Corrigés des exercices du Thème 2 :

Création : juin 2003

Dernière modification : février 2005

Exercice T2_01 : Détermination des indices h k l

1 : Les noeuds $(1/2\ \ 3/2\ \ 0)$ et $(0\ \ 1/2\ \ 1/2)$ se trouvant en position demi – entière, les faces c et a de la maille sont centrées et donc la face b .

Le réseau de Bravais est à faces centrées . La maille est orthorhombique ou cubique.

2 : Soit m $\in \mathbb{Z}$ le numéro du plan de la famille (h k l) dans lequel se trouvent ces nœuds :

$$\begin{cases} h+3k=2m \\ h+k+l=m \\ k+l=2m \end{cases}$$

soit $h=-k \quad k=l$ En prenant l'entier l le plus petit , $(h\ k\ l)=(-111)$

Les nœuds $(1/2\ \ 3/2\ \ 0)$ $(1\ \ 1\ \ 1)$ et $(0\ \ 1/2\ \ 1/2)$ appartiennent au plan m = 1 de la famille (-111)

Exercice T2_02 : Détermination des indices h k l

1 : Le noeud $(3/2\ \ 1/2\ \ 1/2)$ étant en position centrale dans la maille, celle – ci est centrée .

Le réseau de Bravais est corps centré . La maille peut être quadratique , orthorhombique ou cubique.

2 : Soit m $\in \mathbb{Z}$ le numéro du plan de la famille (h k l) dans lequel se trouvent ces nœuds :

$$\begin{cases} h+2k=2m \\ h+k+2l=m \\ 3h+k+l=2m \end{cases}$$

soit $h=5l\ et\ k=2l$ En prenant l'entier l le plus petit , $(h\ k\ l)=(5\,2\,1)$

Les nœuds $(1\,2\,0)$ $(1\ \ 1\ \ 2)$ et $(3/2\ \ 1/2\ \ 1/2)$ appartiennent au plan m = 9 de la famille $(5\,2\,1)$.

Autre méthode :

le vecteur réciproque de composantes $h\ k\ l$ est parallèle au vecteur $\vec{r}_1 \wedge \vec{r}_2$

$\vec{r}_1\ et\ \vec{r}_2$ ayant pour support les deux rangées sécantes en :

$$1\,2\,0 \quad ou\ \ 1\ \ 1\ \ 2 \quad ou\ \ 3/2\ \ 1/2\ \ 1/2$$

En prenant le nœud 120 comme origine :

$$\begin{pmatrix} h' & k' & l' \\ 0 & -1 & 2 \\ 1/2 & -3/2 & 1/2 \end{pmatrix}$$

soit $h' = 5/2 \quad k' = 1 \quad l' = 1/2$

Les indices $h\ k\ l$ étant des entiers $h = 5 \quad k = 2 \quad l = 1$

Exercice T2_03 : Rangée [u v w] cf. 5.4.1 et 5.4.2

La rangée commune [u v w] a pour support la direction du vecteur $\vec{r}_1^{\,*} \wedge \vec{r}_1^{\,*}$,

$\vec{r}_1^{\,*}$ *et* $\vec{r}_1^{\,*}$ étant les vecteurs réciproques normaux aux plans et d'indices h k l relativement à la base réciproque de la base directe où sont rapportés les indices u v w.

On trouve , en formant les déterminants symboliques :

[u v w] = [1 -1 0]   [u v w] = [1 1 -2]

Exercice T2_04 : Détermination des indices h k l

1 : Si le point de coordonnées x y z se trouve sur le nième plan de la famille (h k l), alors :

$$hx + ky + lz = n$$

n = 2 : $h' \times 1/3 = 2 \quad k' \times 2/3 = 2 \quad l' \times 1/2 = 2$

soit $h' = 6 \quad k' = 3 \quad l' = 4$

Les h' k' l' étant premiers entre eux : (h k l) = (6 3 4) Fig .T2_04A

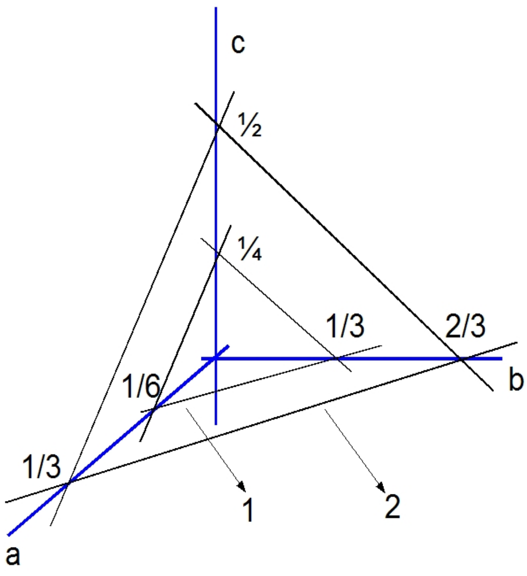
n = 3 : on trouve h' = 2 k' = 0 l' = 4 soit : (h k l) = (1 0 2)

C'est une famille de plans parallèles à l'axe b de la maille Fig .T2_04B

2 : Rangée commune aux familles (6 3 4) et (1 0 2) : [6 -8 -3]

3 : Famille (h k 0) en zone avec [6 -8 -3]: $6h - 8k = 0$: (4 3 0)

Les familles (6 3 4), (1 0 2), (4 3 0) sont en zone avec la rangée [6 -8 -3]



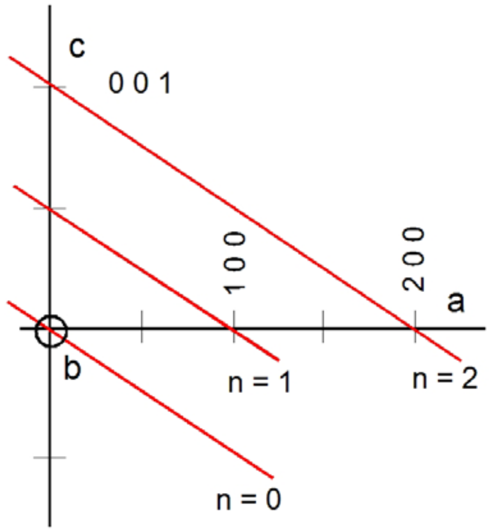


Figure T2-04A : Famille (6 3 4) , plans N° 1 et 2

Figure T2-04B : Famille (1 0 2) plans N° 0 ;1; 2

Exercice T2_05 : Construction de plans réticulaires

1 : Les plans de la famille (0 3 1) sont parallèles à l'**axe a** de la maille Fig .T2_05

