THEME 2 : Enoncés des exercices

Création : juin 2003

Dernière modification : février 2005

OBJECTIFS :

Plans réticulaires . Indices de Miller

Tenseur métrique .Calculs cristallographiques

Utilisation des programmes INDX , TRUECELL et LEPAGE

LISTE des EXERCICES :

Exercice T2_01 : Famille de plans (h k l)

Soit un plan de la famille (h k l) contenant les nœuds : 1/2 3/2 0 ; 1 1 1 ; 0 1/2 1/2

1 - : Indiquer le réseau de Bravais.

2 - : Déterminer les indices h k l de cette famille et le numéro de ce plan dans la famille.

Exercice T2_02 : Famille de plans (h k l)

Soit un plan de la famille (h k l) contenant les nœuds : 1 2 0 ; 1 1 2 ; 3/2 1/2 1/2

1 - : Indiquer le réseau de Bravais.

2 - : Déterminer les indices h k l de cette famille et le numéro de ce plan dans la famille.

Exercice T2_03 : Rangée [u v w] Famille de plans (h k l)

Déterminer les indices u v w de la rangée commune aux familles de plans (h k l) suivants :

(1 1 0) et (1 1 1) (1 -1 0) et (1 1 1)

Exercice T2_04 : Rangée [u v w] Famille de plans (h k l)

1 - **:** Déterminer les indices (h k l) de la famille dont le plan de numéro N intercepte les axes 0x, 0y, 0z de la maille en des points de coordonnées :

N	Ox	Oy	Oz
2	1/ 3 0 0	0 2/3 0	0 0 1/2
3	3/2 0 0	$\propto$	0 0 3 /4

Représenter les plans de numéro 1 à N. (on prendra une maille orthorhombique pour simplifier)

2 - : Déterminer la rangée commune [u v w] à ces deux familles de plans .

3 - : Déterminer une famille de plans (h k l) parallèles à l'axe c et en zone avec cette rangée

Exercice T2_05 : Construction de plans réticulaires

On considère un réseau orthorhombique décrit par une maille de paramètres (a b c)

1 - : Construire les plans réticulaires ayant les numéros –1 ; 0 et 1 dans la famille 0 3 1 .

2 - : Calculer la distance entre ces plans

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

1 - : Rechercher systématiquement (sans considérer la symétrie), le nombre de familles de plans (h, k, l) ayant la même distance inter réticulaire D_{hkl} dans la forme générale $\{h,k,l\}$.

2 - : Même question pour les formes $\{h,h,l\}$ et $\{h,h,0\}$

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

Le plan perpendiculaire à l'axe c de la maille est invariant dans une rotation de 120° : les mailles :

$$(\vec{a},\vec{b},\vec{c}) \quad (\vec{b},-(\vec{a}+\vec{b}),\vec{c}) \quad (-(\vec{a}+\vec{b}),\vec{a},\vec{c})$$

sont équivalentes, Fig. T2_07.

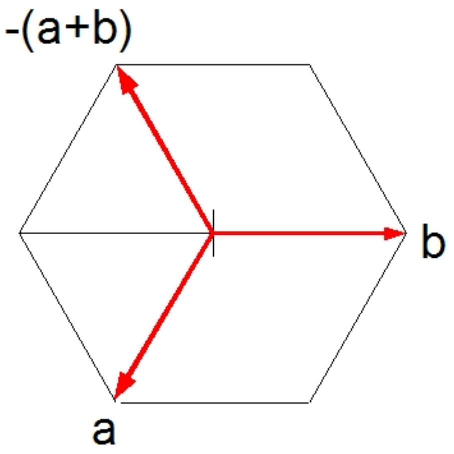

Figure T2_07 : Les 3 mailles hexagonales équivalentes en projection sur le plan (a,b)

On passe d'une description à l 'autre par les matrices de rotation :

$$\begin{Bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Bmatrix} \quad ou \quad \begin{Bmatrix} -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Bmatrix}$$

Il s'en suit que les plans (h,k,l) $(k,-(h+k),\ l)$ $(-(h+k),h,l)$ ont le même espacement.

Pour expliciter cette propriété, on introduit un 4^{ième} indice $i=-(h+k)$ afin que, dans la notation $(h\ k\ i\ l)$, la permutation circulaire des 3 premiers indices $(h\ k\ i\ )$ repère des familles de plans strictement équivalents.

Pour signaler le cas particulier du système hexagonal, on utilise soit la notation à 4 indices, soit un point pour remplacer le 4^{ième} indice .

