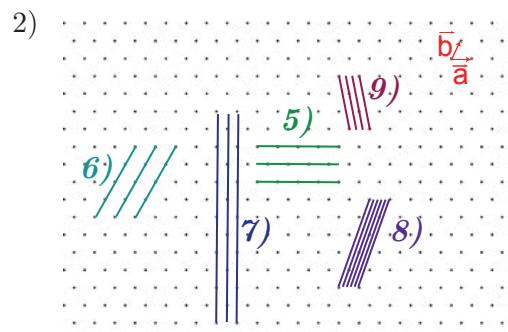
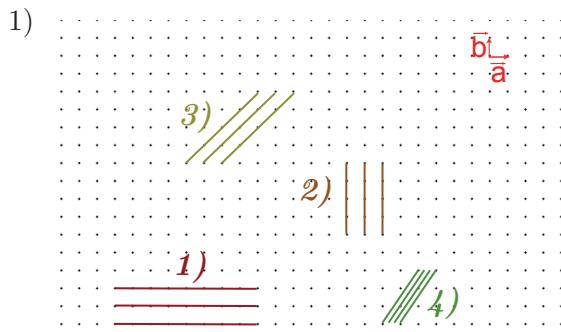


## Exercices – Semaine 2

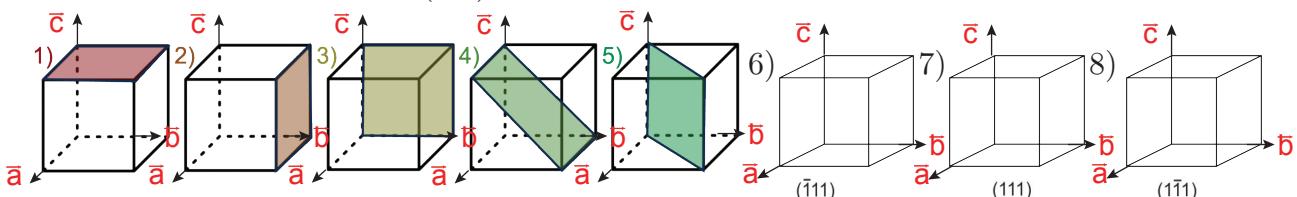
### a: Indices de Miller

Les atomes forment des plans disposés périodiquement. L'orientation de tout ensemble de tels plans peut être caractérisée par des indices de Miller. Calculer les indices de Miller suivants :

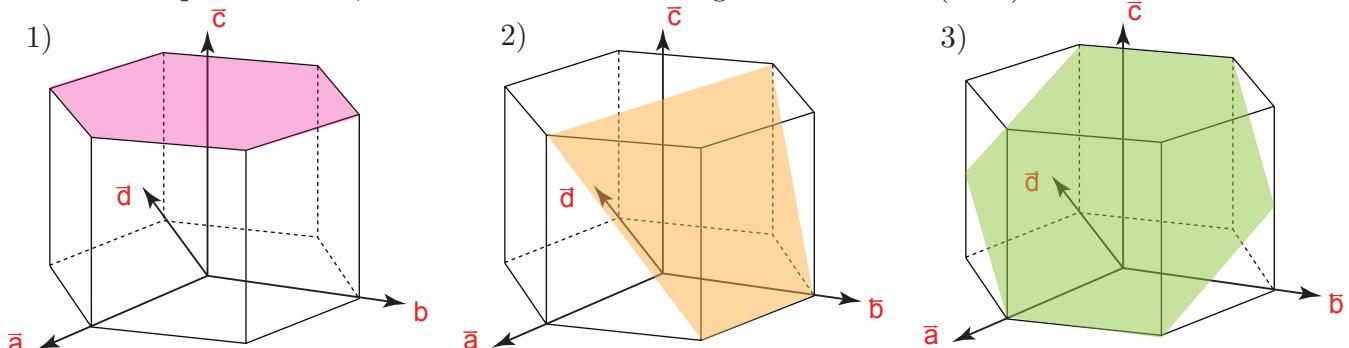
1. En 2D en utilisant (hk) :



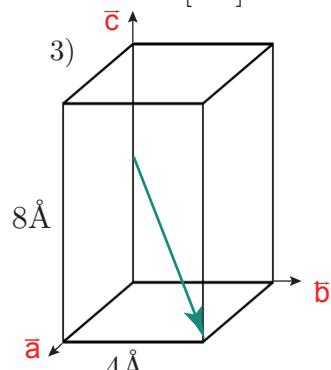
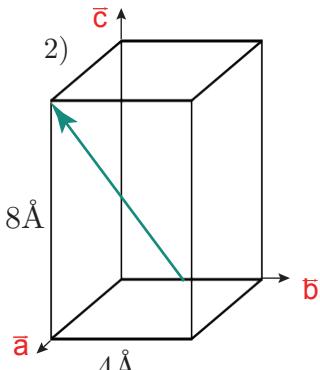
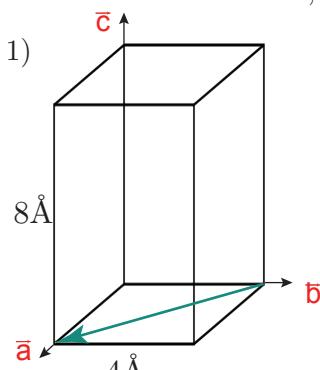
2. Pour les plans en 3D, dans une structure cubique utilisant (hkl) (1-5) et dessiner des plans pour les indices de Miller donnés (6-8) :



3. Pour les plans En 3D, dans une structure hexagonale utilisant (hkld) :

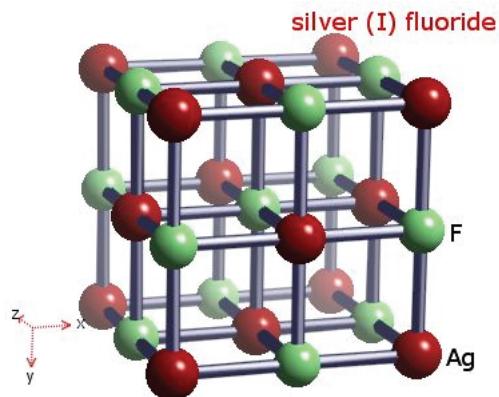


4. Pour des directions En 3D, dans une maille unitaire tétragonale en utilisant [hkl] :



## b: Structure cristalline

L'image montre un cristal de AgF.