Plan 0 : il passe par l'origine et par un point de coordonnées (0 y z) tel que : 3y + z = **0**

soit z = 1 y = -1/3

Plan 1 : il passe par des points de coordonnées (0 y z) tel que : 3y + z = **1**

soit y = 1/3 z = 0 et y = 0 z =1

Plan -1: il passe par des points de coordonnées (0 y z) tel que : 3y + z = **-1**

soit y = -1/3 z = 0 et y = 0 z = -1

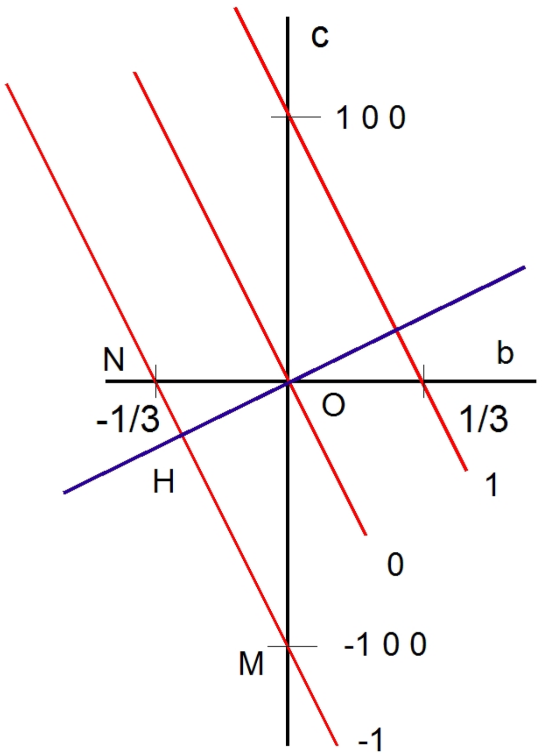


Figure T2_05 : famille (031)
plans N° -1 ; 0 ; 1

2 : OH = d ; dans le triangle rectangle MON : OH NM = ON OM,

soit : $d = bc / \sqrt{a^2 + 9c^2}$

Remarque : utiliser aussi la formule générale du calcul des distances inter réticulaires dans le système orthorhombique . cf ***Tableau 5.3***

Exercice T2_06 : Dénombrement des familles de plans réticulaires dans le système quadratique

1 - : On recense , dans la forme $\{h,k,l\}$, le nombre de familles (h, k, l) ayant la même distance inter réticulaire D_{hkl} : $\frac{1}{D_{hkl}^2} = \frac{h^2+k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$

$\{h,k,l\}$ **:** les 4 familles **(h,k,l) ; (-h,k,l) ; (h,-k,l) ; (-h,-k ,l)** ont le même espacement D_{hkl}

- la permutation de h et k donne 4 autres familles
- le changement de l en -l donne (4+4) 2 = 16 familles ayant le même D_{hkl}

2 - : $\{h,h,l\}$ **:** ce nombre est réduit de moitié : **8**

$\{h,h,0\}$ **:** ce nombre est encore réduit de moitié : **4**

Exercice T2_07 : Dénombrement des familles de plans réticulaires dans le système hexagonal

$$\frac{1}{D_{hkl}^2} = \frac{4(h^2+hk+k^2)}{3a^2} + \frac{l^2}{c^2} \qquad R(hk) = h^2 + hk + k^2$$

1 - : La forme $R(hk)$ reste invariante quand on remplace h par k , k par –(h + k) :

$$R(hk) = k^2 + k(-(h+k)) + (h+k)^2$$
$$= h^2 + hk + k^2$$

etc …… Et par suite , $1/D^2_{hkl}$ reste invariant au cours de cette permutation.

2 - : Dénombrement des plans (1 1 0) ayant la même distance D_{110}

Dans la notation à 4 indices 1 1 **0** s'écrit 1 1 -2 **0**

La permutation circulaire des 4 indices conduit à :

(1 1 -2 **0**) (1 -2 1 **0**) (-2 1 1 **0**) (-1 -1 2 **0**) (-1 2 -1 **0**) (2 -1 -1 **0**)

en revenant à la notation à 3 indices (avec un point) :

(1 1. **0**) (1 -2 . **0**) (-2 1 . **0**) (-1 -1. **0**) (-1 2. 0) (2 -1. **0**)

Finalement, **6** familles (h k l) ont le même espacement D_{110} : Fig. T2_07

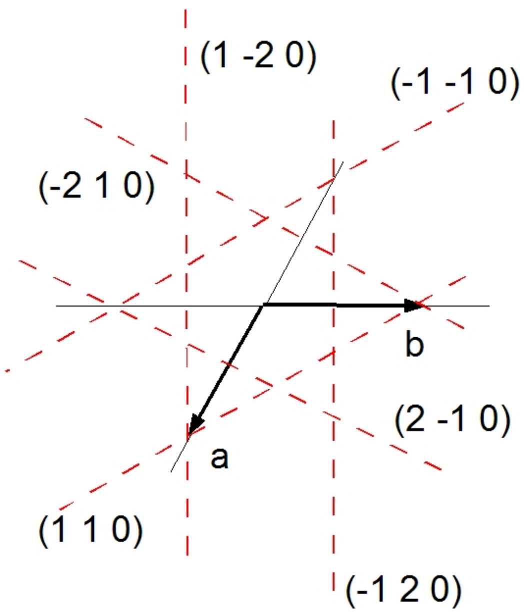


Figure T2_07 : Trace des plans N°1 de la famille (110) et de même distance inter réticulaire égale à a/2

3 - : Dénombrement des plans (h k l) ayant la même distance D_{hkl}

La permutation circulaire les indices $h,k,-(h+k)$ laisse inchangée la valeur $\dfrac{1}{D^2_{hkl}}$ Elle revient à remplacer dans le triplet h k l :

- h par k , k par –(h +k) d'une part,
- h par –(h +k) , k par h d'autre part

Soit : $h,k,l;\quad k,-(h+k),l;\quad -(h+k),h,l$

En remplaçant h par –h et k par –k on obtient 3 autres familles qui sont :

$$-h,-k,l;\quad -k,+(h+k),l;\quad +(h+k),-h,l$$

En substituant k à h et h à k dans le triplet h k l , on obtient 3 autres familles :

$$k,h,l; \quad h,-(h+k),l; \quad -(h+k),k,l$$

En remplaçant h par –h et k par –k :

$$-k,-h,l; \quad -h,+(h+k),l; \quad +(h+k),-k,l$$

En remplaçant **l** par **–l** , on dénombre : $(4\times3)\times2=24$ familles de plans (h,k,l) ayant le même espacement D_{hkl} , et il n'y en a pas d'autre dans la forme $\{h,k,l\}$.