Exemple : Notation standard : $(1\,2\,1)$

Notation spécifique de l'hexagonal : $(1,2,-3,1)$ ou $(1,2,.1)$

1 - : Notation à 4 indices des plans (h k l) : vérifier que l'expression **R(hk) = h^2 + hk + k^2** est invariante par permutation circulaire des indices **h, k, -(h+k)** **.**

2 - : Déterminer le nombre de plans ayant le même espacement dans la forme générale $\{1,1,0\}$. Représenter leur trace sur le plan (a,b) de la maille hexagonale

3 - : Recenser les plans ayant le même espacement dans la forme générale $\{h,k,l\}$.
Utiliser la notation à 4 indices.

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

On considère un réseau corps centré .

Déterminer la condition d'existence des nœuds h k l des nœuds du réseau réciproque.

Exercice T2_09 : Réseau réciproque d'un réseau corps centré et faces centrées.

Pour faciliter les constructions graphiques , on s'est limité à un réseau à maille orthogonale. On envisage successivement un réseau décrit par une maille corps centré et à faces centrées

1 - : Faire la projection du réseau réciproque sur le plan a*,b* . En déduire le type de réseau et les dimensions de la maille réciproque.

Application : détermination du nombre de proches voisins dans les structures **cubiques** corps centré et à faces centrées.

O n peut considérer que les atomes se placent sur des couches sphériques centrées sur un atome quelconque pris comme origine et de rayon égal à :

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

u, v, w sont des entiers et a est le paramètre de la maille(cubique)

Le nombre d'atomes situé sur une même couche est égal à la multiplicité de l'expression :

$u^2+v^2+w^2$

2 - : Fer α **:** le réseau est cubique corps centré avec un motif composé d'un seul atome de Fer situé en 0 0 0.

Indiquer les cordonnées des atomes, le nombre de voisins sur la couche considérée. Traiter les 6 premières couches.

3 - : Nickel : le réseau est cubique à faces centrées avec un motif composé d'un seul atome situé en 0, 0, 0. Mêmes questions .

Exercice T2_10 : Construction de plans réticulaires du réseau monoclinique

Le gypse ($CaSO_4$ 2 H_2O) cristallise dans le système monoclinique :

a = 0, 567 nm b = 1, 515 nm c = 0, 651 nm β = 118,38°

1 - : Construire les plans réticulaires portant les numéros –1, 0 et 1 de la famille (-2 0 1).

Construire le réseau réciproque en superposition sur le réseau direct.

2 - : Ecrire le tenseur métrique réciproque et déterminer la norme des vecteurs réciproques a* b* c* .

3 - : Calculer la distance entre les plans de la famille (-2 0 1) .

Exercice T2_11 : Construction des plans réciproques (1 1 1)* du réseau cubique

1 - : Rappeler la définition d'une famille **(u v w) *** de plans réciproques

2 - : Construction de la strate ''**zéro**'' :

Trouver deux nœuds h k l d'indices simples de la strate ''zéro'' rapportés à la maille cubique a* b* c*

Prendre comme vecteurs de base d'une maille orthogonale les vecteurs A* et B* joignant l'origine à ces nœuds, le troisième vecteur C * étant parallèle à la rangée [1 1 1]

Ecrire la matrice de transformation de la base (a*, b*, c*) en (A*,B*,C*) . Calculer son inverse.

Vérifier la symétrie d'ordre 3

3 - : Construction de la strate '' **un** ''

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

Soit un tétraèdre régulier de coté a : on considère le repère ayant pour origine un sommet quelconque et pour vecteurs de base $\vec{a}\,\vec{b}\,\vec{c}$, les vecteurs joignant ce sommet aux trois autres .

1 - : Indiquer les coordonnées des sommets , relativement à la base $(\vec{a}\,\vec{b}\,\vec{c}\;)$. Ecrire le tenseur métrique associé à cette base.

2 - : Calculer la hauteur du tétraèdre

3 - : Calculer la position du centre de masse G en supposant qu'il y a 4 atomes identiques aux sommets du tétraèdre .

4 - : Calculer l'angle entre les directions issues de G et joignant les 4 sommets .

Exercice T2_13 : Calculs rapportés à une base de réseau hexagonal

1 - : Ecrire le tenseur métrique direct associé à la base $(\vec{a}\,\vec{b}\,\vec{c})$ du réseau direct .

2 - : En déduire le tenseur métrique réciproque et les paramètres de la base réciproque .

