

TD n°1 : RESEAU DIRECT - INDICES DE MILLER - MULTIPLICITE – VOLUME

RAPPEL : RESEAU – RESEAU DE BRAVAIS

Un réseau définit un ensemble de points (ou de nœuds) régulièrement répartis dans l'espace (ou le plan, ou sur une droite). À trois dimensions, un réseau de Bravais représente l'ensemble des nœuds dont le rayon-vecteur est de la forme :

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

où les n_i sont des entiers et les \vec{a}_i des vecteurs linéairement indépendants.

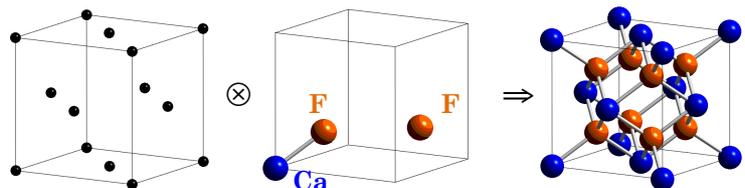
Un réseau de Bravais est infini dans toutes les directions et est tel que de chaque nœud, on voit exactement le même paysage que de tous les autres. On peut aussi définir des réseaux de Bravais à 1 et 2 dimensions. Les vecteurs \vec{a}_i sont appelés vecteurs de base et à l'ensemble des vecteurs \vec{R} , on peut associer l'ensemble des translations du réseau $T(\vec{R})$: toute translation du réseau relie deux points du réseau. La distinction des réseaux de Bravais repose sur leur propriétés de symétries. À 2 dimensions, il existe 5 réseaux de Bravais :

carré $a_1 = a_2$ $\gamma = \pi/2$	hexagonal $a_1 = a_2$ $\gamma = 2\pi/3$	rectangulaire $a_1 \neq a_2$ $\gamma = \pi/2$	rectangulaire centré $a_1 \neq a_2$ $\gamma = \pi/2$	oblique $a_1 \neq a_2$ γ quelconque

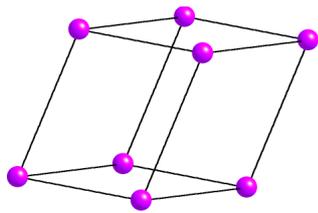
À 3 dimensions, il existe 14 réseaux de Bravais (voir page suivante). Comme pour les réseaux 2D, on notera l'existence de réseaux primitifs (un nœud par maille) et de réseaux associés à des mailles multiples (2, 3 nœuds par maille).

Le réseau de Bravais est une construction purement géométrique. Tous les cristaux réels sont basés sur de tels réseaux (aux défauts près !) et peuvent être décrits en précisant le motif situé aux nœuds du réseau. Par exemple, la structure de la fluorite CaF_2 est basée sur un réseau cubique (toutes) faces centrées avec pour motif :

- un atome de Ca en $(0, 0, 0)$
- un atome de F en $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$
- un atome de F en $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$



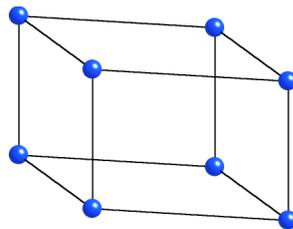
Les 14 réseaux de Bravais tri-dimensionnels :



Triclinique aP

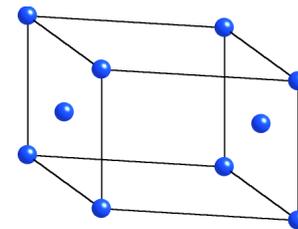
$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma$$