Exercice T2_08 : Règle d'existence des indices h k l

Si la maille est corps centré, elle contient un nœud en position : $1/2\,;1/2\,;1/2$

Ce nœud appartenant **nécessairement** à un plan de la famille (h k l) :

$$1/2\,h+1/2\,k+1/2l=n \qquad n\in\mathbb{Z}$$

soit $h+k+l=2n \qquad n\in\mathbb{Z}$

Exercice T2_09 : Réseau réciproque des réseaux cubiques corps centré et à faces centrées.

$$a^*=1/a \quad b^*=1/b \quad c^*=1/c \quad \alpha^*=\beta^*=\gamma^*=90°$$

1 : réseau à faces centrées : h k l de même parité : Figure T2_09A

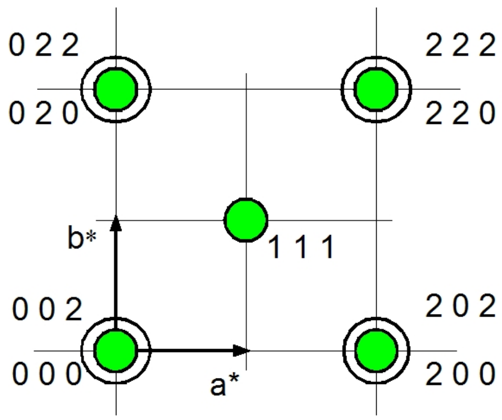


Figure T2_09A : **h,k,l de même parité**

Le réseau réciproque , construit sur **2a*,2b*,2c***, est **corps centré**

Conclusion : pour construire un réseau corps centré , les indices des nœuds de ce réseau doivent être de même parité.

2 : réseau corps centré : h + k + l = 2n Figure T2_09B

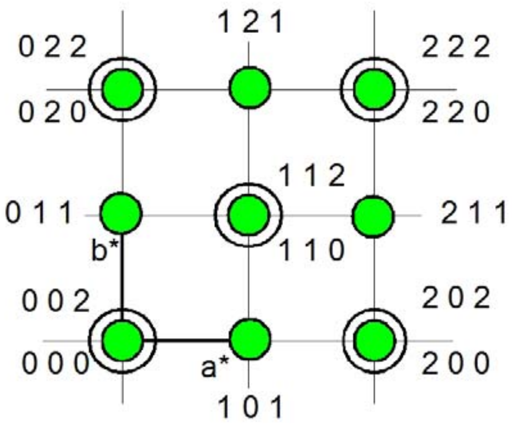


Figure T2_09B : **h + k + l = 2n**

Le réseau réciproque, construit sur **2a*,2b*,2c***, est à **faces centrées** .

3 : *Application* : les atomes sont à l'extrémité du vecteur position $\vec{r}_{uvw}$ de norme égale à :

$$\| \vec{r}_{uvw} \| = \frac{a}{2}\sqrt{u^2+v^2+w^2}$$

a est le paramètre de maille.

Fer α : le réseau est cubique corps centré ; pour le générer les indices u v w doivent être de **même parité** .

N°	u v w	Effectif	Distance
1	1 1 1	8	$a\sqrt{3}/2$ (0,866)
2	2 0 0	6	a (1,000)
3	2 2 0	12	$a\sqrt{2}$ (1,414)
4	3 1 1	24	$a\sqrt{11}/2$ (1,658)
5	2 2 2	8	$2a\sqrt{3}/2$ (1,732)
6	4 0 0	6	$2a$ (2,000)

Tableau T2_08 : Répartition en couches des atomes dans le **Fer** α

Remarque : les couches 1 et 2 sont voisines comparativement avec la couche 3 et les suivantes : on peut dire , grosso modo, que ces 2 couches sont confondues avec un effectif de 14 atomes.

Nickel : le réseau est cubique faces centrées ; pour le générer la somme des indices u v w doit être **paire .**

N°	u v w	Effectif	Distance
1	1 1 0	12	$a\sqrt{2}/2$ (0,707)
2	2 0 0	6	a (1,000)
3	2 1 1	24	$a\sqrt{6}/2$ (1,225)
4	2 2 0	12	$a\sqrt{2}$ (1,414)
5	3 1 0	24	$a\sqrt{10}/2$ (1,581)
6	2 2 2	6	$a\sqrt{3}$ (1,732)

Tableau T2_08 : Répartition en couches des atomes dans le **Nickel**

Exercice T2_10 : Construction de plans réticulaires et du réseau réciproque associé (système monoclinique)

1 : Si un point de coordonnées x y z se trouve dans le plan n de la famille (h k l) ,alors :

$$hu + kv + lw = n \qquad n \in \mathbb{Z}$$

Plan n = -1 de la famille (-2 0 1) : -2x +z = **-1** x=1/2 ; z =0 x = 1 ; z= 1

Plan n = 0 de la famille (-2 0 1) : -2x +z = **0** x = ½ ; z=1

Plan n = 1 de la famille (-2 0 1) : -2x +z = **1** x=0 ; z =1 x = - ½ ; z= 0

La trace de ces plans (parallèles à l'axe b) est représentée Fig.T2_10.

La rangée [-2 0 1]* est parallèle à la normale commune de ces plans

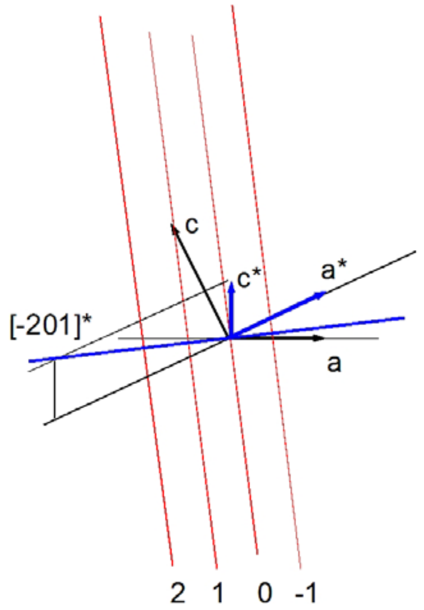


Figure T2_10 : Trace de plans appartenant à la famille (-2 0 1). Réseau réciproque en superposition.

