



Physique des solides

Une introduction

Jean-michel.gillet@centralesupelec.fr



Structure des cristaux

1. Symétrie de translation et réseaux de Bravais
 1. Définition
 2. Mailles
2. Systèmes cristallographiques
 1. Operations ponctuelles et translations
 2. Systèmes et réseaux
 3. Cristal
3. Réseau réciproque
 1. Construction du R.R.
 2. R.R. et plans cristallographiques



1. Symétrie de translation et réseaux de Bravais

1. Définition d'un réseau de Bravais

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ non coplanaires

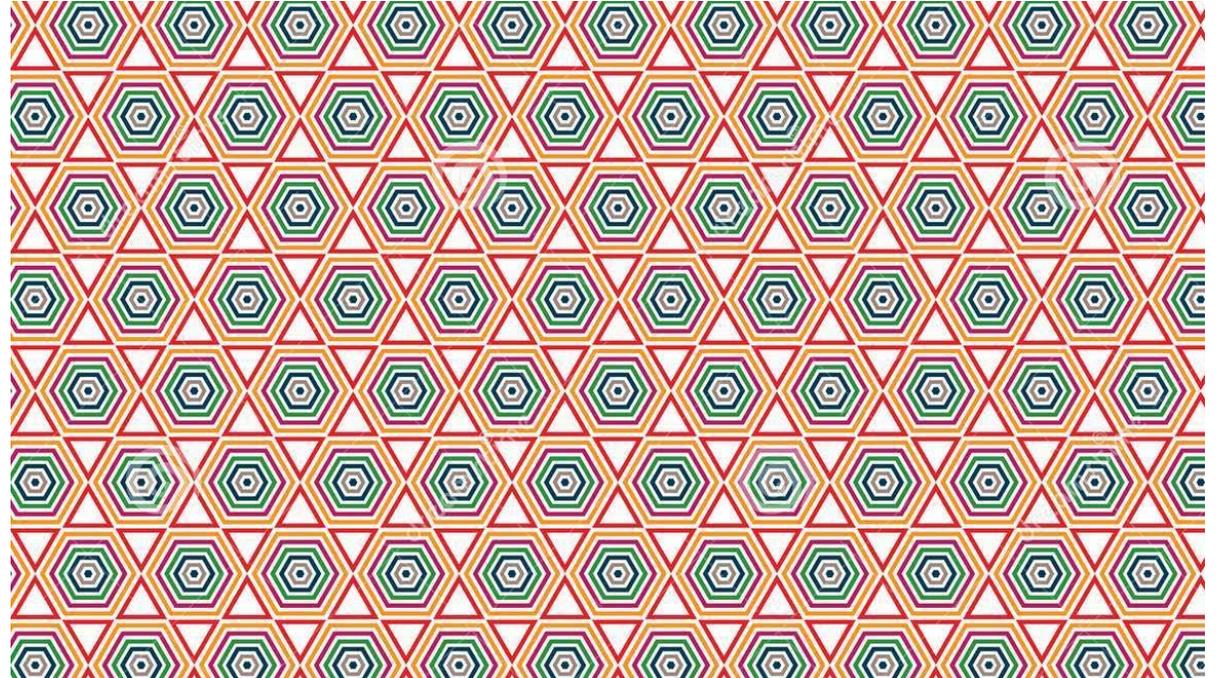
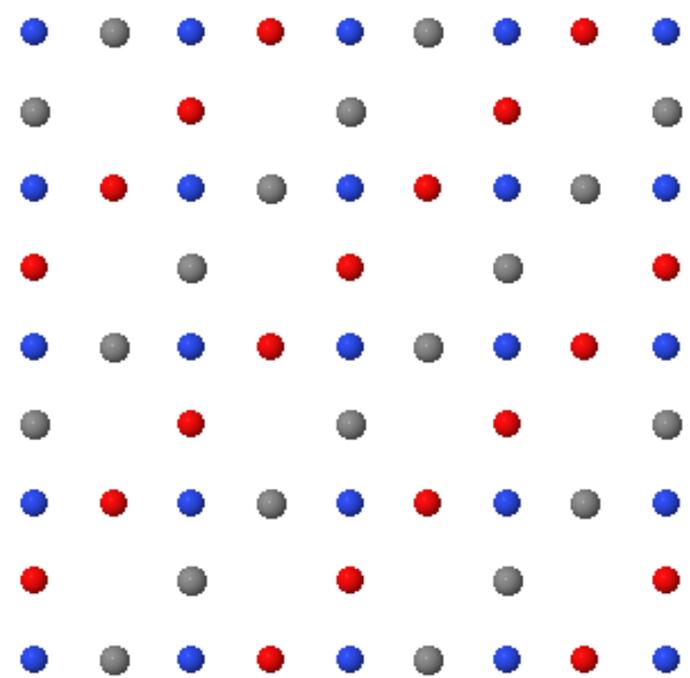
$$n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}$$



