- **Exercice 4 : Rangées réticulaires**

Déterminer les indices [m, n, p] de la rangée qui passe par les 2 nœuds du réseau m_1, n_1, p_1 et m_2, n_2, p_2.

Application : a) 321 et $2\bar{4}0$; b) 321 et $33\bar{1}$; c) $\bar{1}21$ et $1\underset{\cdot}{1}1$; d) $\bar{1}21$ et $\bar{2}12$.

Solution :

Il suffit de faire subir une translation à la rangée considérée pour la faire passer par l'origine et retenir les indices m, n, p qui sont premiers entre eux (voir définition R. de C.). On peut aussi remarquer que la rangée [m, n, p] est confondue avec la rangée $[\bar{m}, \bar{n}, \bar{p}]$.

D'où $[m_2 - m_1,\ n_2 - n_1,\ p_2 - p_1]$

Applications :

a) $[1\bar{2}1]$; b) $[0, 1, \bar{2}]$; c) $[\bar{2}\ 1\ 0]$; d) $[1\ 1\ \bar{1}]$

- **Exercice 6 : Intersection de 2 plans réticulaires**

A l'aide d'une propriété du réseau réciproque, déterminer les indices [m, n, p] de la rangée définie par l'intersection des plans (h_1, k_1, l_1) et (h_2, k_2, l_2).

Application : (3, 2, 1) et (1, 2, 3).

Solution :

Le produit vectoriel de $\vec{G}(h_1, k_1, l_1)$ par $\vec{G}(h_2, k_2, l_2)$ définit un vecteur qui est simultanément parallèle aux plans $(h_1k_1l_1)$ et $(h_2k_2l_2)$ et est donc parallèle à leur intersection [m, n, p].

La démarche à suivre est analogue à celle suivie dans les exercices qui précèdent.

$m = \alpha(k_1l_2 - k_2l_1)$; $n = \alpha(l_1h_2 - l_2h_1)$; $p = \alpha(h_1k_2 - h_2k_1)$

Application : $[1, \bar{2}, 1]$

- **Exercice 8 : Plans atomiques et indices de Miller : application au lithium**

Le réseau de Bravais du lithium est cubique centré, de maille « a » = 3,48 Å.

a) En supposant que les atomes (assimilés à des sphères) sont en contact le long des rangées [111], représenter la distribution de ces atomes suivant respectivement les faces (100), (110), (111) et (201).

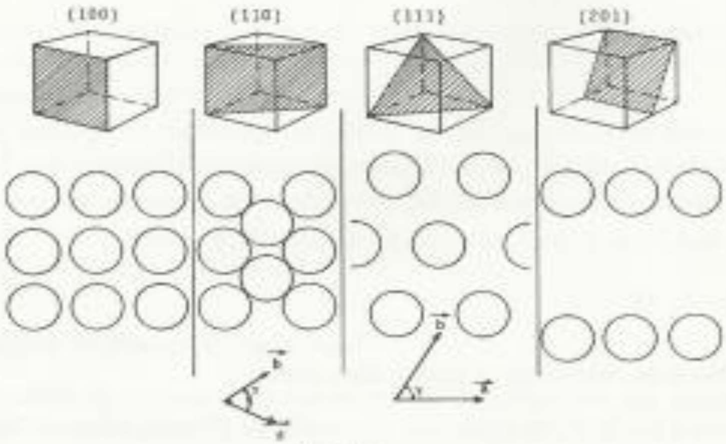
b) Pour chacun des édifices à 2 dimensions ainsi représentés, préciser la direction et le module des vecteurs de base $\vec{a}$ et $\vec{b}$ de la maille élémentaire ainsi que la valeur de l'angle γ.

c) Donner la valeur numérique de la concentration atomique et de la densité massique du lithium (A (Li) ≡ 7).

