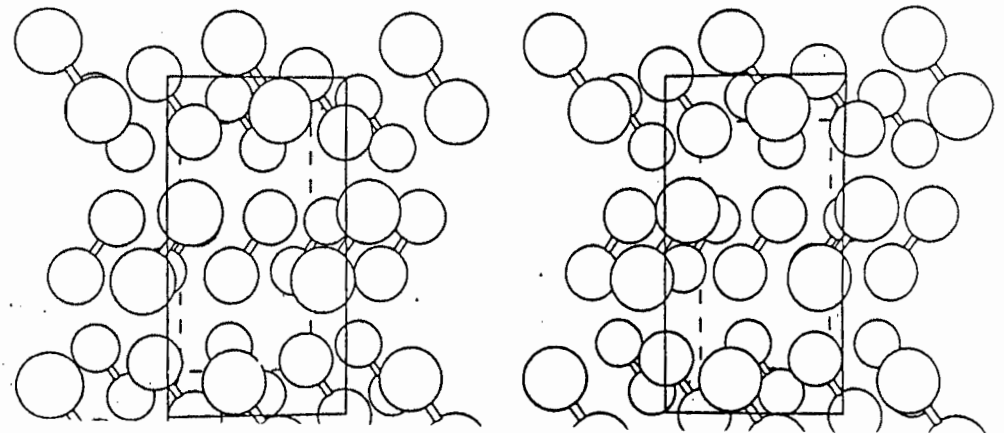
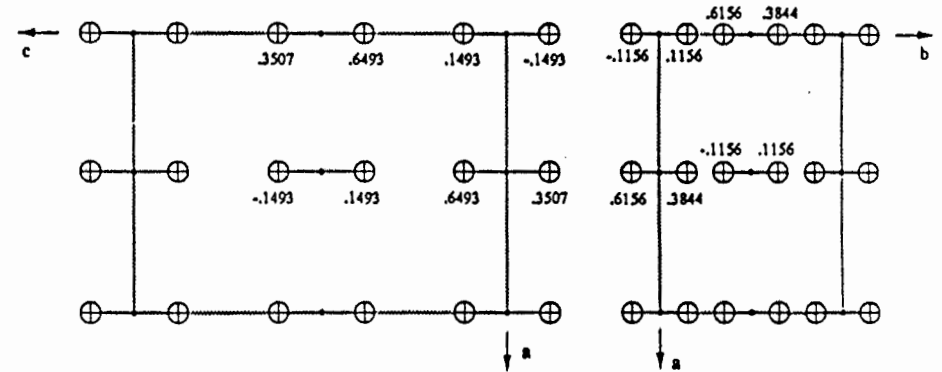
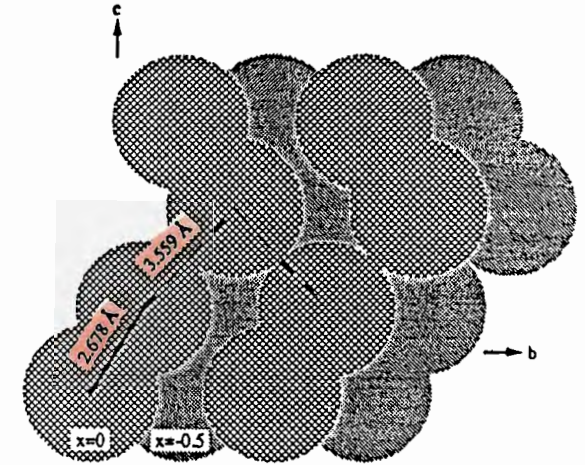
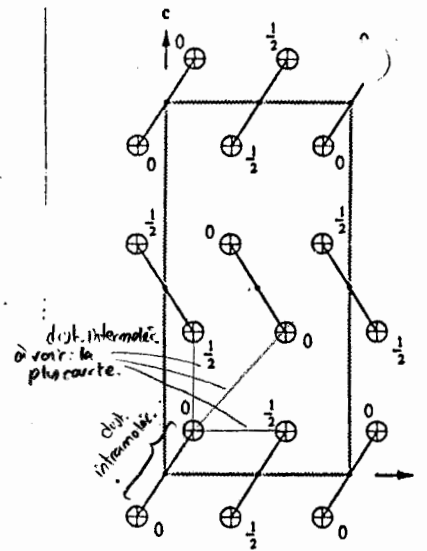
La symétrie ponctuelle d'une molécule dans l'environnement cristallin est donc $2/m$. Symétrie due au centre des molécules \rightarrow si une molécule est en point, elle revient à donner la sym. du site.

- Les deux voisins intermoléculaires les plus proches sont à 3.559 \AA . Toutes les autres distances intermoléculaires sont plus longues que 4 \AA .

- Masse volumique:

$$d = \frac{\text{masse}}{\text{volume}} = \frac{Z \cdot M}{A \cdot V}$$

$Z = 8$ (8 atomes par maille), $M =$ masse atomique en gr/mole,
 $A = 6.023 \cdot 10^{23} =$ nombre d'Avogadro, $V = a \cdot b \cdot c \cdot 10^{-24} \text{ cm}^3$,
 $d = 4.943 \text{ g/cm}^3$



Cristallographie I: Exercice

Réseau réciproque - Construction d'Ewald

(identifier les cas trig. / tétrag.
avec les smg. - etc)

monoclinique

Soient un réseau cristallin avec $a = 10 \text{ \AA}$, $b = 12 \text{ \AA}$, $c = 7 \text{ \AA}$, $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta = 100^\circ$ et un rayonnement avec $\lambda = 1,54178 \text{ \AA}$ (CuK α).

1. Déterminer les paramètres du réseau réciproque a^* , b^* , c^* , α^* , β^* , γ^* et les volumes des mailles directe et réciproque. Indiquer les orientations mutuelles de \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} , \mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* , \mathbf{c}^* dans une esquisse (projection selon \mathbf{b}).
2. Calculer l'intervalle d de la série de plans réticulaires $(70\bar{3})$.
par la projection M, on n'a pas besoin de a^, b^*, c^* .*
3. Quel est l'angle de réflexion θ pour $(70\bar{3})$ avec le rayonnement donné?
4. Soit un faisceau incident perpendiculaire à l'axe \mathbf{b} .
 - i) Déterminer graphiquement par la construction d'Ewald la position du cristal nécessaire pour obtenir la réflexion $(70\bar{3})$. (*Indication: prendre comme échelle $0,1 \text{ \AA}^{-1} \cong 1 \text{ cm}$*). Cette position peut être définie par les angles entre le rayon incident s_0 et les vecteurs \mathbf{a}^* et \mathbf{c}^* . Calculer ces angles.
 - ii) Déterminer le nombre maximal des réflexions avec les indices $(h0l)$ qu'on peut obtenir en tournant le cristal autour de l'axe \mathbf{b} . Donner les indices h_{\max} et l_{\max} des réflexions ainsi obtenues.
 - iii) Quel sera le nombre maximal des réflexions hkl ?

Cristallographie I: Solution

Réseau réciproque - Construction d'Ewald

1. On obtient pour le volume de la maille directe $V = l(axc)bl = abc \cdot \sin\beta = 827,24 \text{ \AA}^3$. *⚠ parce qu'il fallait que $\alpha' = \gamma' = \pi/2$: il faut d'abord calculer ces angles.*

On trouve avec les équations qui définissent le réseau réciproque:

$$\begin{aligned} a^* &= (bc \cdot \sin\alpha)/V = 1/(a \cdot \sin\beta) = 0,101542 \text{ \AA}^{-1} \\ b^* &= (ca \cdot \sin\beta)/V = 1/b = 0,083333 \text{ \AA}^{-1} \\ c^* &= (ab \cdot \sin\gamma)/V = 1/(c \cdot \sin\beta) = 0,145061 \text{ \AA}^{-1} \\ \alpha^* &= \gamma^* = 90^\circ, \quad \beta^* = 80^\circ. \end{aligned}$$

Le volume de la maille réciproque est:

$$V^* = a^*b^*c^* \cdot \sin\beta^* = 0,0012088 \text{ \AA}^{-3} = 1/V.$$

2. Le vecteur réciproque $70\bar{3}$ est: $r_{70\bar{3}}^* = 7a^* + 0b^* - 3c^*$. Comme $\cos\alpha^* = \cos\gamma^* = 0$, on a: $|r^*|^2 = r^* \cdot r^* = 49a^{*2} + 9c^{*2} - 42a^*c^* \cos\beta^* = 0,5871905 \text{ \AA}^{-2} = 1/(d^2)$. D'où: $d_{70\bar{3}} = 1,305 \text{ \AA}$.

3. $2d\sin\theta = \lambda$, d'où $\sin\theta = \lambda/2d = 0,590720$ ou $\theta_{70\bar{3}} = 36,21^\circ$.

4. i) Avec une échelle de 1 cm pour $0,1 \text{ \AA}^{-1}$, on a: $a^* = 1,02 \text{ cm}$, $c^* = 1,45 \text{ cm}$, $1/\lambda = 6,5 \text{ cm} =$ rayon de la sphère d'Ewald. La sphère d'Ewald doit passer par l'origine (000) du réseau réciproque et par le noeud (703). La construction graphique donne deux solutions pour l'orientation du cristal par rapport au rayon incident s_0 (voir figure). Les angles sont:

que par la sphère e-M.

$$\begin{cases} \text{angle}(s_0, a^*) = 160,2^\circ, & \text{angle}(s_0, c^*) = 119,8^\circ; \\ \text{angle}(s, a^*) = 87,8^\circ, & \text{angle}(s, c^*) = 167,8^\circ; \end{cases} \quad \begin{cases} s' = -s_0 \\ s'_0 = -s \end{cases} \text{ sphère } M'$$

Ces angles peuvent être obtenus algébriquement en calculant d'une part les angles intermédiaires ($r_{70\bar{3}}^*, a^*$) et ($r_{70\bar{3}}^*, c^*$) (produit scalaire entre deux vecteurs réciproques); d'autre part les angles ($r_{70\bar{3}}^*, s_0$) et ($r_{70\bar{3}}^*, s$) sont égaux à $90^\circ + \theta$ et $90^\circ - \theta$.

ii) On obtient une réflexion chaque fois qu'un noeud du réseau réciproque passe par la sphère d'Ewald. En tournant le cristal autour de l'axe b , les noeuds d'indices $h0l$ qui peuvent couper la sphère d'Ewald se trouvent dans un cercle de rayon $2/\lambda$ (= diamètre de la sphère d'Ewald) centré sur l'origine du réseau réciproque: c'est le

cercle limite. Le nombre maximal des réflexions $h0l$ est donné par le rapport entre la surface du cercle limite et celle du parallélogramme défini par a^* et c^* .

$$n_{\max}(\text{CuK}\alpha) = \frac{\pi(2/\lambda_{\text{CuK}\alpha})^2}{a^*c^*\sin\beta^*} = 364,43$$

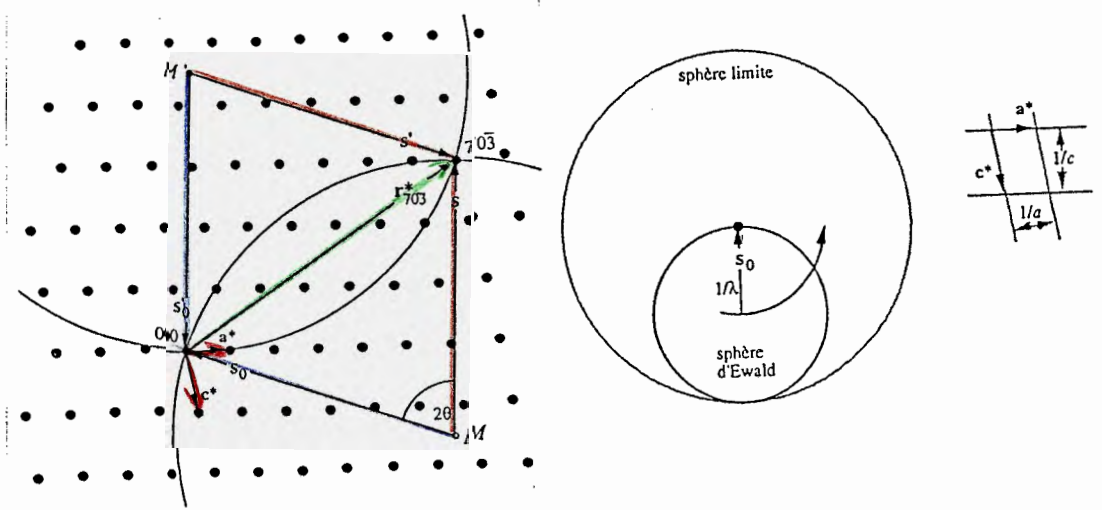
Le nombre maximal des réflexions $h0l$ est donc 364.

L'indice h_{\max} (resp. l_{\max}) est donné par le rapport entre le rayon du cercle limite $2/\lambda$ et la distance réticulaire $a^*\sin\beta^* = 1/a$ (resp. $c^*\sin\beta^* = 1/c$):

$$h_{\max} = \frac{2}{\lambda} \cdot \frac{1}{\frac{1}{a}}$$

$$h_{\max} = \frac{2a}{\lambda} = 12,97 \rightarrow 12; \quad l_{\max} = \frac{2c}{\lambda} = 9,08 \rightarrow 9.$$

$$\text{iii) } n_{\max}(\text{CuK}\alpha) = \frac{4\pi(2/\lambda_{\text{CuK}\alpha})^3}{3a^*b^*c^*\sin\beta^*} = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2}{\lambda}\right)^3 V = 7563.$$

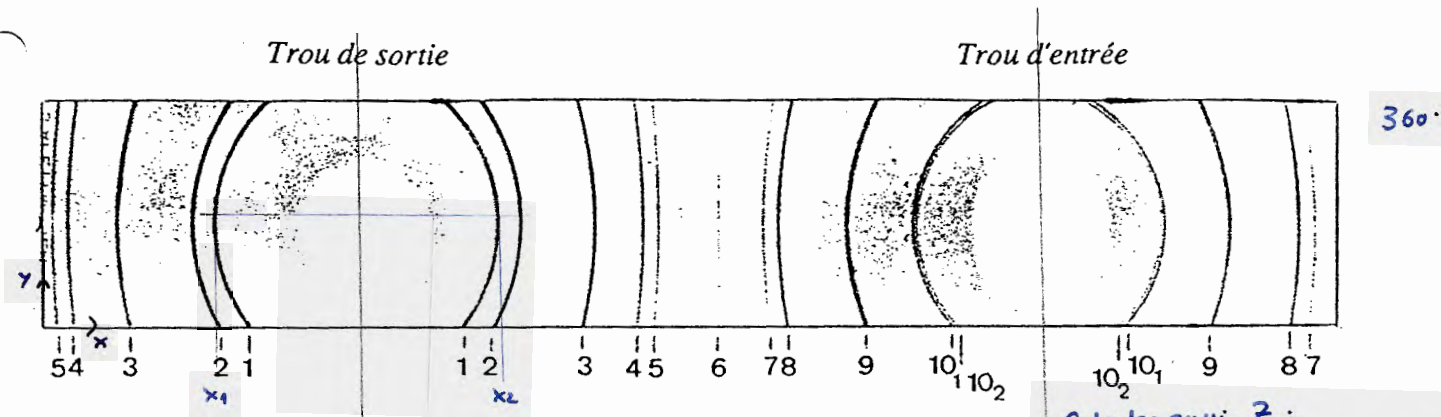


Cristallographie générale - diffraction

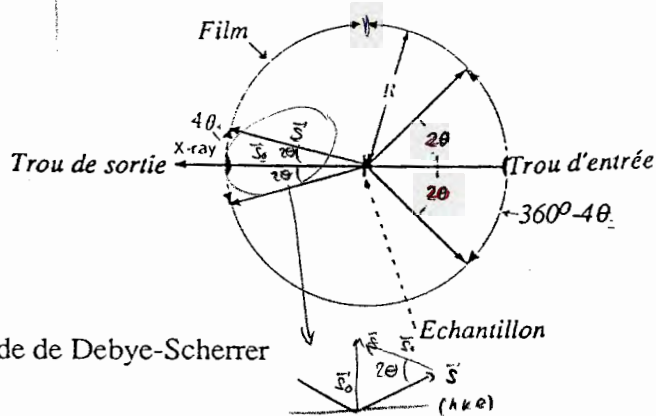
Exercice: Méthode des poudres

On donne un diffractogramme de poudre obtenu par la méthode de Debye-Scherrer du composé cubique NiO.

Longueurs d'onde du rayonnement utilisé: $\lambda(\text{CuK}\alpha) = 1.5418 \text{ \AA}$; $\lambda(\text{CuK}\alpha_1) = 1.5405 \text{ \AA}$; $\lambda(\text{CuK}\alpha_2) = 1.5443 \text{ \AA}$.



360



Calculer aussi Z :
 ob. unités de formule
 nb. NO par maille
 - commencer par calculer
 l'échelle de conversion [mm] ↔ [°]
 densité: $\rho = 6,81 \text{ g/cm}^3$

Schéma de la méthode de Debye-Scherrer

Les positions des raies relevées (origine arbitraire) sur le diffractogramme sont les suivantes:

Raie No.	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10 ₁	10 ₂
x ₁ [mm]	24.25	21.20	11.40	5.15	3.10	90.60	96.60	98.65	107.80	116.40	116.85
x ₂ [mm]	61.65	64.65	74.50	80.75	82.80	-	169.60	167.50	158.45	149.80	149.39

La chambre de diffraction a pour diamètre 57.3 mm, sa circonférence mesure donc 180 mm, c'est-à-dire $1 \text{ mm} \equiv 2^\circ$. La distance entre les deux trous sur le diffractogramme qui marquent l'entrée et la sortie du faisceau incident du rayon X est donc égale à $90 \text{ mm}^{(*)}$ ou 180° . Comme la différence $x_2 - x_1$ correspond à 4θ , l'angle de diffraction θ est donné par la relation:

$$\theta [^\circ] = \frac{(x_2 - x_1)}{2} [\text{mm}]$$

Remarques:

- Pour les raies no. 6 jusqu'au no. 10_2 (i.e. réflexions avec $2\theta > 90^\circ$), $x_2 - x_1$ correspond à $360^\circ - 4\theta$, c'est-à-dire:

$$360^\circ - 4\theta = 2(x_2 - x_1) [\text{mm}]$$

- En ce qui concerne la raie no. 6 se trouvant au centre du diffractogramme, x_2 ne peut pas être relevé à cause de la longueur du film qui est plus petite que la circonférence de la chambre (voir schéma). Pour cela, on calcule la position M du faisceau incident au trou d'entrée du diffractogramme à l'aide des raies no. 7 jusqu'aux raies no. 10_2 telles que:

$$\bar{M} [\text{mm}] = \left(\sum_{i=7}^{10_2} M_i \right) / 5, \text{ où } M_i = \frac{(x_2 + x_1)}{2} [\text{mm}] \text{ pour la raie no. } i.$$

Pour la raie no. 6, on a donc: $180^\circ - 2\theta = 2(\bar{M} - x_1) [\text{mm}]$

- Les raies rapprochées no. 10_1 et 10_2 sont des réflexions dues au doublet $K\alpha_1$ et $K\alpha_2$ (leurs angles de diffraction sont assez grands pour obtenir la résolution de ce doublet). Les autres raies peuvent être considérées comme des réflexions dues à la longueur d'onde $K\alpha \dots$

En connaissant la longueur d'onde du faisceau incident ainsi que les angles de diffraction θ des raies du diffractogramme, trouver les indices de Miller hkl de ces raies et le paramètre a de la maille. En examinant les indices assignés et les absences systématiques que l'on peut en déduire, donner également le type de réseau de Bravais caractérisant le composé.

