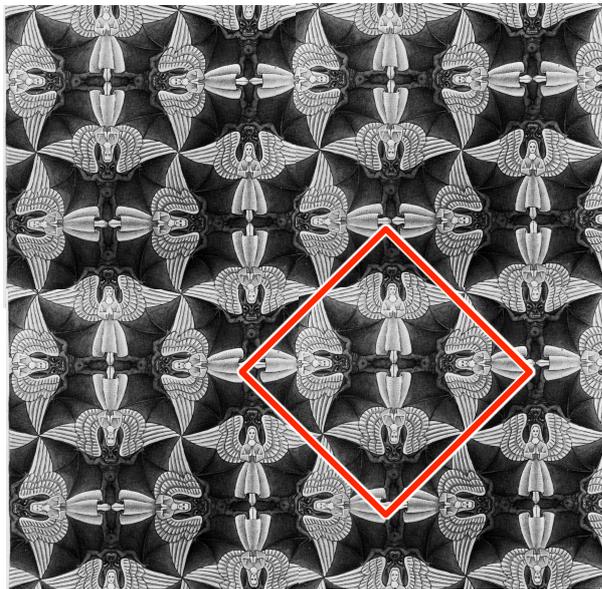
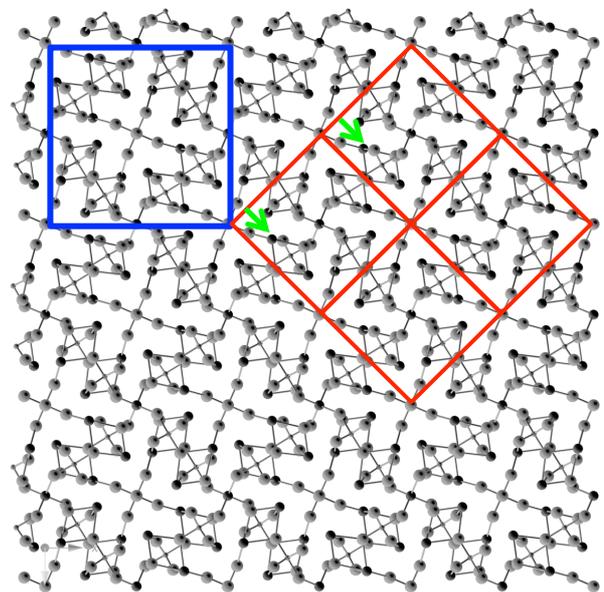


1. RESEAUX BIDIMENSIONNELS

- Pour chacune des figures ci-contre, déterminer une maille élémentaire.

