

EXAMEN

Exercice 01 : (04 pt)

1. Décrire, par un schéma, un diffractomètre automatique de poudre en géométrie Bragg-Brentano.
2. Décrire un diffractogramme de poudre, Intensité diffractée = $f(2\theta)$.
3. Définir les deux entités utilisées pour décrire l'élargissement d'un pic ; FWHM et β .

Exercice 02 : (16 pt)

Le fluorure de calcium de formule CaF_2 est un composé inorganique présent dans la nature sous la forme de fluorine (appelée aussi fluorite). C'est la principale source mondiale en fluor. Sa structure cristalline est cubique où chaque atome de calcium est adjacent à huit atomes de fluor, et chaque atome de fluor à quatre atomes de calcium. Son diagramme de diffraction de rayons X de poudre est enregistré dans le domaine angulaire $20^\circ < 2\theta < 95^\circ$ avec les conditions :

- Pas de balayage en 2θ est égal $0,02^\circ$.
- Temps de comptage par pas est égal 0,5 seconde.
- Longueur d'onde de la radiation utilisée est celle de Cuivre $\lambda_{\text{K}\alpha} = 1.5418 \text{ \AA}$.

Raie	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
2θ (°)	28,30	32,80	47,04	55,82	58,52	68,74	75,92	78,26	87,46	94,32
Intensité (%)	92	< 01	100	33	01	10	09	01	17	07

1. Calculer le temps nécessaire pour enregistrer ce diffractogramme.
2. Indexer les raies, c'est-à-dire attribuer à chaque raie les indices h, k et l correspondants.
3. Déduire le mode de réseau de Bravais.
4. Calculer la valeur du paramètre de maille " a ".
5. Quelle est la raie (hkl) du diffractogramme correspondant à l'angle de Bragg maximum ?
6. Calculer la masse volumique ρ en g.cm^{-3} .
7. Dessiner la maille avec le modèle éclaté en *perspective* et en *projection* sur le plan XOY.
8. Calculer le facteur de structure F_{hkl} .
9. Justifier l'intensité très faibles de certaines raies de diffraction.

Données :

- Les coordonnées réduites des ions dans la maille : Ca^{2+} : (0, 0, 0) et F^- : $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$; $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$
- Les numéros atomiques Z : Ca = 20 et F = 9.
- $\mathcal{M}_{\text{CaF}_2} = 78 \text{ g.mol}^{-1}$ et $\mathcal{N}_A = 6,023 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$.