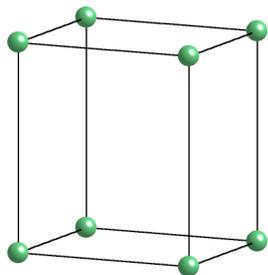
Monoclinique mP

$$a \neq b \neq c$$

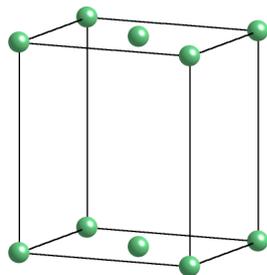


Monoclinique mC
faces C centrées

$$\alpha = \gamma = \pi/2, \beta > \pi/2$$

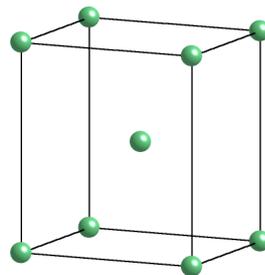


Orthorhombique oP



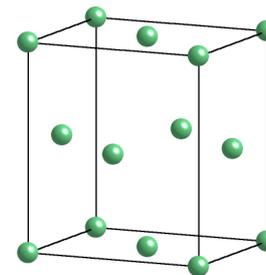
Orthorhombique oC
faces C centrées

$$a \neq b \neq c$$

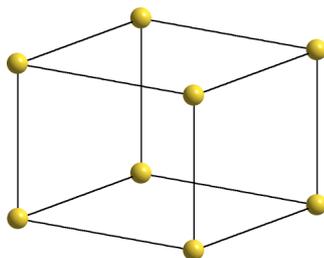


Orthorhombique oI
centré

$$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$$

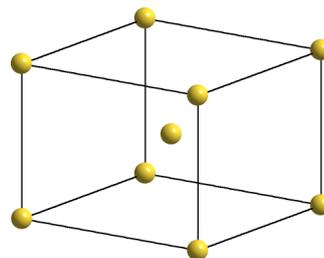


Orthorhombique oF
toutes faces centrées



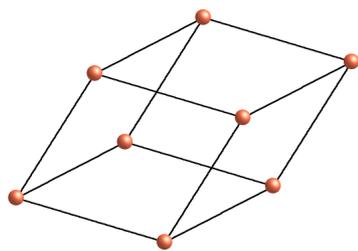
Tétragonal tP

$$a = b \neq c$$



Tétragonal tI
centré

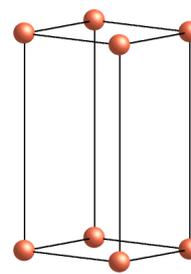
$$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$$



Trigonal hR

$$a = b = c$$

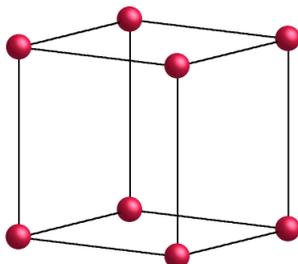
$$\alpha = \beta = \gamma \neq \pi/2$$



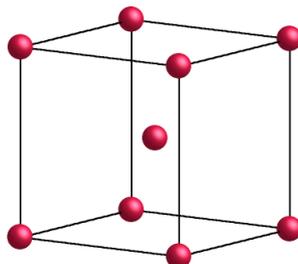
Hexagonal hP

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \pi/2, \gamma = 2\pi/3$$



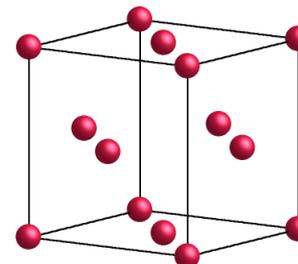
Cubique cP



Cubique cI
centré

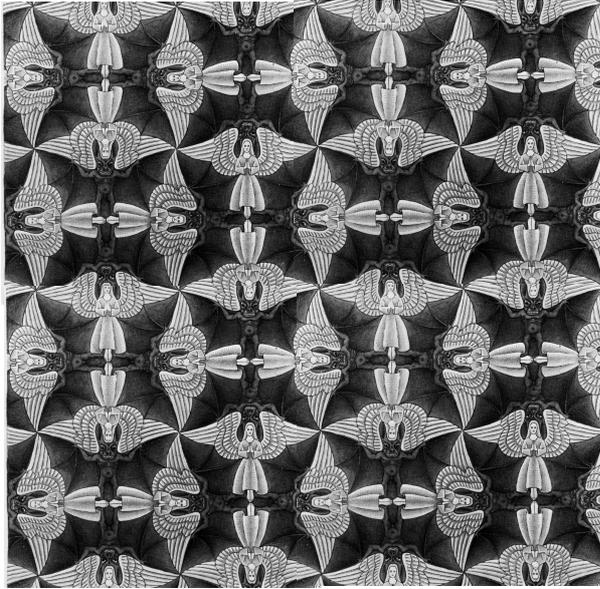
$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$$