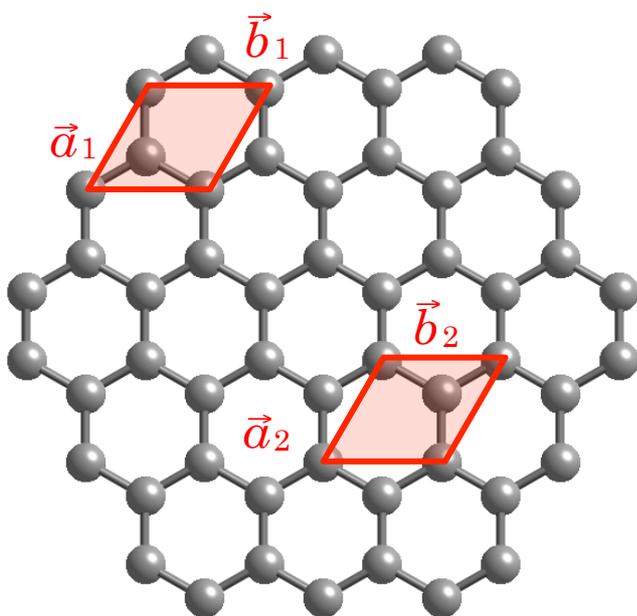


(a) d'après M.C. Escher

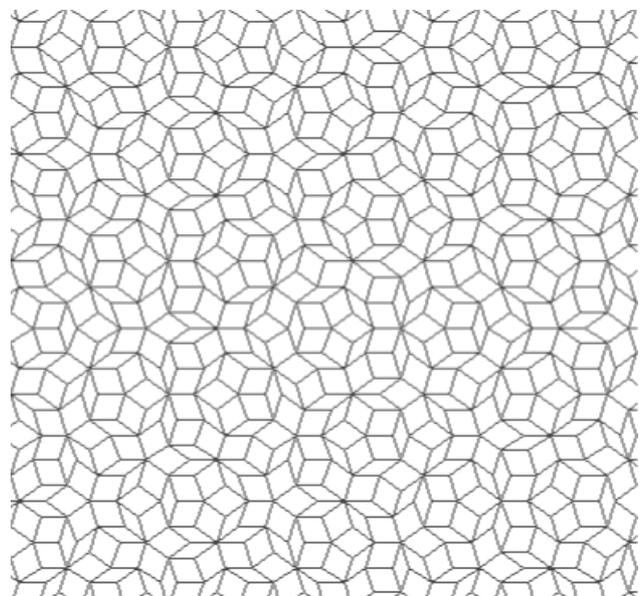


(b) $Pb_5Al_3F_{19}$

le choix de la maille "rouge" n'est pas correct car les détails structuraux repérés par les flèches vertes sont distincts d'une maille à l'autre



(c) graphène



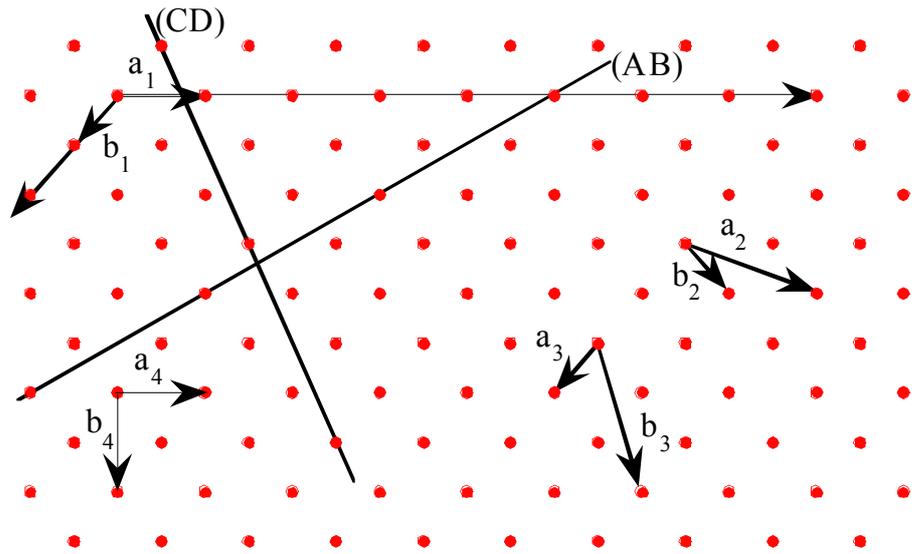
(d) pavage de Penrose

Pour la figure (c), plusieurs choix sont possibles pour déterminer le motif (nature des atomes, position dans la maille) :

- Choix #1 : 0,0 2/3, 1/3
- Choix #2 : 0,0 1/3, 2/3

2. RANGEES - INDICES DE MILLER - PLANS EN ZONE

2.1 réseau bidimensionnel



- il s'agit de retrouver les vecteurs directeurs des droites (AB) et (CD) .

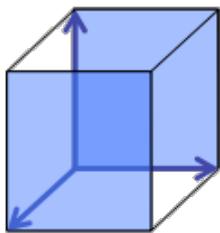
$(AB) : [uv] = [2\bar{1}]$ ou $[\bar{2}1]$; $(CD) : [uv] = [\bar{4}3]$ ou $[4\bar{3}]$
ne dépend pas du choix de l'origine

- $(\vec{a}_1; \vec{b}_1) : m = 1$; $(\vec{a}_2; \vec{b}_2) : m = 1$; $(\vec{a}_3; \vec{b}_3) : m = 2$; $(\vec{a}_4; \vec{b}_4) : m = 2$

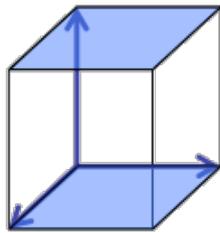
- mailles élémentaires : celles formées par $(\vec{a}_1; \vec{b}_1)$ et $(\vec{a}_2; \vec{b}_2)$.

