1 Réseau cristallin, réseau réciproque

On considère une structure bidimensionnelle, de composition XY, présentant deux types d'arrangements α et β.

— La structure α correspond à l'arrangement des atomes X ($\circ$) et Y($\bullet$) représenté dans la figure 1.

— La structure β, peut être décrite dans une maille rectangulaire de côtés $a = 0,6$ nm et $b = 0,4$ nm. Les coordonnées cristallographiques relatives des atomes dans la maille sont :
  - — atome X : (0 , 0) et (1/2 , 1/2)
  - — atome Y : (0 , 1/4) et (1/2 , 3/4)

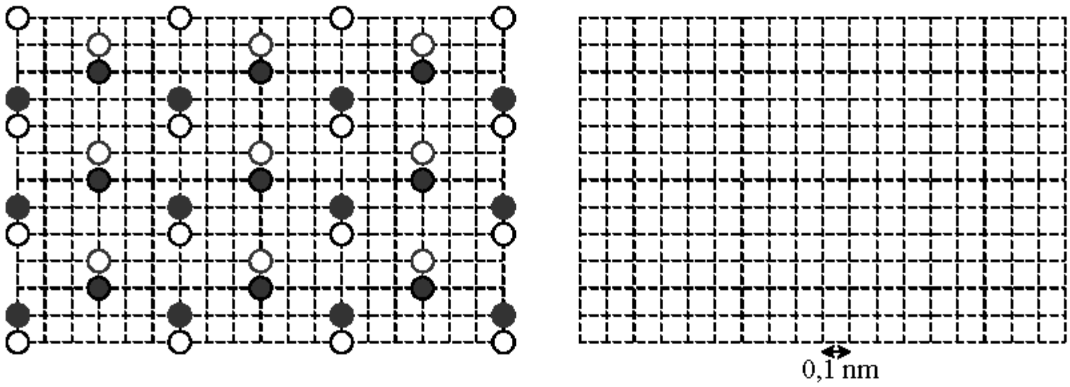

FIGURE 1 – Structure α

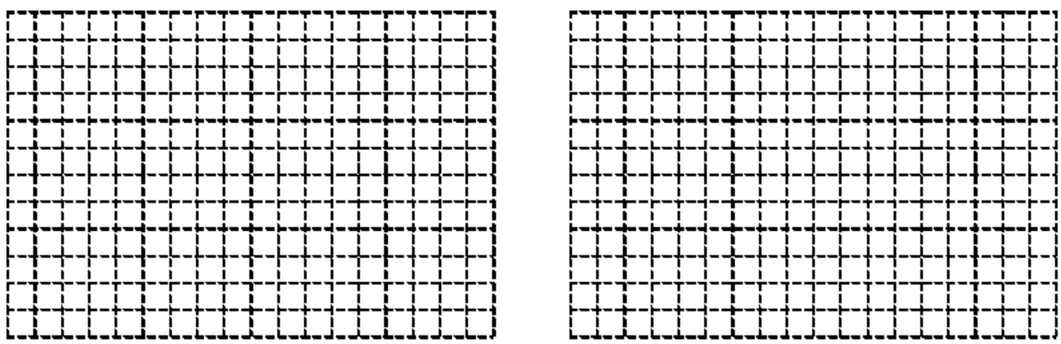

FIGURE 2 – Structure β

1.1 Réseau direct.

1. Déterminer une maille primitive pour le réseau α. Préciser les coordonnées réduites des atomes X et Y appartenant à la maille.
2. Déterminer une maille primitive pour le réseau β. La maille rectangulaire choisie pour le réseau β est-elle primitive ou multiple ?
3. Représenter pour chaque structure les nœuds du réseau de Bravais et dessiner la cellule de Wigner-Seitz (cellule unitaire de symétrie).

1.2 Réseau réciproque.

1. A partir des mailles primitives respectives ($\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$) et ($\vec{b}_1$, $\vec{b}_2$) des réseaux α et β, construire les réseaux réciproques correspondants sur la figure 3.
2. Dessiner la première zone de Brillouin.

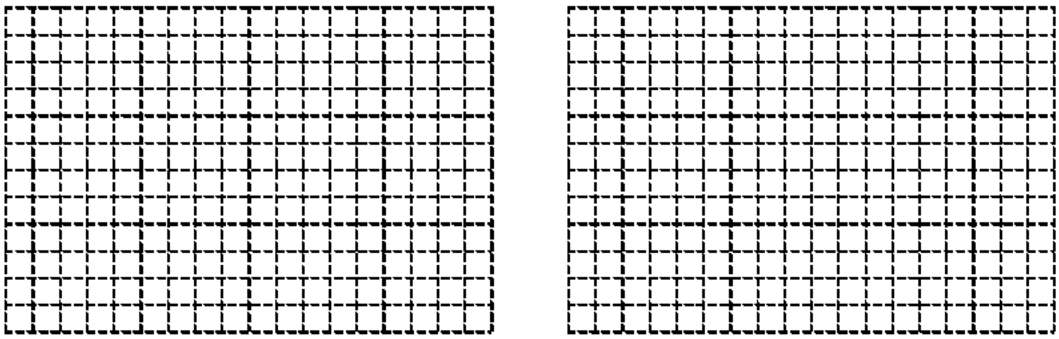

FIGURE 3 – Réseaux réciproques

1.3 Ligne réticulaire et indices de Miller.

Dans cette partie on s'intéresse à la structure α. On appelle ligne réticulaire une ligne passant par deux nœuds du réseau. On peut ainsi définir des familles de lignes réticulaires parallèles.

1. Montrez que l'équation d'une ligne réticulaire peut se mettre sous la forme

$$h\frac{x}{a} + k\frac{y}{b} = n$$

   où h, k, et $n \in \mathbb{Z}$. (h, k) sont appelés indices de Miller et caractérisent cette famille de lignes. Donner une interprétation géométrique simple de ces indices. Dessinez la ligne (1, 2).

2. Montrer que le vecteur $\vec{G}_{hk} = h\vec{a}_1^* + k\vec{a}_2^*$ du réseau réciproque est orthogonal aux lignes réticulaires (h,k) et que sa norme est égale à $2\pi/d_{hk}$, où d_{hk} est la distance réticulaire séparant deux lignes consécutives (h, k).

   Ce résultat peut aisément être généralisé à trois dimensions : $\vec{G}_{hkl} = h\vec{a}_1^* + k\vec{a}_2^* + l\vec{a}_3^*$ est orthogonal aux plans réticulaires (h,k,l) et sa norme vaut $2\pi/d_{hkl}$, d_{hkl} étant la distance réticulaire séparant deux plans consécutifs.