Indication: La loi de Bragg donne la relation entre λ , d_{hkl} et l'angle θ :
 $2 d_{hkl} \sin \theta_{hkl} = \lambda$.

Pour une substance cubique, il existe une relation simple entre la constante du réseau a , les indices de Miller (hkl) et d_{hkl} (voir cours):

$$\frac{1}{d_{hkl}} = d_{hkl} = \frac{a}{(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}} \quad \text{d'où: } \sin^2 \theta = \frac{\lambda^2}{4a^2} (h^2 + k^2 + l^2)$$

$\uparrow \quad \uparrow$
 \uparrow nombre entier
 facteur commun pour chaque raie

Il faut donc chercher le facteur commun indiqué ci-dessus pour les valeurs de $\sin^2 \theta$ et trouver le triplet des entiers (hkl) .

(*): dans le cas idéal! En pratique, cette distance varie légèrement autour de 90 mm ; le facteur exact de conversion distance-angle doit être calculé pour chaque diffractogramme.

Cristallographie générale - diffraction

Solutions: Méthode des poudres
Indexation du diffractogramme du composé cubique NiO

Comme la chambre de diffraction a pour diamètre 57.3 mm., le facteur de conversion théorique angle-distance pour le diffractogramme vaut donc 2°/mm. En pratique, on détermine ce facteur par la distance séparant l'entrée et la sortie du faisceau primaire du rayon X. Pour cela, on calcule les positions moyennes \bar{M} (entrée) et \bar{M}' (sortie) à l'aide des mesures x_1 et x_2 des raies relevées sur le diffractogramme.

$$\text{Entrée: } \bar{M} = \left(\sum_{i=7}^{10_2} M_i \right) / 5; \quad \text{Sortie: } \bar{M}' = \left(\sum_{i=1}^5 M_i \right) / 5,$$

où: $M_i = \frac{(x_2 + x_1)}{2}$ [mm] pour la raie no. i.

On trouve: $\bar{M} = 133.095$ mm, $\bar{M}' = 42.945$ mm.

D'où la distance séparant l'entrée et la sortie du faisceau primaire du rayon X:

$$\bar{M} - \bar{M}' = 90.150 \text{ mm} \cong 180^\circ$$

Le facteur de conversion vaut donc $180/90.15 = 1.996672^\circ/\text{mm}$ et on a la relation:

$$(x_2 - x_1) \text{ [mm]} \cong 1.996672 \cdot (x_2 - x_1) [^\circ].$$

Le calcul donne les valeurs suivantes:

Raie No.	Int.	d_{hkl} [Å]	θ [°]	$\sin_2\theta$	$= \frac{\lambda^2}{4a^2} \cdot (h^2+k^2+l^2)$	hkl	$a = \frac{\lambda}{2b}$ [Å]	
1	F	2.4083	18.6689	0.102463	0.0341543	3	111	4.1713
2	FF	2.0860	21.6889	0.136579	0.0341448	4	200	4.1719
3	F	1.4755	31.4975	0.272966	0.0341208	8	220	4.1734
4	m	1.2596	37.7371	0.374592	0.0340538	11	311	4.1775
5	f	1.2047	39.7837	0.409461	0.0341218	12	222	4.1733
6	f	1.0443	47.5757	0.544894	0.0340559	16	400	4.1774
7	f	0.9582	53.5607	0.647199	0.0340631	19	331	4.1769
8	m	0.9339	55.6323	0.681337	0.0340669	20	420	4.1767
9	m	0.8526	64.7171	0.817596	0.0340665	24	422	4.1767
10 ₁	f	0.8041	73.3278	0.917691	0.0339886	27	333,511	4.1780
10 ₂	f	0.8041	73.8020	0.922183	0.0341549			4.1781

\uparrow
 b^2

$\sin^2\theta = b^2 \cdot (h^2+k^2+l^2)$

où: Int. = intensité relative (estimée sur le diffractogramme original)
FF : très fort; F: fort; m: moyen; f: faible; ff: très faible.

$$d_{hkl} = \frac{\lambda}{2\sin\theta}; \quad \begin{array}{l} \text{raies no. 1-9: } \lambda(K\bar{\alpha}) = 1.5418 \text{ \AA} \\ \text{raie no. 10}_1: \lambda(K\alpha_1) = 1.5405 \text{ \AA} \\ \text{raie no. 10}_2: \lambda(K\alpha_1) = 1.5443 \text{ \AA} \end{array}$$

La constante du réseau de NiO est donc: $\bar{a} = 4.1756 \text{ \AA}$ ($a_{\text{ASTM}} = 4.1769 \text{ \AA}$).

Le nombre d'unités de formule NiO par maille est:

$$Z = \rho \frac{N_A \cdot V}{M} = 4,$$

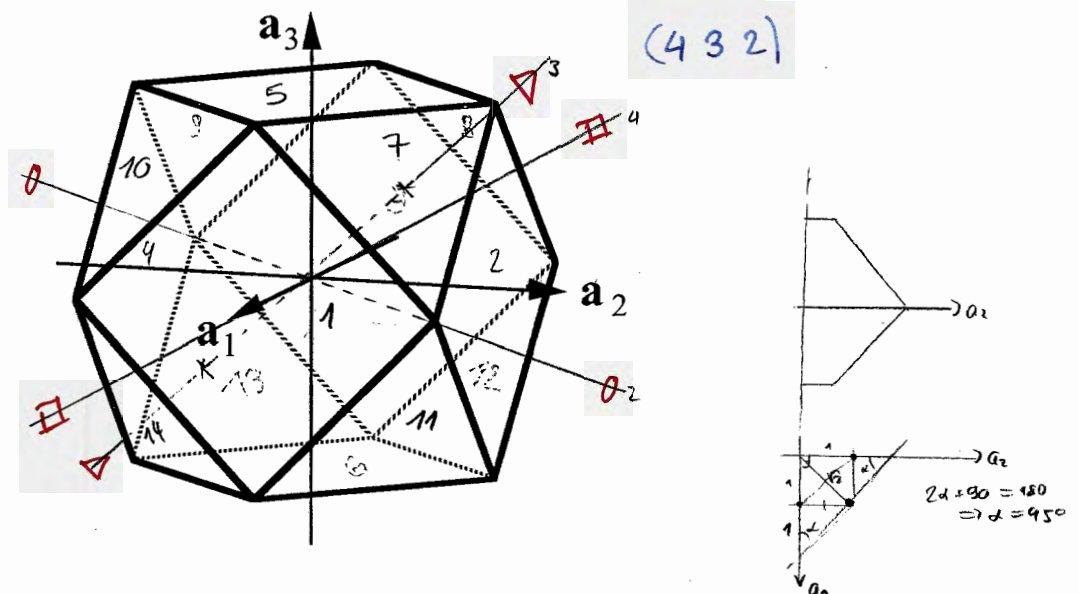
- où: ρ : masse volumique mesurée = 6.81 g/cm³
- V : volume de la maille = a^3
- M : masse molaire de NiO = 74.7094 g/mole
- N_A : nombre d'Avogadro = $6.023 \cdot 10^{23}$ /mole.

Absences systématiques: les (hkl) assignés (voir tableau) sont tous pairs ou tous impairs, c'est-à-dire de la même parité. Les réflexions d'indices hkl de parité mixte sont *systématiquement* absentes. Le réseau de Bravais de NiO est donc du type F (à faces centrées).

Test 1

Veillez rendre cette feuille avec vos réponses aux problèmes.

- La symétrie du polyèdre ci-dessous est cubique. Dessinez les directions d'un axe de symétrie quaternaire, d'un axe ternaire et d'un axe binaire.
 - Donnez les indices des faces.
 - Calculez l'angle entre une face triangulaire et une face carrée.



- La structure de l'étain métallique (Sn) possède la symétrie du groupe d'espace $I4_1/amd$, $a = 5,8197 \text{ \AA}$, $c = 3,1749 \text{ \AA}$. Les atomes occupent la position $4a$. On trouve dans les Tables Internationales l'information suivante:

$$(0, 0, 0; \quad 1/2, 1/2, 1/2)^+$$

$$\underline{0, 0}, 0; \quad \underline{0, 1/2}, 1/4)$$

- Donnez la classe cristalline et le système cristallin.
- Dessinez une projection de la structure (quatre mailles).
- Calculez la masse volumique (masses atomique $M(\text{Sn}) = 118,69 \text{ g mol}^{-1}$; nombre d'Avogadro $A = 6,023 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$).
- Calculez l'angle de Bragg du plan (211) pour le rayonnement $\text{MoK}\alpha$, $\lambda = 0,709 \text{ \AA}$.

3. Les angles de Bragg θ du diagramme de poudre du métal europium (Eu), enregistré avec la longueur d'onde $\lambda = 1,54056 \text{ \AA}$ ($\text{CuK}\alpha_1$), sont

no.	intens.	θ [°]	$\sin^2\theta$	Round. valeur :	Valeurs réelles	cte. du réseau
1	100	13,68	0,05593	1	2	4,60611
2	15	19,54	0,11187	2	4	4,60604
3	20	24,18	0,16780	3	6	4,60637
4	7	28,23	0,22374	4	8	4,6059
5	10	31,93	0,27967	5	10	4,6056
6	4	35,40	0,33561	6	12	4,60627
7	7	38,74	0,39154	7	14	4,60559
8	3	41,99	0,44748	8	16	4,60555
9	5	45,20	0,50341	9	18	4,60563
10	2	48,41	0,55934	10	20	4,60587
11	3	51,66	0,61528	11	22 ✓	4,60631 ✓

(321)
(400)
(330) (411)
(420)
(332)

(pas en réalité) indices des raies (en réalité)

- Trouver les indices des raies.
- Déterminer les constantes de réseau.
- Identifier les absences systématiques et en dériver le réseau de Bravais.

indices des raies. On suppose le réseau cubique, alors la loi de Bragg simplifiée ($a=b=c$) donne:

$$\sin^2\theta_i = \frac{\lambda^2}{4a^2} (h^2+k^2+l^2) \in \mathbb{N}_+^*$$

donc il suffit de calculer le $\sin^2\theta_i$ $\forall i = 1, \dots, 11$ et de faire le rapport des valeurs obtenues, et comme $h^2+k^2+l^2 \in \mathbb{N}_+^*$, alors $\exists n_0 \in \mathbb{N}$ t.q. les valeurs multipliées par n_0 donnent des entiers (à peu près). (j'en donne pas les calc. interméd. parce que tout est sur la MP (liste))
On obtient le 7, et $\exists (hkl) \in \mathbb{N}$ t.q. $h^2+k^2+l^2 = 7$, donc on multiplie par 2

et:
absences systématiques: on voit que seuls les termes pairs sont présents, donc c'est (à cause de la présence du 7) typique d'un réseau CUBIQUE I. C'est bien un réseau cubique. La cte du réseau est donc:

$$a^2 = \frac{\lambda^2 \cdot (h^2+k^2+l^2)}{4 \cdot \sin^2\theta_i} \Rightarrow a = \frac{\lambda}{2 \sin\theta_i} \sqrt{h^2+k^2+l^2}$$

→ on peut évaluer a par moyennage.

$$a_{\text{moyen}} = 4,6059 \text{ \AA}$$

(on trouve la justification des absences en écrivant l'équation d'onde et en observant que l'intensité \sim Amplitude², si on suppose la symétrie $(h+k+l)$ pair, alors on voit que l'amplitude s'annule pour les $(h+k+l)$ impair → absences)
ces plans qui réfléchissent sont:

$$h+k+l = 2n$$

- 2: (110) ✓
- 4: (200) ✓
- 6: (211) ✓
- 8: (220) ✓
- 10: (310) ✓
- 12: (222) ... etc. ✓

ECOLE POLYTECHNIQUE FEDERALE DE
LAUSANNE

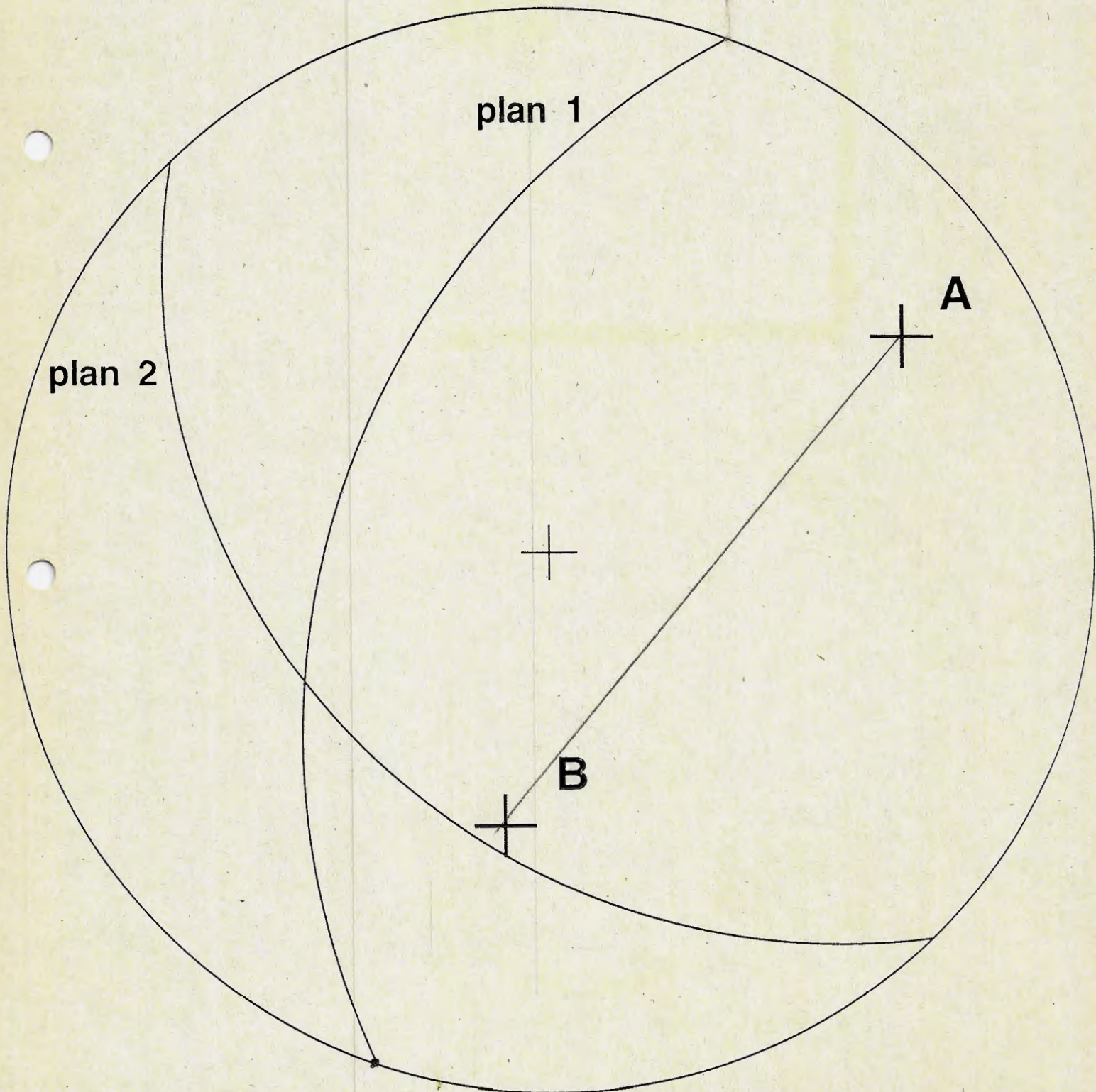
STRUCTURE DE LA MATIERE CONDENSEE

Série du 16 décembre 1997

La projection stéréographique

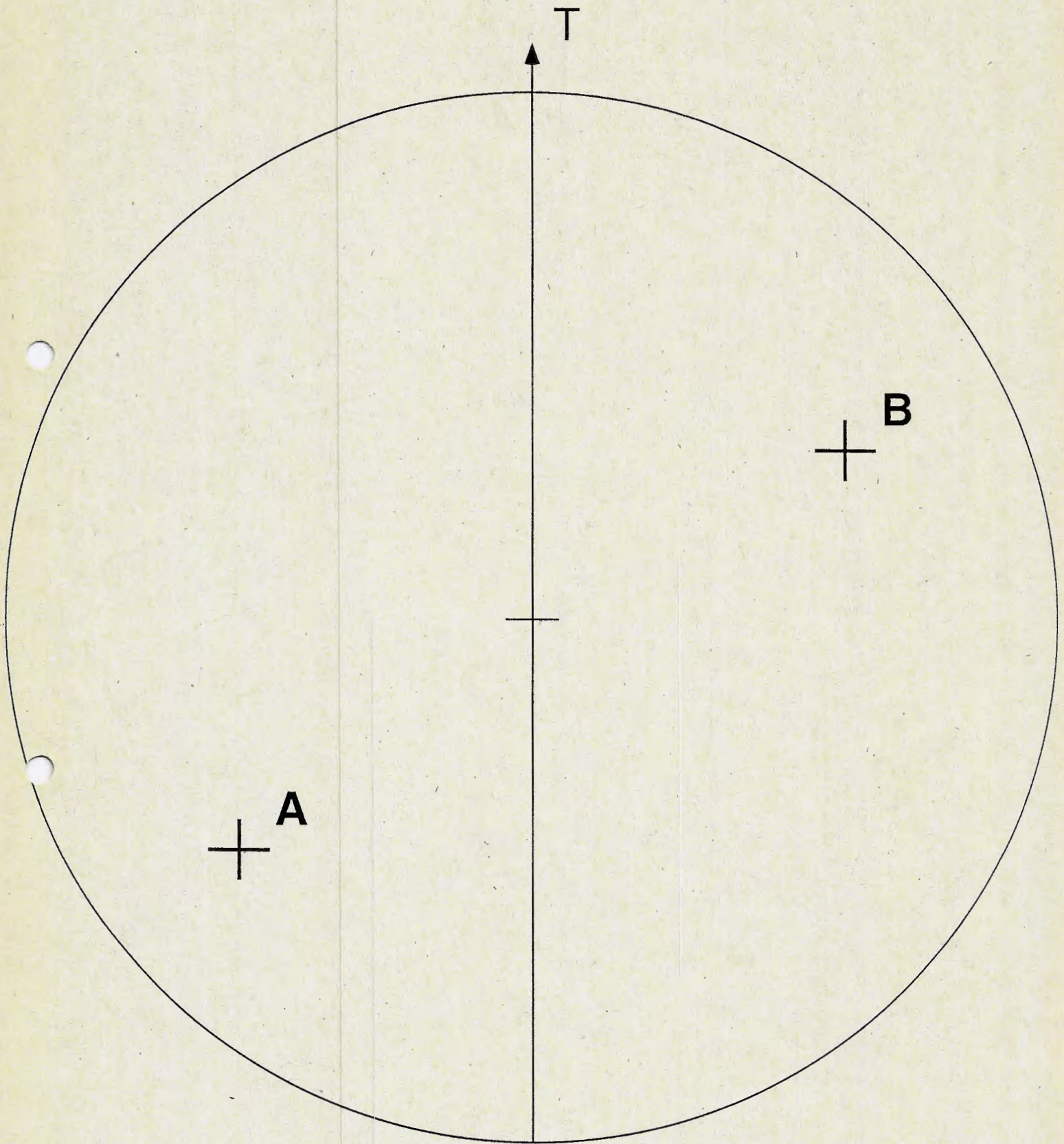
1. a) Trouver l'angle de deux directions A et B : calque tourner jusqu'à ce que A et B soient sur la même ligne vert.
b) Trouver l'angle de deux plans P₁ et P₂.