1. Symétrie de translation et réseaux de Bravais

1. Définition d'un réseau de Bravais

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

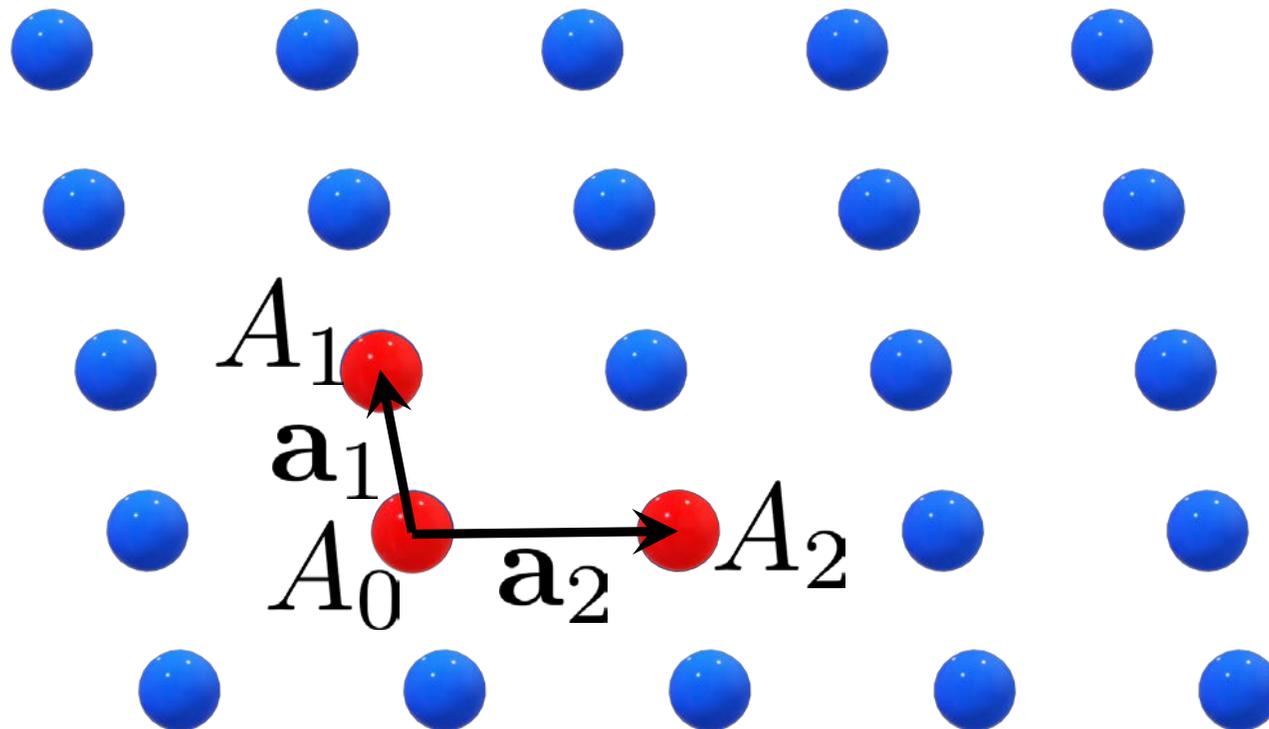




1. Symétrie de translation et réseaux de Bravais

1. Définition d'un réseau de Bravais

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$



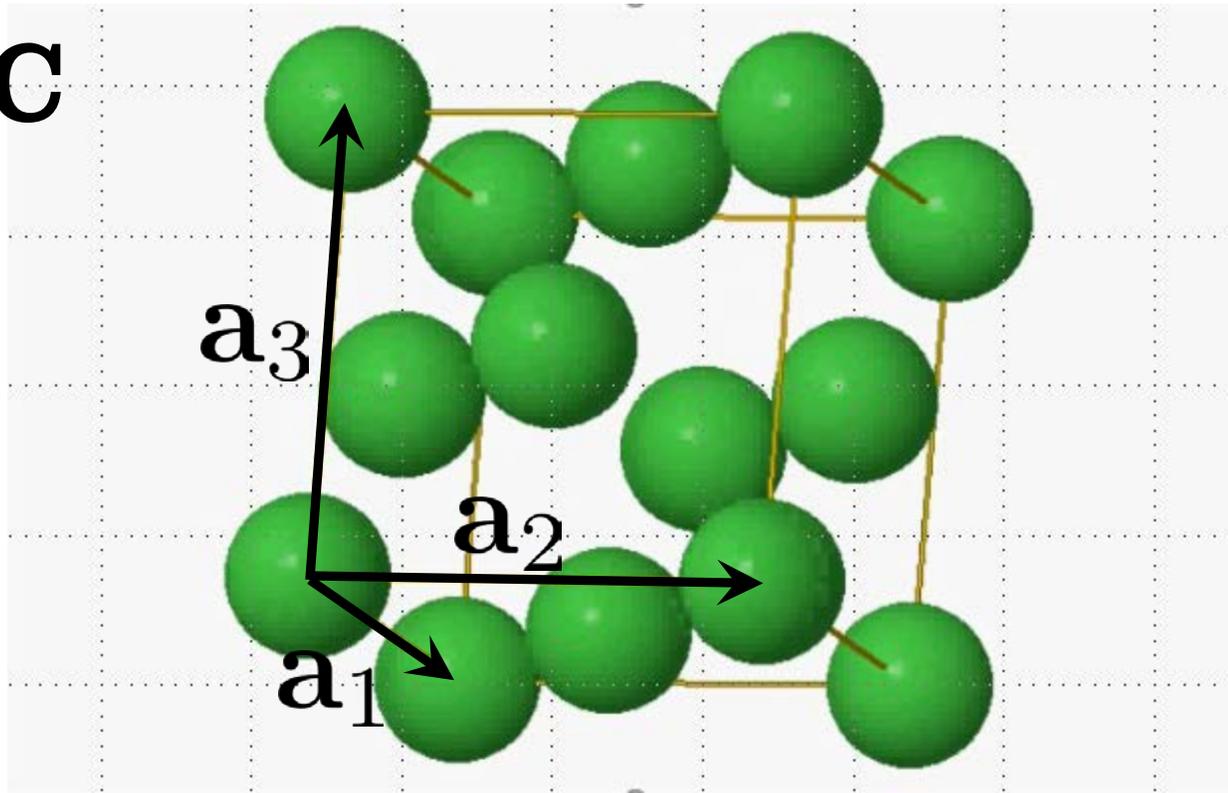


1. Symétrie de translation et réseaux de Bravais

2. Maille

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

Le cas CFC



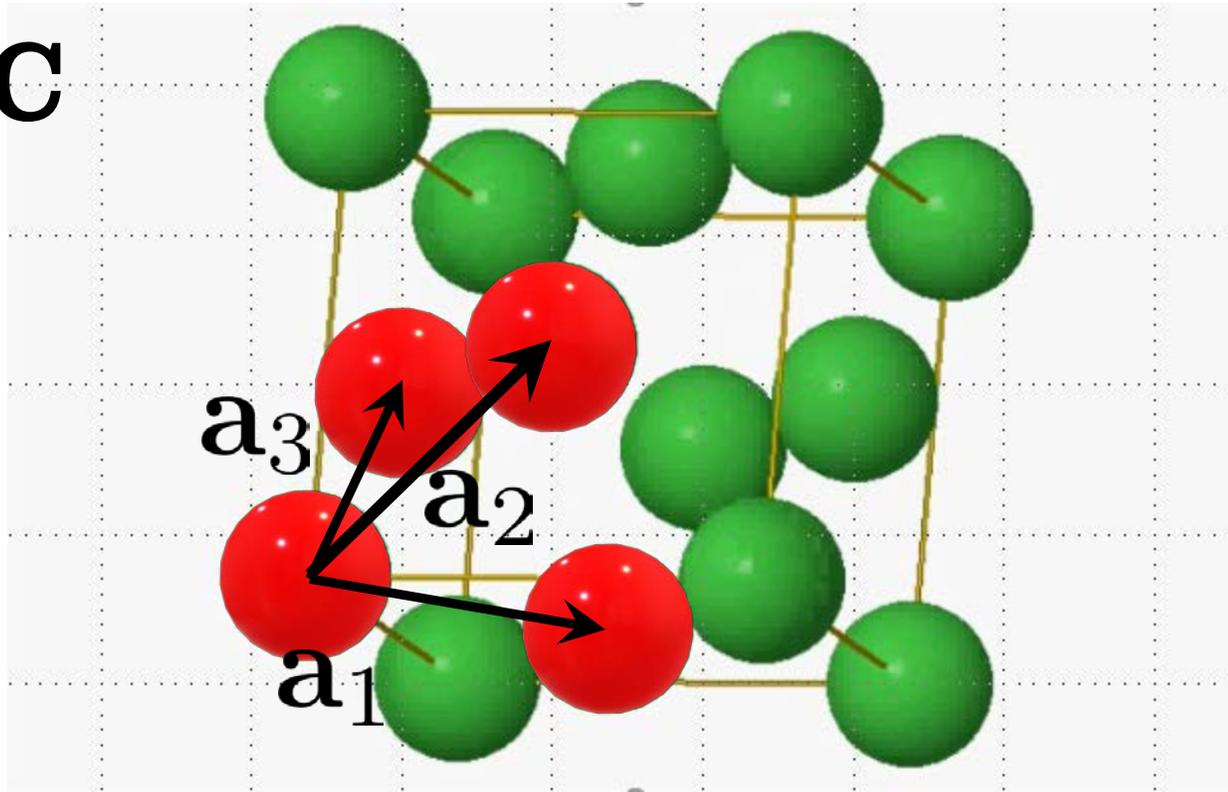


1. Symétrie de translation et réseaux de Bravais

1. Définition d'un réseau de Bravais

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

Le cas CFC



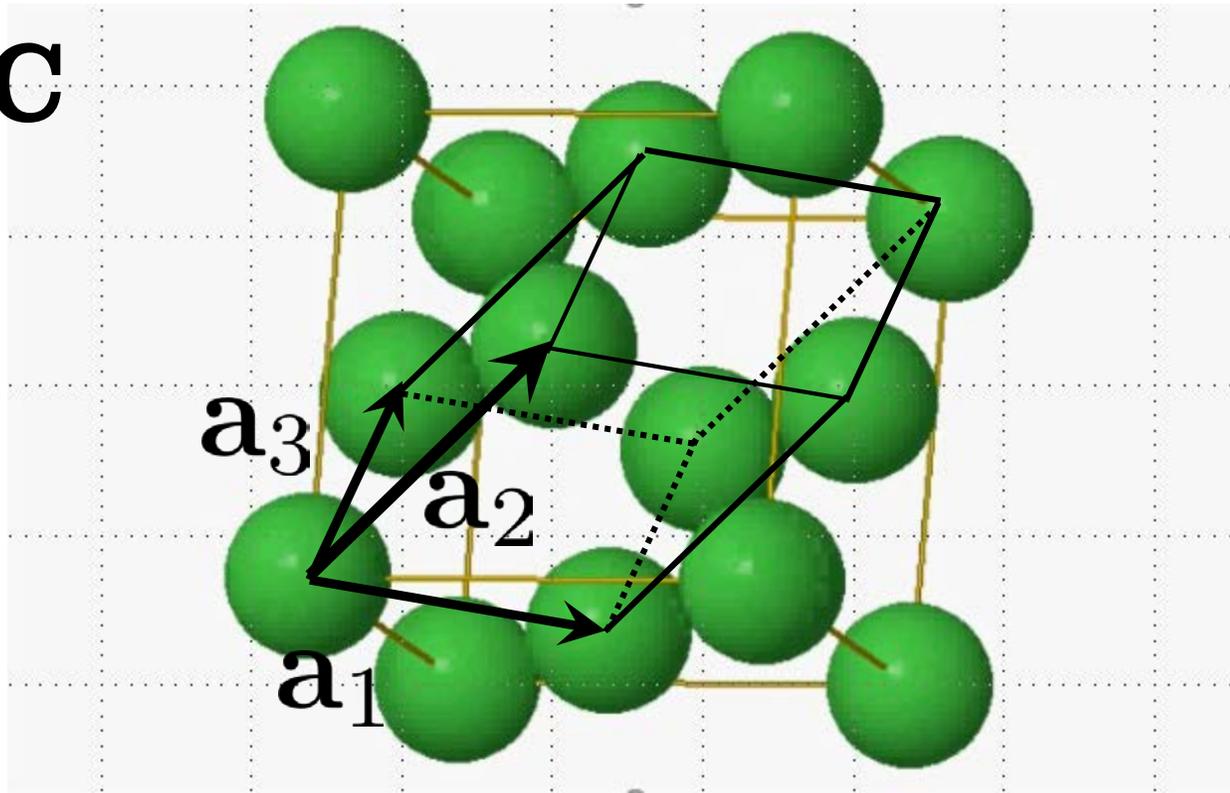


1. Symétrie de translation et réseaux de Bravais

2. Maille

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

Le cas CFC



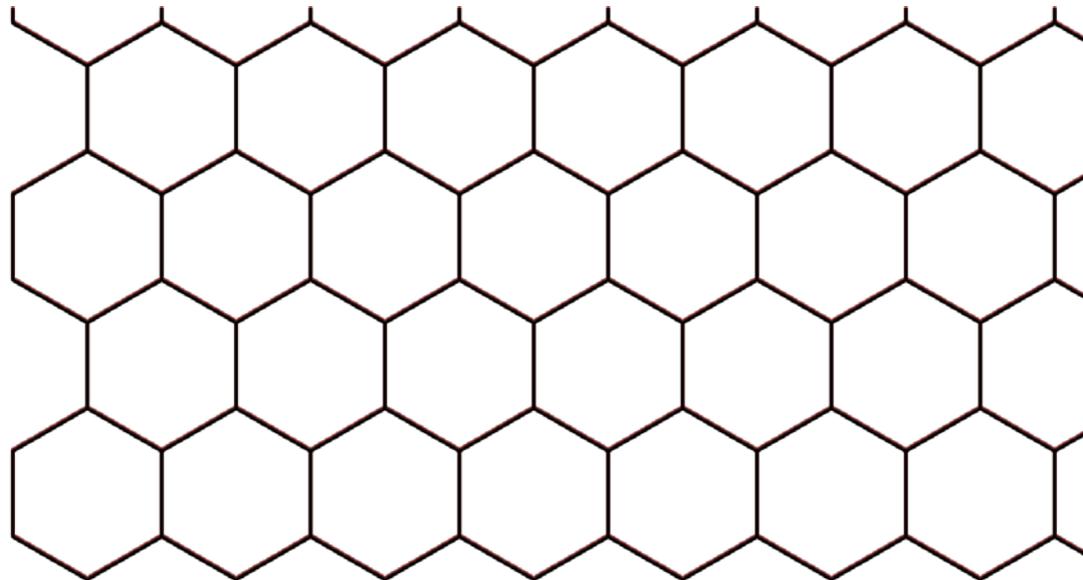


1. Symétrie de translation et réseaux de Bravais

2. Maille

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

Le cas hexagonal : pas Bravais