2 : Tenseur métrique réciproque : c'est l'inverse du tenseur métrique direct :

$$G^* = \begin{Bmatrix} 1/a^2\sin^2\beta & 0 & -\cos\beta/ac\sin^2\beta \\ 0 & 1/b^2 & 0 \\ -\cos\beta/ac\sin^2\beta & 0 & 1/c^2\sin^2\beta \end{Bmatrix}$$

On en déduit par identification :

$$a^* = 1/a\sin\beta \quad b^* = 1/b \quad c^* = 1/c\sin\beta \quad \alpha^* = \gamma^* = \pi/2 \quad \beta^* = \pi - \beta$$

3 : Distance entre plans de la famille (-2 0 1) :

$$\frac{1}{D^2_{-201}} = (-201)(G^*)\begin{pmatrix} -2 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \text{soit :} \qquad \frac{1}{D^2_{-201}} = \frac{1}{\sin^2\beta}\left(\frac{4}{a^2} + \frac{1}{c^2} + \frac{4\cos\beta}{ac}\right)$$

$D_{-201} = 0,283nm \simeq a/2$ cf Fig. T2_10

Exercice T2_11 : (en attente)

Exercice T2_12 : Exemple de calculs dans un repère non- orthogonal : application au tétraèdre régulier

1 : Repère $(O,\vec{a},\vec{b},\vec{c})$: A a pour coordonnées 1 0 0, B 0 1 0 et C 0 0 1

$$G=\begin{Bmatrix} a^2 & 1/2a^2 & 1/2a^2 \\ 1/2a^2 & a^2 & 1/2a^2 \\ 1/2a^2 & 1/2a^2 & a^2 \end{Bmatrix}$$

2 : OH hauteur du tétraèdre Fig. T2_12A

H est confondu avec l'isobarycentre des points A B C ; il a pour coordonnées 1/3,1/3 1/3 dans (O ,A,B,C) .

On vérifie que HO et HA sont orthogonaux en effectuant leur produit scalaire :

$$(-1/3,-1/3,-1/3)(G)\begin{pmatrix} -1/3 \\ -1/3 \\ 2/3 \end{pmatrix}=0$$

On trouverait le même résultat avec HO et HB.

HO étant perpendiculaire à 2 droites sécantes, est perpendiculaire au plan qu'elles définissent .

On montre sans difficulté que HA = HB =HC : H se trouve sur l'axe ternaire orthogonal à la face ABC du tétraèdre.

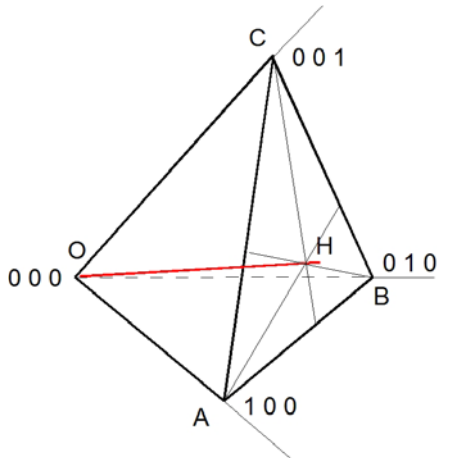


Figure T2_12A : hauteur

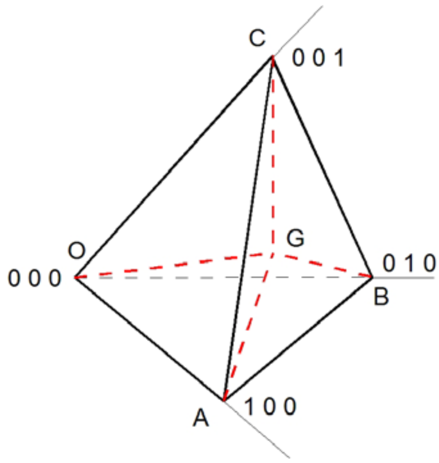


Figure T2_12B : isobarycentre

$$OH^2=(1/3,1/3,1/3)(G)\begin{pmatrix} 1/3 \\ 1/3 \\ 1/3 \end{pmatrix} \qquad OH=a\sqrt{2/3}$$

3 : position de l'isobarycentre G du tétraèdre : 1 /4 1 /4 1 /4 . Un calcul identique au précédant conduit à $OG=a\sqrt{3/8}$

4 : angle φ entre OG et GA Fig. T2_12B :

$$\cos\varphi = \frac{(-1/4,-1/4,-1/4)(G)\begin{pmatrix}-1/4\\-1/4\\3/4\end{pmatrix}}{\|(-1/4,-1/4,-1/4)\|\|(-1/4,-1/4,3/4)\|}$$

on trouve : $\cos\varphi = -1/3 \quad \varphi \simeq 109,47\,°$

On trouverait la même valeur de entre OG et GB et entre OG et GA . G se trouve en effet sur l'axe ternaire orthogonal à la face ABC du tétraèdre.

Remarque : retenir cette valeur particulière de l'angle $\varphi \simeq 109,47°$ *et de son cosinus :* $\cos\varphi = -1/3$.

Exercice T2_13 : Tenseur métrique associé à une base de réseau hexagonal

1 : tenseur métrique direct associé à la base de paramètres a b c

$$G = \begin{Bmatrix} a^2 & -1/2a^2 & 0 \\ -1/2a^2 & b^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{Bmatrix} \qquad V^2 = \det(G) \qquad V = a^2 c\frac{\sqrt{3}}{2}$$

2 : tenseur métrique réciproque : $G^* = G^{-1}$

$$G^* = \begin{Bmatrix} \left(2/a\sqrt{3}\right)^2 & \frac{1}{2}\left(2/a\sqrt{3}\right)^2 & 0 \\ \frac{1}{2}\left(2/a\sqrt{3}\right)^2 & \left(2/a\sqrt{3}\right)^2 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c^2} \end{Bmatrix}$$

en procédant par identification, on arrive à :

$$a^* = b^* = 2/a\sqrt{3} \quad c^* = 1/c \qquad \alpha^* = \beta^* = 90° \quad \gamma^* = 60°$$