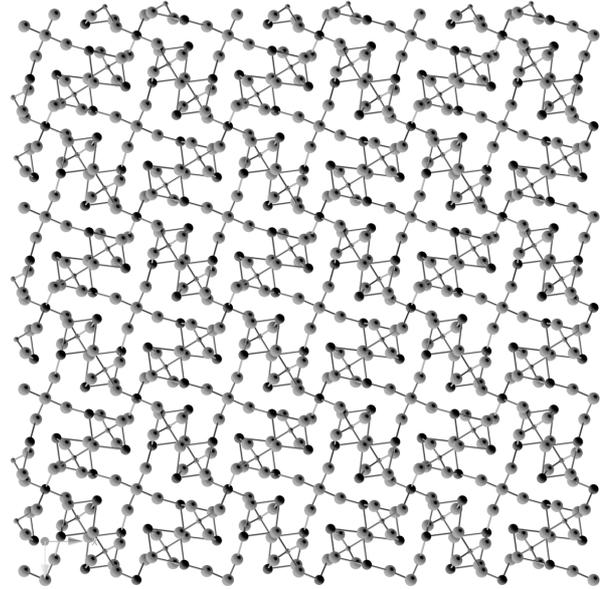


Cubique cF
toutes faces centrées

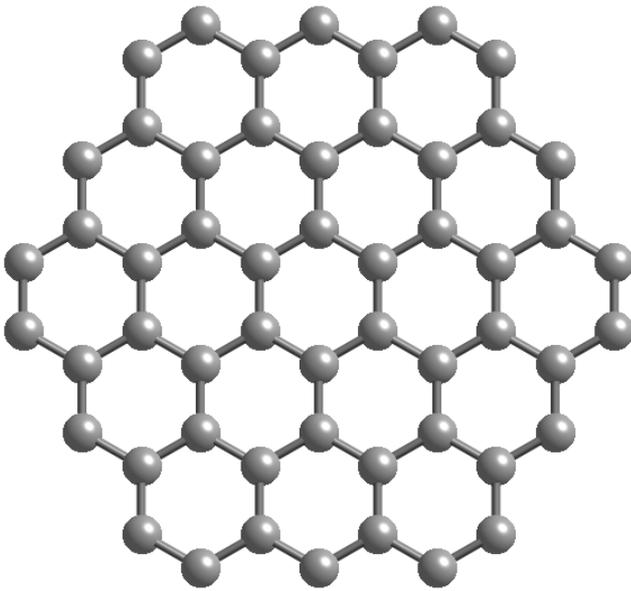
1. RESEAUX BIDIMENSIONNELS



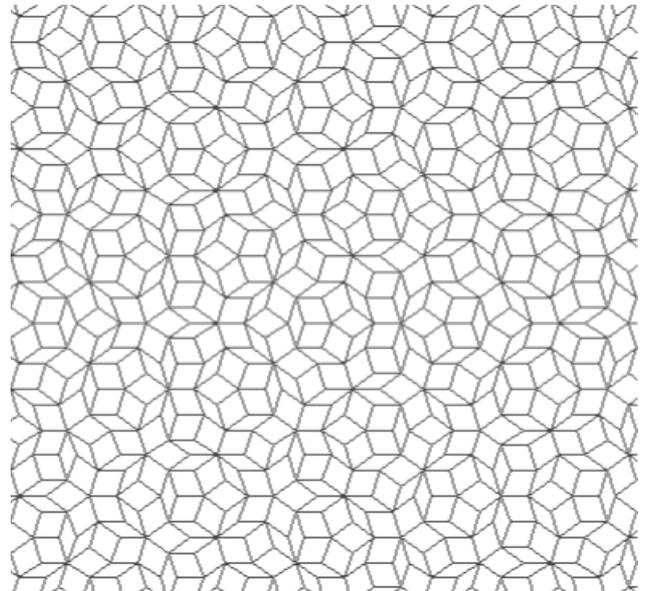
(a) d'après M.C. Escher



(b) $Pb_5Al_3F_{19}$



(c) graphène



(d) pavage de Penrose

- Pour chacune des figures ci-contre, déterminer une maille élémentaire.
- Pour la figure (c), déterminer le motif (nature des atomes, position dans la maille)

2. RANGEES - INDICES DE MILLER - PLANS EN ZONE

Définition : 2 nœuds du réseau définissent une **rangée** du réseau.

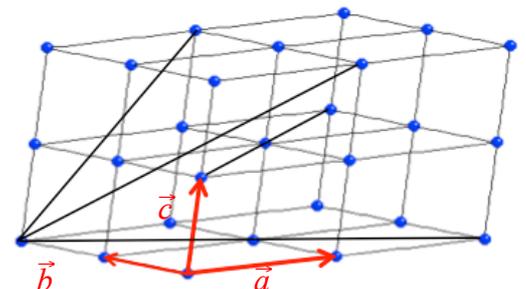
À 3 dimensions, une rangée est définie par :

$$\vec{n}_{uvw} = [u \ v \ w] = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