Angle entre 2 direct. : 112°
Angle : 40°



2. Soit T un axe de **basculement** contenu dans le plan de base. Trouver les images des directions A et B par la rotation d'axe T et d'angle 80° .

rotation



3. Soit T un axe de basculement quelconque. Trouver l'image de la direction A par la rotation de 50° d'axe T.

- met T sur l'équateur, et prend 90° vers \leftarrow et le plan (est celui qui est \perp à T.
- tracer le plan qui contient T et A



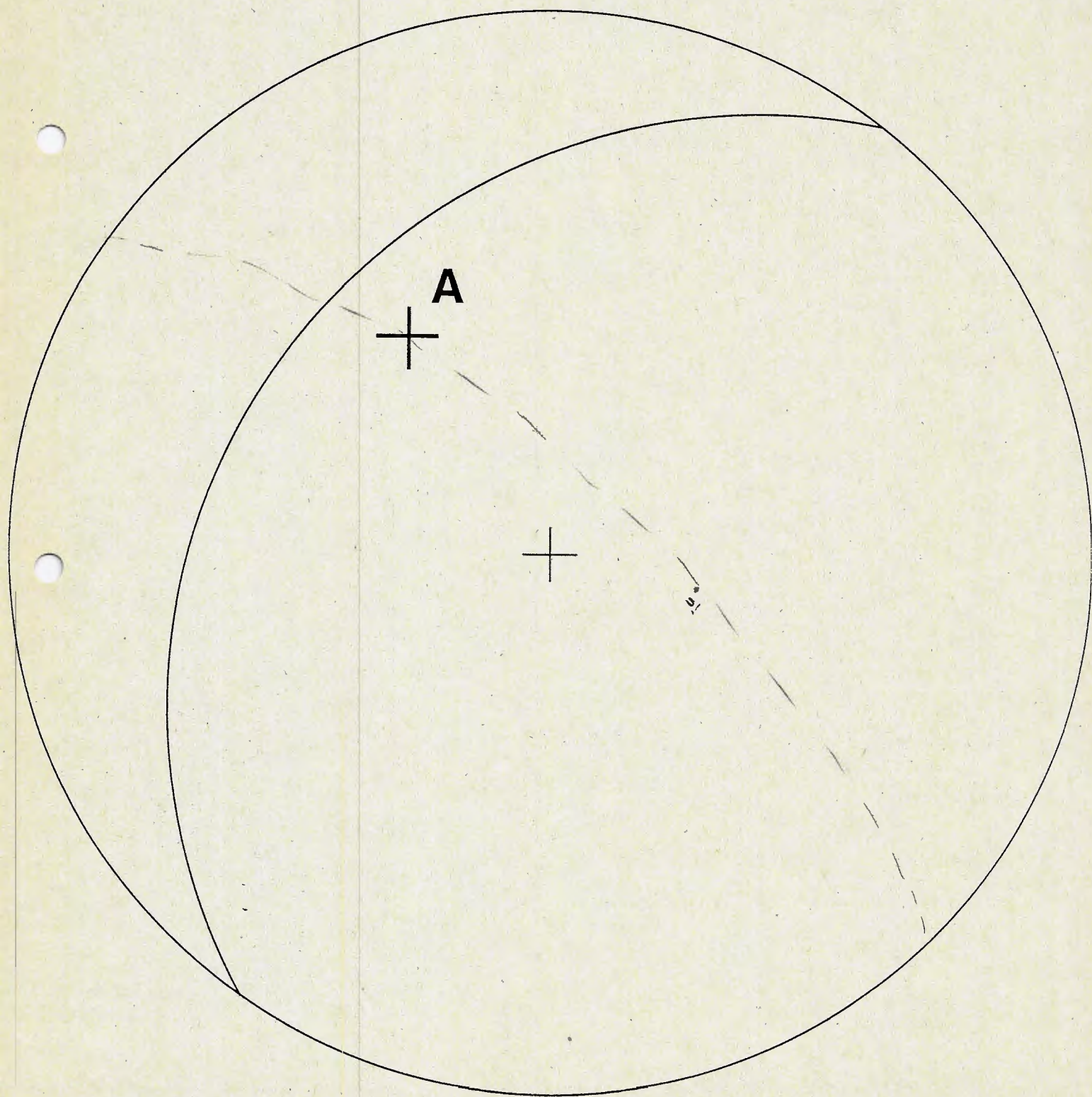
+ T

+

+ A

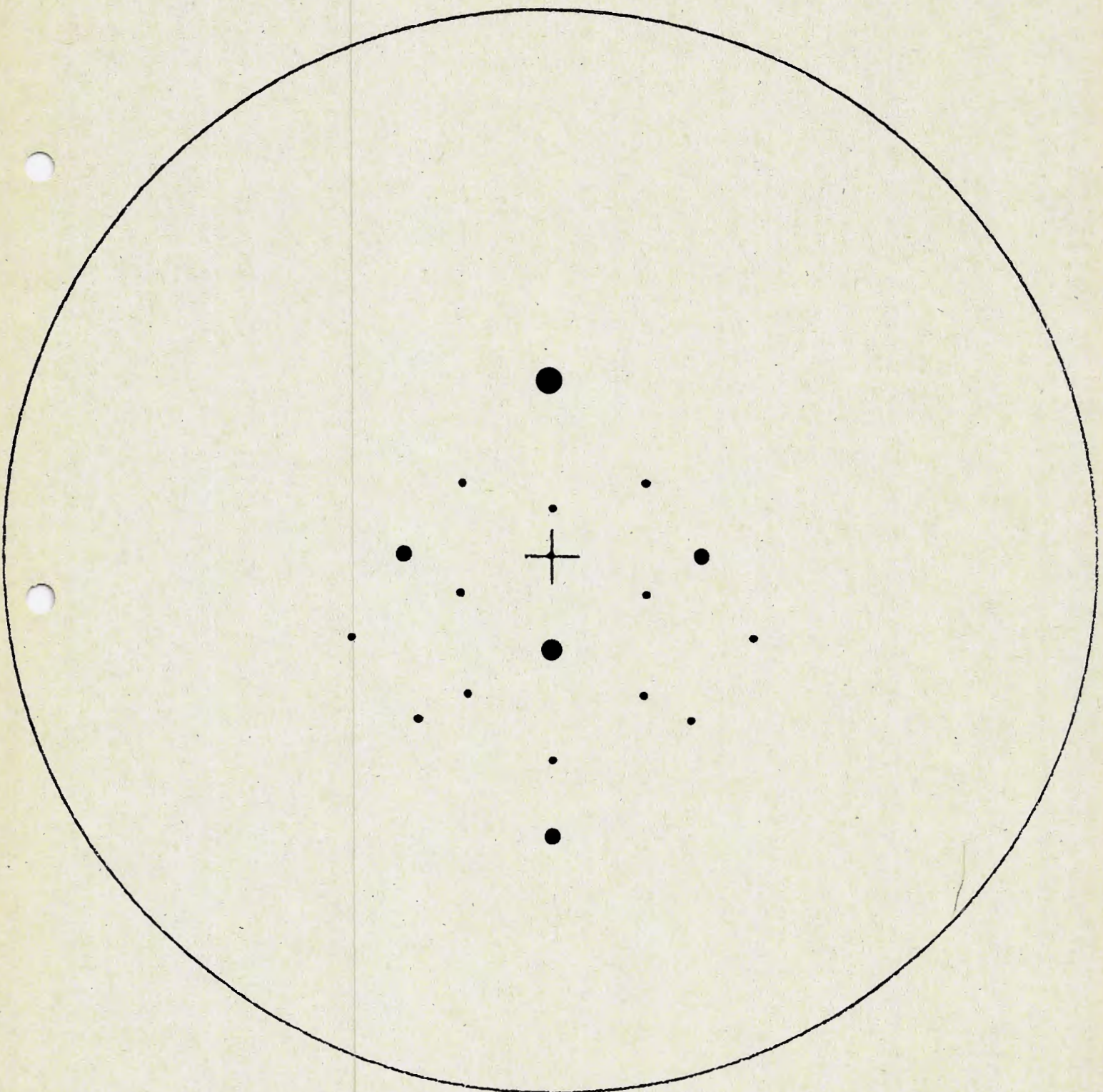
4. Trouver la symétrie de A par rapport au plan P.

- Normale au plan
- plan qui passe par A et par la normale (qui contient la normale de P et A)
- mener l'angle entre A et le point d'intersection



5. Trouver les indices des taches (les taches larges correspondent à de faibles indices).

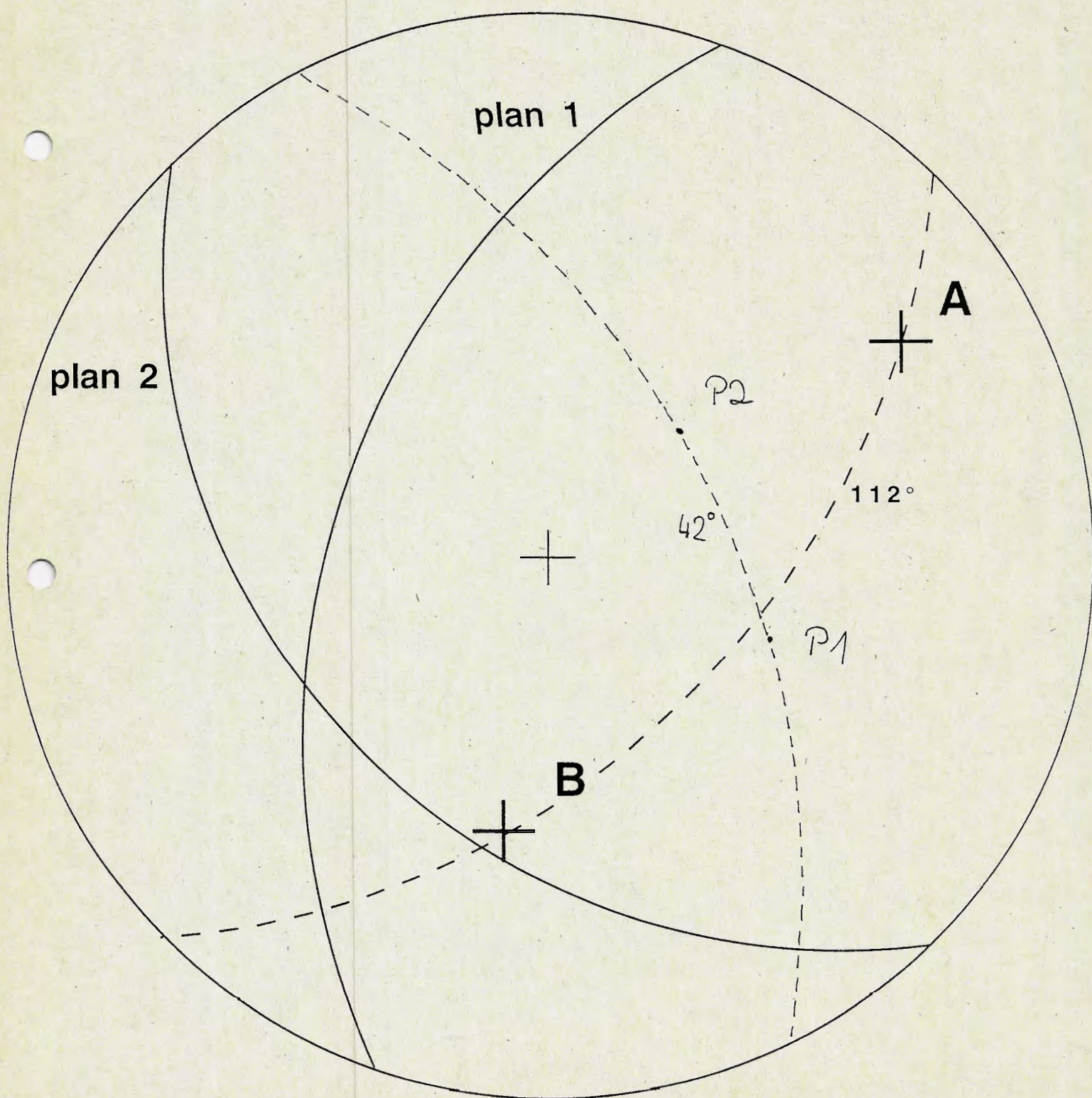
- taches : corresp. à des directions
 - angles entre les grandes taches
 - obtenir le tableau par avoir la direct. cristalline
- ex: $59.7^\circ \Rightarrow (111)$ et (101)