Remarque : on peut obtenir ces résultats géométriquement, en partant plus simplement des relations de définition du réseau réciproque : $(\vec{a}_i|\vec{a}_j^*) = \delta_{ij}$ Figure T2_13

–

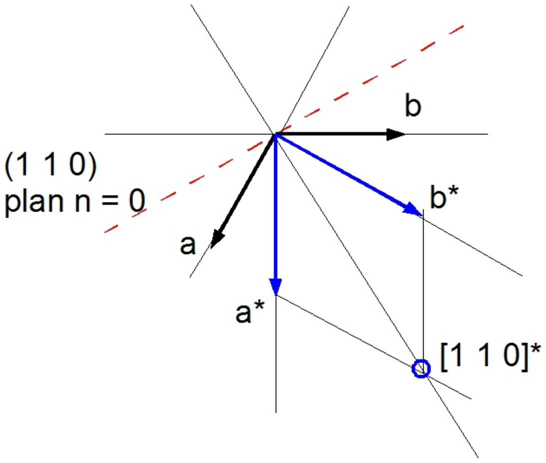


Figure T2_13 : réseaux direct et réciproque superposés

3 : Distance inter réticulaire D_{hkl}

$$\frac{1}{D_{hkl}^2} = (hkl)G^* \begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix} = \frac{4(h^2+hk+k^2)}{3a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

Exercice T2_14 : Tenseur métrique associé à une maille rhomboédrique

1 : tenseur métrique direct associé à la base rhomboédrique de paramètres :

$$a = b = c \qquad \alpha = \beta = \gamma \neq 90°$$

$$G = \begin{Bmatrix} a^2 & a^2\cos\alpha & a^2\cos\alpha \\ a^2\cos\alpha & a^2 & a^2\cos\alpha \\ a^2\cos\alpha & a^2\cos\alpha & a^2 \end{Bmatrix}$$

$$V^2 = \det(G) = a^6(1-\cos\alpha)(1+\cos\alpha - 2\cos^2\alpha)$$

ou encore :

$$V^2 = \det(G) = a^6(1-\cos\alpha)^2(1+2\cos\alpha)$$

soit finalement :

$$V = a^3(1-\cos\alpha)\sqrt{(1+2\cos\alpha}$$

2 : 1 1 1 est le premier nœud à partir de l'origine , la période de la rangée [1 1 1] , Fig.T2_14, est égale à : $\|\overrightarrow{111}\| = a\sqrt{3(1+2\cos\alpha)}$

Cas particuliers :

$$\alpha = 60° \quad \|\overrightarrow{111}\| = a\sqrt{6}$$

$$\alpha = 109{,}47° \quad (\cos\alpha = -1/3) \quad \|\overrightarrow{111}\| = a$$

On notera que la diagonale principale d'un rhomboèdre d'angle α = 109,47° (cos α = -1/3) est égale à son arête .

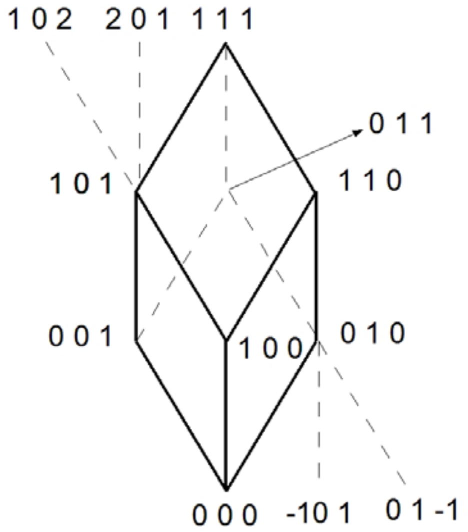


Figure T2_14 : Nœuds appartenant aux plans n = 0,1,2,3 de la famille (1 1 1)

3 : Distance entre plans :

$\frac{1}{D_{hkl}^2} = \left(hkl\right) G^* \begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix}$ après calcul de $G^* = G^{-1}$ (pour simplifier poser $c = \cos\alpha$), il vient :

$$\frac{1}{D_{hkl}^2} = \frac{1}{a^2(1-\cos\alpha)(1+2\cos\alpha)}\left[(1+\cos\alpha)S_{hkl} - 2\cos\alpha R_{hkl}\right]$$

avec : $S_{hkl} = h^2 + k^2 + l^2$ et $R_{hkl} = hk + kl + lh$

4 : Famille (1 1 1) : $D_{111} = \frac{1}{3} a\sqrt{3(1+2\cos\alpha)} = \frac{1}{3}\|\overrightarrow{111}\|$

Il y a 3 plans réticulaires de la famille (1 1 1) entre l'origine et le nœud 111 : Fig.T2_14

Les nœuds 0 0 0 ,-1 0 1 , 0 1-1 sont situés dans le plan n = 0 ,les nœuds 1 0 0, 0 1 0, 0 0 1 dans le plan n = 1 , etc . …

Noter que les plans n = 0 et n = 3 sont superposables.**cf. Cours 5.6.3**

Exercice T2_15 : Relation entre paramètres des réseaux direct et réciproque

1 : De la relation de définition : $(\vec{a}^*_i \mid \vec{a}_j) = \delta_{ij}$, on déduit que :

$$\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \wedge \vec{c}}{V} \qquad \vec{a} = \frac{\vec{b}^* \wedge \vec{c}^*}{V^*}$$

le réciproque $\vec{a}*$ de $\vec{a}$ est égal à $\dfrac{\vec{b}\wedge\vec{c}}{V}$, de même le réciproque $(\vec{a}^*)^*$ de $\vec{a}*$ est égal à $\dfrac{\vec{b}^*\wedge\vec{c}^*}{V^*}$ c'est à dire à $\vec{a}$. Conclusion : $(\vec{a}^*)^* = \vec{a}$

On peut aussi développer le double produit vectoriel :

$$(\vec{a}^*)^* = \frac{\vec{b}^*\wedge\vec{c}^*}{V^*} = \frac{1}{VV^*}(\vec{b}^*\wedge(\vec{a}\wedge\vec{b})) = \vec{a}$$

Le réciproque du réseau réciproque est bien le réseau direct.

2 : Tableau T2_15A .