3 - : Donner l'expression de la distance entre plans de la famille (h k l) en fonction de a b c

Exercice T2_14 : Calculs rapportés à une base rhomboédrique.

Soient **a** et α les paramètres de la maille **rhomboédrique** associée au réseau trigonal **.**

1 - : Déterminer le tenseur métrique direct et le volume de la maille **.**

2 - : Calculer la période de la rangée [1 1 1]. Cas particulier : $\alpha = 60°$; $\alpha = 109,47°$

3 - : Calculer la distance entre plans de la famille (h k l)

4 - : Cas de la famille (1 1 1)

Exercice T2_15 : Relations générales entre paramètres des réseaux direct et réciproque

1 - : De la même façon qu'il a été montré que $\vec{a}^* = \dfrac{\vec{b} \wedge \vec{c}}{V}$ ($\vec{b}\,^*$ et $\vec{c}\,^*$ sont obtenus par permutation circulaire, vérifier que :

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

$\vec{a}$ et $\vec{b}$ sont obtenus par permutation circulaire. En déduire que le réciproque du réseau réciproque est le réseau direct.

2 - : Vérifier les relations suivantes :

$$a^* = \frac{1}{a \sin\beta \sin\gamma^*} = \frac{1}{a \sin\beta^* \sin\gamma}$$

$$b^* = \frac{1}{b \sin\gamma \sin\alpha^*} = \frac{1}{b \sin\gamma^* \sin\alpha}$$

$$c^* = \frac{1}{c \sin\alpha \sin\beta^*} = \frac{1}{c \sin\alpha^* \sin\beta}$$

Tableau T2_ 15A : Relations entre paramètres de la maille directe et réciproque.

3 - : Vérifier les relations suivantes :

$$\cos\alpha^* = \frac{\cos\beta\cos\gamma - \cos\alpha}{\sin\beta\sin\gamma} \qquad \cos\alpha = \frac{\cos\beta^*\cos\gamma^* - \cos\alpha^*}{\sin\beta^*\sin\gamma^*}$$

$$\cos\beta^* = \frac{\cos\gamma\cos\alpha - \cos\beta}{\sin\gamma\sin\alpha} \qquad \cos\beta = \frac{\cos\gamma^*\cos\alpha^* - \cos\beta^*}{\sin\gamma^*\sin\alpha^*}$$

$$\cos\gamma^* = \frac{\cos\alpha\cos\beta - \cos\gamma}{\sin\alpha\sin\beta} \qquad \cos\gamma = \frac{\cos\alpha^*\cos\beta^* - \cos\gamma^*}{\sin\alpha^*\sin\beta^*}$$

Tableau T2_ 15B : Relations entre les angles de la maille directe et réciproque.

On remarque que ces expressions se déduisent les unes des autres par permutation circulaire des angles α β γ .

4 - : Application : Maille hexagonale

5 - : Application : Maille monoclinique

6 - : Application : Maille rhomboédrique d'angle α égal à 60°. En déduire le réseau réciproque associé à la maille cubique à faces centrées**.**

EXERCICE T2_16 : Maille PRIMITIVE associée à une maille orthogonale à faces centrées.

On considère un réseau décrit par une maille **orthorhombique** à **faces centrées** **F** : on cherche la **maille primitive** correspondante **P** .

1 - : Ecrire la matrice de la transformation **F** vers **P**

2 - : Déterminer les paramètres de la maille primitive. Cas particulier de la maille isométrique.

3 - : Application numérique : programme **INDX**

Choisir des paramètres (réalistes) d'une maille orthorhombique et calculer les paramètres de la maille primitive décrivant ce réseau .

Une fois les valeurs ***(en A°)*** des paramètres de maille entrées, le programme ***INDX*** fournit en retour une liste des familles (h k l) indexées et rangées suivant les distances D_{hkl} décroissantes et avec leur multiplicité.

- Entrer d'abord les valeurs des paramètres de la maille **triclinique primitive** et imprimer la liste des famille (h k l)
- Entrer ensuite les valeurs des paramètres de la maille **orthorhombique à faces centrées** et imprimer la liste des familles (H K L)

Vérifier la correspondance entre les indices (h k l) et (H K L) . Comparer ces 2 listes et en particulier la multiplicité des familles (h k l) . Conclusion

4 - : Programmes **TRUECELL ou LEPAGE**

Partant de n'importe qu'elle maille bâtie sur les 3 plus courtes translations, l'algorithme recherche les axes binaires. Leur distribution dans l'espace détermine la symétrie du réseau et par suite une base de réseau mieux adaptée .