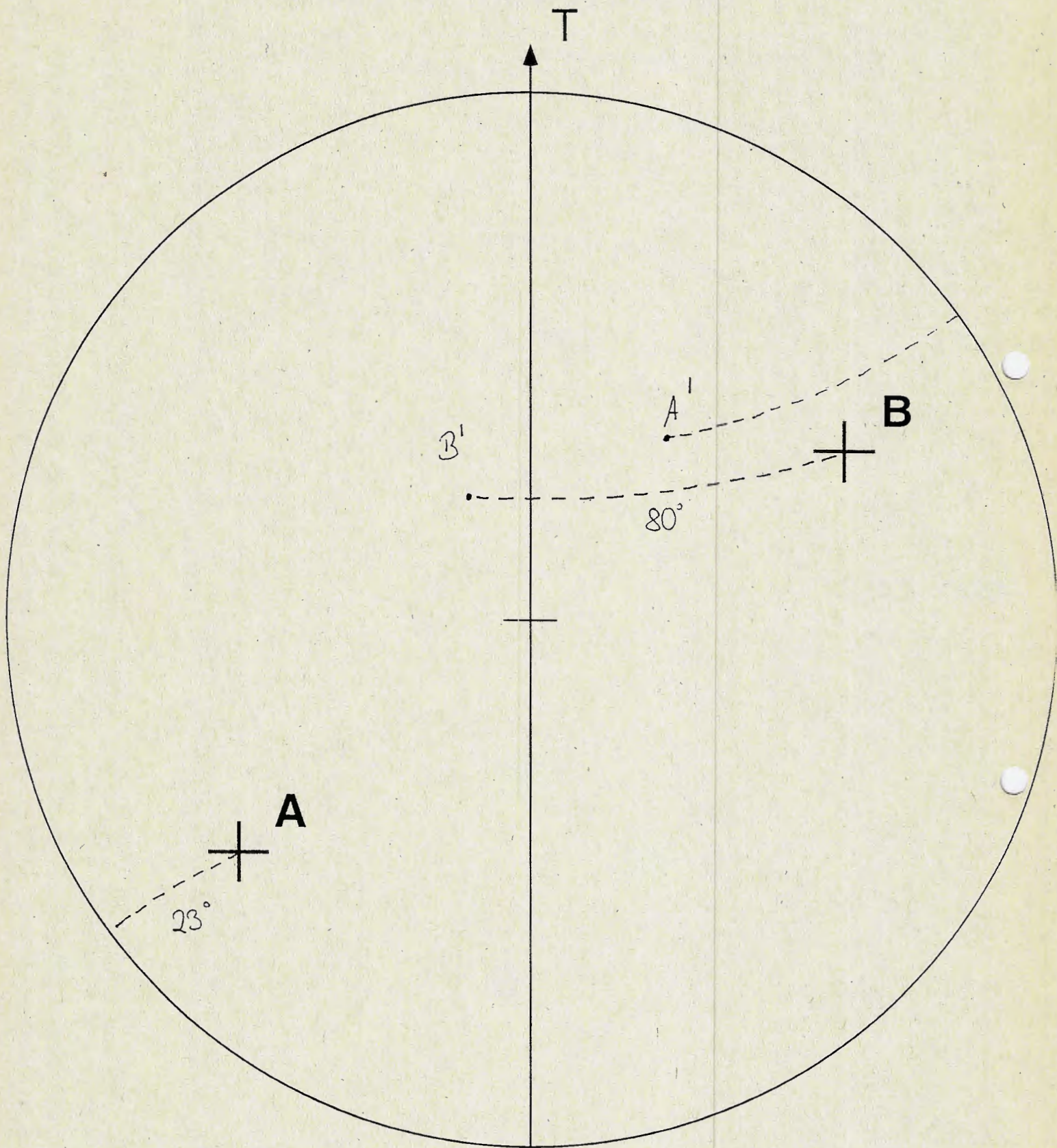
STRUCTURE DE LA MATIERE CONDENSEE

Corrigé de la série du 16 décembre 1997

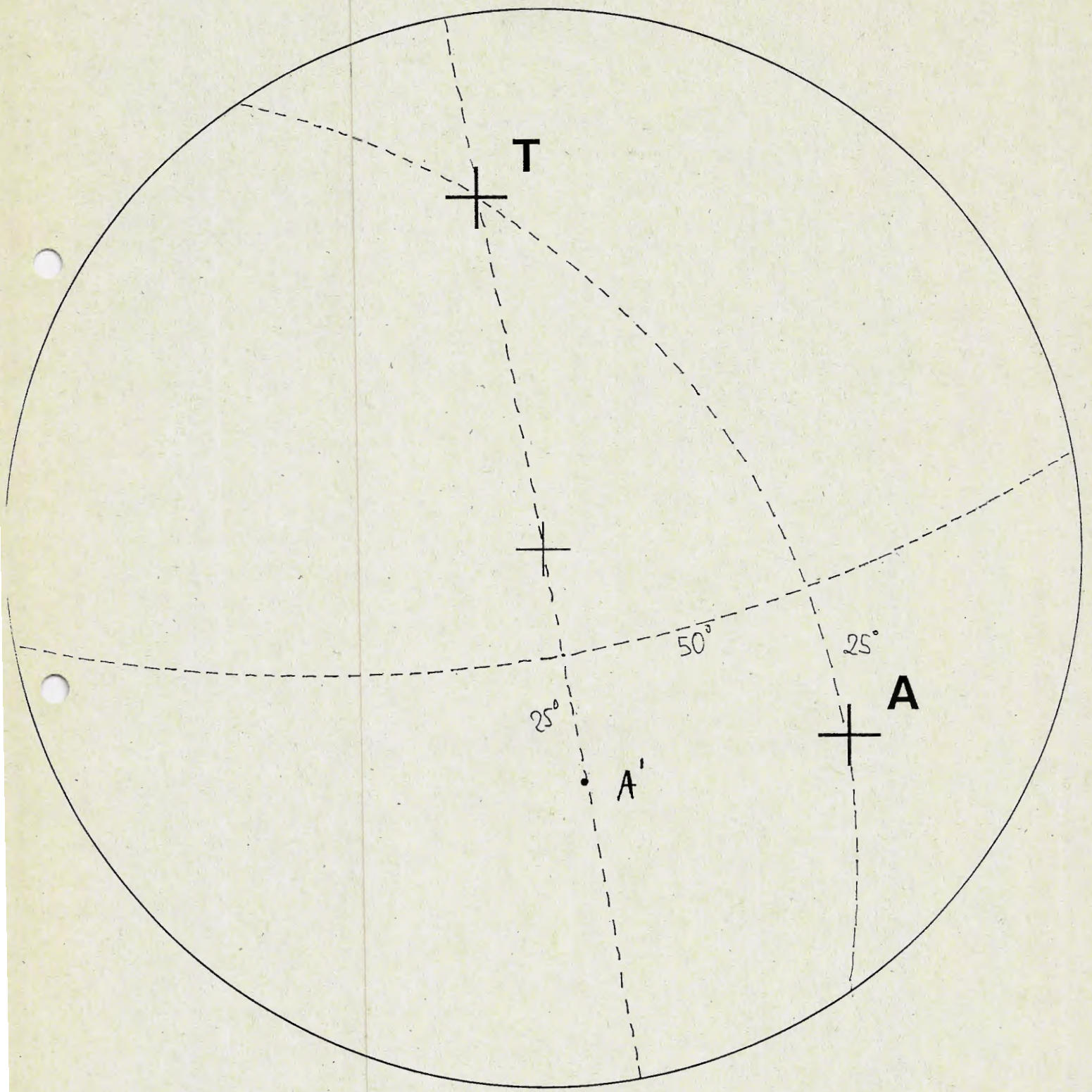
1. a) Trouver l'angle de deux directions A et B
- b) Trouver l'angle de deux plans P_1 et P_2 .



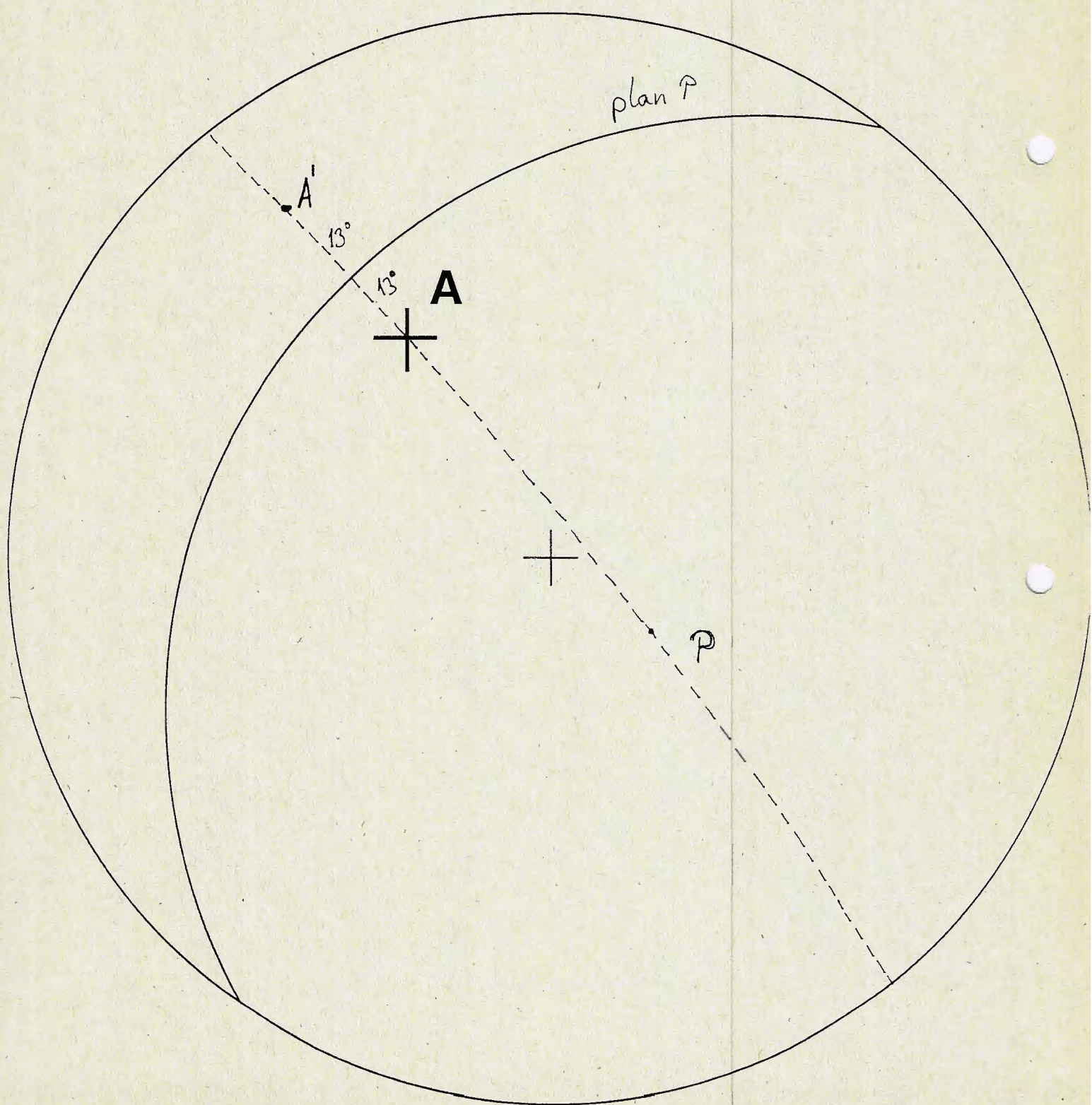
2. Soit T un axe de basculement contenu dans le plan de base. Trouver les images des directions A et B par la rotation d'axe T et d'angle 80° .



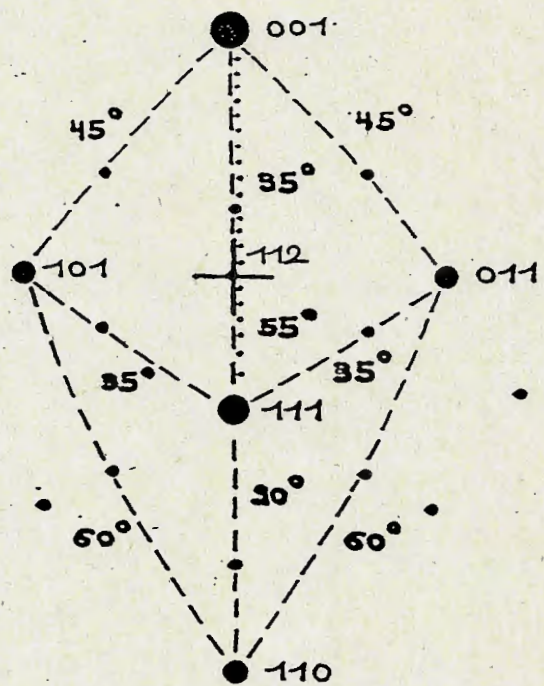
3. Soit T un axe de basculement quelconque. Trouver l'image de la direction A par la rotation de 50° d'axe T.



4. Trouver la symétrie de A par rapport au plan P.



5. Trouver les indices des taches (les taches larges correspondent à de faibles indices)



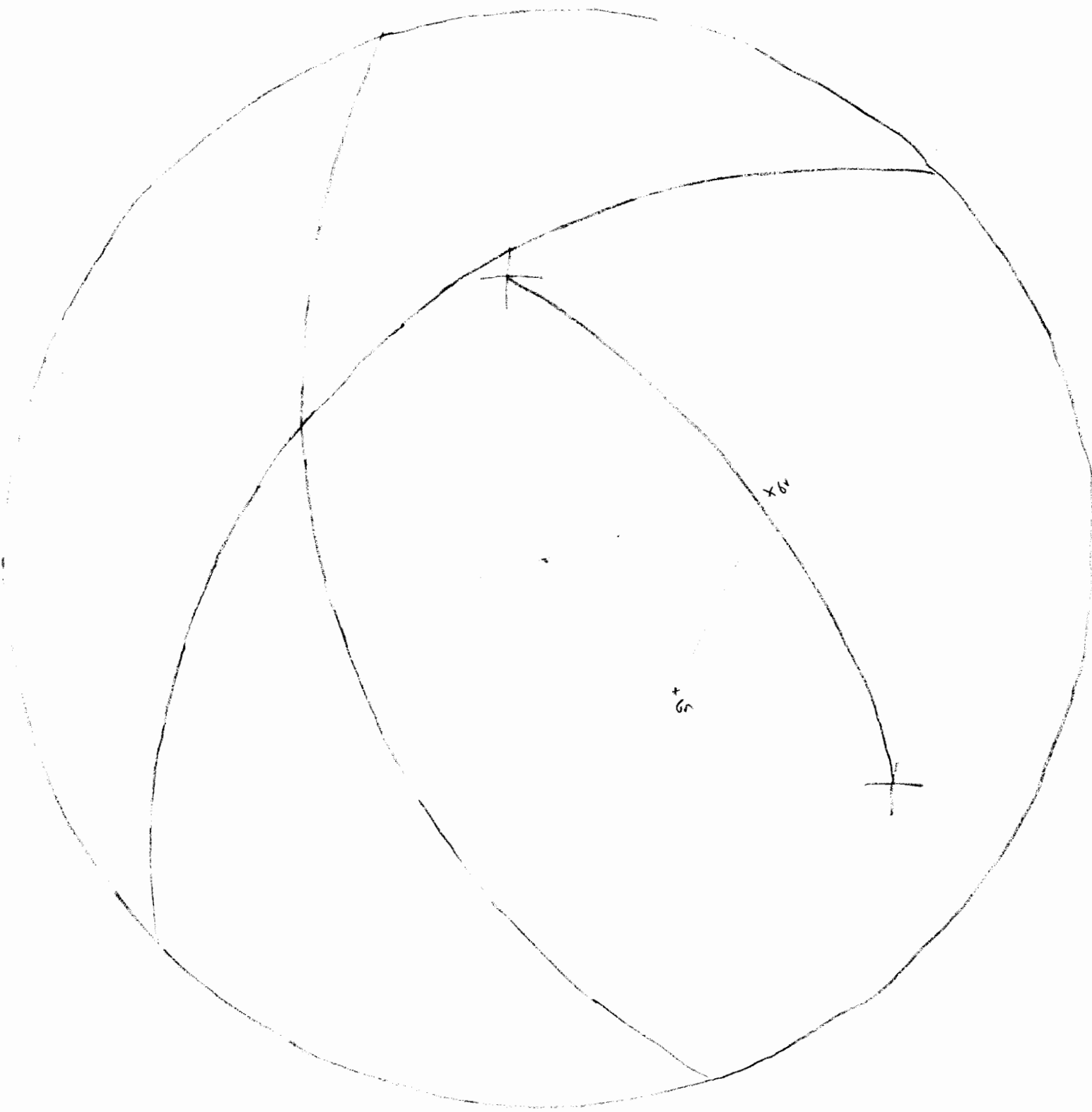
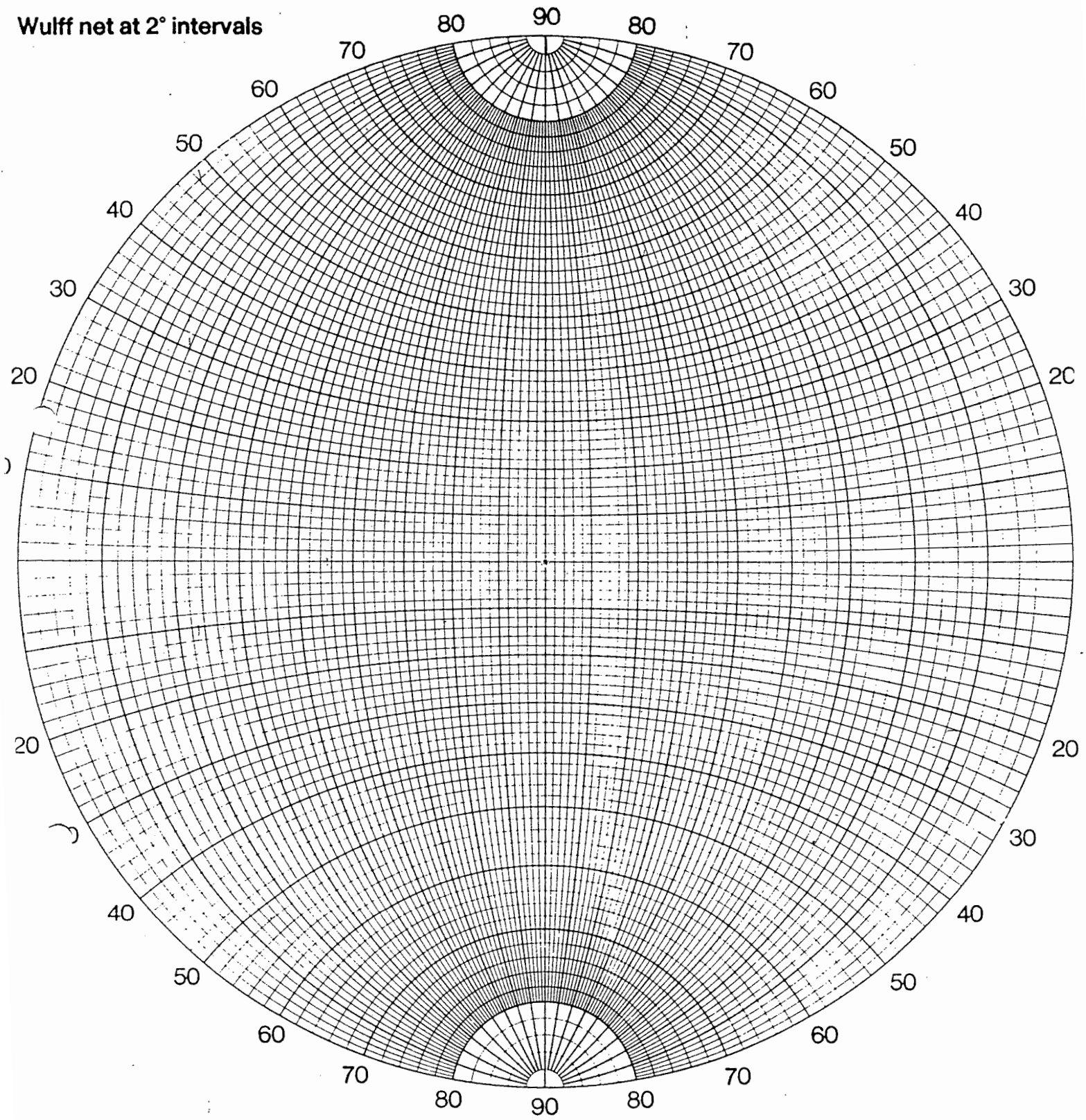
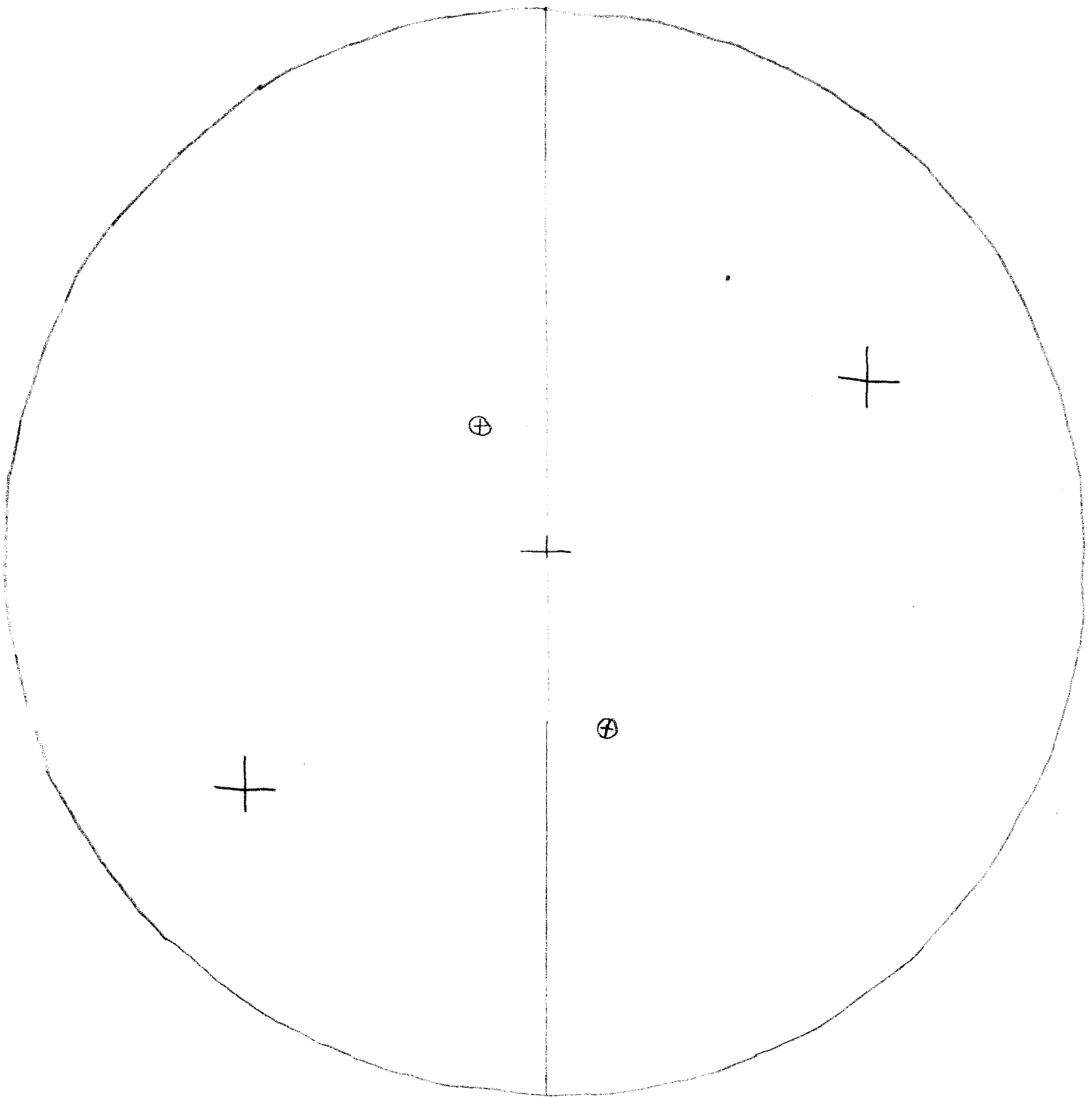