La norme du vecteur $\vec{a}$ s'écrit : $a = \dfrac{1}{V*}b*c*\sin\alpha*$,en remplaçant $b*$ par $\dfrac{1}{V}ca\sin\beta$, on obtient $1 = c*c\sin\beta\sin\alpha*$.En remplaçant $c*$ par $\dfrac{1}{V}ab\sin\gamma$, on obtiendrait $1 = b*b\sin\gamma\sin\alpha*$

On procède de même pour établir les autres relations du tableau.

3 : Tableau T2_15B

Considérons le tenseur métrique direct **:** l'élément g^*_{12} du tenseur métrique **réciproque** $(G*) = (G)^{-1}$ est égal à :

$$g^*_{12} = \frac{abc^2}{V^2}(\cos\alpha\cos\beta - \cos\gamma) = \frac{ab}{V^2}(\frac{a^*b^*}{V*}\sin\gamma^*)^2(\cos\alpha\cos\beta - \cos\gamma)$$

en remplaçant $aa*$ et $bb*$ par leur expression du Tableau T2_15A, on obtient :

$$a*b*\frac{\cos\alpha\cos\beta - \cos\gamma}{\sin\alpha\sin\beta} = a*b*\cos\gamma*$$

d'où la relation cherchée, donnant $\cos\gamma*$ en fonction des cosinus des angles $\alpha\ \beta\ \gamma$ de la maille directe. Les éléments g^*_{13} et g^*_{32} donnent respectivement $\cos\beta*$ et $\cos\alpha*$.

En partant de $G = (G*)^{-1}$, on obtient par des calculs similaires, les relations du tableau T2_16B entre les cosinus des angles **directs** en fonction des cosinus des angles **réciproques** .

4 : Maille hexagonale : $a = b \neq c \quad \alpha = \beta = 90° \quad \gamma = 120°$

$$\cos\alpha* = 0 \quad \alpha* = 90° \quad a*a = 2/\sqrt{3} \quad a* = \frac{1}{a}\frac{2\sqrt{3}}{3}$$

$$\cos\beta* = 0 \quad \beta* = 90° \quad b*b = 2/\sqrt{3} \quad b* = \frac{1}{b}\frac{2\sqrt{3}}{3}$$

$$\cos\gamma* = 1/2 \quad \gamma* = 60° \quad c*c = 1 \quad c* = \frac{1}{c}$$

5 : Maille monoclinique : $a \neq b \neq c \quad \alpha = \gamma = 90° \quad \beta > 90°$

$$\cos\alpha^* = 0 \quad \alpha^* = 90° \quad a^* a = \frac{1}{\sin\beta} \quad a^* = \frac{1}{a\sin\beta}$$

$$\cos\beta^* = -\cos\beta \quad \beta^* = 180° - \beta \quad b^* b = 1 \quad b^* = \frac{1}{b}$$

$$\cos\gamma^* = 0 \quad \beta^* = 90° \quad c^* c = \frac{1}{\sin\beta^*} \quad c^* = \frac{1}{c\sin\beta}$$

6 : Maille rhomboédrique : $a = b = c \quad \alpha = \beta = \gamma \neq 90°$

$$\cos\alpha^* = \cos\beta^* = \cos\gamma^* = -\frac{1}{3} \quad \alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 109,47°$$

$$a^* = b^* = c^* = \frac{1}{a}\sqrt{\frac{3}{2}}$$

Le réseau cubique associé au réseau primitif rhomboédrique d'angle $\alpha = 109,47°$ est **corps centré**.

Le réseau cubique associé au réseau primitif rhomboédrique d'angle $\alpha = 60°$ est cubique à **faces centrées.**

Les 2 réseaux rhomboédriques étant réciproques l'un de l'autre, les 2 réseaux cubiques associés le sont aussi .

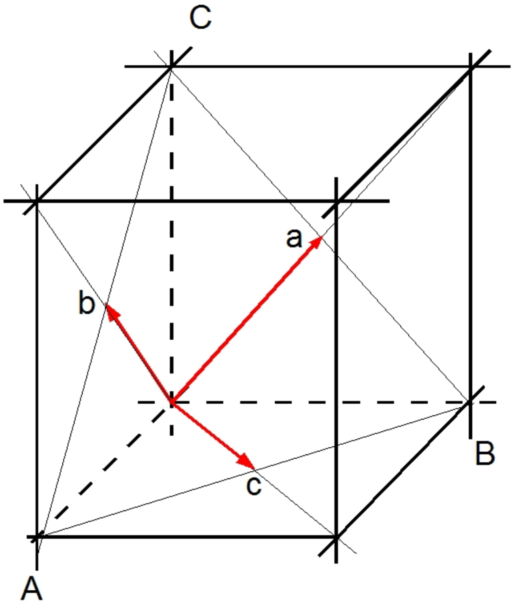
Conclusion : le réciproque d'un réseau à faces centrées est un réseau corps centré. Et réciproquement. cf **exercice T2_09**

Exercice T2_16 : Maille primitive associée à une maille orthogonale à faces centrées.

1 : $\vec{A},\vec{B},\vec{C}$ sont les vecteurs de base de la maille multiple à **faces centrées**. La maille primitive est construite sur les 3 translations $\vec{a},\vec{b},\vec{c}$ les plus courtes possibles. Fig.T2_16

$$(\vec{a},\vec{b},\vec{c}) = (\vec{A},\vec{B},\vec{C})(P) \qquad (P) = \begin{Bmatrix} 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{Bmatrix}$$

det(P) = **1 /4** : la maille multiple contient 4 nœuds



$$\vec{a} = \frac{1}{2}(\vec{B}+\vec{C})$$
$$\vec{b} = \frac{1}{2}(\vec{A}+\vec{C})$$
$$\vec{c} = \frac{1}{2}(\vec{A}+\vec{C})$$