\vec{a} , \vec{b} et \vec{c} sont les vecteurs de base du réseau

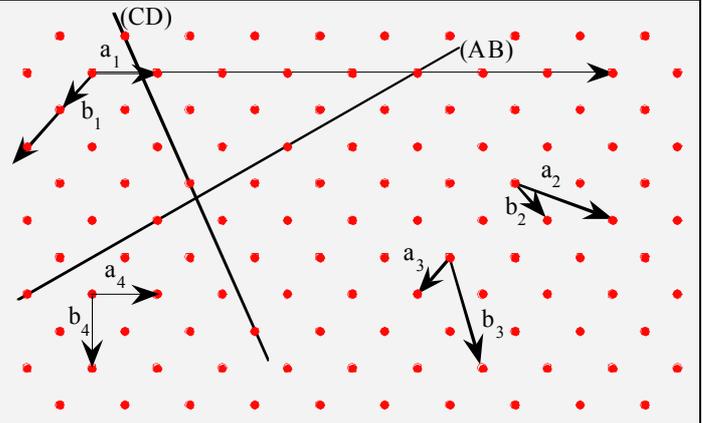
Une rangée ou direction cristallographique est définie par les plus petits entiers possibles :

$$[-9 \ 3 \ 6] \rightarrow [-3 \ 1 \ 2] = [\bar{3} \ 1 \ 2] \quad \text{noté "3 barre" 1 2}$$



2.1 réseau bidimensionnel

- Dans le repère $(\vec{a}_1; \vec{b}_1)$, déterminer les indices $[uv]$ des rangées (AB) et (CD) .
- Le résultat dépend-il du choix de l'origine?
- Déterminer la multiplicité des mailles définies par les couples de vecteurs $(\vec{a}_i; \vec{b}_i)$.
- Quelles sont celles qui peuvent être qualifiées de maille élémentaire?
- Proposer d'autres repères $(\vec{a}; \vec{b})$ correspondant à des mailles élémentaires.