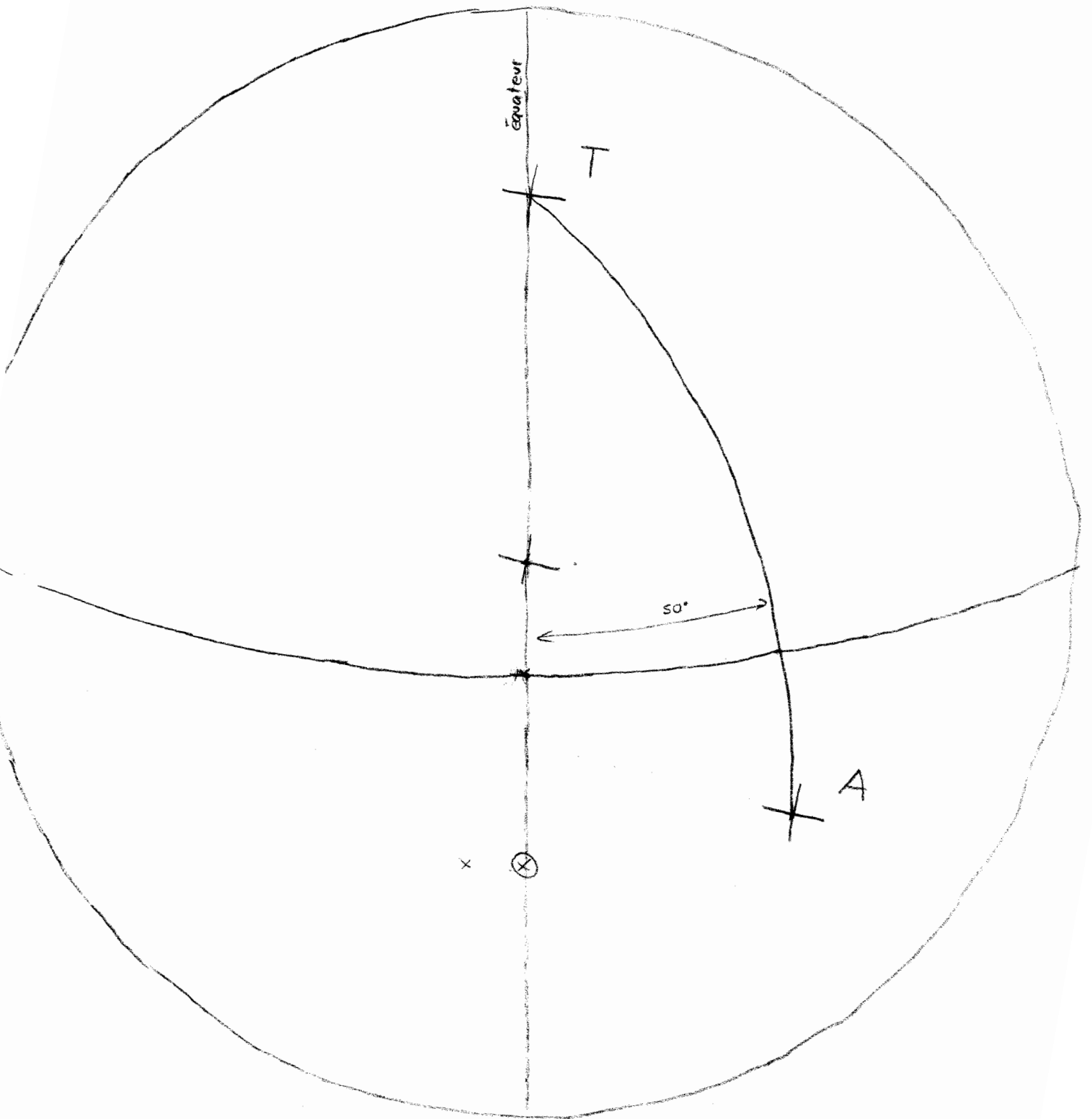
FIGURE 1

Wulff net at 2° intervals

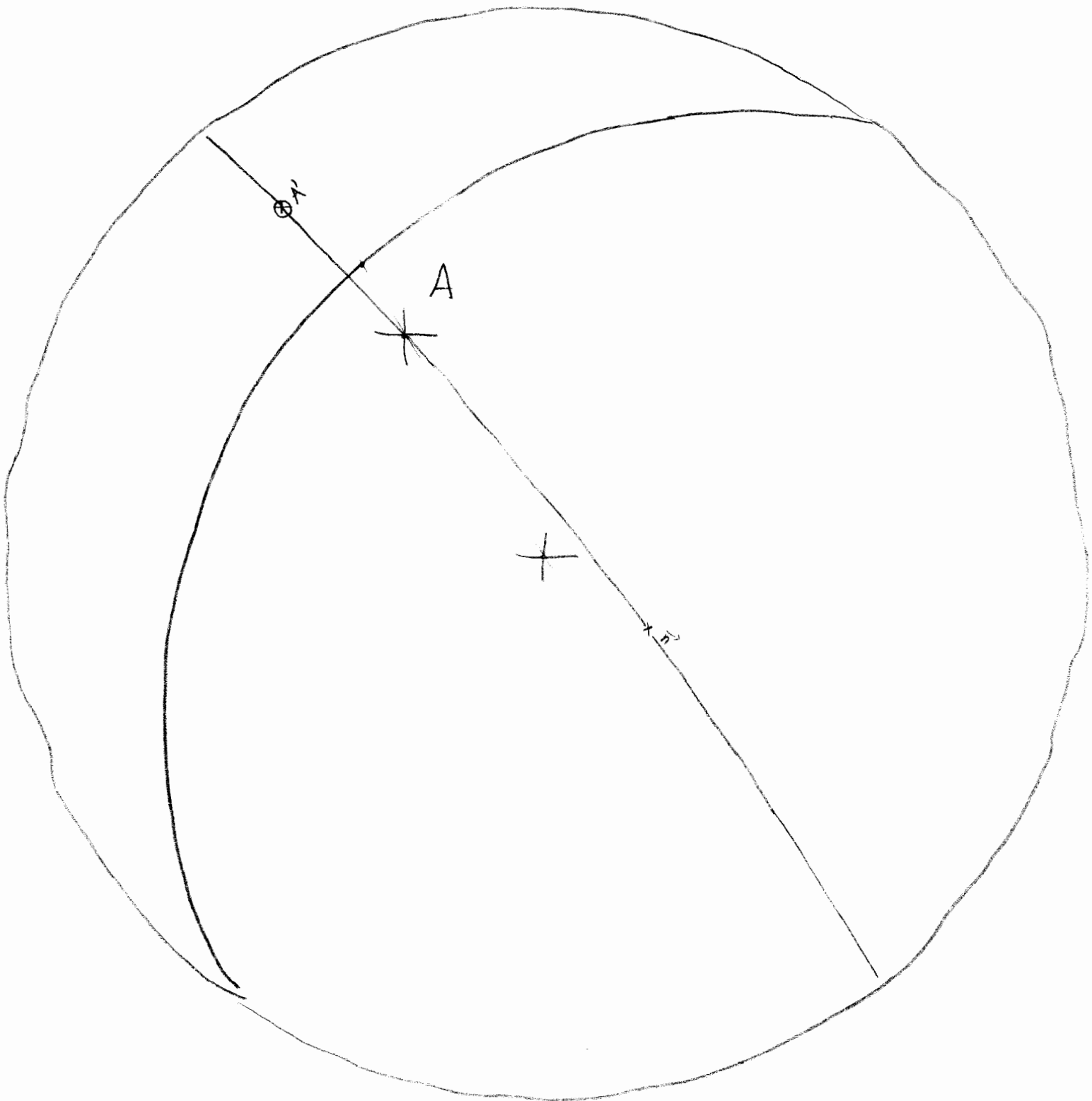


Exercise 2

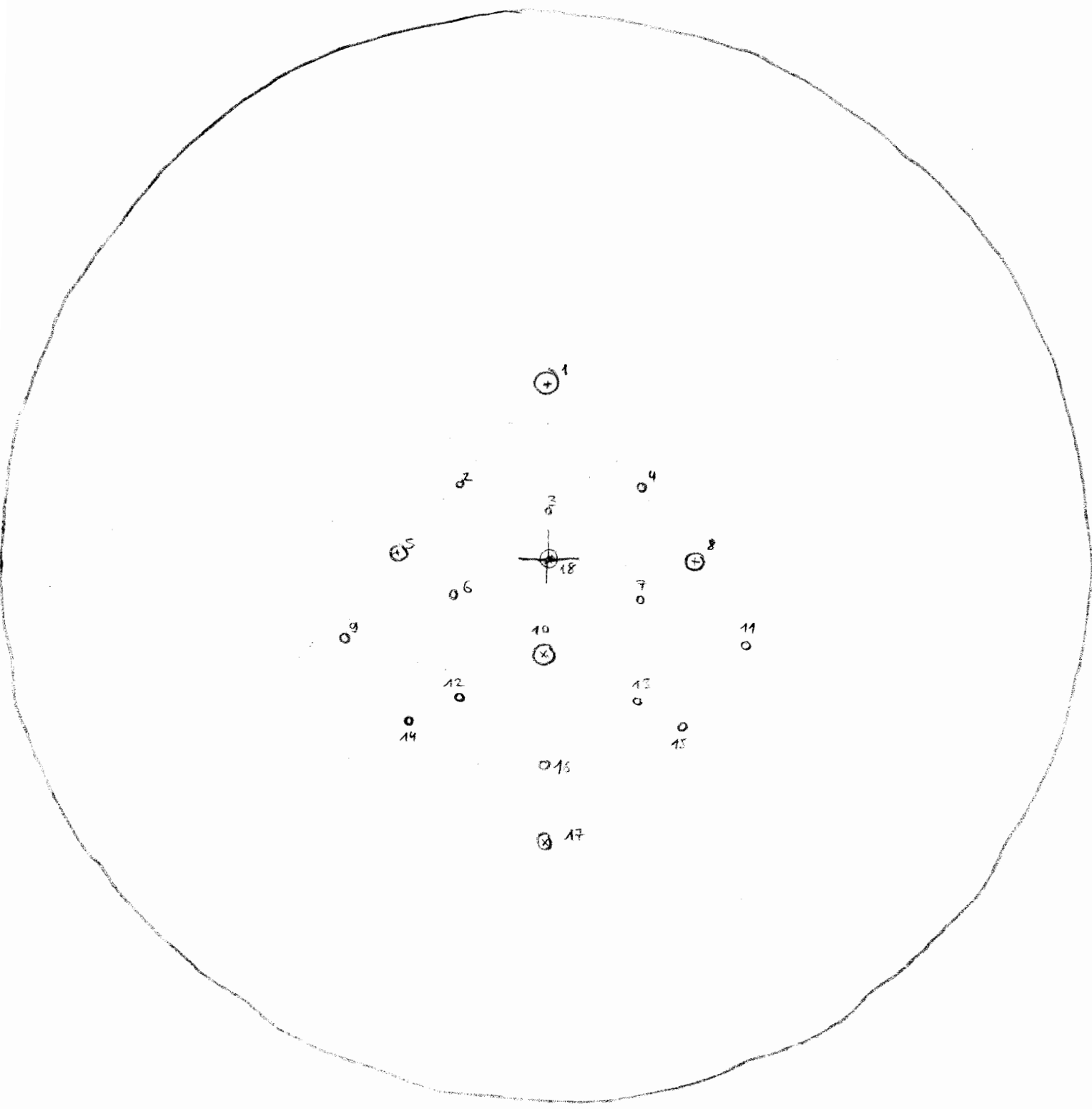




Exercice 4



Exercise 5



Exercice 5

On regarde par rapport à 1 point tous les angles et on regarde si \exists un plan correspondant. Incertitude: ± 1 .

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1		26	28	26	45	47	47	45	64	56	64	66	66	73	73	78	91	36
2	26		19							39					67	59	71	22
3	28	19		19	32	26	26	32	48	30	48	42	42	50	50	51	65	10
4	26		19							39					48	59	71	22
5	45		32							36					68	51	61	30
6	47		26							22					53	38	50	21
7	47		26							22					26	38	50	21
8	45		32							36					32	51	61	30
9	64		48							40					67	44	51	44
10	56	39	30	39	36	22	22	36	40		40	18	18	30	30	21	35	20
11	64		48							40					19	44	51	44
12	66		42							18					43	20	30	34
13	66		42							18					10	20	30	34
14	73		50							30					52	26	32	43
15	73	67	50	48	68	53	26	32	67	30	19	43	10	52		26	32	43
16	78	59	51	59	51	38	38	51	44	21	44	20	20	26	26		14	42
17	91	71	65	71	61	50	50	61	51	35	51	30	30	32	32	14		55
18	36	22	10	22	30	21	21	30	44	20	44	34	34	43	43	42	55	

ECOLE POLYTECHNIQUE FEDERALE DE
LAUSANNE

STRUCTURE DE LA MATIERE CONDENSEE

Série du 6 janvier 1998

1. Dessiner la structure cubique centrée (cc)

- a) Reporter sur un dessin les plans et les directions denses et les exprimer au moyen des indices de Miller.
- b) Indiquer sur le dessin les directions $[001], [1\bar{1}0], [11\bar{2}]$.
- c) Dessiner les plans $(011), (112), (20\bar{3})$.

2. Dessiner la structure cubique à faces centrées (cfc)

- a) Reporter sur un dessin les plans et les directions denses et les exprimer au moyen des indices de Miller.
- b) Pourquoi appelle-t-on les plans denses des plans octaédriques ?
- c) Peut-on construire un tétraèdre avec des plans denses ?

3. Dessiner la structure hexagonale compacte (hc)

Rappel : pour décrire cette structure, on utilise généralement un système de 4 vecteurs comprenant les axes $\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3$ situés dans le plan de base de l'hexagone et formant entre eux des angles de 120° ainsi que l'axe \bar{c} perpendiculaire au plan de base. Les plans de mêmes indices sont ainsi équivalents par symétrie et les directions et plans cristallographiques sont exprimés au moyen de 4 indices de Miller.

Pour les plans : les indices $(hkil)$ satisfont à la condition $h+k=-i$.

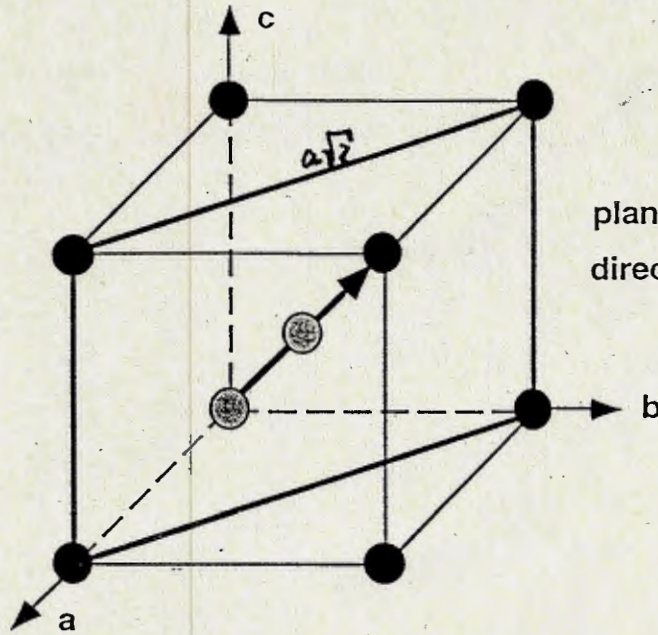
Pour les directions : les indices $\langle uv\bar{t}w \rangle$ satisfont à la condition $u+v=-t$;

- a) Indiquer sur un dessin les directions $[01\bar{1}0], [2\bar{1}\bar{1}0], [\bar{1}2\bar{1}0]$.
- b) Dessiner les plans $(0001), (01\bar{1}0), (10\bar{1}2), (11\bar{2}0)$.

