

Série No. 2

25 Février 2025

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 $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$.

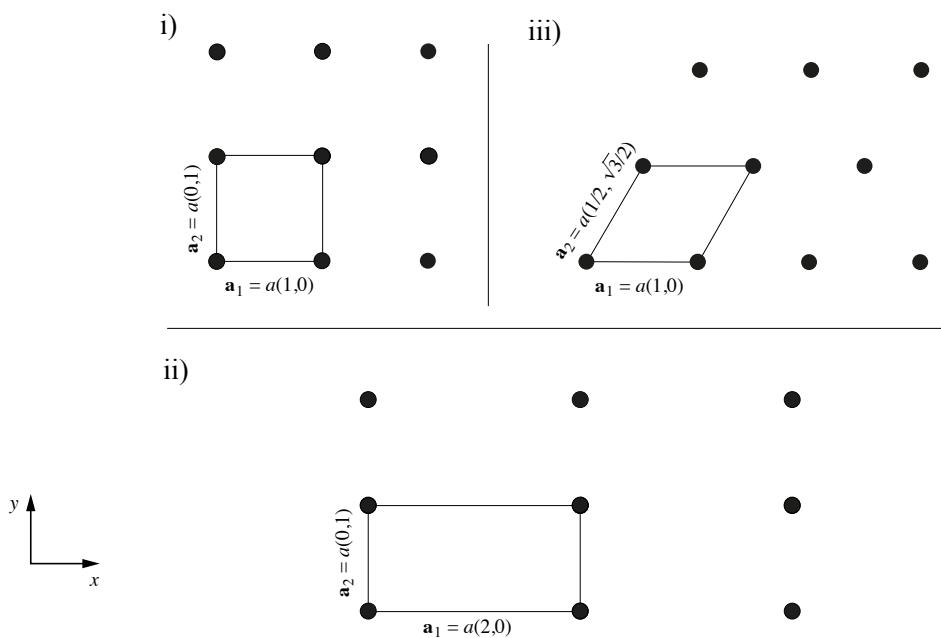
2. Réseau réciproque et zones de Brillouin, exemples à 2D

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 : $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$.

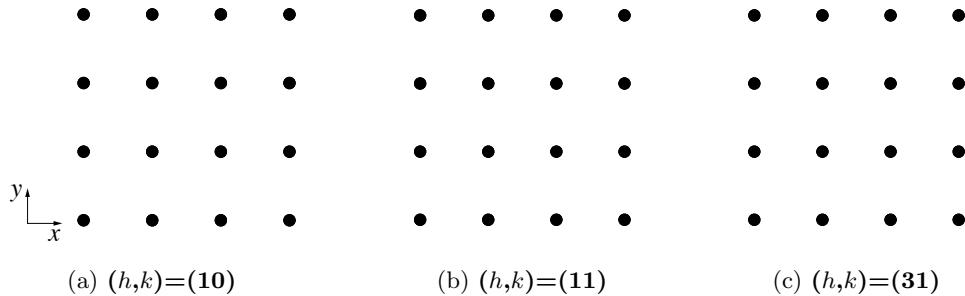
On considère les réseaux carré (i) et rectangulaire simple (ii) représentés dans la figure ci-dessous. A faire comme exercice supplémentaire (pas en séance) : réseau hexagonal (iii).

- (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 λ_{max} qui peut donner lieu à une reflexion de Bragg. Quelle est l'énergie correspondante (en eV) ?
 $(h = 4.1357 \times 10^{-15} \text{ eV s}, \quad c = 3 \times 10^8 \text{ m s}^{-1})$
- 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, ℓ) .

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
 $\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{G}$.