Figure T2_16 : maille à faces centrées et maille primitive associée

2 : Soit (G_p) et (G_f) les tenseurs métrique associés respectivement aux mailles primitives et à faces centrées : $(G_p) = (P)^t (G_f)(P)$

$$(G_p) = \frac{1}{4}\left\{\begin{matrix} B^2+C^2 & C^2 & B^2 \\ C^2 & A^2+C^2 & A^2 \\ B^2 & A^2 & A^2+B^2 \end{matrix}\right\}$$

c'est le tenseur métrique d'une maille **triclinique** de paramètres :

$$a = \frac{1}{2}\sqrt{B^2+C^2} \quad b = \frac{1}{2}\sqrt{A^2+C^2} \quad c = \frac{1}{2}\sqrt{A^2+B^2}$$

$$ab\cos\gamma = \frac{1}{4}C^2 \quad soit \quad \cos\gamma = \frac{C^2}{\sqrt{B^2+C^2}\sqrt{A^2+C^2}}$$
$$ac\cos\beta = \frac{1}{4}B^2 \quad soit \quad \cos\beta = \frac{B^2}{\sqrt{B^2+C^2}\sqrt{A^2+B^2}}$$
$$bc\cos\alpha = \frac{1}{4}A^2 \quad soit \quad \cos\alpha = \frac{A^2}{\sqrt{A^2+C^2}\sqrt{A^2+B^2}}$$

Cas particulier de la maille **isométrique** : $A = B = C \quad \alpha = \beta = \gamma = 90°$

$$a = b = c = A\frac{\sqrt{2}}{2} \qquad \cos\alpha = cos\beta = \cos\gamma = \frac{1}{2}$$

La maille primitive (a b c) est **rhomboédrique** avec un angle égal à 60°

3 : Paramètres de la maille orthorhombique à faces centrées choisis arbitrairement :

A = 0,40 nm B = 0,50 nm C=0,60 nm

Paramètres calculés de la maille triclinique primitive : (1)

$$a = 0,3905\,nm \quad b = 0,3605\,nm \quad c = 0,3201\,nm$$
$$\alpha = 69,72° \quad \beta = 60,01° \quad \gamma = 50,27°$$

Programme **INDX :**

o On entre les valeurs des paramètres de la maille triclinique primitive : (1) (valeurs en A°) .

Certaines familles (h k l) ont en fait une multiplicité supérieure à 2 qui est la multiplicité attendue pour le système triclinique.

Exemple : on dénombre 4 familles (h k l) dont les plans sont tous équidistants de D_{hkl} = 2,77 A° , ce qui correspond à une multiplicité de 4 x 2 = 8

C'est donc qu'il existe une maille plus symétrique pour décrire ce réseau .

o On entre dans le programme les paramètres de la maille orthorhombique à faces centrées : toutes les familles (H K L) de la liste ont la multiplicité attendue pour le système orthorhombique.

Noter les nouveaux indices des familles de plans réticulaires , la correspondance se faisant par la transformation : $(h\ k\ l)_{tricli} = (H\ K\ L)_{ortho} (P)$

4 : Programme **TRUECELL ou LEPAGE** :

Le programme indique que les mailles orthorhombiques (3 axes binaires orthogonaux) ayant des paramètres A B C égaux respectivement à 4 ,00 A° ,5,00 A°, 6,00 A°

(aux erreurs d'arrondi près), ont un volume **4** fois plus grand que la maille primitive.

La maille multiple possède donc 4 nœuds .

La matrice $(P)^{-1}$ permet d'exprimer les $(H\ K\ L)_{ortho}$ en fonction des $(h\ k\ l)_{tricli}$:

$$(H\ K\ L)_{ortho} = (h\ k\ l)_{tricli} (P)^{-1}$$

en développant on obtient :

H+K = 2l H+L = 2k K+L = 2h Les H K L sont de même parité , les h k l étant des entiers.

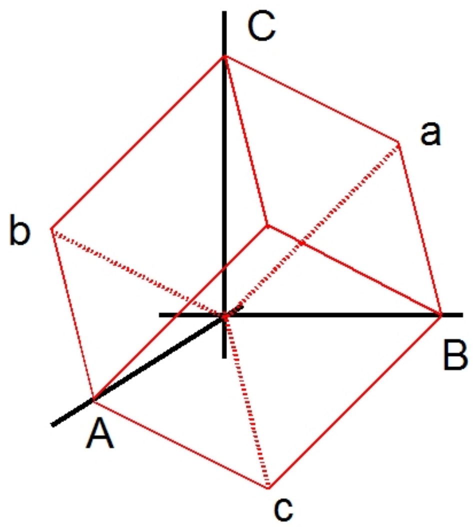
La maille orthorhombique la plus symétrique est à faces centrées .

Exercice T2_17 : Maille primitive associée à une maille orthogonale corps centré.

1 : $\vec{A},\vec{B},\vec{C}$ sont les vecteurs de base de la maille multiple **corps centré**. La maille primitive est construite sur les 3 translations $\vec{a},\vec{b},\vec{c}$ les plus courtes possibles. Fig.T2_17

$$(\vec{a},\vec{b},\vec{c}) = (\vec{A},\vec{B},\vec{C})(P) \qquad (P) = \begin{Bmatrix} -1/2 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & -1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & -1/2 \end{Bmatrix}$$

det(P) = **1 /2** : la maille multiple contient 2 nœuds



$$\vec{a} = \frac{\vec{B}+\vec{C}}{2} - \frac{\vec{A}}{2}$$
$$\vec{b} = \frac{\vec{A}+\vec{C}}{2} - \frac{\vec{B}}{2}$$
$$\vec{c} = \frac{\vec{A}+\vec{B}}{2} - \frac{\vec{C}}{2}$$

Figure T2_17 : maille corps centré et maille primitive associée

2 : Soit (G_p) et (G_f) les tenseurs métrique associés respectivement aux mailles primitives et à faces centrées : $(G_p) = (P)^t (G_f)(P)$

$$(G_p) = \frac{1}{4}\begin{Bmatrix} A^2+B^2+C^2 & -A^2-B^2+C^2 & -A^2+B^2-C^2 \\ -A^2-B^2+C^2 & A^2+B^2+C^2 & A^2-B^2-C^2 \\ -A^2+B^2-C^2 & A^2-B^2-C^2 & A^2+B^2+C^2 \end{Bmatrix}$$

c'est le tenseur métrique d'une maille **triclinique** de paramètres :

$$a = b = c = \frac{1}{2}\sqrt{A^2+B^2+C^2}$$

$$\cos\gamma = \frac{-A^2-B^2+C^2}{A^2+B^2+C^2} \quad \cos\beta = \frac{-A^2+B^2-C^2}{A^2+B^2+C^2} \quad \cos\alpha = \frac{A^2-B^2-C^2}{A^2+B^2+C^2}$$

Cas particulier de la maille **isométrique** : $A = B = C \quad \alpha = \beta = \gamma = 90°$

$$a = b = c = A\frac{\sqrt{3}}{2} \qquad \cos\alpha = \cos\beta = \cos\gamma = -\frac{1}{3}$$

La maille primitive (a b c) est **rhomboédrique** avec un angle égal à 109,47°

3 : Paramètres de la maille orthorhombique à faces centrées choisis arbitrairement :

A = 0,40 nm B = 0,50 nm C=0,60 nm

Paramètres calculés de la maille triclinique primitive : (1)

$$a = 0,4387\,nm \quad b = 0,4387\,nm \quad c = 0,4387\,nm$$
$$\alpha = 125,76° \quad \beta = 110,53° \quad \gamma = 93,72°$$

Programme **INDX :**

o On entre les valeurs des paramètres de la maille triclinique primitive : (1) (valeurs en A°) .