Supposons qu'on ait, à l'aide d'un logiciel approprié, déterminé une maille triclinique dont les paramètres sont ceux calculés, paragraphe 2, et indexé les familles (h k l) relativement à cette base de réseau.

On se propose, à l'aide des programmes **TRUECELL ou LEPAGE** *de rechercher d'autres mailles plus symétriques si elles existent.*

Entrer les paramètres ***(calculés en (3) en A°)*** et lancer le programme.

Rechercher, parmi les mailles multiples possibles proposées, la maille la plus symétrique et la plus petite. Conclusion.

EXERCICE T2_17 : Maille PRIMITIVE associée à une maille orthogonale corps centré.

On considère un réseau décrit par une maille **orthorhombique corps centré I** : on cherche la **maille primitive** correspondante **P** .

1 - : Ecrire la matrice de la transformation **I** vers **P**

2 - : Déterminer les paramètres de la maille primitive. Cas particulier de la maille isométrique.

3 - : Application numérique : programme **INDX** (cf Ex.T2_16)

Choisir des paramètres (réalistes) d'une maille orthorhombique et calculer les paramètres de la maille primitive décrivant ce réseau .

- Entrer d'abord les valeurs ***(calculés en (3) en A°)*** des paramètres de la maille **primitive** et imprimer la liste des famille (h k l)

- Entrer ensuite les valeurs des paramètres de la maille **orthorhombique corps centré** et imprimer la liste des familles (H K L)

Vérifier la correspondance entre les indices (h k l) et (H K L) . Comparer ces 2 listes et en particulier la multiplicité des familles (h k l) . Conclusion

4 - : Programmes **TRUECELL ou LEPAGE** (cf Ex.T2_16)

Entrer les paramètres de la maille primitive et lancer le programme.

Rechercher, parmi les mailles multiples possibles proposées, la maille la plus symétrique et la plus petite. Conclusion.

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

On considère un réseau trigonal généré par les translations d' une maille rhomboédrique de paramètres :

$$a_R = b_R = c_R \quad \alpha_R = \beta_R = \gamma_R$$

Il est souvent plus commode d'associer à ce réseau une maille hexagonale multiple, en effectuant un changement de base de matrice (P) :

$$(\vec{a}_H\ \vec{b}_H\ \vec{c}_H) = (\vec{a}_R\ \vec{b}_R\ \vec{c}_R)(P)$$

avec :

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

1 - : Soit $\mathbf{G_R}$ le tenseur métrique associé à la maille rhomboédrique, calculer le tenseur métrique $\mathbf{G_H}$ associé à la maille hexagonale.

En déduire les paramètres de la maille hexagonale en fonction de des paramètres rhomboédriques . Et inversement.

2 - : Indiquer le nombre de nœuds contenus dans la maille hexagonale et leurs coordonnées

3 - : Déterminer la règle d'existence des indices H K L rapportés à la maille hexagonale.

4 - : Application :

- La maille rhomboédrique du Bismuth a pour dimensions :

$$a_R = b_R = c_R = 0,4746\ nm \quad \alpha_R = \beta_R = \gamma_R = 57,24°$$

Déterminer les paramètres de la maille hexagonale triple correspondante

- Indiquer le système cristallin d'après la liste, ci- jointe, des familles (h k l) du Tantalate de Lithium Li Ta O_3 .
- Même question pour le sulfure de zinc ZnS
- Déterminer éventuellement les paramètres de la maille rhomboédrique correspondante.

Liste des 12 premières réflexions du Li Ta O_3

$\mathbf{a_H} = \mathbf{b_H}$ = 0, 5153 nm $\mathbf{c_H}$ = 1, 3755 nm .

0 1 2 ; 1 0 4 ; 1 1 0 ; 0 0 6 ; 1 1 3 ; 2 0 2 ; 0 2 4 ; 1 1 6 ; 1 2 2 ; 0 1 8 ; 2 1 4 ; 3 0 0 ;

Liste des 12 premières réflexions du ZnS

$\mathbf{a_H} = \mathbf{b_H}$ = 0, 32495 nm $\mathbf{c_H}$ = 0 ,52069 nm .

0 1 0 ; 0 0 2 ; 0 1 1 ; 0 1 2 ; 1 1 0 ; 0 1 3 ; 0 2 0 ; 1 1 2 ; 0 2 1 ; 0 0 4 ; 0 2 2 ; 0 1 4 ;