Solution :

a) Par définition, les intersections P, Q et R du plan (hkl) avec les vecteurs de base $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ du réseau direct sont telles que : $\overrightarrow{OP} = \frac{\vec{a}}{h}$; $\overrightarrow{OQ} = \frac{\vec{b}}{k}$; $\overrightarrow{OR} = \frac{\vec{c}}{l}$ (voir aussi Fig. 9 ex. 10). Quand un indice est nul, l'intersection avec l'axe correspondant est rejetée à l'infini. Les plans concernés par cet exercice sont représentés en haut de la Fig. 6.

Les atomes étant en contact le long de la rangée [111], leur rayon est $r = \frac{a\sqrt{3}}{4}$. On en déduit aisément la distribution (représentée en bas de la Fig. 6) des atomes selon les différentes faces.



b) Les vecteurs de base de la maille élémentaire relative aux différentes faces sont, respectivement :

$$(100)\ :\ |\vec{a}| = |\vec{b}| = a;\ \hat{\gamma} = 90°.\ (110) : |\vec{a}| = |\vec{b}| = a\sqrt{3}/2\ ;\ \hat{\gamma} = 70°\ ;$$

$$(111)\ :\ |\vec{a}| = |\vec{b}| = a\sqrt{2}\ ;\ \hat{\gamma} = 60°\ \text{ou}\ 120°\ .$$

$$(201)\ :\ |\vec{a}| = a;\ |\vec{b}| = a\sqrt{5}\ ;\ \hat{\gamma} = 90°\ .$$

On observera que la densité atomique superficielle décroît quand les indices h, k, l croissent (voir aussi Ex. IV 15).

Le taux de remplissage (t = 0,68) est évalué dans l'exercice suivant (Ex. n°9b).

c) Il y a 2 atomes (c.c) de lithium par cube (a^3).

N (Li) = 4, 7 10^{28} At/m^3.

La densité massique obéit à $\rho = \frac{NA}{\mathcal{N}}$ d'où $\rho = 546$ kg/m^3.

- **Exercice 10 : Propriétés du réseau réciproque**

a) Montrer que tout vecteur du réseau réciproque $\vec{G}_{hkl} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}$ est perpendiculaire aux plans de mêmes indices (h, k, l) de l'espace direct.

b) Montrer que la distance d_{hkl} entre 2 plans (h, k, l) consécutifs est inversement proportionnelle à $|\vec{G}_{hkl}|$.

c) En déduire l'expression de d_{hkl} :

- pour un réseau cubique simple,
- pour un réseau orthorhombique ($a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$).

Solution :

a) Par définition, les intersections du plan (h, k, l) avec les vecteurs de base du réseau direct sont (voir fig. 9) : $P(\frac{a}{h}, 0, 0)$, $Q(0, \frac{b}{k}, 0)$, $R(0, 0, \frac{c}{l})$.

Le vecteur $\overrightarrow{PQ}$ contenu dans le plan (hkl) obéit à la relation $\overrightarrow{PQ} = \frac{\vec{b}}{k} - \frac{\vec{a}}{h}$ et le produit $\vec{G}_{hkl} \cdot \overrightarrow{PQ} = (h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C})\left(\frac{\vec{b}}{k} - \frac{\vec{a}}{h}\right)$ est nul car (définitions de $\vec{G}$) :

$\vec{A} \cdot \vec{a} = \vec{B} \cdot \vec{b} = \vec{C} \cdot \vec{c} = 2\pi$ et $\vec{A} \cdot \vec{b} = \vec{A} \cdot \vec{c} = \vec{B} \cdot \vec{a} = 0$.

$\vec{G}_{hkl}$ est donc perpendiculaire à $\overrightarrow{PQ}$ et on démontrerait de même que $\vec{G}_{hkl}$ est perpendiculaire à $\overrightarrow{PR}$: il est perpendiculaire au plan (h, k, l).

b) La distance interéticulaire d_{hkl} est représentée par la longueur OH sur la figure 9.