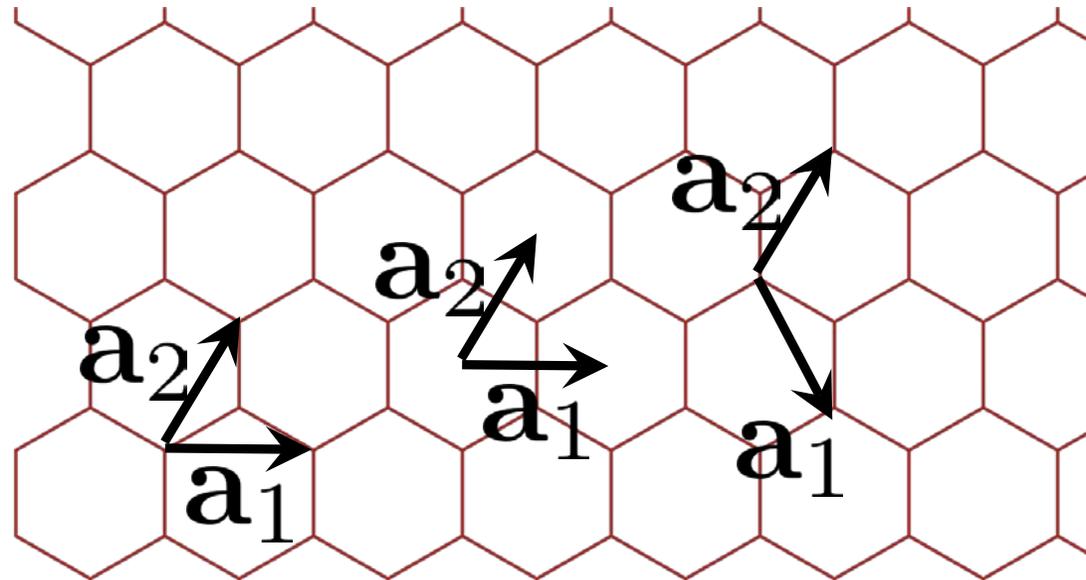


1. Symétrie de translation et réseaux de Bravais

2. Maille

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

Le cas hexagonal

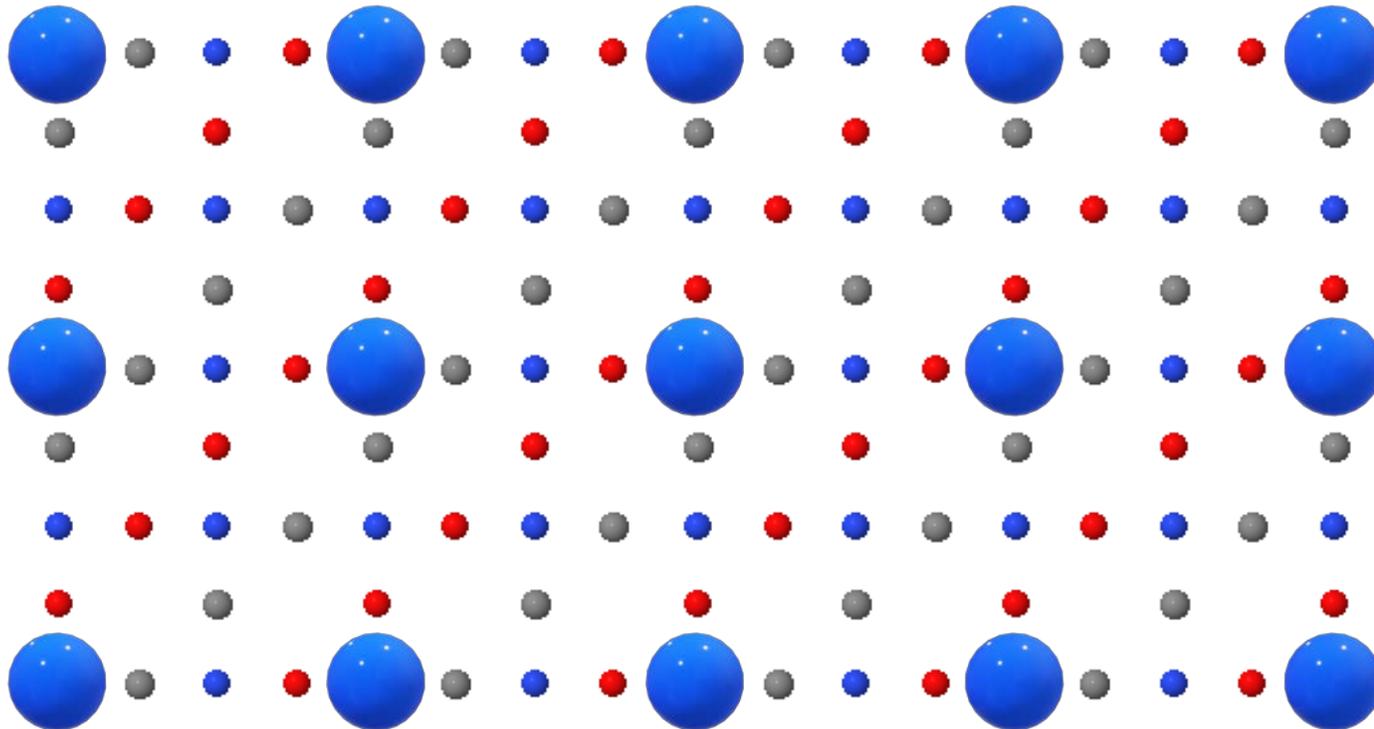




1. Symétrie de translation et réseaux de Bravais

1. Maille

$$v = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \wedge \mathbf{a}_3)$$





1. Symétrie de translation et réseaux de Bravais

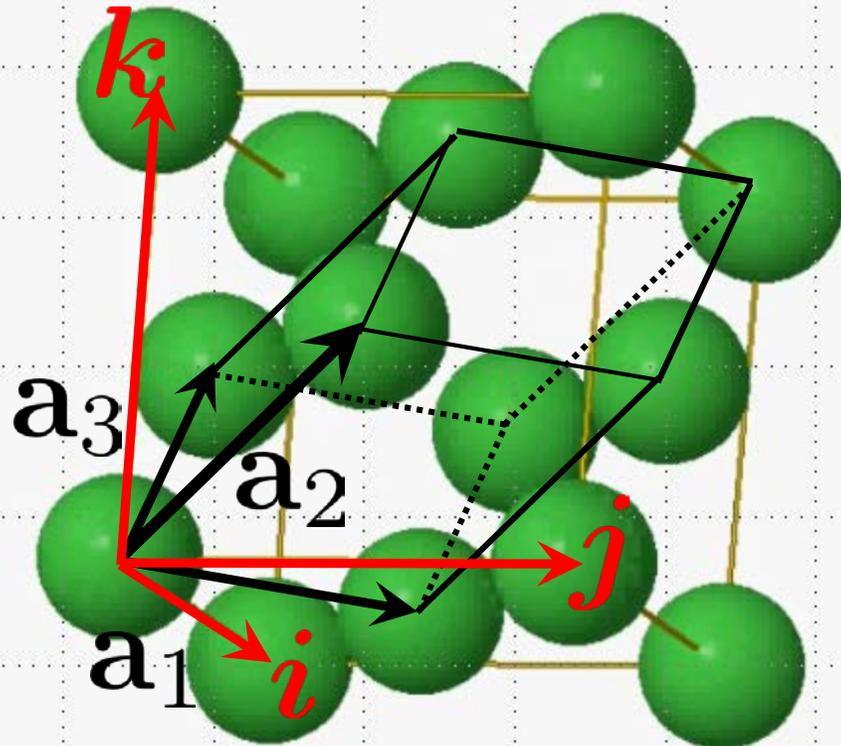
2. Maille

$$v = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \wedge \mathbf{a}_3)$$

Le cas CFC

EXO

$$v = v_{\text{cube}}/4$$



$$\mathbf{a}_1 = a \frac{i + j}{2}$$
$$\mathbf{a}_2 = a \frac{j + k}{2}$$
$$\mathbf{a}_3 = a \frac{i + k}{2}$$



Structure des cristaux

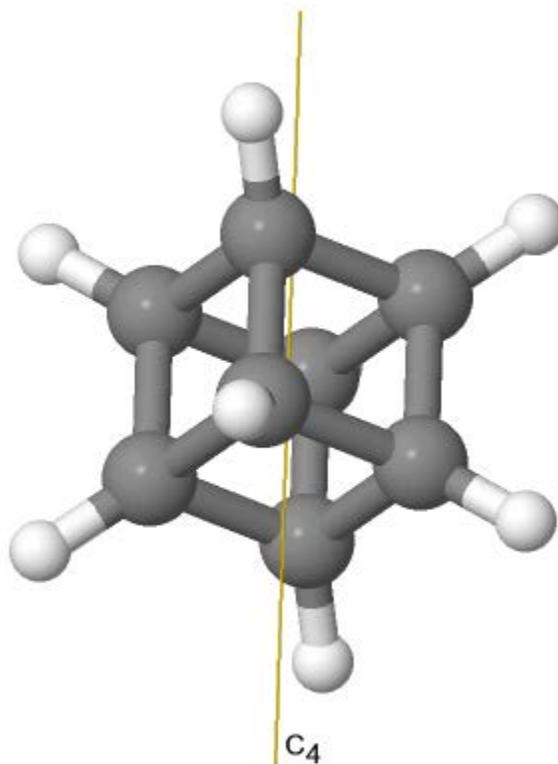
1. Symétrie de translation et réseaux de Bravais
 1. Définition
 2. Mailles
2. Systèmes cristallographiques
 1. Opérations ponctuelles et translations
 2. Systèmes et réseaux
 3. Cristal
3. Réseau réciproque
 1. Construction du R.R.
 2. R.R. et plans cristallographiques