2.2 Réseau tridimensionnel

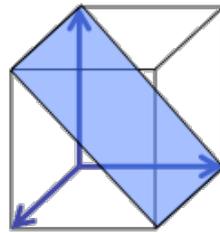
- Déterminer les indices de Miller des familles de plans suivants :



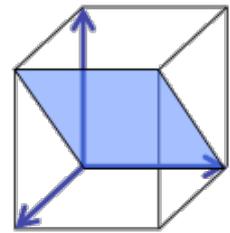
(100)



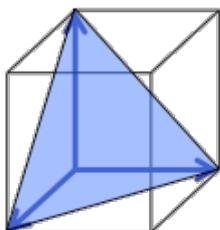
(001)



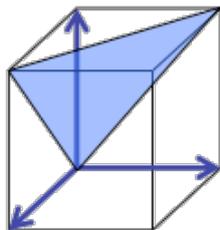
(011)



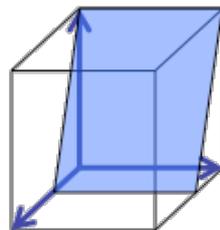
$(\bar{1}01)$



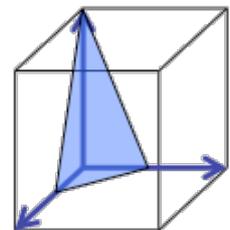
(111)



$(11\bar{1})$



(201)



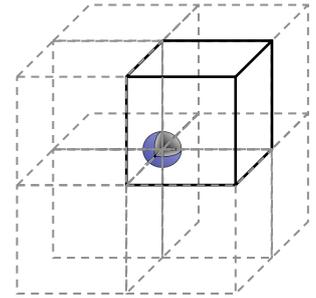
(321)

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

- Quelle est la multiplicité (nombre de nœuds) de la maille ?

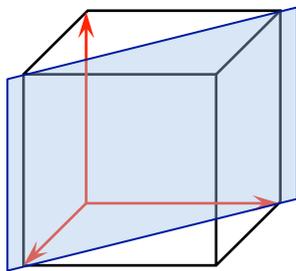
- Comme il est précisé qu'il s'agit d'une maille primitive ou simple, on peut en conclure directement que sa multiplicité vaut 1.
- On peut aussi recalculer le nombre de nœuds contenus dans la maille : chaque nœud est partagé entre les 8 mailles adjacentes

$$m = 8 \times 1/8$$

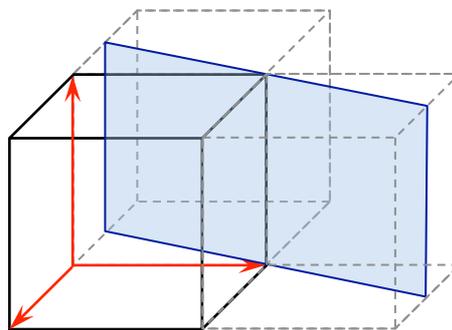


- Représenter les plans d'indices de Miller (110), $(\bar{2}10)$, (132), ainsi que les rangées $[110]$, $[\bar{2}10]$ et $[132]$.

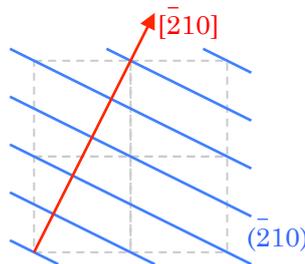
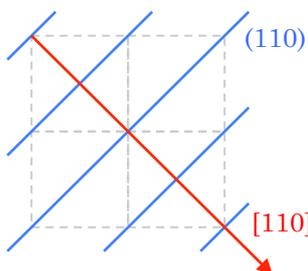
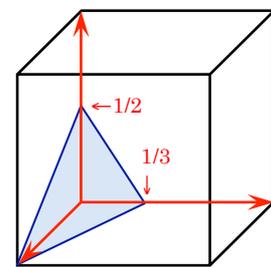
(110)