$\overline{OH}$ est perpendiculaire au plan (h, k, l) et est donc parallèle à $\vec{G}_{hkl}$; en considérant $\vec{OH}$ comme la projection de $\overrightarrow{OP}$ sur $\vec{G}_{hkl}$, on obtient

$$|\vec{G}_{hkl}| \cdot d_{hkl} = \vec{G}_{hkl} \cdot \overrightarrow{OP} = (h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C})\,(\vec{a}/h) = 2\pi$$

d'où $d_{hkl} = 2\pi/|G_{hkl}|$.

c) A partir de la définition du réseau réciproque

$$\left(\vec{A} = 2\pi\frac{\vec{b}\wedge\vec{c}}{(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})},\quad \vec{B} = \frac{2\pi\,(\vec{c}\wedge\vec{a})}{(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})},\quad \vec{C} = \frac{2\pi\,(\vec{a}\wedge\vec{b})}{(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})}\right)$$

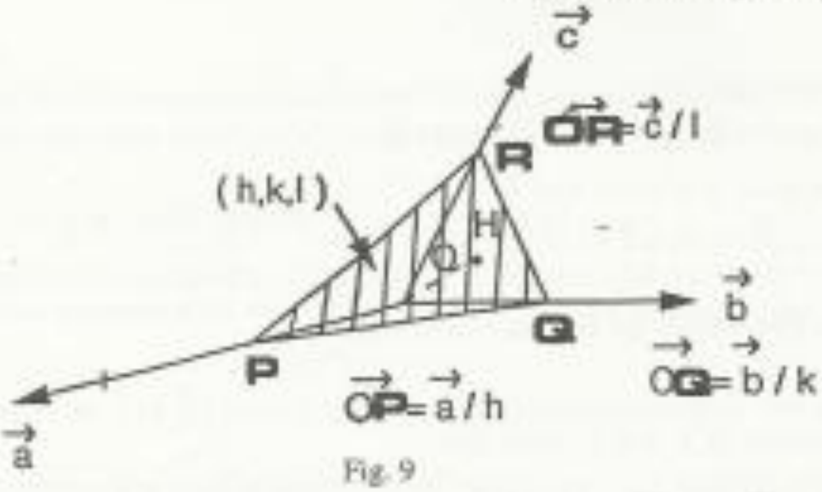


Fig. 9

on obtient, dans un système de coordonnées rectangulaires, les relations suivantes :

$$\vec{A} = \frac{2\pi\vec{a}}{a^2}, \quad \vec{B} = \frac{2\pi\vec{b}}{b^2}, \quad \vec{C} = \frac{2\pi\vec{c}}{c^2}$$

d'où $$G^2_{hkl} = (h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C})^2 = 4\pi^2\left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}\right)$$

Si le réseau est orthorhombique $\rightarrow d_{hkl} = \frac{2\pi}{|G_{hkl}|} = \frac{1}{\left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}\right)^{\frac{1}{2}}}$

Si le réseau est cubique $(a^2 = b^2 = c^2) \rightarrow d_{hkl} = \frac{a}{(h^2 + k^2 + l^2)^{\frac{1}{2}}}$.