2. Système cristallographiques

1. Opérations ponctuelles et translation

$$\varphi = \frac{2\pi}{n}$$



Cubane

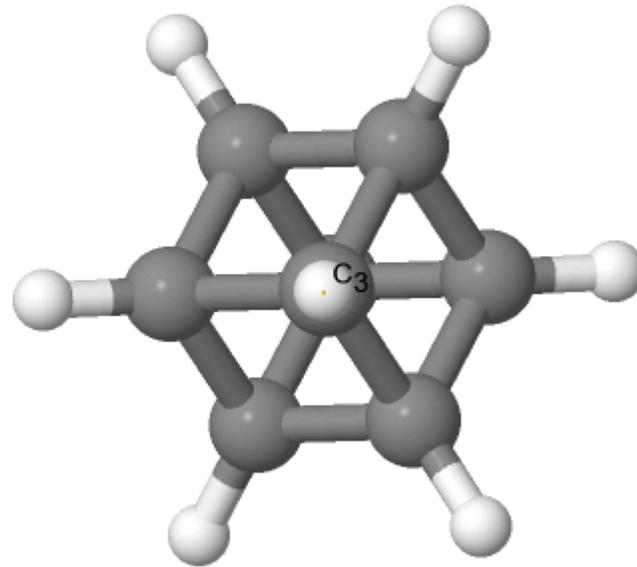
Point Group = O_h



2. Système cristallographiques

1. Opérations ponctuelles et translation

$$\varphi = \frac{2\pi}{n}$$



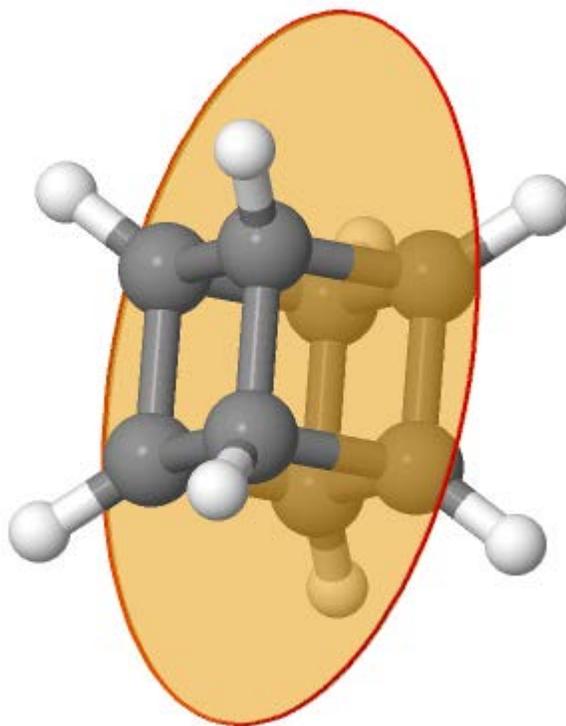
Cubane Point Group = O_h



2. Système cristallographiques

1. Opérations ponctuelles et translation

$$\varphi = \frac{2\pi}{n}$$



Cubane

Point Group = O_h



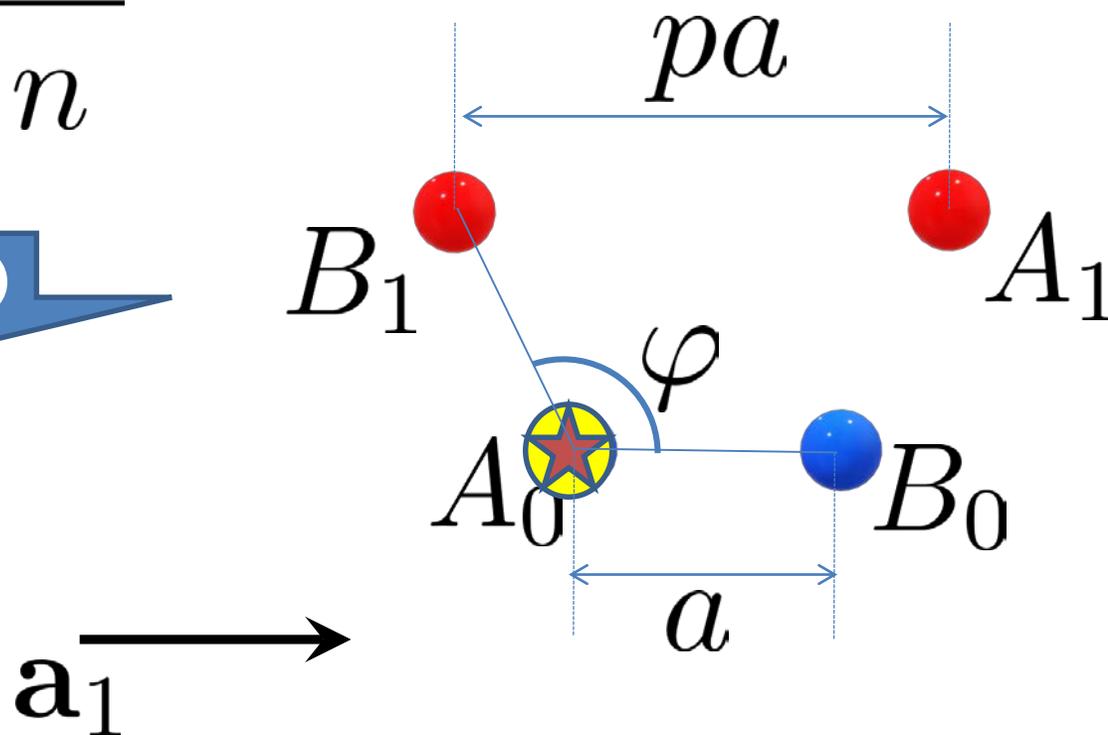
2. Système cristallographiques

1. Opérations ponctuelles et translation

$$\varphi = \frac{2\pi}{n}$$

EXO

n ?





2. Système cristallographiques

1. Opérations ponctuelles et translation

$$\varphi = \frac{2\pi}{n}$$

p	-1	0	1	2	3
$\cos \varphi$	-1	$-\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	1
φ	$\pm\pi$	$\pm\frac{2\pi}{3}$	$\pm\frac{\pi}{2}$	$\pm\frac{\pi}{3}$	0
n	2	3	4	6	1

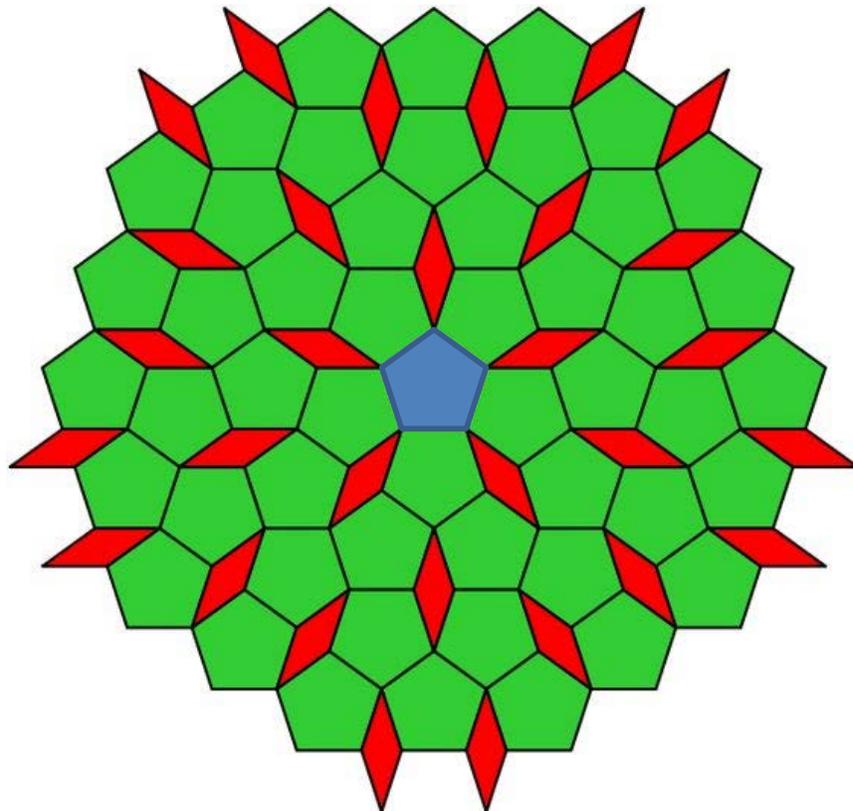


2. Système cristallographiques

1. Opérations ponctuelles et translation

$$\varphi = \frac{2\pi}{n}$$

n	2	3	4	6	1
-----	---	---	---	---	---





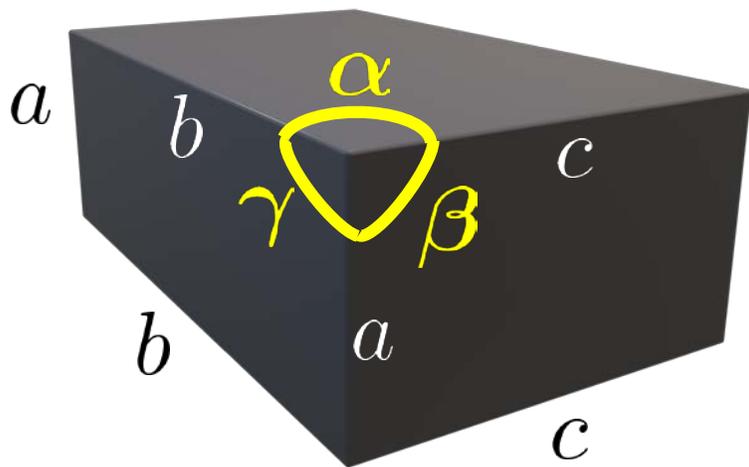
2. Système cristallographiques

2. Systèmes et réseaux

Cubique

$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Isometric	Tetragonal	Orthorhombic	Monoclinic
$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ$ $\beta \neq 90^\circ$
Fluorite	Wulfenite	Tanzanite	Azurite



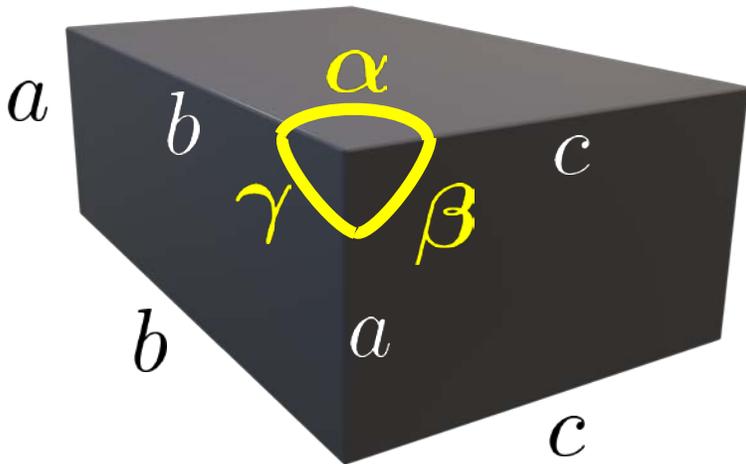
2. Système cristallographiques

2. Systèmes et réseaux

Tetragonal (quadratique)