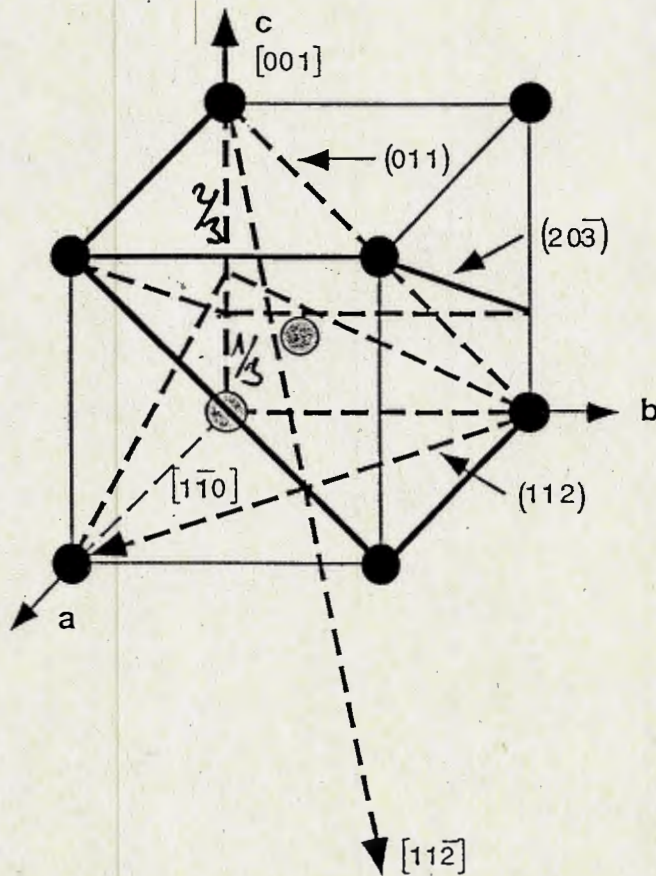
STRUCTURE DE LA MATIERE CONDENSEE

Corrigé de la série du 6 janvier 1998

1. La structure cc

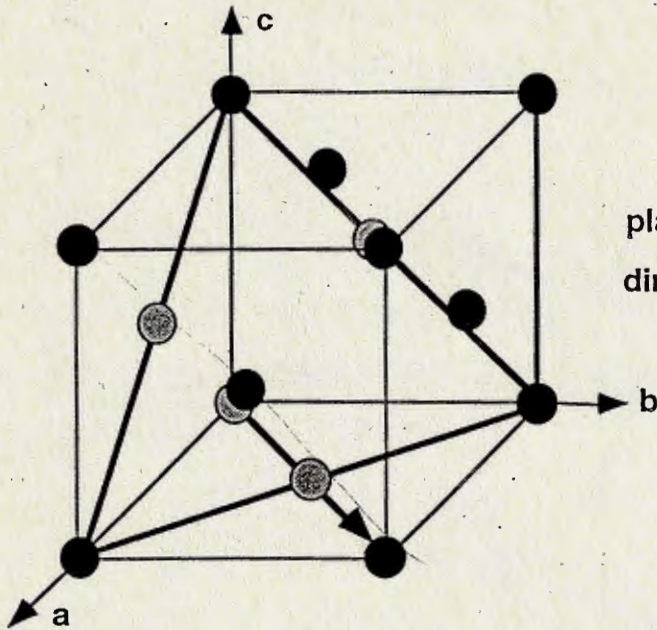


plans denses = $\{110\}$ — familles
directions denses = $\langle 111 \rangle$



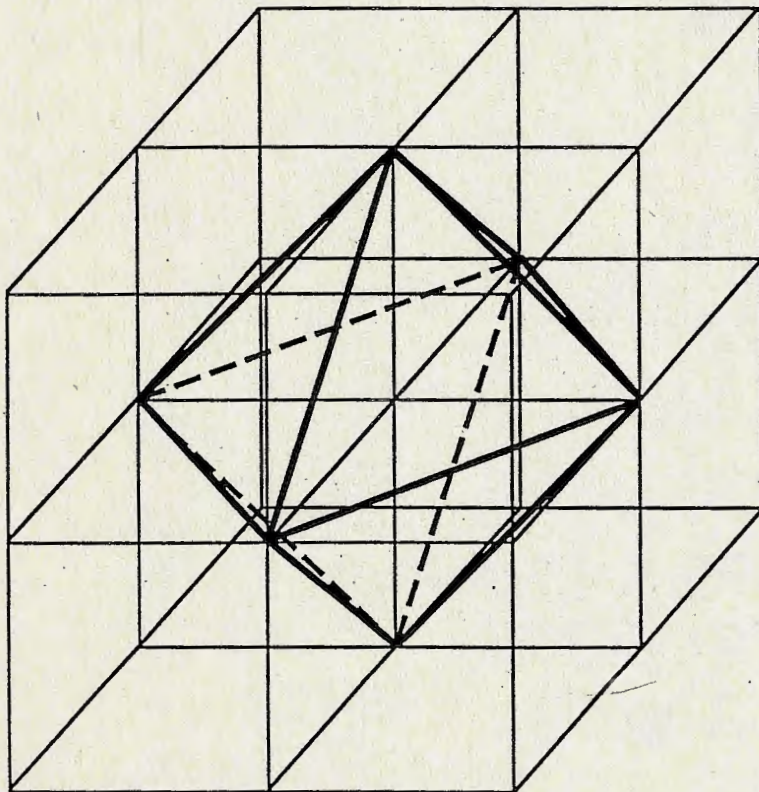
plan dense - plan crist. avec
le maximum d'atomes par
surface

2. La structure cfc

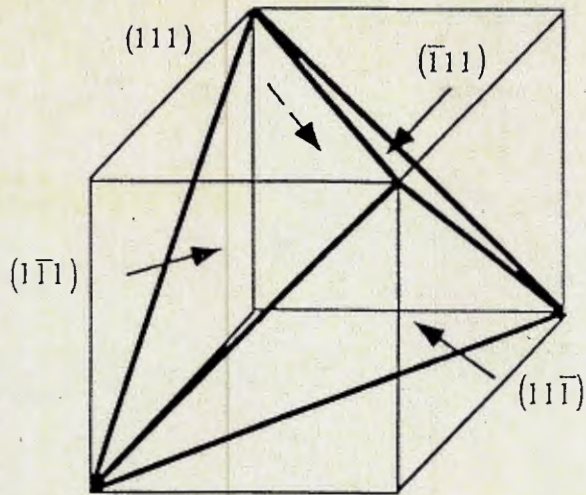


plans denses = $\{111\}$

directions denses = $\langle 110 \rangle$

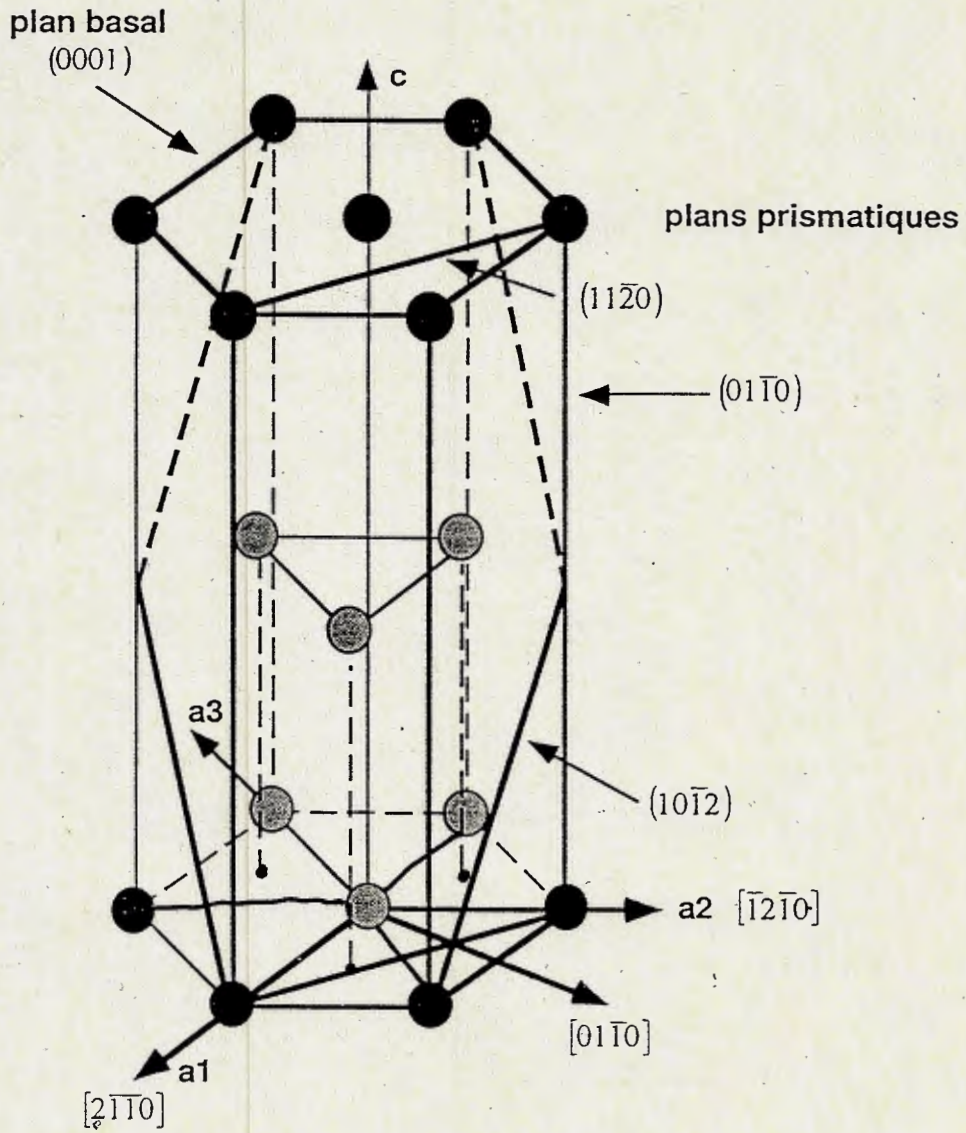


octaèdre formé par
les plans denses



tétraèdre formé par les plans denses

3. La structure hc



ECOLE POLYTECHNIQUE FEDERALE DE
LAUSANNE

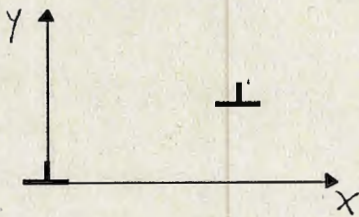
STRUCTURE DE LA MATIERE CONDENSEE

Série du 13 janvier 1998

1) Dans un cristal de magnésium déformé, on observe une trace de glissement de 10^{-4} cm de hauteur. Elle correspond à des dislocations situées sur un seul plan de glissement. Combien de dislocations ont été émises sur ce plan pour créer la marche ($b = 0.32$ nm) ?

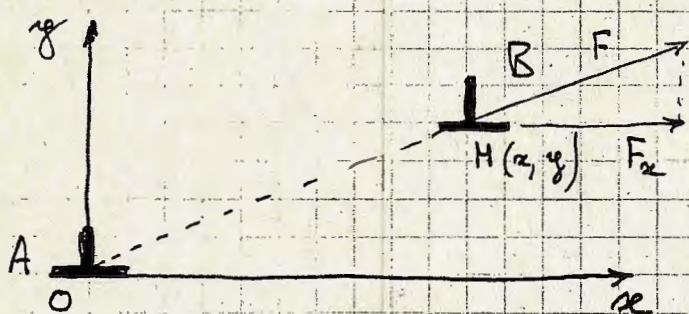
2) Calcul de la force d'interaction entre deux dislocations (coins) parallèles, situées dans des plans de glissement parallèles avec des
a) mêmes vecteurs de Burgers
b) vecteurs de Burgers opposés.

Quelles sont les positions d'équilibre? Stabilité? On suppose que les dislocations glissent facilement.



Exercice n°1: Se reporter au schéma de glissement de la dislocation ci-dessus. Lorsque une telle dislocation traverse tout le cristal, la marche créée sur la surface de sortie est de hauteur b . L'observation montre ici que la marche est de hauteur H . Le nombre de dislocations qui ont glissé est alors:
$$N = \frac{H}{b} = \frac{10^3}{0,32} \sim 3 \cdot 10^3 \text{ dislocations (3 mille)}$$

Exercice n°2:



Les 2 dislocations de même b ici, sont respectivement à l'origine et en $M(x,y)$. A étant fixe, B glisse facilement parallèlement à Ox .

La force d'interaction est portée par AB. C'est sa composante F_x qui nous intéresse pour le glissement. On a vu dans la cours que $F_x = \sigma_{xy} b$ par unité de longueur de

ligne. Pour la dislocation en:
$$\sigma_{xy} = \frac{\mu b x (x^2 - y^2)}{2\pi(1-\nu)(x^2 + y^2)^2} \quad (1) \quad \text{general: } \frac{F}{l} = \sigma$$

C'est la contrainte créée par A qui agit sur B.

Les positions d'équilibre de B autour de A, sont celles pour lesquelles F_x , ou σ_{xy} s'annulent ($x=0$ et $x=y$)

On remarque que σ_{xy} est impaire par rapport à x , cad la courbe représentative est symétrique par rapport à l'origine, on l'étudie pour $x > 0$.

Quand $x \rightarrow 0$, $x^2 = \text{négligé}$:
$$\sigma_{xy} \propto \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{-xy^2}{y^4} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \left(-\frac{x}{y^2} \right) \quad \text{si } x > 0, \sigma_{xy} < 0$$

On voit aussi sur (1) que pour $x > y > 0$, $\sigma_{xy} > 0$.

Lorsque $x \rightarrow +\infty$:
$$\sigma_{xy} \propto \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{1}{x} \quad \text{L'axe } Ox \text{ est asymptote.}$$

La représentation exacte de la fonction est ci-dessus. On vérifie bien que pour y donné, si on coupe la courbe ($-\infty < x < +\infty$) par une droite horizontale σ_{xy} ou $F_x = c$, on a 4 points d'intersection comme le prédit la relation (1) ordonnée

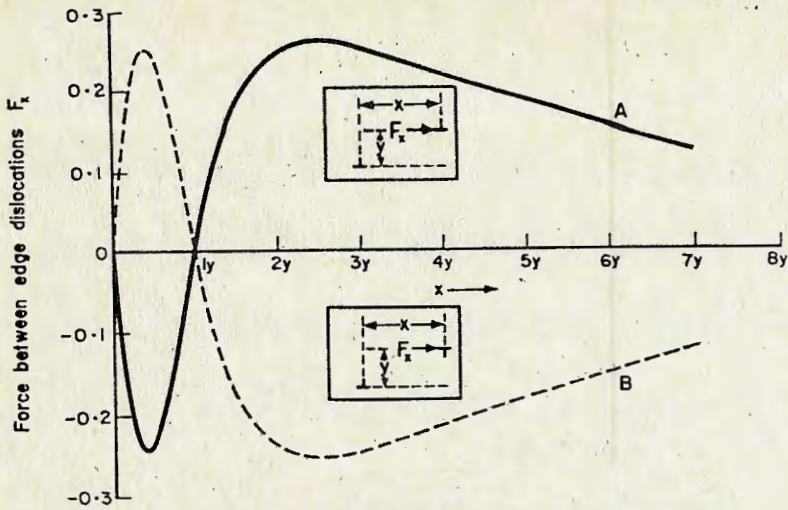


FIG. 4.8. Force between parallel edge dislocations with parallel Burgers vectors from equation (4.23). Unit of force F_x is

$$\frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)y}$$

The full curve A is for like dislocations, and the broken curve B for unlike dislocations. (After COTTRELL (1953) *Dislocations and Plastic Flow in Crystals*, Oxford University Press.)

A +b interagit avec +b

B -b interagit avec +b

par rapport à x (polynôme de degré 4).

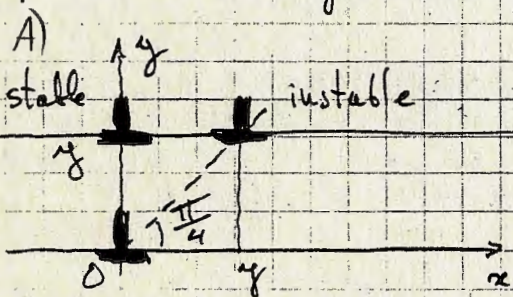
Positions d'équilibre, stabilité:

Elles correspondent, pour $x \geq 0$, à $x=0$ et $x=y$.

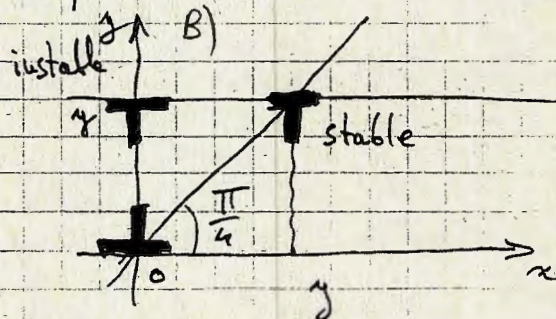
Cas des dislocations analogues (courbe A):

$x=0$, les dislocations sont sur la même verticale. Si on éloigne celle du haut vers $x > 0$, la fig montre que la force est négative (dirigée vers les x négatifs) donc l'équilibre est stable

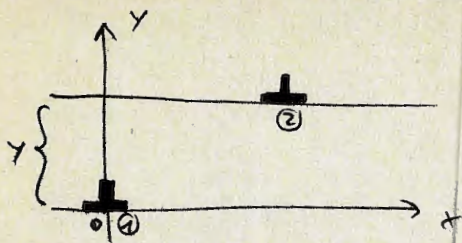
$x=y$. Si on éloigne la dislocation du haut vers la droite ($x > y$) la force est positive donc éloigne encore la dislocation. Equilibre instable.



(Explique la formation de sous-joints de flexion)



(Explique la formation de dipôles)



La dislocation (2) se déplaçant dans le plan \bar{e}_x , alors $B \perp \bar{L}$, donc on a affaire à des disloc. coin
 Dans ce cas, en 1D:

$$F_x = (\sigma_{xy})_1 \cdot b_2 = \frac{\mu b_1 b_2}{2\pi(1-\nu)} \frac{x^2 - y^2}{(x^2 + y^2)^{3/2}} x$$

L'étude se fait comme suit, sans aucune dérivée, en étudiant les signes de F.

i) Mêmes vecteurs de Burgers

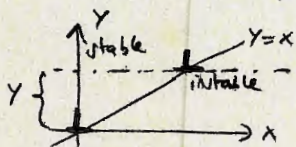
Recherche des points d'équilibre: $F_x = 0$ si $x = \pm y$

De plus, si $x \sim 0$, alors:

$$F_x \sim \frac{\mu b_1 b_2}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(-y^2)}{y^3} = -\frac{\mu b^2 x}{2\pi(1-\nu) y^2}$$

Donc $x=0$ est un point d'équilibre.