$(\bar{2}10)$



(132)



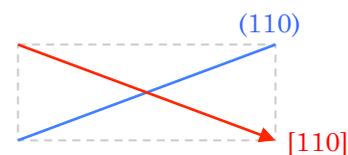
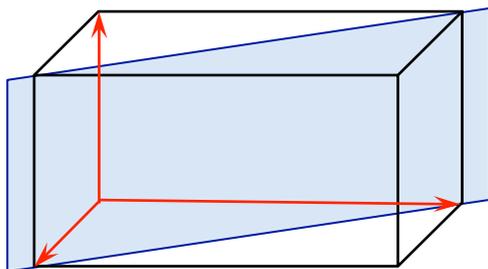
vue selon $[001]$

Que remarquez-vous ? Est-ce vrai pour les autres systèmes cristallins ?

On constate, pour le **système cubique**, que les rangées ayant pour indices $[hkl]$ sont perpendiculaires aux plans (hkl) de mêmes indices.

Ceci n'est valable que pour le système cubique, en effet sauf pour quelques cas particuliers des systèmes hexagonal, tetragonal ou orthorhombique, ce n'est pas vrai.

Exemple : cas de la famille de plans (110) pour une maille orthorhombique :



- Les rangées $[3\bar{1}\bar{2}]$, $[20\bar{1}]$ et $[\bar{1}95]$ sont-elles coplanaires ?
Si oui, donner les indices de Miller (hkl) du plan contenant ces trois rangées.

- si les rangées $[u_1 v_1 w_1]$, $[u_2 v_2 w_2]$ et $[u_3 v_3 w_3]$ sont coplanaires, le volume de la maille qu'elles définissent est nul. Il suffit donc de calculer le produit mixte des 3 vecteurs considérés :

$$\text{Volume} = \begin{vmatrix} u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \\ u_3 & v_3 & w_3 \end{vmatrix}$$

Dans le cas considéré, on vérifie aisément que le déterminant $\begin{vmatrix} 3 & \bar{1} & \bar{2} \\ 2 & 0 & \bar{1} \\ \bar{1} & 9 & 5 \end{vmatrix} = 0$

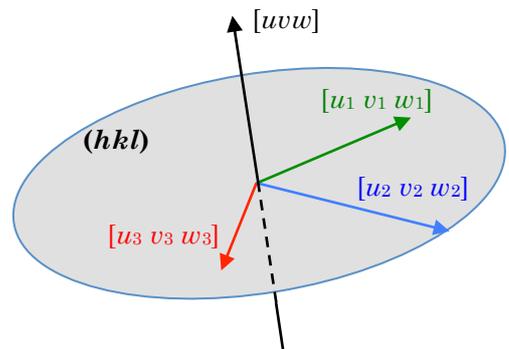
→ Les rangées sont donc coplanaires.

- Les indices de Miller (hkl) du plan contenant ces rangées du réseau direct sont les mêmes que ceux de la rangée $[hkl]$ perpendiculaire à ces rangées.
vrai que pour le système cubique !

Il suffit donc de calculer le produit vectoriel de deux vecteurs parmi les 3 considérés.

Par exemple :

$$[3\bar{1}\bar{2}] \wedge [20\bar{1}] = [1\bar{1}2]$$

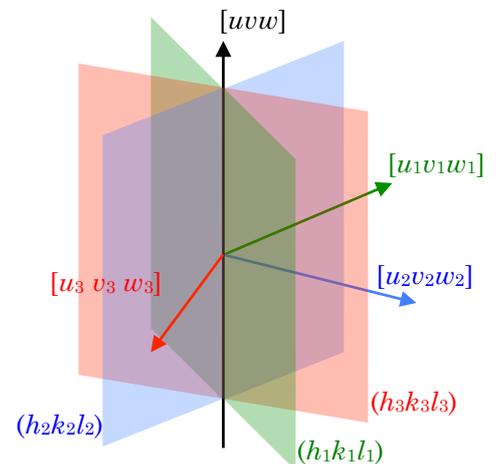


- Les plans $(21\bar{1})$, (120) et $(30\bar{2})$ sont-ils en zone (ont-ils un axe commun) ?
Si oui, quel est l'axe commun ?