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Isometric	Tetragonal	Orthorhombic	Monoclinic
$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ$ $\beta \neq 90^\circ$
Fluorite	Wulfenite	Tanzanite	Azurite

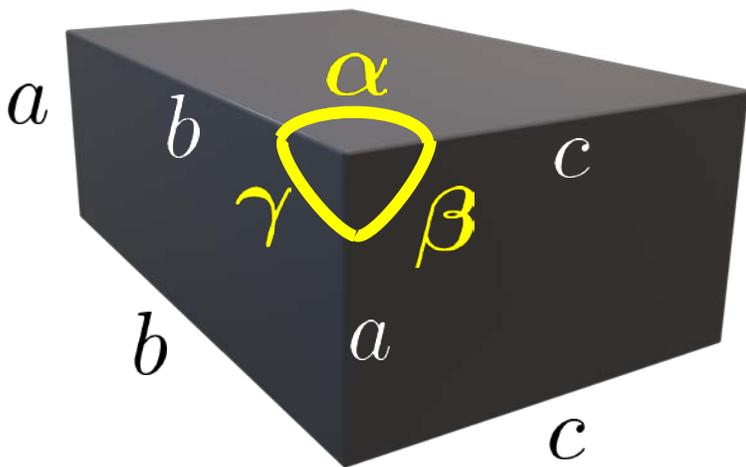


2. Système cristallographiques

2. Systèmes et réseaux Orthorhombique

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Isometric	Tetragonal	Orthorhombic	Monoclinic
$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ$ $\beta \neq 90^\circ$
Fluorite	Wulfenite	Tanzanite	Azurite



2. Système cristallographiques

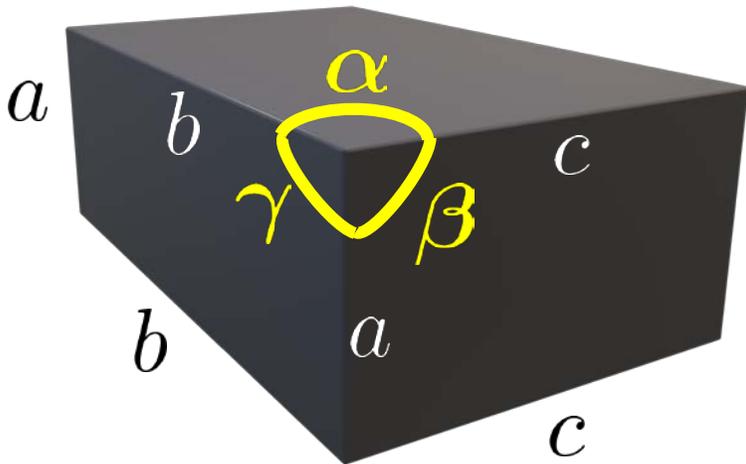
2. Systèmes et réseaux

Monoclinique

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \gamma = 90^\circ$$

$$\beta \neq 90^\circ$$



Isometric	Tetragonal	Orthorhombic	Monoclinic
$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ$ $\beta \neq 90^\circ$
Fluorite	Wulfenite	Tanzanite	Azurite



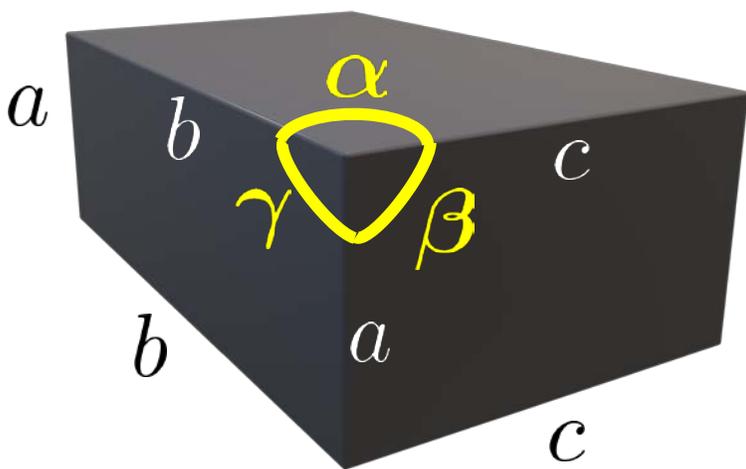
2. Système cristallographiques

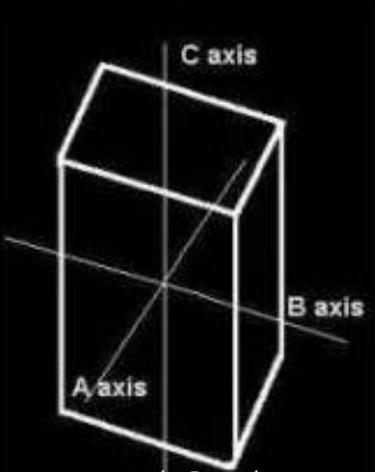
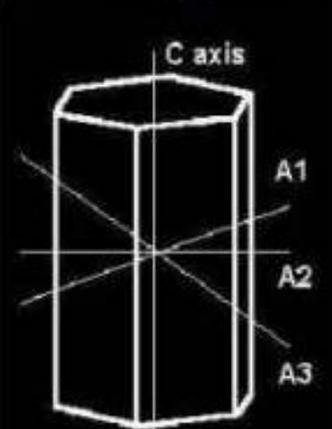
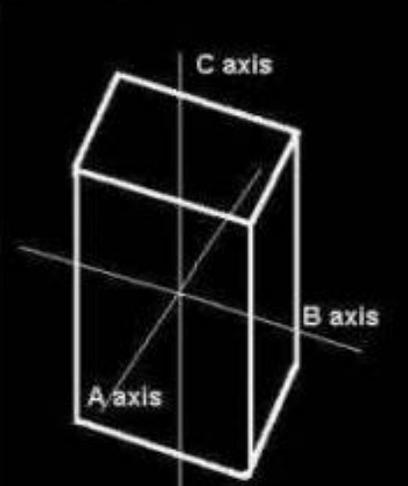
2. Systèmes et réseaux

Triclinique

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



Triclinic	Hexagonal	Trigonal
 <p>$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$</p>	 <p>$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$</p>	 <p>$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$</p>
		
Amazonite	Emerald	Rhodochrosite



2. Système cristallographiques

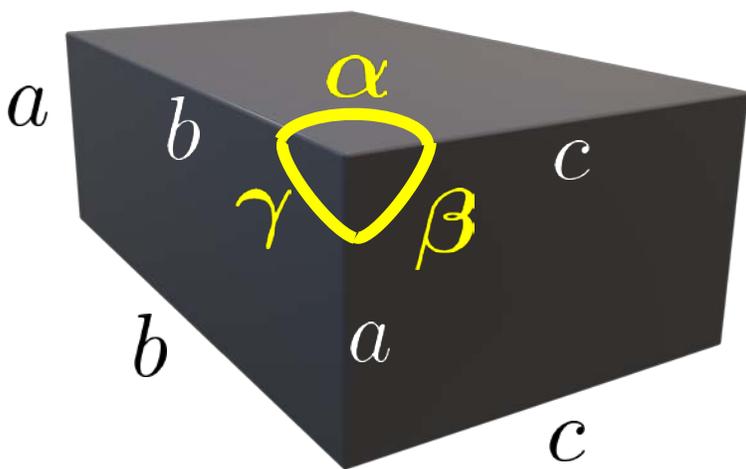
2. Systèmes et réseaux

Hexagonal

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ$$

$$\gamma = 120^\circ$$



Triclinic	Hexagonal	Trigonal
$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$ $\neq 90^\circ$	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma$ $\neq 90^\circ$
Amazonite	Emerald	Rhodochrosite



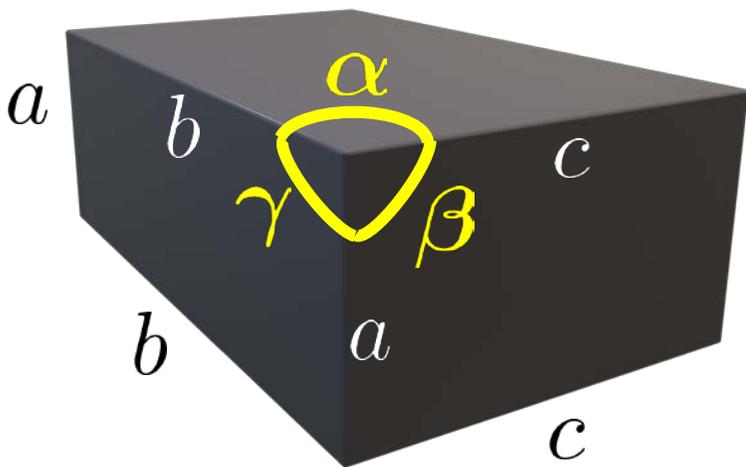
2. Système cristallographiques

2. Systèmes et réseaux

Trigonal (rhomboédrique)

$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$



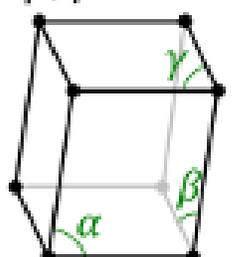
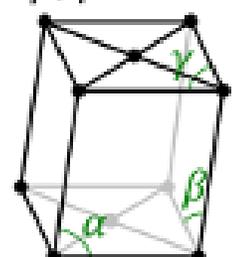
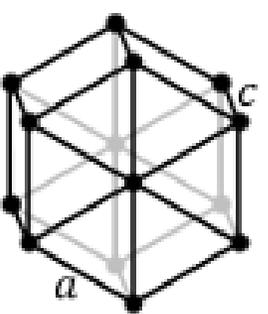
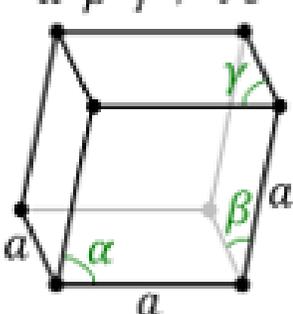
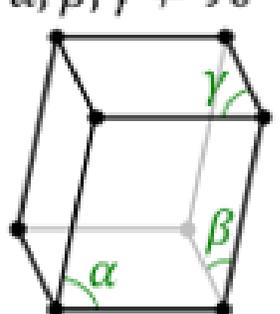
Triclinic	Hexagonal	Trigonal
$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Amazonite	Emerald	Rhodochrosite