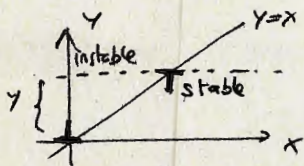
Ques: $\left\{ \begin{array}{l} x=0 \rightarrow F_x=0 ; x=\varepsilon : F_x < 0 \rightarrow \text{stable} \\ x=y \rightarrow \begin{array}{l} x < y \rightarrow F < 0 \\ x > y \rightarrow F > 0 \end{array} \end{array} \right\} \rightarrow \text{instable}$



ii) Vecteurs de Burgers opposés

$$x = \varepsilon > 0 \rightarrow F_x \sim \frac{\mu b^2 x}{2\pi(1-\nu) y^2} > 0 \rightarrow \text{instable}$$

$$x = y \rightarrow \left. \begin{array}{l} x < y \rightarrow F > 0 \\ x > y \rightarrow F < 0 \end{array} \right\} \rightarrow \text{stable}$$



BIBLIOGRAPHIE.

Partie III.

- J. Dieudonné : Calcul infinitésimal. Hermann, Paris (1968).
M.W. Hirsch and S. Smale : Differential equations, dynamical systems and linear algebra. Academic Press, N.Y. (1974).
L. Pontriaguine : Equations différentielles ordinaires. Editions Mir, Moscou (1969).
W. Walter : Gewöhnliche Differentialgleichungen. Springer-Verlag, Berlin (1976).

Partie IV.

- A. Kolmogorov et S. Fomine : Eléments de la théorie des fonctions et de l'analyse fonctionnelle. Editions Mir, Moscou (1974).
H. Lebesgue : Leçons sur les séries trigonométriques. Librairie Scientifique et Technique, Albert Blanchard, Paris (1975, nouveau tirage de la 1^{ère} éd. de 1906, publié par Gauthier-Villars, Paris).
R. Seeley : An introduction to Fourier series and integrals. W.A. Benjamin, Inc., New York (1966).

Partie V.

- D. Gilbarg and N.S. Trudinger : Elliptic partial differential equations of second order. Springer-Verlag, Berlin (2nd ed. 1983).
S. Godounov : Equations de la physique mathématique. Editions Mir, Moscou (1973).

- F. John : Partial differential equations. Springer-Verlag, Berlin (3rd ed. 1978).
L. Schwartz : Méthodes mathématiques pour les sciences physiques. Hermann, Paris (1965).

Références supplémentaires.

- H. Cartan : Théorie élémentaire des fonctions analytiques d'une ou plusieurs variables complexes. Hermann, Paris (1961).
G. Chilov : Analyse mathématique. Fonctions de plusieurs variables réelles. Editions Mir, Moscou (1975).

Deux titres utiles (comme formulaires).

- P.M. Morse and H. Feshbach. Methods of theoretical physics, vols. I, II, McGraw-Hill Book Co., New York (1953).
M.R. Spiegel : Mathematical handbook of formulas and tables. Schaum's outline series. McGraw-Hill Book Co., New York (1968).

Finalement, nous attirons l'attention des lecteurs ambitieux sur les ouvrages exigeants mais très complets de J. Dieudonné, "Eléments d'Analyse" tomes I - IX, Gauthier-Villars, Paris (1962-1982).

ECOLE POLYTECHNIQUE FEDERALE DE
LAUSANNE

STRUCTURE DE LA MATIERE CONDENSEE

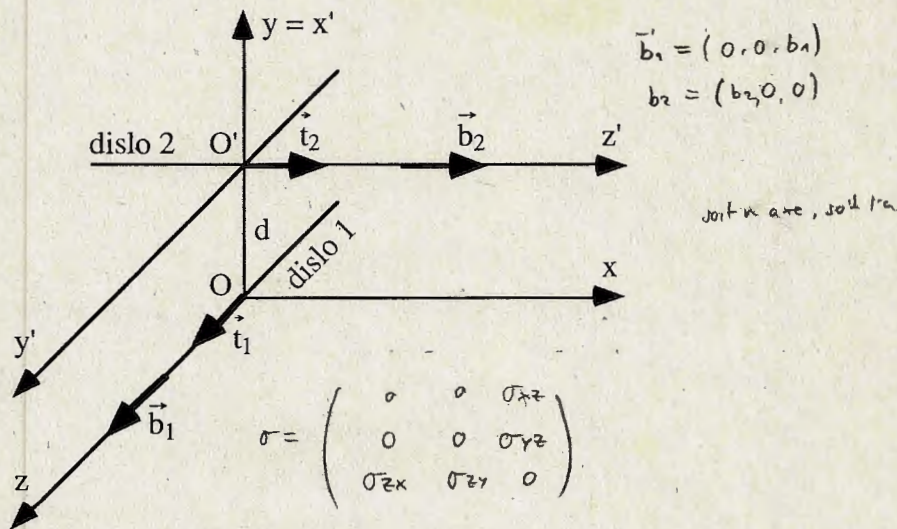
Série du 20 janvier 1998

1. Paires de dislocation

- (a) Trouvez une paire de dislocations équivalente à une rangée de lacunes.
 (b) Trouvez une paire de dislocations équivalente à une rangée d'atomes en insertion (ou interstitiels).

*vachement mal
explique*

2. Calculer la force d'interaction entre deux dislocations **vis** perpendiculaires l'une à l'autre.



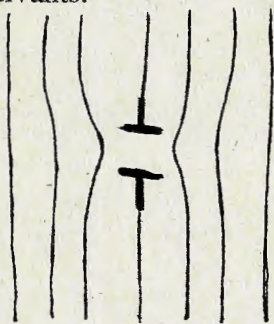
$$F_{1 \rightarrow 2} = (\vec{b}_2 \cdot \sigma_1) \wedge \vec{t}_1$$

ECOLE POLYTECHNIQUE FEDERALE DE
LAUSANNE

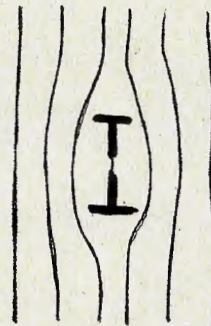
STRUCTURE DE LA MATIERE CONDENSEE

Corrigé de la série du 20 janvier 1998

1. Sur un plan strictement géométrique, on peut imaginer les deux groupes de dislocations suivants:



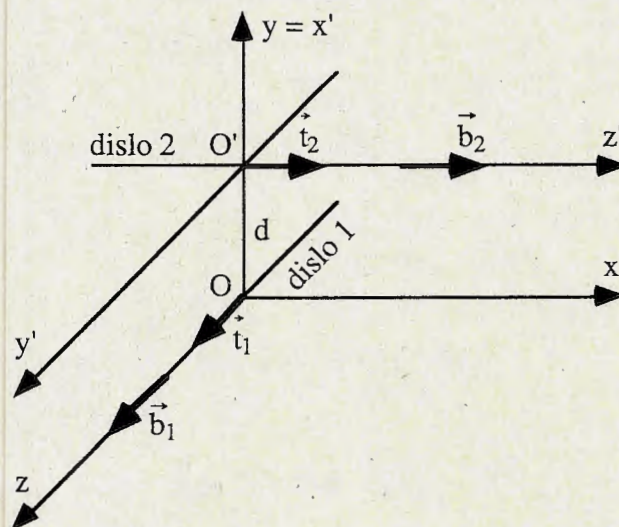
équivalent à une
rangée de lacunes



équivalent à une
rangée interstitielle

Dans les deux cas, les dislocations sont distantes l'une de l'autre d'une rangée atomique. Un ensemble de 2 dislocations s'appelle un dipôle. Cette équivalence est géométrique; les positions occupées par les dislocations ne correspondent pas à un équilibre stable (voir exercice du 13.1.98).

2. Force d'interaction entre deux dislocations vis perpendiculaires l'une à l'autre.



Force exercée par la dislocation 1 sur la dislocation 2 :

$$\vec{F}_{1 \rightarrow 2} = (\vec{b}_2 \cdot \vec{\sigma}_1) \times \vec{t}_2$$

Force de Peach et Koehler
dans le repère O,X,Y,Z

Comme :

$$\vec{b}_1 = (0, 0, b_1)$$

$$\vec{b}_2 = (b_2, 0, 0)$$

alors :

$$\vec{b}_2 \cdot \vec{\sigma}_1 = (b_2 \ 0 \ 0) \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_{13} \\ 0 & 0 & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & 0 \end{pmatrix} = (0 \ 0 \ b_2 \sigma_{13})$$

$$(\vec{b}_2 \cdot \vec{\sigma}_1) \times \vec{t}_2 = (0 \ 0 \ b_2 \sigma_{13}) \times (1 \ 0 \ 0) = (0 \ b_2 \sigma_{13} \ 0)$$

d'où :

$$\vec{F}_{1 \rightarrow 2} = b_2 \sigma_{13} \vec{e}_y$$

Comme :

$$\sigma_{13} = -\frac{\mu b_1}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2}$$

voir cours !

$$\sigma_{13} = -\frac{\mu b_1}{2\pi} \frac{d}{x^2 + d^2}$$

car $y = d$

alors :

$$\vec{F}_{1 \rightarrow 2} = -\frac{\mu b_1 b_2}{2\pi} \frac{d}{x^2 + d^2} \vec{e}_y$$

Force exercée par la dislocation 2 sur la dislocation 1 :

$$\vec{F}_{2 \rightarrow 1} = (\vec{b}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \times \vec{t}_1$$

dans le repère O',X',Y',Z'

Force de Peach et Koehler

Comme :

$$\vec{b}_1 = (0, b_1, 0)$$

$$\vec{b}_2 = (0, 0, b_2)$$

alors :

$$\vec{b}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = (0 \ b_1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_{13} \\ 0 & 0 & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & 0 \end{pmatrix} = (0 \ 0 \ b_1 \sigma_{23})$$

$$(\vec{b}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \times \vec{t}_1 = (0 \ 0 \ b_1 \sigma_{23}) \times (0 \ 1 \ 0) = (-b_1 \sigma_{23} \ 0 \ 0)$$

d'où :

$$\vec{F}_{2 \rightarrow 1} = -b_1 \sigma_{23} \vec{e}_{x'}$$

Comme :

$$\sigma_{23} = \frac{\mu b_2}{2\pi} \frac{x'}{x'^2 + y'^2}$$

voir cours !

$$\sigma_{23} = -\frac{\mu b_2}{2\pi} \frac{d}{d^2 + y'^2}$$

car $x' = -d$

alors :

$$\vec{F}_{2 \rightarrow 1} = \frac{\mu b_1 b_2}{2\pi} \frac{d}{d^2 + y'^2} \vec{e}_x$$

$$\vec{F}_{2 \rightarrow 1} = \frac{\mu b_1 b_2}{2\pi} \frac{d}{d^2 + z^2} \vec{e}_y$$

car $y' = z$ et $x' = y$
OK.

Lorsque $X = 0$ et $Z = 0$: $\vec{F}_{1 \rightarrow 2} = -\vec{F}_{2 \rightarrow 1}$

sur la droite y .

$$\vec{F}_{1 \rightarrow 2} = -\frac{\mu b_1 b_2}{2\pi} \frac{d}{d^2 + x^2} \vec{e}_y$$

$$\vec{F}_{2 \rightarrow 1} = \frac{\mu b_1 b_2}{2\pi} \frac{d}{d^2 + z^2} \vec{e}_y$$

Série du 27 janvier 1998

1. Module de cisaillement apparent

Considérons un cristal contenant une famille de dislocations identiques avec un vecteur de Burgers \bar{b} . On suppose que ces dislocations sont épinglées (par exemple par d'autres dislocations) avec une distance moyenne ℓ entre points d'ancrage. Soit N le nombre de segments épinglés par unité de volume.

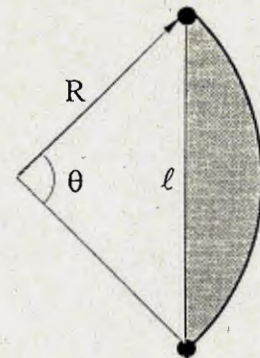
Lorsqu'on applique une faible contrainte σ , les portions de dislocations entre points d'ancrage vont se courber et provoquer une faible déformation $\delta\gamma$ qui va s'ajouter à la déformation élastique normale γ (effet d'anélasticité). De ce fait, le module de cisaillement apparent va être légèrement différent du vrai module de cisaillement (c'est-à-dire sans anélasticité). Nous voulons quantifier cet effet.

- a) Trouvez l'aire A balayée par un segment de dislocation en fonction de ℓ et R , en supposant θ petit, où θ est l'angle de courbure et R le rayon de courbure du segment de dislocation
- b) En introduisant la tension de ligne $\tau \approx \mu b^2/2$, trouvez la relation entre A et σ .
- c) Trouvez la variation de déformation $\delta\gamma$ due à la courbure de ces dislocations, ainsi que la variation relative $\delta\gamma/\gamma$. En tirez la variation relative du module de cisaillement $\delta\mu/\mu$.
- d) Si les segments de dislocations sont ceux d'un réseau de Frank dans une structure c.f.c., on peut montrer que $N\ell^3 \approx 1/3$. Évaluez alors le terme $\delta\mu/\mu$.

(Corrigé) de la série du 27 janvier 1992

1. Module de cisaillement apparent

a) L'aire A balayée par le segment de dislocation (partie hachurée dans la figure ci-contre) est donnée par:



$$A = \frac{1}{2} R^2 \theta - R^2 \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} = \frac{1}{2} R^2 (\theta - \sin \theta)$$

Comme \$\theta\$ est petit, on peut développer le sinus:

$$A \approx \frac{1}{2} R^2 \left(\theta - \theta + \frac{\theta^3}{6} \right) \Rightarrow A \approx \frac{R^2 \theta^3}{12}$$

Or: \$\ell \approx \theta R\$. D'où: $A \approx \frac{R^2 \ell^3}{12 R^3} = \frac{\ell^3}{12 R}$

b) On a: $\tau = \sigma b R \approx \frac{\mu b^2}{2} \Rightarrow R \approx \frac{\mu b^2}{2 \sigma b} = \frac{\mu b}{2 \sigma} \Rightarrow A \approx \frac{\ell^3 2 \sigma}{12 \mu b} = \frac{\ell^3 \sigma}{6 \mu b}$

c) On a: $\delta \gamma = N A b = N \frac{\ell^3 \sigma}{6 \mu b} b = N \frac{\ell^3 \sigma}{6 \mu}$

Or \$\gamma = \sigma/\mu\$; d'où: $\frac{\delta \gamma}{\gamma} \approx \frac{N \ell^3 \sigma \mu}{6 \mu \sigma} = \frac{N \ell^3}{6}$

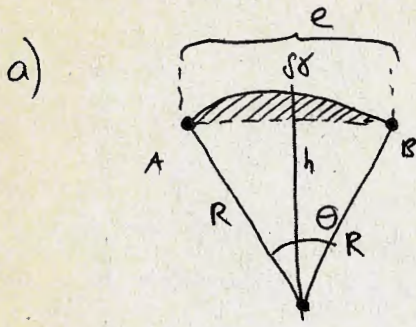
On a: $\frac{\delta \gamma}{\gamma} = - \frac{\delta \mu}{\mu} \Rightarrow \frac{\delta \mu}{\mu} \approx - \frac{N \ell^3}{6}$

d) Avec \$N \ell^3 \approx 1/3\$, on a:

$$\frac{\delta \mu}{\mu} \approx - \frac{1}{18} \approx \underline{\underline{-5.5\%}}$$

Série du 27 janvier 1998 : Module de cisaillement apparent et effet d'anélasticités

Soit: $b, e, N = \text{nb. de segments épinglés par unité de volume}$. Soit la contrainte (faible) σ , la déformation anélastique $\delta\delta$, déformation normale δ .



Aire balayée par un segment en fonction de e et R, θ petit.
Il s'agit simplement d'un peu de géométrie.

$$A = A_c - A_t \quad , \quad A_c : \text{Aire du cercle},$$

$$A_t : \text{Aire du triangle}.$$

Avec:

$$A_c = \frac{1}{2} \theta \cdot R^2$$

$$A_t = \frac{e \cdot h}{2}$$

$$\text{avec: } \begin{cases} \frac{e}{2} = R \cdot \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ h = R \cdot \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{cases}$$

$$\text{donc: } A = \frac{1}{2} \theta R^2 - R^2 \cdot \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \cdot \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

$$\text{On a: } \sin(\alpha) \cdot \cos(\alpha) = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2i} (e^{i\alpha} - e^{-i\alpha}) \cdot (e^{i\alpha} + e^{-i\alpha})$$

$$= \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2i} (e^{2i\alpha} - e^{-2i\alpha})$$

$$= \frac{1}{2} \sin(2\alpha)$$

$$\text{Donc: } A = \frac{1}{2} \theta R^2 - \frac{1}{2} R^2 \sin(\theta) = \frac{1}{2} R^2 (\theta - \sin \theta)$$

Comme θ est très petit, alors m.d.l. donne:

$$A = \frac{1}{2} R^2 \left(\theta - \theta + \frac{\theta^3}{6} \right) = \frac{\theta^3 R^2}{12}$$

On a aussi: $e \approx R\theta$, donc: $\theta = \frac{e}{R}$, et alors:

$$A = \frac{e^3 R^2}{12 R^3} = \frac{e^3}{12 \cdot R}$$

b) Soit la tension de ligne: $\gamma \sim \frac{\mu b^2}{2}$, trouver la relation entre A et σ .

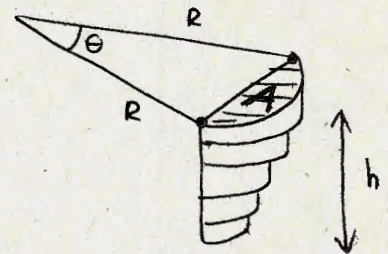
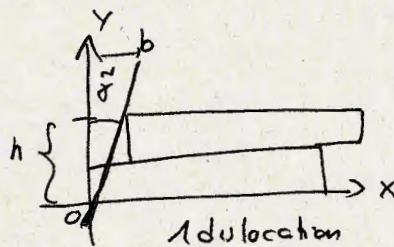
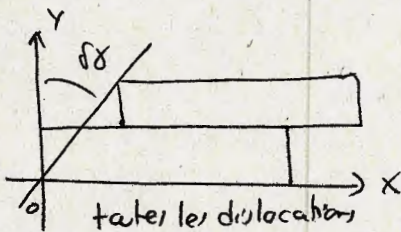
On a: $\gamma \approx \sigma \cdot A$, avec l'anne approximative ici qui vaut $A \sim b \cdot R$, donc:

$$\gamma \sim \sigma \cdot b \cdot R \sim \frac{\mu b^2}{2} \rightarrow R \sim \frac{\mu b}{2\sigma}$$

$$\text{Donc: } A = \frac{e^3 \cdot 2\sigma}{12 \cdot \mu b} = \frac{e^3 \cdot \sigma}{6 \mu b}$$

c) Variation de déformation $\delta\delta$.