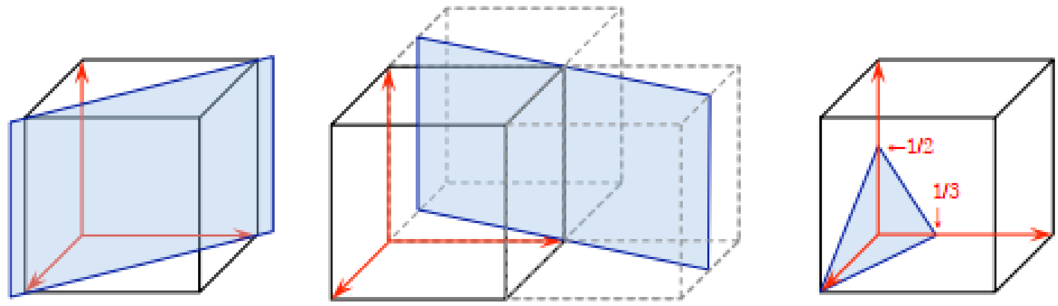
EXercice 2

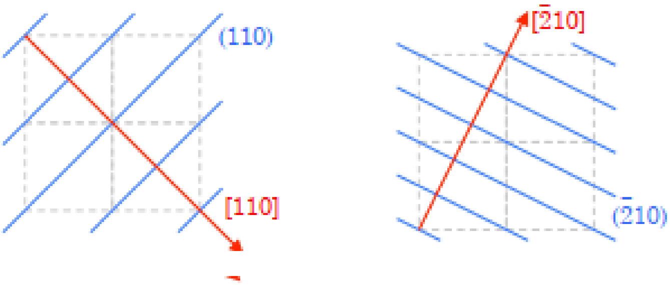
Soit un réseau cubique de paramètre *a*.

- 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}$1], [311] et [351] sont-elles coplanaires ? Si oui, donner les indices de Miller (hkl) du plan correspondant.
- les plans (21$\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.

- 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)





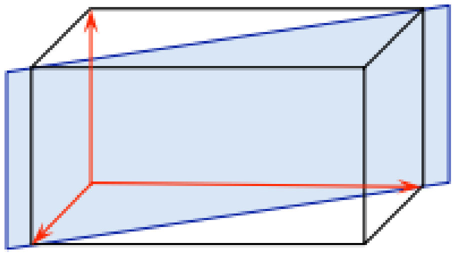
vue selon [001]

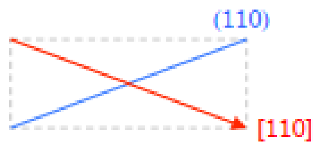
Que remarquez-vous ? Est-ce vrai pour les autres systèmes cristallins ?

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 :

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

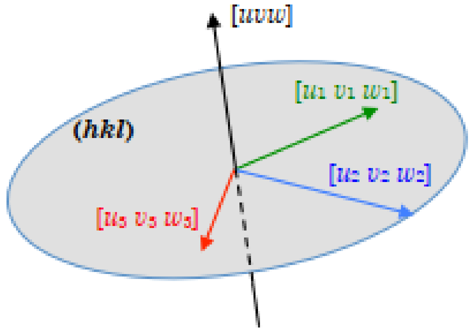
Dans le cas considéré, on vérifie aisément que le déterminant $\begin{vmatrix} 3 & \bar{1} & \bar{2} \\ 2 & 0 & \bar{1} \\ \bar{1} & 9 & 5 \end{vmatrix} = 0$

→ Les rangées sont donc coplanaires.

- Les indices de Miller (hkl) du plan contenant ces rangées <u>du réseau direct</u> 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 :

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

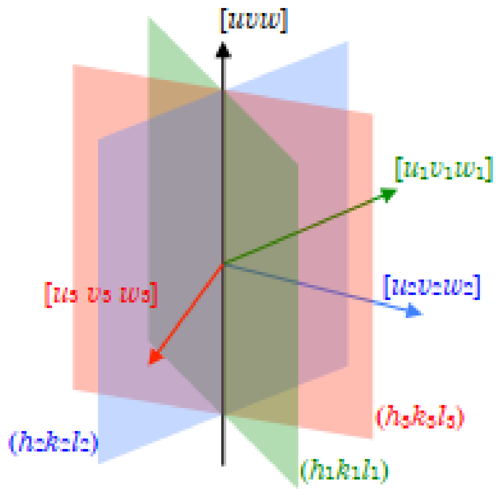


- Les plans $(21\bar{1})$, (120) et $(30\bar{2})$ sont-ils en zone (ont-ils un axe commun) ?
  Si oui, quel est l'axe commun ?

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 $[1\bar{2}1]$, $[1\bar{1}0]$ 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.