

Physique des Matériaux I
Série 1 : Les réseaux direct et réciproque

Devoir 1 : Etude de quelques réseaux réciproques

Exercice 4 : Réseau de Bravais de l'indium

1. Réseau direct de l'indium : tétragonal, donc :

$$a = b \neq c ; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

Les vecteurs de translation fondamentaux du réseau réciproque sont donnés par :

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{V} \vec{b} \wedge \vec{c}$$

$$\vec{b}^* = \frac{2\pi}{V} \vec{c} \wedge \vec{a}$$

$$\vec{c}^* = \frac{2\pi}{V} \vec{a} \wedge \vec{b}$$

Avec $V = \vec{a} \cdot (\vec{b} \wedge \vec{c}) = \det(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$. On choisit une base orthonormée $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ les vecteurs de translation fondamentaux du réseau direct et réciproque s'écrivent :

$$\vec{a} = 3,25 \vec{i}$$

$$\vec{a}^* = 1,93 \vec{i}$$

$$\vec{b} = 3,25 \vec{j}$$

$$\vec{b}^* = 1,93 \vec{j}$$

$$\vec{c} = 4,95 \vec{k}$$

$$\vec{c}^* = 1,27 \vec{k}$$

Le réseau réciproque de l'indium est caractérisé par :

$$a^* = b^* \neq c^* ; \alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90^\circ$$

On conclut que le réseau réciproque est aussi tétragonal.

2. On a :

a. $V = 52,3 \text{ \AA}^3$

$V^* = 4,73 \text{ \AA}^{-3}$

b. $V \times V^* = 247$ (sans unité avec 3 chiffres significatifs).

Ce résultat est en accord avec la formule démontrée en TD $V \times V^* = (2\pi)^3 = 248$ (avec 3 chiffres significatifs)

Exercice 5 : Réseau réciproque d'un réseau hexagonal

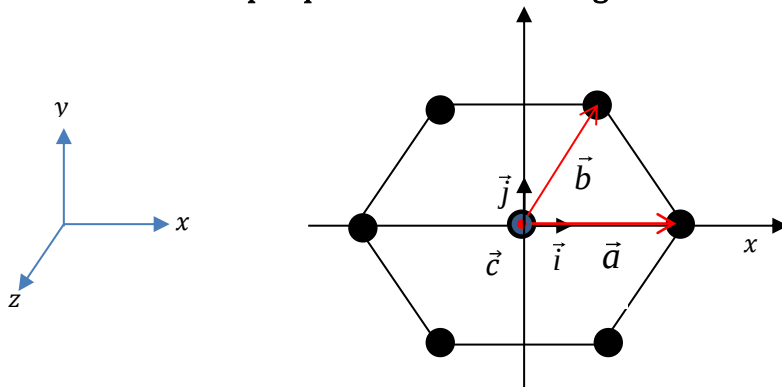


Figure 1

1. D'après la figure donnée dans le texte, les vecteurs de translation du réseau direct s'écrivent dans la base orthonormée $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$:

$$\vec{a} = a \vec{i}$$

$$\vec{b} = \frac{a}{2} \vec{i} + \frac{a\sqrt{3}}{2} \vec{j}$$

$$\vec{c} = c \vec{k}$$

Les vecteurs du réseau réciproque sont donnés par :

$$\begin{aligned}\vec{a}^* &= \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \vec{i} - \frac{1}{2} \vec{j} \right) \\ \vec{b}^* &= \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \vec{j} \\ \vec{c}^* &= \frac{2\pi}{c} \vec{k}\end{aligned}$$

2. Le réseau réciproque est caractérisé par.

$$\|\vec{a}^*\| = \|\vec{b}^*\| = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}$$

$$\alpha^* = \beta^* = 90^\circ \text{ et } \gamma^* = 120^\circ$$

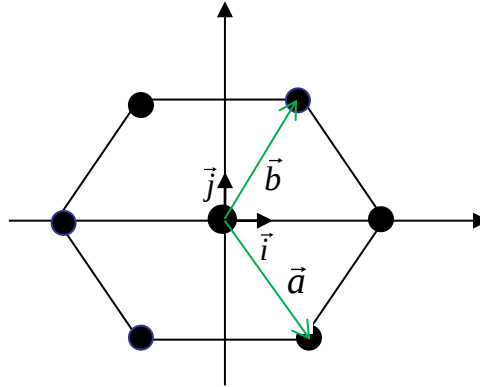
Donc c'est aussi un réseau hexagonal.

3. Pour que $\frac{c^*}{a^*} = \frac{c}{a}$ il faut que $\frac{c}{a} = \frac{(3)^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2}} \approx 0.931$

4. Si $\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}}$ alors $\frac{c^*}{a^*} = \sqrt{\frac{9}{32}}$

Remarque

Reprendre les questions 1. et 2. dans le cas du réseau de Bravais hexagonal simple défini par les vecteurs de translation fondamentaux de la figure ci-dessous.

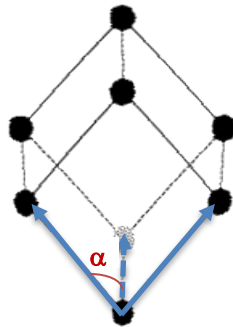


Exercice 6 : Réseau réciproque du Bismuth (Exercice difficile)

Le réseau rhomboédrique est défini par les paramètres :

$$\begin{aligned}a_1 &= a_2 = a_3 \\ \alpha &= \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ\end{aligned}$$

On note a la longueur du côté et α l'angle.



A partir de la définition montrer que le réseau réciproque est aussi trigonal vérifiant :

$$\begin{aligned}b_1 &= b_2 = b_3 = b \\ \alpha^* &= \beta^* = \gamma^* < 120^\circ, \neq 90^\circ\end{aligned}$$

avec :

$$b = \frac{2\pi}{a\sqrt{1 + 2\cos\alpha \cdot \cos\alpha^*}}$$

$$\cos\alpha^* = -\frac{\cos\alpha}{1 + \cos\alpha}$$