On va sommer la contribution de chaque dislocation:



On suppose la contribution de 1 dislocation très faible de sorte que $\text{tg}(\delta\delta) \sim \delta\delta = \frac{b}{h}$.

Le nombre total de dislocations dans tout le volume est: $N \cdot A \cdot h$

Donc la contribution de toutes les dislocations donne:

$$\delta\delta = \frac{b}{h} \cdot N \cdot A \cdot h = b \cdot N \cdot A$$

Avec l'expression qui a été trouvée avant, on a:

$$\delta\delta = b \cdot N \cdot \frac{e^3 \cdot \sigma}{6 \mu b} = \frac{N e^3 \sigma}{6 \mu}$$

Avec la loi de l'élasticité, on a :

$$\sigma = \mu \cdot \gamma \rightarrow \gamma = \frac{\sigma}{\mu}$$

Donc :

$$\boxed{\frac{\delta \sigma}{\sigma} = \frac{Ne^3 \sigma}{6\mu} \frac{\mu}{\sigma} = \frac{Ne^3}{6}}$$

Variation relative du module de cisaillement $\delta\mu/\mu$: Comme on a :

$$\boxed{\sigma = \mu \gamma}$$

Alors :

$$\frac{\delta \sigma}{\sigma} =$$

Alors on veut maintenir la contrainte σ constante pour observer l'effet de l'anélasticité sur μ , par cela $\sigma = \text{cte}$, donc comme $\frac{\delta \sigma}{\sigma} \neq 0$, pour que $\sigma = \text{cte}$, il faut que la variation du module de cisaillement soit exactement opposée, i.e.

$$\frac{\delta \sigma}{\sigma} = - \frac{\delta \mu}{\mu}$$

Donc on obtient :

$$\frac{\delta \mu}{\mu} = - \frac{Ne^3}{6}$$

d) Soit $Ne^3 \sim 1/18$, alors on obtient une variation de module de cisaillement par effet d'anélasticité qui est de :

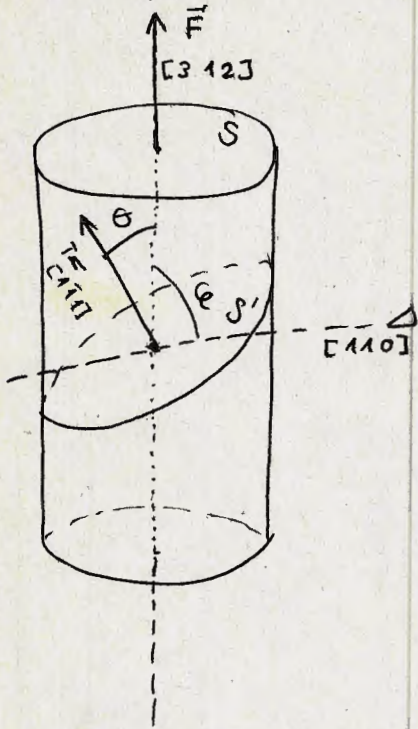
$$\frac{\delta \mu}{\mu} = - \frac{1}{18} \sim - 5.5\%$$

Par tout à fait négligeable.

• Corrigé question 2 fait J.L. Martin

Énoncé : en vue d'un essai de déformation, une éprouvette cylindrique monocristalline a son axe de traction parallèle à la direction $[3\ 1\ 2]$. Le glissement se produit dans le plan $(1\ \bar{1}\ 1)$, le long de la direction $[1\ 1\ 0]$ et est initié par une contrainte appliquée de 2 MPa. Calculer la contrainte de cisaillement critique.

On a schématiquement : on applique F , et on veut connaître la contrainte selon Δ . On a :



$$\begin{cases} F' = F \cdot \cos \varphi \\ S' = \frac{S}{\cos \theta} \end{cases}$$

donc la contrainte selon Δ vaut :

$$\sigma' = \frac{F'}{S'} = \frac{F \cdot \cos \varphi \cdot \cos \theta}{S} = \sigma \cdot \underbrace{\cos \varphi \cdot \cos \theta}_{\text{facteur de Schmid}}$$

On peut calculer $\cos \varphi$ et $\cos \theta$ avec les relations élémentaires

$$\|\vec{a}\| \cdot \|\vec{b}\| \cdot \cos \theta = \vec{a} \cdot \vec{b}$$

donc :

$$\begin{cases} \cos \theta = \frac{[3\ 1\ 2] \cdot [1\ \bar{1}\ 1]}{\|(\frac{3}{2})\| \cdot \|(\frac{1}{1})\|} = \frac{4}{\sqrt{14} \cdot \sqrt{3}} \\ \cos \varphi = \frac{[3\ 1\ 2] \cdot [1\ 1\ 0]}{\|(\frac{3}{2})\| \cdot \|(\frac{1}{0})\|} = \frac{4}{\sqrt{14} \cdot \sqrt{2}} \end{cases}$$

donc la contrainte effective le long de Δ est :

$$\sigma' = \frac{16}{14 \cdot \sqrt{6}} \cdot \sigma = \frac{8}{7\sqrt{6}} \cdot \sigma$$

$$\Rightarrow \sigma = \frac{7 \cdot \sqrt{6}}{8} \cdot \sigma'$$

App. num. : si on sait que il y a glissement par une contrainte σ' de 2 MPa, alors il faut exercer selon $[3\ 1\ 2]$ une contrainte de :

$$\sigma = \frac{7}{4} \sqrt{6} \text{ MPa} \sim 4,3 \text{ MPa}$$

Démonstration.

Nous donnons la démonstration, seulement pour le cas où φ est, en plus, de classe C^1 . Posons $F(x) = \int_a^x f$; l'intégration par partie donne

$$\int_a^b f(x) \varphi(x) dx = F(b)\varphi(b) - \int_a^b F(x)\varphi'(x) dx.$$

Comme $\varphi' \geq 0$, on a que

$$m \int_a^b \varphi'(x) dx \leq \int_a^b F(x)\varphi'(x) dx \leq M \int_a^b \varphi'(x) dx$$

où $m = \inf_x F(x)$, $M = \sup_x F(x)$, $x \in [a, b]$; on en déduit qu'il existe μ entre m et M t.q.

$$\int_a^b F(x)\varphi'(x) dx = \mu \int_a^b \varphi'(x) dx.$$

Comme F est continue, il existe ξ , $a < \xi < b$, t.q. $\mu = F(\xi)$ et on aura, pour ce ξ ,

$$\int_a^b F(x)\varphi'(x) dx = F(\xi) \int_a^b \varphi'(x) dx$$

(ce que l'on appelle le premier théorème de la moyenne). On a donc

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)\varphi(x) dx &= F(b)\varphi(b) - F(\xi)\{\varphi(b)-\varphi(a)\} \\ &= \varphi(a)F(b) + \{\varphi(b)-\varphi(a)\}\{F(b)-F(\xi)\} \\ &= \varphi(b)v \end{aligned}$$

où v est un nombre entre $F(b) = \int_a^b f$ et $F(b)-F(\xi) = \int_\xi^b f$ (car une combinaison convexe de deux nombres réels donne un nombre réel entre ces deux derniers); comme $x \mapsto \int_x^b f$ est continue, il existe un c , $a < c < \xi$, t.q. $v = \int_c^b f$ d'où le résultat.

Q.E.D.

Remarque. Une variante importante du lemme 2 est la suivante : si $\varphi : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ est une fonction décroissante, continue et ≥ 0 et $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ est continue alors il existe un c , $a < c < b$, t.q.

$$\int_a^b f(x)\varphi(x) dx = \varphi(a) \int_a^c f(x) dx.$$

En fait, dans ces énoncés, il suffit de prendre f intégrable; on peut, aussi, éliminer l'hypothèse de continuité sur φ et supposer seulement que $\varphi(b-) = \varphi(b)$, $\varphi(a+) = \varphi(a)$.

Notons une application de la variante donnée du lemme 2 (que nous appellerons aussi "second théorème de la moyenne") dont nous aurons besoin : si $0 < a < b$,

$$\left| \int_a^b \frac{\sin x}{x} dx \right| \leq \frac{2}{a}$$

En effet, selon ce qui précède, il existe c , $a < c < b$, t.q.

$$\int_a^b \frac{\sin x}{x} dx = \frac{1}{a} \int_a^c \sin x dx ;$$

aussi, $\left| \int_a^c \sin x dx \right| = |\cos c - \cos a| \leq 2$ ce qui prouve notre

EPFL - UNIL

STRUCTURE DE LA MATIERE CONDENSEE

ETUDIANTS EN PHYSIQUE (2ème année)

TRAVAIL ECRIT

4 Février 1997

NOM CORRIGÉ

Instructions: Les questions posées sont, dans l'ensemble, faciles ou assez faciles. Nous vous indiquons l'ordre de grandeur de la longueur de la réponse. Faites des schémas pour clarifier les réponses. Ne rien écrire dans la marge. Utiliser le verso des feuilles si vous n'avez pas assez de place. On a indiqué le nombre de points sur 20 pour chaque question. Les calculatrices ne sont pas autorisées.

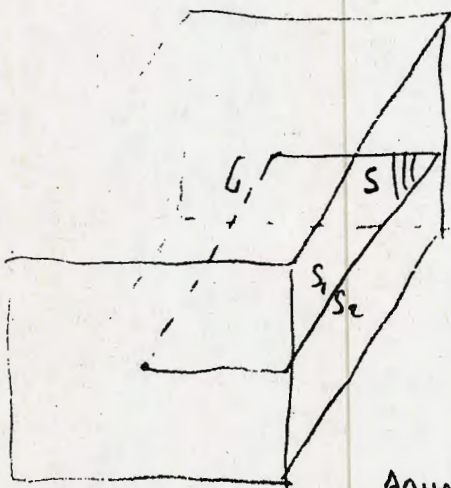
Durée: 1h45. Bon courage!

Question 1:

Méthode de Volterra. Réalisation d'une dislocation coin dans un solide homogène et isotrope. (Prendre un parallélépipède la ligne de dislocation étant parallèle à une arête.

Réponse:

3 points



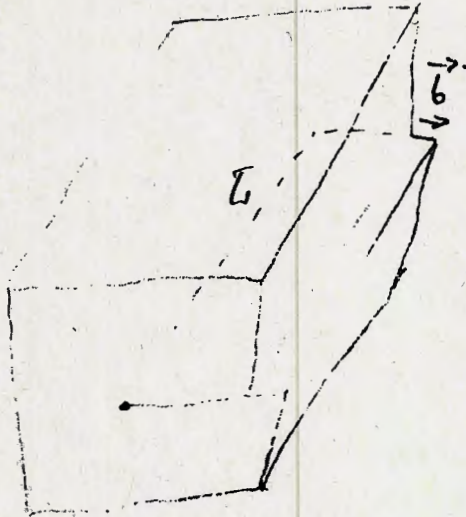
1) On materialise la ligne L
2) On incise le bloc jusqu'à L
le long d'un plan qui s'appuie sur
 L (surface de coupe S). On introduit
ainsi 2 lèvres S_1 et S_2

3) on translata S_1 par rapport à S_2
sans déformer les lèvres, d'un vecteur \vec{b}
perpendiculaire à L

4) éventuellement, on ajoute ou enlève de la matière entre S_1 et S_2
de manière à ce qu'il n'y ait pas de vide ou d'excédent.

5) on recolle en supprimant les efforts nécessaires.

Le résultat est :



$$\frac{8}{\sqrt{6}} \quad \frac{4}{8} \sqrt{6} \quad \frac{7}{4} \sqrt{6}$$

Question 2:

En vue d'un essai de déformation, une éprouvette cylindrique monocristalline a son axe de traction parallèle à la direction [312]. Le glissement se produit dans le plan (111), le long de la direction [110] et est initié pour une contrainte appliquée de 2MPa. Calculer la contrainte de cisaillement critique.

Réponse:



La force selon la direction de glissement est:
 $F' = F \cos \varphi$ et la contrainte de cisaillement

$$\frac{F'}{S'} = \frac{F \cos \varphi}{S / \cos \theta} = \tau_c \frac{\cos \varphi \cos \theta}{\text{fact. de Schmid}}$$

$$\cos \varphi = \frac{[312] \cdot [110]}{\sqrt{14} \sqrt{2}} = \frac{4}{\sqrt{14} \sqrt{2}}$$

$$\cos \theta = \frac{[312] \cdot [1\bar{1}1]}{\sqrt{14} \sqrt{3}} = \frac{4}{\sqrt{14} \sqrt{3}}$$

$$\tau_c = 2 \cdot \frac{16}{14 \sqrt{6}}$$

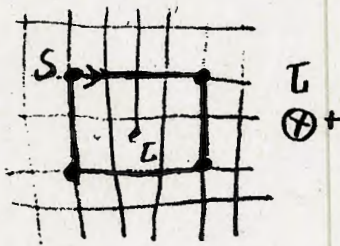
5 points

Question 3:

Soit un cristal cubique, contenant une ligne de dislocation coin. Définir le circuit de Burgers. Comment trouve-t-on le vecteur de Burgers en grandeur et en signe (faire un schéma à 2 dimensions, perpendiculaire à la ligne de dislocation).

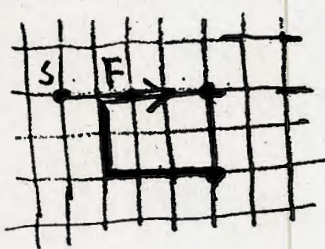
Réponse:

3 points



On oriente la ligne L . Dans le cristal déformé, on trace un circuit rectangulaire autour de L , orienté par la règle de la normale d'Amperé et fermé

Dans un cristal parfait de même maille, partant de S , on parcourt dans le même sens un circuit comprenant le même nombre de mailles, sur chaque portion, que le précédent.



$$\vec{b} = \vec{FS}$$

Convention FS AH

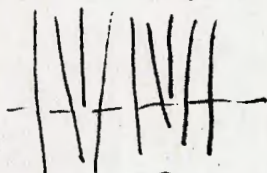
Question 4:

Expliquer avec des arguments qualitatifs et semi quantitatifs quelles sont les forces d'interaction entre deux dislocations coins, parallèles, situées sur le même plan de glissement. Examiner les deux cas possibles.

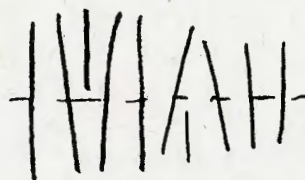
Réponse:

4 points

Deux cas possibles



a) même signe



b) signes opposés

argument qualitatif: en essaye de rapprocher les \perp .

En a) les zones en compression vont se repousser

En b) la zone en compression va attirer la zone en traction

de l'autre dislocation. Elles vont s'attirer pour reformer le cristal parfait.

Argument semi quantitatif. On considère les énergies par unité de longueur:

- Dislocations éloignées: énergie de 2 coins = 2 fois l'énergie d'une coin (on néglige l'énergie d'interaction)

$$\frac{2\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \ln\left(\frac{R}{r_0}\right) \quad (1)$$

- Dislocations rapprochées: a) $\perp\perp \sim \perp$ l'énergie est

$$\frac{\mu(2b)^2}{4\pi(1-\nu)} \ln\frac{R}{r_0} \text{ qui est 2 fois plus grand que (1) donc } \underline{\text{répulsion}}$$

b) $\perp\top$ $b_{equiv} \sim 0$ Énergie nulle attraction

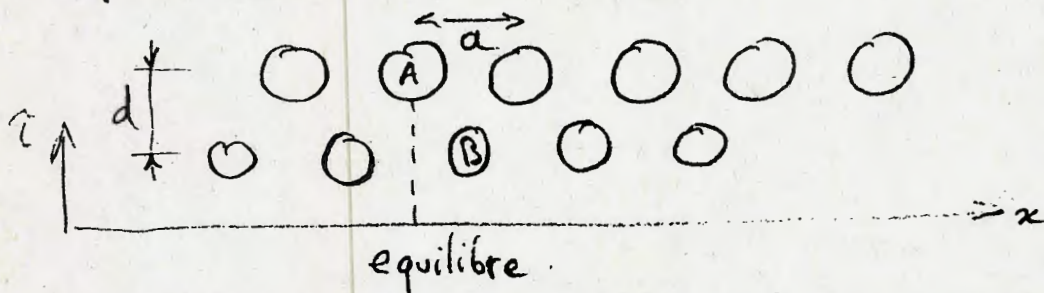
Question 5:

Décrivez la méthode de Frenkel pour estimer la résistance théorique au cisaillement, dans un monocristal. Comment se compare-t-elle aux valeurs expérimentales. Que doit on en conclure.

Réponse:

5 points

2 plans cristallins l'un sur l'autre



On estime la force pour translater horizontalement tout le plan A au dessus de B (dans la direction x)

Si A est déplacé à droite de x, l'angle de cisaillement est $\frac{x}{d}$, la contrainte de cisaillement correspondante

$$(1) \tau = \mu \frac{x}{d} \quad \mu \text{ (module de cisaillement) } \begin{matrix} \text{cf cours sur} \\ \text{le solide élastique} \end{matrix}$$

μ/d est la pente à l'origine de la fonction $\tau(x)$.

on propose la forme suivante pour $\tau(x)$

$$\tau(x) = \left(\frac{\mu a}{2\pi d} \right) \sin(2\pi x/a)$$

en effet cette fonction est périodique \rightarrow Si x augmente de a , $2\pi x/a$ augmente de 2π et τ reprend la même valeur qu'en x , ce que l'on attend

De plus, si $x \sim 0$ $\tau \sim \frac{\mu a}{2\pi d} \frac{2\pi x}{a} = \frac{\mu x}{d}$

conforme avec (1)

Le glissement global du plan A sur le plan B aura lieu si la contrainte de cisaillement = la contrainte maximale (A à la verticale de B).

$$\tau_{\max} = \frac{\mu a}{2\pi d}$$

Dans le cristal $a \sim d$ $\tau_{\max} \sim \mu/6$

Les valeurs expérimentales sont au moins 50 fois plus faibles. D'où la nécessité d'avoir un glissement de dislocations qui peut se faire sous des contraintes bcp + faibles