On reprend un raisonnement similaire à celui précédemment utilisé : si les plans sont en zone, les rangées qui leur sont orthogonales sont coplanaires ; on est ramené au problème de la question précédente. Il suffit de vérifier que le produit mixte des trois rangées $[21\bar{1}]$, $[120]$ et $[30\bar{2}]$ est nul.

De même, pour déterminer la rangée commune aux trois plans, il suffit de calculer le produit vectoriel de deux vecteurs normaux à ces plans parmi les 3 possibles. Par exemple :

$$[2\bar{1}\bar{1}] \wedge [20\bar{1}] = [2\bar{1}3]$$

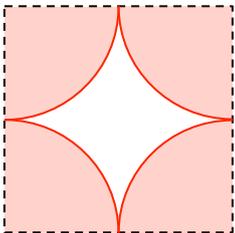
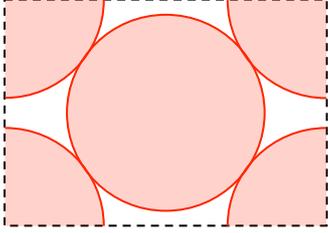
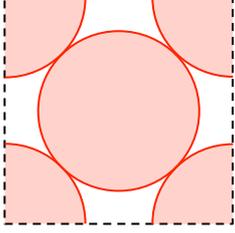


- Calculer le volume de la maille construite sur les rangées $[1\bar{2}\bar{1}]$, $[1\bar{1}0]$ et $[101]$.
En déduire sa multiplicité.

- On calcule le produit mixte des trois vecteurs considérés : $V = 2 a^3$.
- La multiplicité est donc égale à 2.