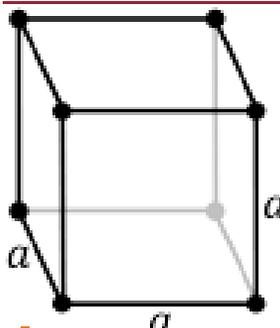
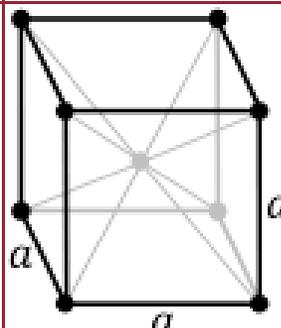
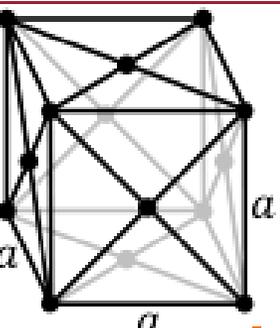
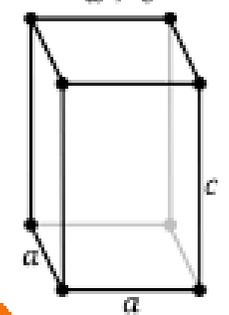
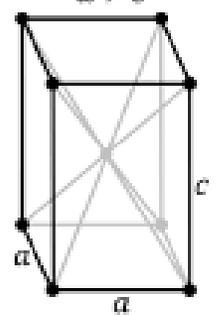
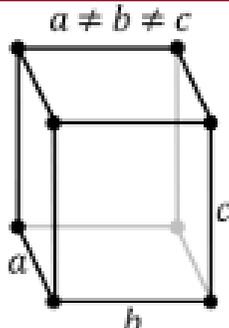
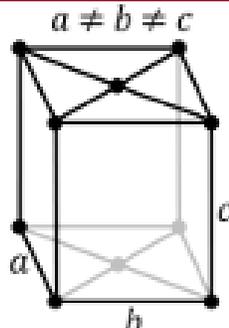
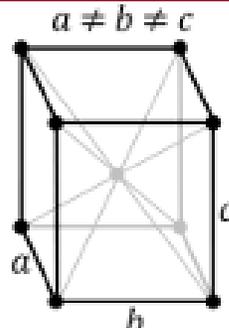
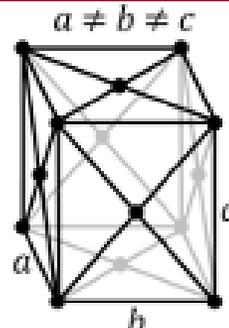


2. Système cristallographiques

2. 7 systèmes et 14 réseaux



primitive	side-centred	body-centred	face-centred
$\alpha \neq 90^\circ$ $\beta, \gamma = 90^\circ$ 	$\alpha \neq 90^\circ$ $\beta, \gamma = 90^\circ$ 		
monoclinic			
	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ 	$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$ 	
hexagonal	trigonal	triclinic	

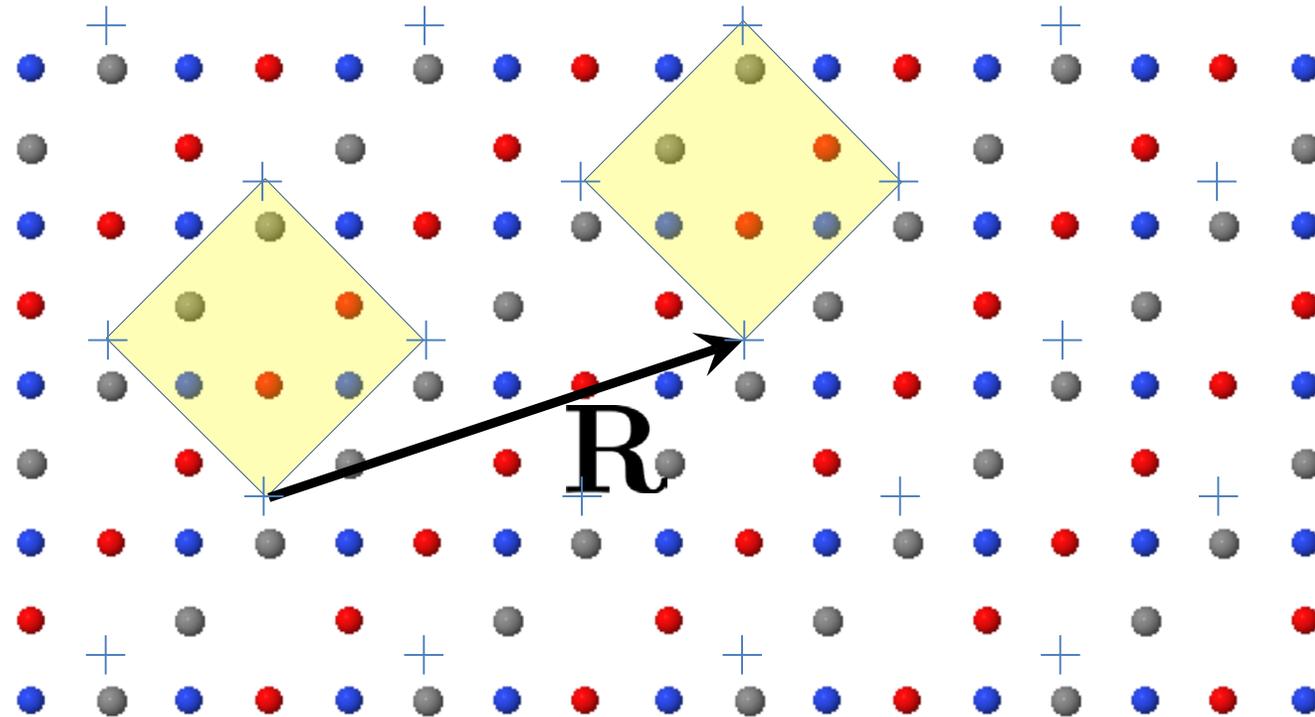
primitive	side-centred	body-centred	face-centred
			
cubic			
$a \neq c$ 		$a \neq c$ 	
tetragonal			
$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 
orthorhombic			



1. Symétrie de translation et réseaux de Bravais

1. Le cristal $\mathbf{r}_j = x_j \mathbf{a}_1 + y_j \mathbf{a}_2 + z_j \mathbf{a}_3 + \mathbf{R}$

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

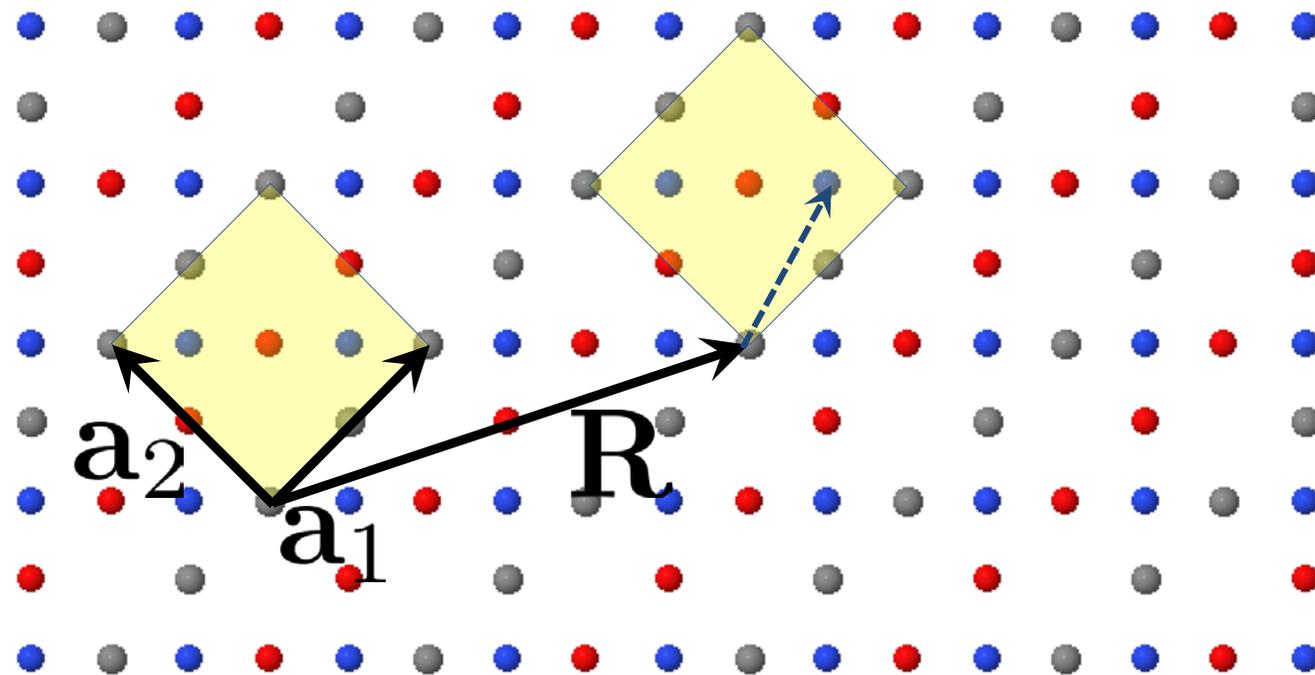




1. Symétrie de translation et réseaux de Bravais

1. Le cristal $\mathbf{r}_j = x_j \mathbf{a}_1 + y_j \mathbf{a}_2 + z_j \mathbf{a}_3 + \mathbf{R}$

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$





Structure des cristaux

1. Symétrie de translation et réseaux de Bravais
 1. Définition
 2. Mailles
2. Systèmes cristallographiques
 1. Opérations ponctuelles et translations
 2. Systèmes et réseaux
 3. Cristal
- 3. Réseau réciproque**
 1. Construction du R.R.
 2. R.R. et plans cristallographiques