2.2 Réseau tridimensionnel

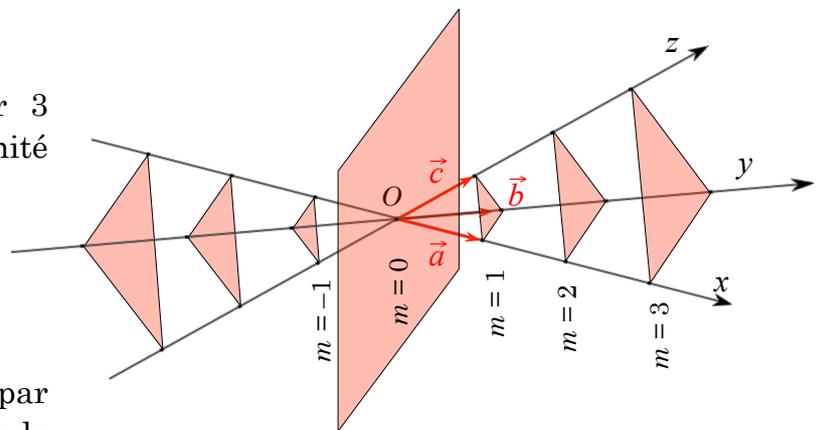
On considère un plan passant par 3 nœuds (et donc passant par une infinité de nœuds du réseau).

Ce plan a pour équation :

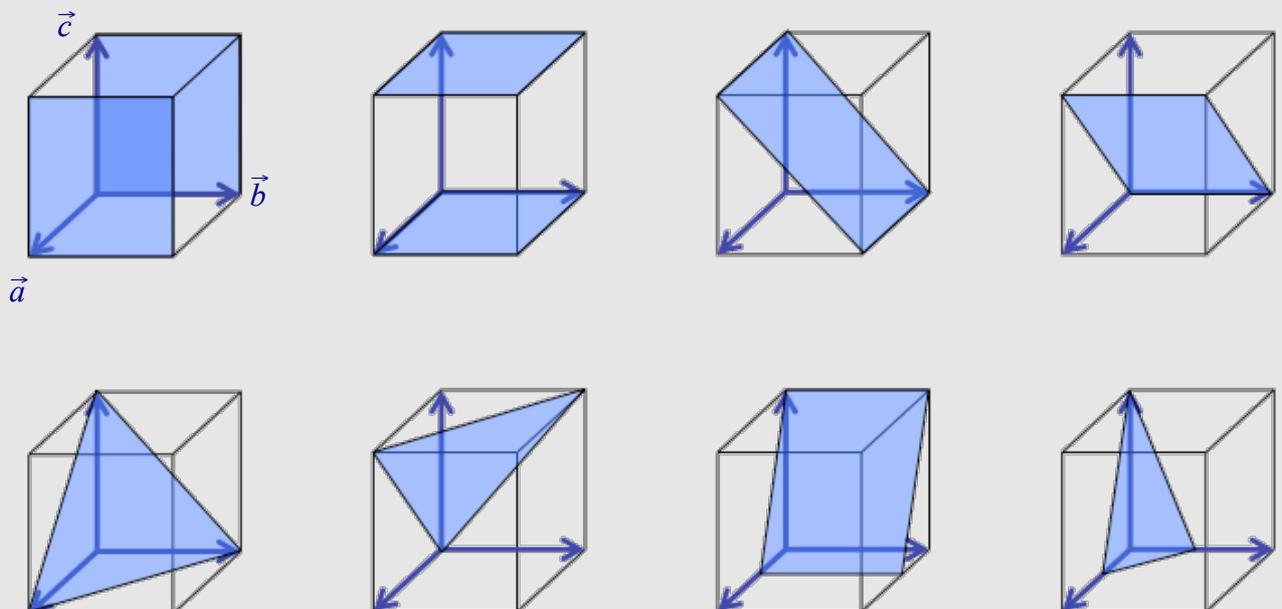
$$hx + ky + lz = m$$

Pour $m = 0$, il s'agit du plan passant par l'origine. Pour $m = 1$, il s'agit du plan le plus proche de l'origine.

Ce plan intercepte respectivement les axes (O, \vec{a}) , (O, \vec{b}) et (O, \vec{c}) en : $1/h$, $1/k$ et $1/l$. Les indices h , k et l sont appelés indices de Miller et définissent ainsi une famille de plans parallèles entre eux : la famille de plans (hkl) .



- Déterminer les indices de Miller des familles de plans suivants :



Soit un réseau cubique primitif (simple) de paramètre a .