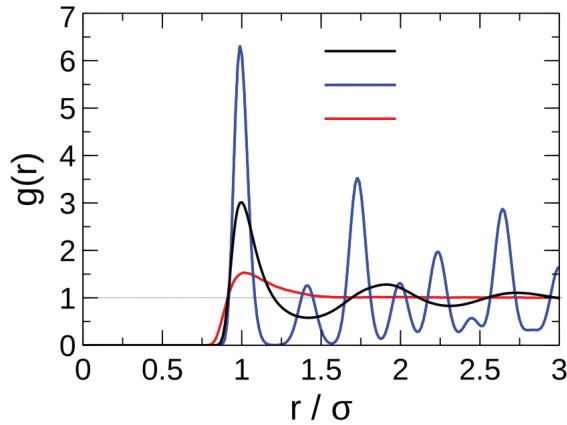


1. Déterminer les indices de Miller des monocouches polaire et non-polaire.
2. Déterminer le nombre de chaque atome par cellule unitaire ainsi que leur ratio l'un par rapport à l'autre.

Suggestion : les monocouches polaires sont monoatomiques.

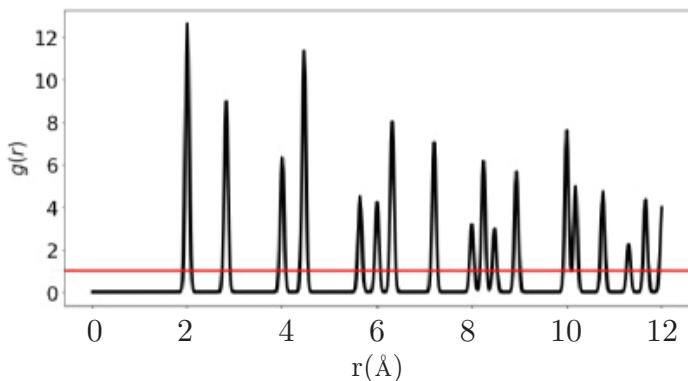
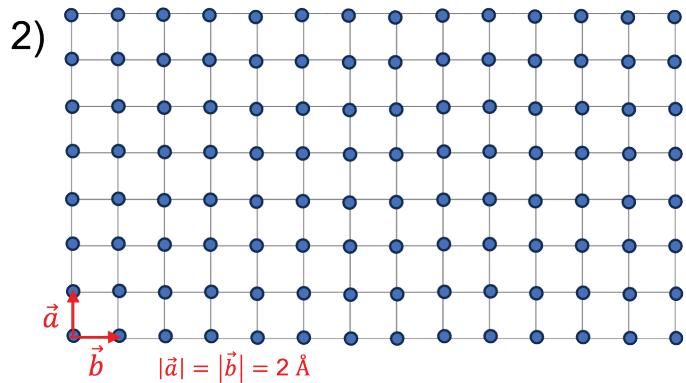
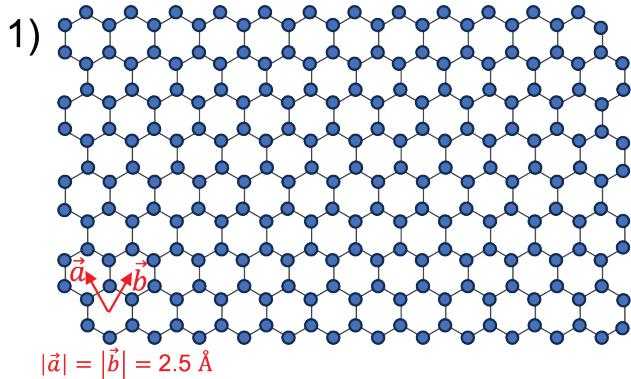
## c: Les fonctions de distribution radiale (RDFs) de différents états de la matière

1. Le graphique ci-dessous montre la distribution radiale de l'argon à différentes températures. La fonction est calculée à  $T = 50$  K, quand l'argon est solide,  $T = 80$  K (liquide),  $T = 300$  K (gaz), avec  $\sigma$  le rayon de l'atome d'argon. Assigner chaque courbe à leurs températures, en expliquant votre raisonnement.



2. Sur le graphique, 3 courbes représentant différentes températures sont dessinées. Quel autre paramètre on peut changer pour avoir un effet similaire ?
3. Pourquoi la fonction  $g(r)$  tend vers 0 quand le rapport  $r/\sigma$  est  $< 1$  ?
4. Pourquoi la courbe rouge converge vers 1, quand  $r/\sigma$  tend vers l'infinie ? Et pourquoi la courbe bleue ne converge pas ?

d: La fonction de distribution radiale des cristaux



1. Associer la fonction de distribution radiale représentée ci-dessus à la structure correspondante (1 ou 2). Dessiner sur les schémas les sphères qui vous ont aidé à faire cette association.
2. Représenter la fonction de distribution radiale de l'autre structure.

The end.