3. CARACTERISTIQUES DES STRUCTURES CRISTALLINES SIMPLES

- 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

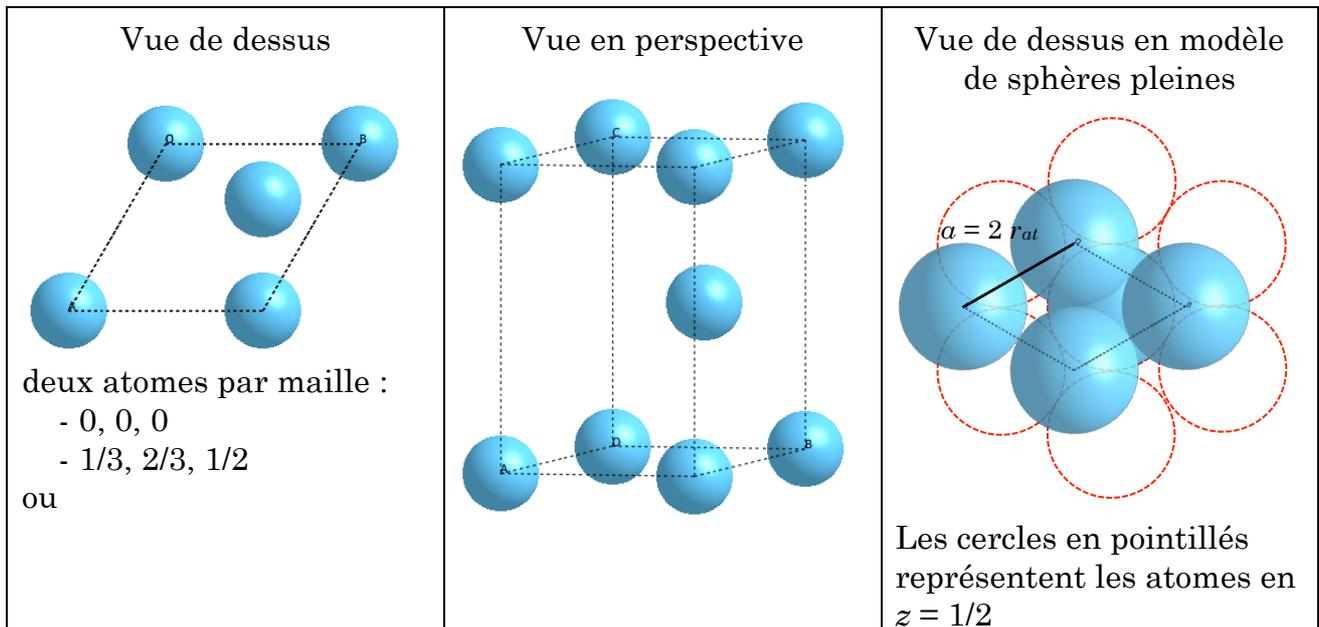
cubique P cP	cubique I cI	cubique F cF
0,0,0	0,0,0 $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	0,0,0 $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$ $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$ $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
<ul style="list-style-type: none"> • premiers voisins : 6 à la distance a • seconds voisins : 12 à la distance $\sqrt{2}a$ • densité des rangées : <ul style="list-style-type: none"> - [100] : $1/a$ - [110] : $1/(\sqrt{2}a)$ - [111] : $1/(\sqrt{3}a)$ • densité des plans : <ul style="list-style-type: none"> - (100) : $1/a^2$ - (110) : $1/(\sqrt{2}a^2)$ - (111) : $1/(\sqrt{3}a^2)$ • compacité : <ul style="list-style-type: none"> - $r_{at} = a/2$ - $c = \pi/6 \approx 0.526$ 	<ul style="list-style-type: none"> • premiers voisins : 8 à la distance $a\sqrt{3}/2$ • seconds voisins : 6 à la distance a • densité des rangées : <ul style="list-style-type: none"> - [100] : $1/a$ - [110] : $1/(\sqrt{2}a)$ - [111] : $2/(\sqrt{3}a)$ • densité des plans : <ul style="list-style-type: none"> - (100) : $1/a^2$ - (110) : $2/(\sqrt{2}a^2)$ - (111) : $1/(\sqrt{3}a^2)$ • compacité : <ul style="list-style-type: none"> - $r_{at} = a\sqrt{3}/4$ - $c = \pi\sqrt{3}/8 \approx 0.680$ 	<ul style="list-style-type: none"> • premiers voisins : 12 à la distance $a\sqrt{2}/2$ • seconds voisins : 6 à la distance a • densité des rangées : <ul style="list-style-type: none"> - [100] : $1/a$ - [110] : $2/(\sqrt{2}a)$ - [111] : $1/(\sqrt{3}a)$ • densité des plans : <ul style="list-style-type: none"> - (100) : $2/a^2$ - (110) : $2/(\sqrt{2}a^2)$ - (111) : $4/(\sqrt{3}a^2)$ • compacité : <ul style="list-style-type: none"> - $r_{at} = a\sqrt{2}/4$ - $c = \pi/(3\sqrt{2}) \approx 0.740$
 <p style="text-align: center;">(001)</p>	 <p style="text-align: center;">(110)</p>	 <p style="text-align: center;">(001)</p>

• Conclusions ?

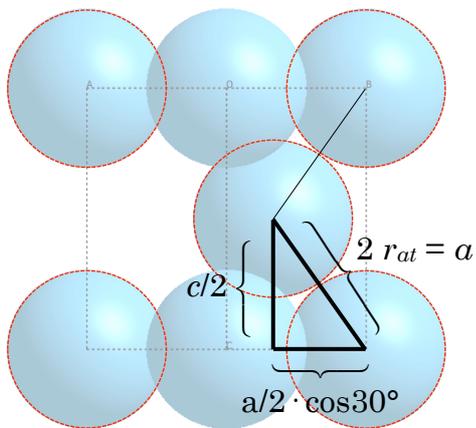
Le réseau cF est le plus dense.

4. RESEAU HEXAGONAL COMPACT

- 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



Les atomes cerclés en pointillés sont dans le même plan ($11\bar{2}0$).

En utilisant le théorème de Pythagore, on détermine le rapport c/a :

$$c/a = \sqrt{8/3}$$