- Quelle est la multiplicité (nombre de nœuds) de la maille ?
- Représenter les plans d'indices de Miller (110), $(\bar{2}10)$, (132), ainsi que les rangées [110], $[\bar{2}10]$ et [132].
Que remarquez-vous ? Est-ce vrai pour les autres systèmes cristallins ?
- Les rangées $[3\bar{2}1]$, [311] et [351] sont-elles coplanaires ?
Si oui, donner les indices de Miller (hkl) du plan contenant ces trois rangées.
- Les plans $(21\bar{1})$, (120) et $(30\bar{2})$ sont-ils en zone (ont-ils un axe commun) ?
Si oui, quel est l'axe commun ?
- Calculer le volume de la maille construite sur les rangées $[1\bar{2}1]$, $[1\bar{1}0]$ et [101].
En déduire sa multiplicité.

3. CARACTERISTIQUES DES STRUCTURES CRISTALLINES SIMPLES

La plupart des composés purs cristallisent dans les structures cubiques réseaux I ou F ou bien encore dans la structure hexagonale compacte. Par exemple, les éléments tels que Cu, Ag, Fe- γ , Pb, Ni etc. cristallisent dans la structure cubique réseau F alors que Ba, Cr, Cs, Fe- α , Mo, Ta, W cristallisent dans la structure cubique réseau I . Ces structures présentent en fait les empilements d'atomes parmi les plus compacts possibles. Nous étudierons dans un premier temps les structures relatives aux réseaux cubiques P , I et F .

- Donner les positions atomiques permettant de définir parfaitement chacune des 3 structures.
- Pour chaque type de réseau (P, I ou F), on déterminera :
 - le nombre de premiers et de seconds voisins;
 - la distance entre premiers et seconds voisins;
 - la densité des rangées [100], [110] et [111];
 - la densité des plans (100), (110) et (111);
 - la compacité (ou taux de remplissage) de la structure, celle-ci étant définie comme le rapport entre le volume occupé par les atomes (considérés dans un modèle de sphères dures) et le volume de la maille.

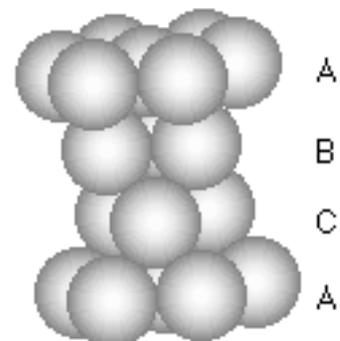
Remarque : le paramètre de maille sera pris égal à a .

- Conclusions ?

4. RESEAU HEXAGONAL COMPACT

La structure du réseau cubique F peut être décrite comme un empilement selon les axes de type [111] de couches de type (111) identiques mais décalées. On dit alors que l'empilement est ...ABCABC... dans la structure c.f.c.. Cet empilement est le plus compact possible.

Cependant, il existe une autre possibilité d'empilement qui conduit au même taux de remplissage que celui de la structure c.f.c. mais dans ce cas, la structure obtenue présente alors une symétrie hexagonale. Cette structure peut être décrite comme un empilement ...ABABAB... et elle est appelée structure hexagonale compacte (notée en anglais c.p.h. close packed hexagonal)



- Représenter la structure et donner le nombre d'atomes par maille.
- Proposer des positions atomiques permettant de définir parfaitement la structure.
- Calculer le rapport c/a de la structure hexagonale compacte

Dans le cas des structures hexagonales compactes réelles (Be, Sc, Mg, Te, Co, Zn, Y, Zr, Tc, Ru, Gd, Tb, Py, Ho, Er, Tm, Lu, Hf, Re, Os, Tl), le rapport c/a pourra être légèrement différent du rapport théorique; cela dépend de la forme du nuage électronique des atomes constituant la maille. Dans le cas de Mg, $c/a \approx 1,623$, on peut considérer les atomes de Mg comme légèrement "aplatis"; au contraire pour Zn, $c/a \approx 1,86$, on considère néanmoins cette structure comme hexagonale compacte.