3. Réseau réciproque

1. Construction

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = f(\mathbf{r})$$

$$e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}} = 1$$

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}$$

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2n\pi$$

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

$$\forall \mathbf{R} \iff \forall n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}$$

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = n_1 \mathbf{G} \cdot \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{G} \cdot \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{G} \cdot \mathbf{a}_3 = 2n\pi$$



3. Réseau réciproque

1. Construction

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{a}_1 = p_1 2\pi$$

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{a}_2 = p_2 2\pi$$

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{a}_3 = p_3 2\pi$$

$$\forall p_1, p_2, p_3 \in \mathbb{Z}$$

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = n_1 \mathbf{G} \cdot \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{G} \cdot \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{G} \cdot \mathbf{a}_3 = 2n\pi$$



3. Réseau réciproque

1. Construction

$$\mathbf{a}_1^* = \lambda_1 (\mathbf{a}_2 \wedge \mathbf{a}_3)$$

$$\mathbf{a}_2^* = \lambda_2 (\mathbf{a}_3 \wedge \mathbf{a}_1)$$

$$\mathbf{a}_3^* = \lambda_3 (\mathbf{a}_1 \wedge \mathbf{a}_2)$$

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{a}_1 = p_1 2\pi$$

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{a}_2 = p_2 2\pi$$

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{a}_3 = p_3 2\pi$$

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = n_1 \mathbf{G} \cdot \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{G} \cdot \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{G} \cdot \mathbf{a}_3 = 2n\pi$$



3. Réseau réciproque

1. Construction

$$\mathbf{a}_1^* = \lambda_1 (\mathbf{a}_2 \wedge \mathbf{a}_3)$$

$$\mathbf{a}_2^* = \lambda_2 (\mathbf{a}_3 \wedge \mathbf{a}_1)$$

$$\mathbf{a}_3^* = \lambda_3 (\mathbf{a}_1 \wedge \mathbf{a}_2)$$

$$\mathbf{a}_i^* \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{i,j}$$

$$v = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \wedge \mathbf{a}_3)$$

$$\lambda_i = \frac{2\pi}{v} = \frac{2\pi}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \wedge \mathbf{a}_3)}$$



3. Réseau réciproque

1. Construction

$$\mathbf{a}_1^* = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \wedge \mathbf{a}_3}{v}$$

$$\mathbf{a}_2^* = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \wedge \mathbf{a}_1}{v}$$

$$\mathbf{a}_3^* = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \wedge \mathbf{a}_2}{v}$$

$$v^* = \mathbf{a}_1^* \cdot (\mathbf{a}_2^* \wedge \mathbf{a}_3^*)$$

$$v^* = \frac{(2\pi)^3}{v} \quad \text{EXO}$$

$$\lambda_i = \frac{2\pi}{v} = \frac{2\pi}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \wedge \mathbf{a}_3)}$$



3. Réseau réciproque

1. Construction

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = f(\mathbf{r})$$

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad \forall n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}$$

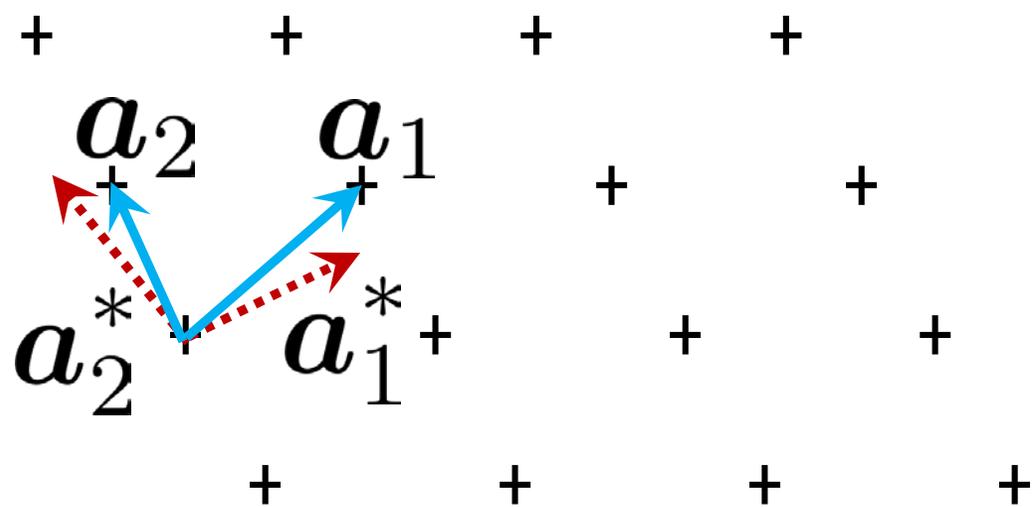
$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = n_1 \mathbf{G} \cdot \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{G} \cdot \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{G} \cdot \mathbf{a}_3 = 2n\pi$$

$$\mathbf{G} = m_1 \mathbf{a}_1^* + m_2 \mathbf{a}_2^* + m_3 \mathbf{a}_3^* \quad m_1, m_2, m_3 \in \mathbb{Z}$$



3. Réseau réciproque

2. Plans cristallographiques



$$G \cdot R = 2n\pi$$

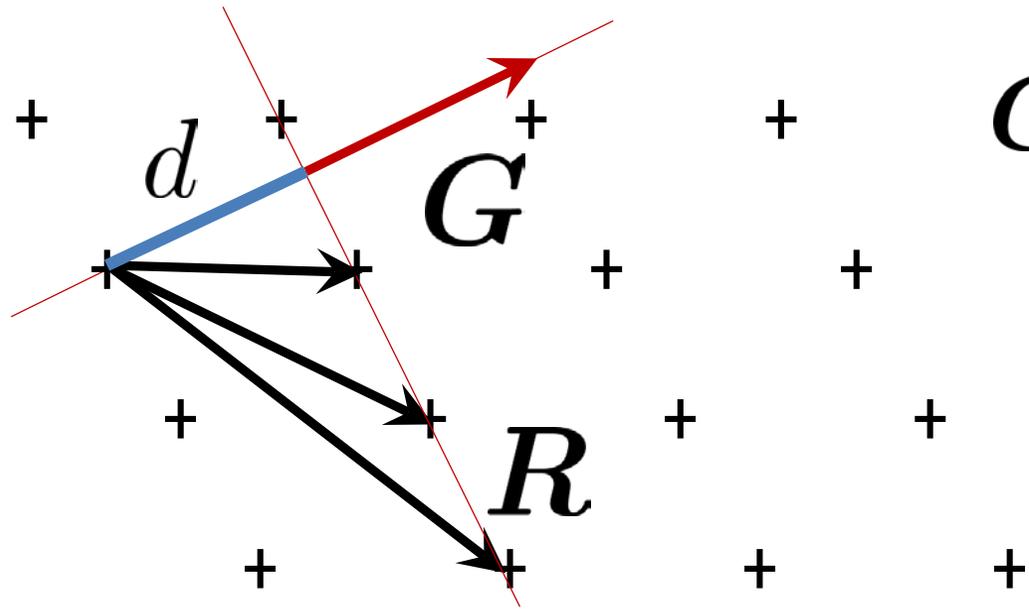
$$a_i^* \cdot a_j = 2\pi \delta_{i,j}$$

$$G = m_1 a_1^* + m_2 a_2^* + m_3 a_3^* \quad m_1, m_2, m_3 \in \mathbb{Z}$$



3. Réseau réciproque

2. Plans cristallographiques



$$G \cdot R = 2n\pi \quad d = \frac{2n\pi}{|G|}$$

$$R = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

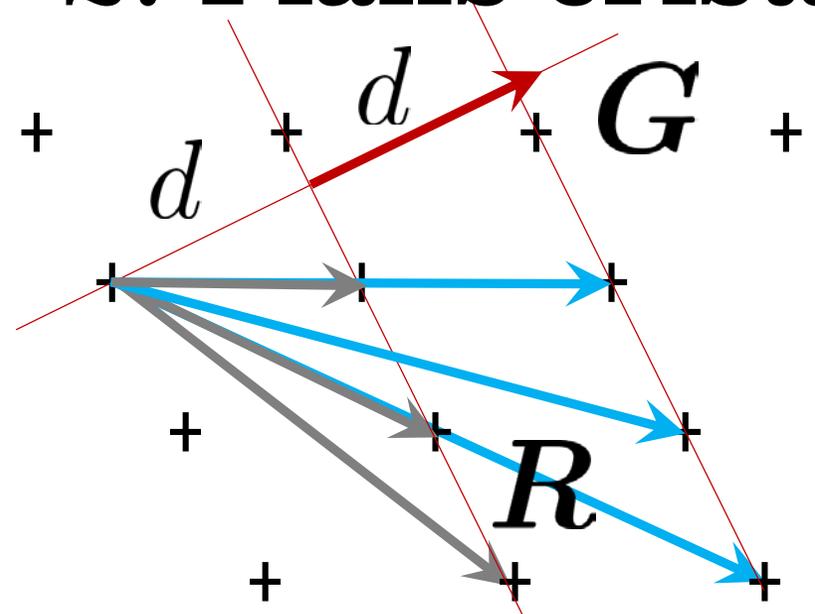
$$R' = (n_1 - qm_3) \mathbf{a}_1 + (n_2 - qm_3) \mathbf{a}_2 + (n_3 + q(m_1 + m_2)) \mathbf{a}_3$$

$$G = m_1 \mathbf{a}_1^* + m_2 \mathbf{a}_2^* + m_3 \mathbf{a}_3^* \quad m_1, m_2, m_3 \in \mathbb{Z}$$