Certaines familles (h k l) ont une multiplicité supérieure à 2 qui est la multiplicité attendue pour le système triclinique.

Exemple : on dénombre 4 familles (h k l) dont les plans sont équidistants de D_{hkl} = 2,163 A°

ce qui correspond à une multiplicité de 4 x 2 = 8

C'est donc qu'il existe une maille plus symétrique pour décrire ce réseau .

o On entre dans le programme les paramètres de la maille orthorhombique corps centré : toutes les familles (H K L) de la liste ont la multiplicité attendue pour le système orthorhombique.

Noter les nouveaux indices des familles de plans réticulaires , la correspondance se faisant par la transformation : $(h\,k\,l)_{\text{tricli}} = (H\,K\,L)_{\text{ortho}}\,(P)$

4 : Programme **TRUECELL ou LEPAGE** :

Le programme indique que les mailles orthorhombiques (3 axes binaires orthogonaux) ayant des paramètres A B C égaux respectivement à 4 ,00 A° ,5,00 A°, 6,00 A°

(aux erreurs d'arrondi près), ont un volume **2** fois plus grand que la maille primitive.

La maille multiple possède donc 2 nœuds .

La matrice $(P)^{-1}$ permet d'exprimer les $(H\,K\,L)_{\text{ortho}}$ en fonction des $(h\,k\,l)_{\text{tricli}}$:

$$(H\,K\,L)_{\text{ortho}} = (h\,k\,l)_{\text{tricli}}(P)^{-1}$$

en développant on obtient :

H+K +L = 2(h+k+l) La somme H + K + L est paire, les h k l étant des entiers.

La maille orthorhombique la plus symétrique est corps centré .

EXERCICE T2_18 : Transformation d'une maille rhomboédrique en une maille hexagonale.

1: Soit (G_H) et (G_R) les tenseurs métrique associés respectivement aux mailles

hexagonale et rhomboédrique : $(G_H) = (P)^t (G_R)(P)$

$$(G_H) = \begin{Bmatrix} 2a_R^2(1-c) & -a_R^2(1-c) & 0 \\ -a_R^2(1-c) & 2a_R^2(1-c) & 0 \\ 0 & 0 & 3a_R^2(1+2c) \end{Bmatrix} \qquad c = \cos\alpha_R$$

On identifie les paramètres de la maille hexagonale :

$$a_H = b_H = a_R\sqrt{2(1-\cos\alpha_R)} \qquad c_H = a_R\sqrt{3(1+2\cos\alpha_R)}$$

Connaissant les paramètres de la maille hexagonale, on peut exprimer les paramètres de la maille rhomboédrique en fonction du rapport : $R = \dfrac{c_H}{a_H}$

$$a_R = a_H \frac{1}{3}\sqrt{R^2+3}$$

$$\cos\alpha_R = \frac{2R^2-3}{2(R^2+3)} \qquad \sin\frac{\alpha_R}{2} = \frac{3}{2\sqrt{R^2+3}}$$

2 : det(P) =3 : la maille hexagonale contient **3** nœuds, cf Fig .T2_14 et Fig .T2_18 :

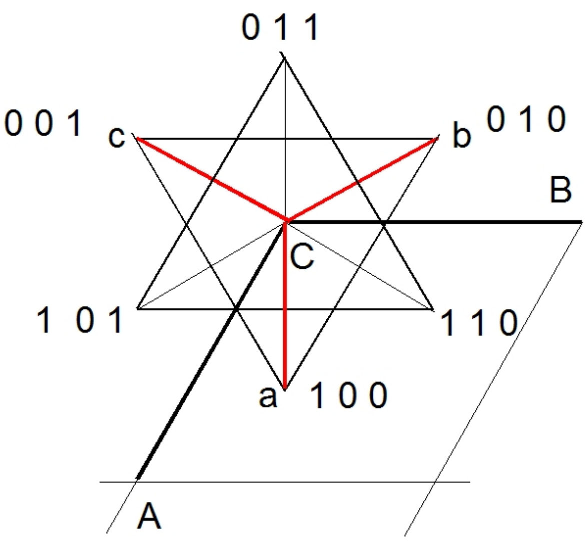


Figure T2_18 : Projection de la maille rhomboédrique (a,b,c) sur le plan perpendiculaire à l'axe C de la maille hexagonale (A,B,C)
Les coordonnées des nœuds sont rapportées à la maille rhomboédrique.

Position des nœuds dans la maille hexagonale :

$$\begin{Bmatrix}0\\0\\0\end{Bmatrix} \qquad \begin{Bmatrix}2/3\\1/3\\1/3\end{Bmatrix} = (P)^{-1}\begin{Bmatrix}1\\0\\0\end{Bmatrix} \qquad \begin{Bmatrix}1/3\\2/3\\2/3\end{Bmatrix} = (P)^{-1}\begin{Bmatrix}1\\1\\0\end{Bmatrix}$$

3 : Règle d'existence des indices H K L rapportés à la maille hexagonale :
$(H\ K\ L) = (h\ k\ l)(P)$ soit : $H = h-k \quad K = k-l \quad L = h+k+l$
ou encore :

$$-H+K+L = 3k \quad k \in \mathbb{Z}$$

4 : Application :

Bismuth : système trigonal ;
maille hexagonale triple : -H + K + L = 3n

$$a_H = b_H = 0,4547\,nm \qquad c_H = 1,1862\,nm$$

Tantalate de Lithium : système trigonal : -H + K + L = 3n
maille rhomboédrique :

$$a_R = b_R = c_R = 0,5466\,nm \qquad \alpha_R = \beta_R = \gamma_R = 56,25°$$

Sulfure de Zinc : système hexagonal ; maille hexagonale simple