

But de cette série : se familiariser avec la description des réseaux direct et réciproque

### 1. Taux de remplissage ou compacité

Dans un cristal, le taux de remplissage est défini comme le rapport entre le volume occupé par les atomes (assimilés à des sphères dures de rayon  $r$ ) et le volume de la maille considérée.

Calculer le taux maximal de remplissage  $t$  pour les structures suivantes. Considérer des mailles conventionnelles cubiques de côté  $a$  et un atome à chaque noeud du réseau de Bravais sauf si spécifié autrement.

- (a) cubique simple (en anglais : simple cubic, sc) ;
- (b) cubique à faces centrées (en anglais : face centered cubic, fcc) ;

A faire comme exercices supplémentaires (pas en séance) :

- (c) cubique centré (en anglais : body centered cubic, bcc) ;
- (d) cubique à faces centrées avec une base de deux atomes identiques dont les positions sont identifiées par les vecteurs  $(0,0,0)$  et  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ .

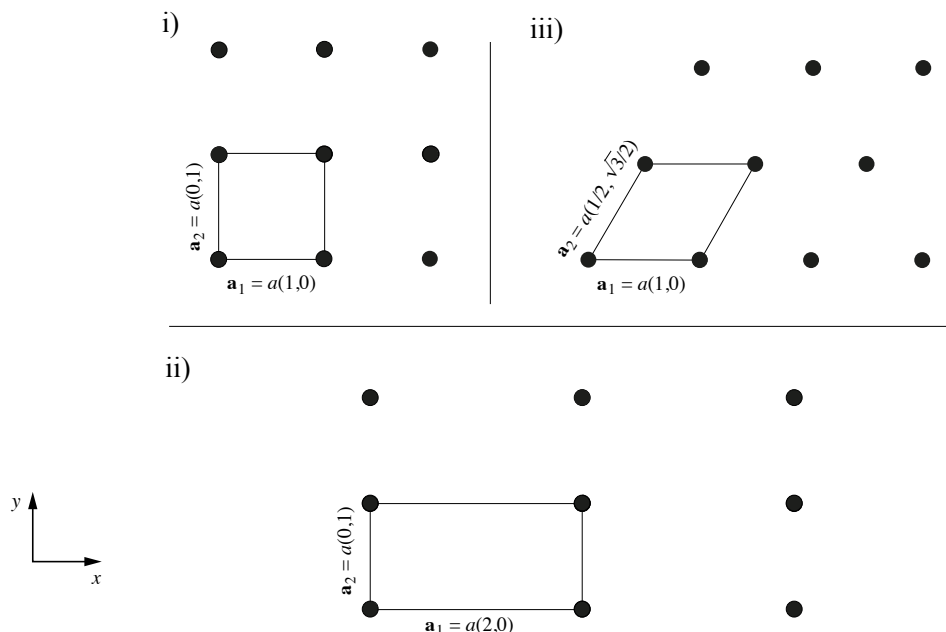
### 2. Réseau réciproque et zones de Brillouin, exemples à 2D

A deux dimensions, un réseau de Bravais correspond à l'ensemble des points dont le vecteur position est donné par  $\mathbf{R} = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2$ , avec  $\mathbf{a}_1$  et  $\mathbf{a}_2$  non-collinéaires,  $m$  et  $n$  des entiers.

Le réseau réciproque correspondant est lui aussi bidimensionnel,  $\mathbf{G} = k\mathbf{b}_1 + l\mathbf{b}_2$ . Pour déterminer  $\mathbf{b}_1$  et  $\mathbf{b}_2$ , on utilise la relation suivante :  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$ .

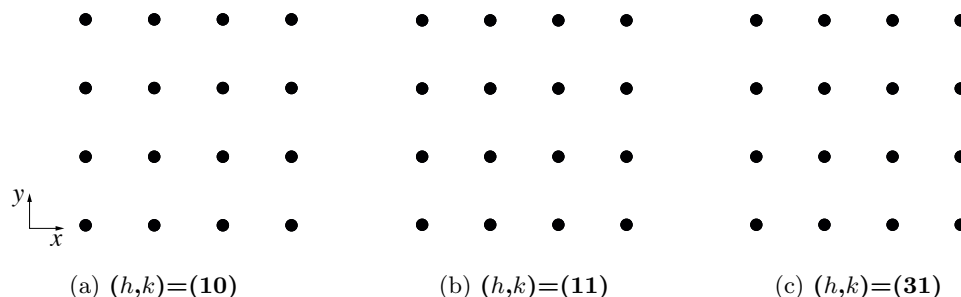
On considère les réseaux carré (i) et rectangulaire simple (ii) représentés dans la figure ci-dessous. A faire comme exercice supplémentaire (pas en séance) : réseau hexagonal (iii).

- (a) Trouver les vecteurs du réseau réciproque  $\mathbf{b}_1$  et  $\mathbf{b}_2$ .
- (b) Rappeler la définition de zones de Brillouin. Esquisser la 1ère et la 2ème zone de Brillouin.



### 3. Indices de Miller

Pour chaque portion de réseau carré représentée ci-dessous, dessiner quelques plans des familles identifiées par les indices de Miller  $(h,k)$  indiqués. Placer l'origine dans le coin en bas à gauche. Qualitativement, comment la distance entre deux plans adjacents d'une même famille change-t-elle en fonction de  $(h,k)$  ?



### 4. Diffraction - Loi de Bragg

Considérer un cristal de forme cubique, avec structure cubique simple de paramètre de maille  $a = 3.6 \text{ \AA}$ .

- On envoie des rayons X sur ce cristal. Déterminer la longueur d'onde maximale  $\lambda_{max}$  qui peut donner lieu à une réflexion de Bragg. Quelle est l'énergie correspondante (en eV) ? ( $h = 4.1357 \times 10^{-15} \text{ eV s}$ ,  $c = 3 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$ )
- Si on voulait faire de la diffraction de neutrons, quelle serait l'énergie des neutrons pour obtenir une longueur d'onde de de Broglie équivalente ? ( $M_n = 9.39 \times 10^8 \text{ eV}/c^2$ )

### 5. Equivalence des formulations de Bragg et Laue

Chaque famille de plans dans un réseau de Bravais est identifiée par des indices de Miller  $(h, k, \ell)$ . On peut montrer qu'il existe des vecteurs du réseau réciproque  $\mathbf{G}$  perpendiculaires à la famille de plans, et que le vecteur  $\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + \ell\mathbf{b}_3$  est celui avec la plus petite norme  $G_{\min} = \frac{2\pi}{d}$ , où  $d$  est la distance entre deux plans adjacents de la famille considérée.

A l'aide de la figure ci-contre, montrer l'équivalence entre la formulation de Bragg  $n\lambda = 2d \sin \theta$  et la formulation de Laue  $\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{G}$ .