3. Réseau réciproque

2. Plans cristallographiques



$$G = ha_1^* + ka_2^* + la_3^*$$

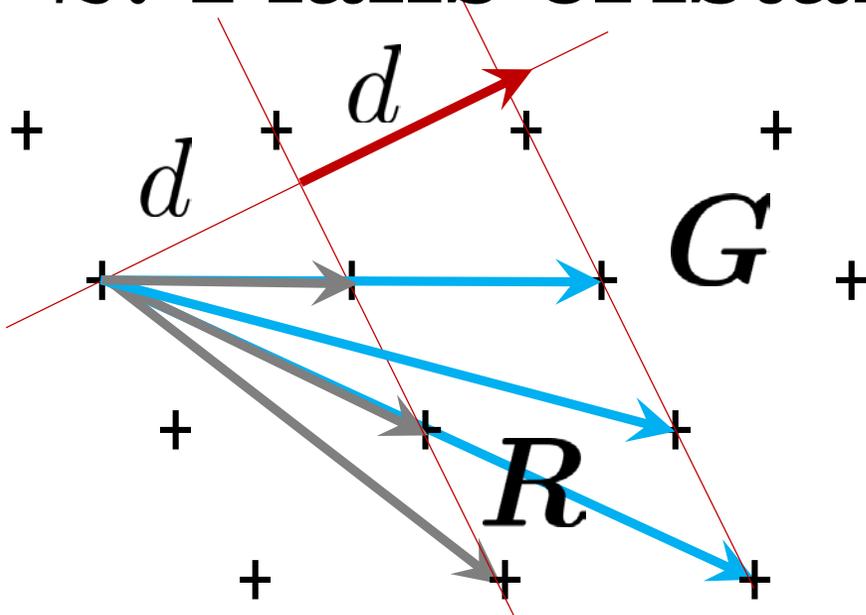
$$h, k, l \in \mathbb{Z}$$

$$G \perp \text{aux deux plans} \begin{cases} G \cdot R = 2n\pi \\ G \cdot R' = 2(n+1)\pi \end{cases}$$



3. Réseau réciproque

2. Plans cristallographiques



$$G = ha_1^* + ka_2^* + la_3^*$$

Premiers entre eux $\leftarrow h, k, l \in \mathbb{Z}$

$$G \perp \text{aux deux plans} \begin{cases} G \cdot R = 2n\pi \\ G \cdot R' = 2(n+1)\pi \end{cases}$$

$$G \cdot (R - R') = 2\pi$$

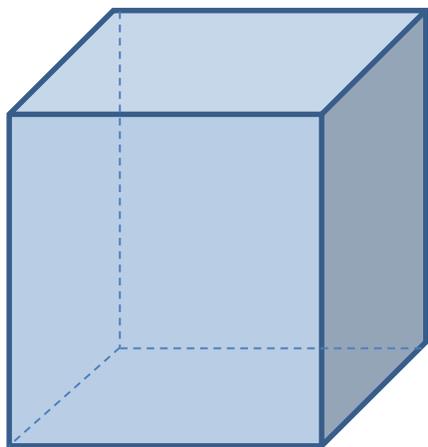
et $G \perp$ aux deux plans

$$\frac{G}{G} \cdot (R - R') = \frac{2\pi}{G} = d_{h,k,l}$$



3. Réseau réciproque

2. Plans cristallographiques



$$G = ha_1^* + ka_2^* + la_3^*$$

Premiers entre eux $\leftarrow h, k, l \in \mathbb{Z}$

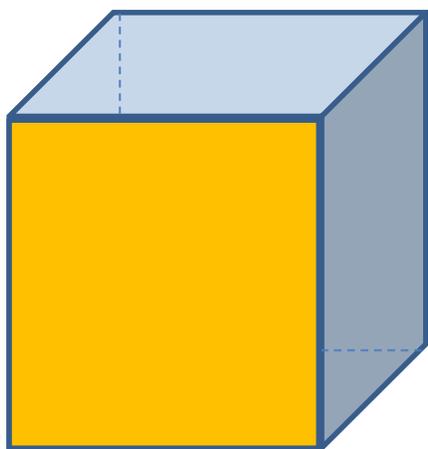
$G \cdot R = 2\pi$ pour le(s) plan(s) le(s) plus proche(s) de l'origine

$$hx + ky + lz = 1 \quad (1/h, 0, 0) \quad (0, 1/k, 0) \quad (0, 0, 1/l)$$



3. Réseau réciproque

2. Plans cristallographiques



$(1, 0, 0)$

$$G = ha_1^* + ka_2^* + la_3^*$$

Premiers entre eux $\leftarrow h, k, l \in \mathbb{Z}$

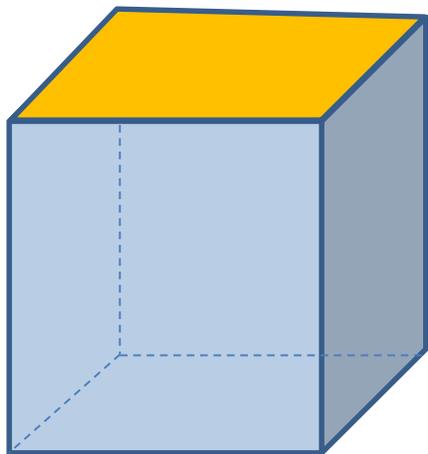
$G \cdot R = 2\pi$ pour le(s) plan(s) le(s) plus proche(s) de l'origine

$$hx + ky + lz = 1 \quad (1/h, 0, 0) \quad (0, 1/k, 0) \quad (0, 0, 1/l)$$



3. Réseau réciproque

2. Plans cristallographiques



$(0, 0, 1)$

$$G = ha_1^* + ka_2^* + la_3^*$$

Premiers entre eux $\leftarrow h, k, l \in \mathbb{Z}$

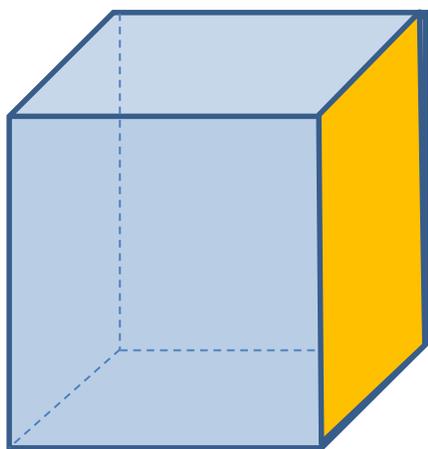
$G \cdot R = 2\pi$ pour le(s) plan(s) le(s) plus proche(s) de l'origine

$$hx + ky + lz = 1 \quad \left(\frac{1}{h}, 0, 0 \right) \quad \left(0, \frac{1}{k}, 0 \right) \quad \left(0, 0, \frac{1}{l} \right)$$



3. Réseau réciproque

2. Plans cristallographiques



$(0, 1, 0)$

$$G = ha_1^* + ka_2^* + la_3^*$$

Premiers entre eux $\leftarrow h, k, \ell \in \mathbb{Z}$

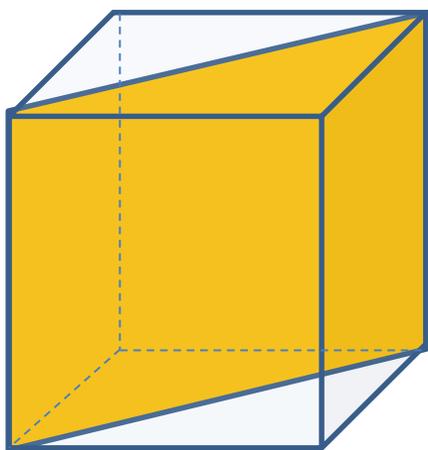
$G \cdot R = 2\pi$ pour le(s) plan(s) le(s) plus proche(s) de l'origine

$$hx + ky + lz = 1 \quad (1/h, 0, 0) \quad (0, 1/k, 0) \quad (0, 0, 1/\ell)$$



3. Réseau réciproque

2. Plans cristallographiques



$$G = ha_1^* + ka_2^* + la_3^*$$

Premiers entre eux $\leftarrow h, k, \ell \in \mathbb{Z}$

$(1, 1, 0)$

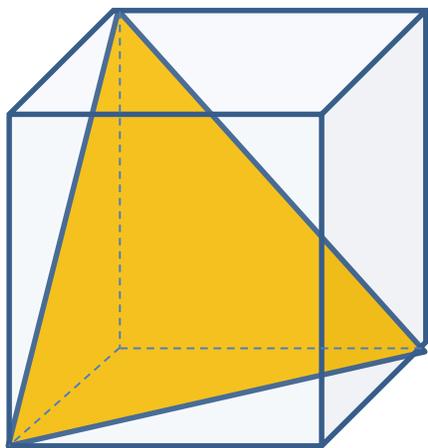
$G \cdot R = 2\pi$ pour le(s) plan(s) le(s) plus proche(s) de l'origine

$$hx + ky + lz = 1 \quad (1/h, 0, 0) \quad (0, 1/k, 0) \quad (0, 0, 1/\ell)$$



3. Réseau réciproque

2. Plans cristallographiques



$$G = ha_1^* + ka_2^* + la_3^*$$

Premiers entre eux $\leftarrow h, k, l \in \mathbb{Z}$

(1, 1, 1)

(2, 1, 0)

$G \cdot R = 2\pi$ pour le(s) plan(s) le(s) plus proche(s) de l'origine

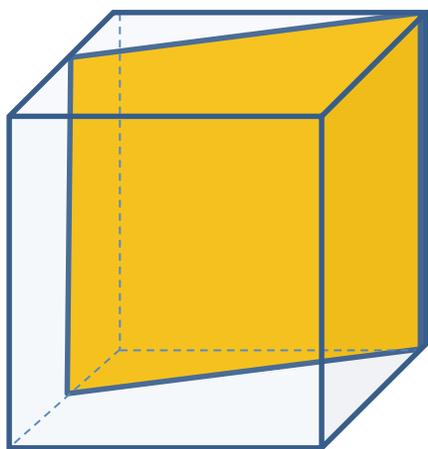
$$hx + ky + lz = 1$$

$$(1/h, 0, 0) \quad (0, 1/k, 0) \quad (0, 0, 1/l)$$



3. Réseau réciproque

2. Plans cristallographiques



$$G = ha_1^* + ka_2^* + la_3^*$$

Premiers entre eux $\leftarrow h, k, l \in \mathbb{Z}$



$(2, 1, 0)$

$(1, -1, 3)$

$G \cdot R = 2\pi$ pour le(s) plan(s) le(s) plus proche(s) de l'origine

$$hx + ky + lz = 1 \quad (1/h, 0, 0) \quad (0, 1/k, 0) \quad (0, 0, 1/l)$$