



UNIVERSITÉ DE STRASBOURG

# TD5

*Bernard Doudin*

Transcrit par  
PIERRE GUICHARD

L3 Semestre 6 2021

## 5.1 Indices de Miller (exemple du Lithium)

Définitions des indices de Miller :

Dans l'espace réel, une droite qui relie l'origine du réseau à un de ses points définit une rangée de points, repérée par les trois nombres entiers  $n_1, n_2, n_3$  notée  $[n_1n_2n_3]$ , vérifiant l'équation (1)

$$\vec{R}_{[n_1n_2n_3]} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \quad (1)$$

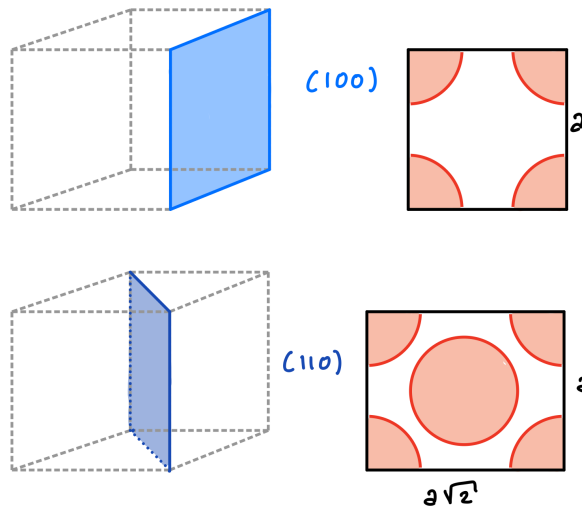
avec  $n_i \in \mathbb{Z}$ .

Dans l'espace réciproque, de réseau  $\vec{G}_{(m_1m_2m_3)} = m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2 + m_3\vec{b}_3$ , on note la droite qui définit une rangée de points du réseau réciproque par  $(m_1m_2m_3)$ , habituellement notés  $(hkl)$ . On montre (c.f. cours) que ces indices de Miller  $(hkl)$  correspondent à une série de plans réticulaires du réseau réel, parallèles, et séparés par une distance  $2\pi/||\vec{G}_{\min}||$  où  $\vec{G}_{\min}$  est le vecteur du réseau réciproque le plus court dans cette direction. Le plan le plus proche de l'origine coupe les trois axes en  $x_1, x_2, x_3$  tels que

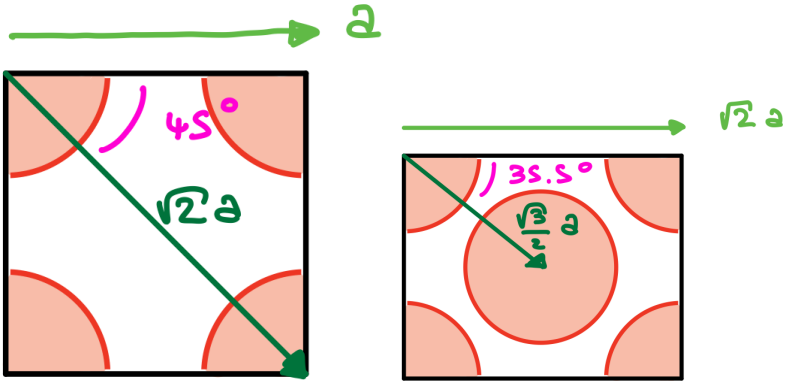
$$\frac{a_1}{x_1} : \frac{a_2}{x_2} : \frac{a_3}{x_3} = h : k : l$$

Le réseau de Bravais du lithium est cubique centré (qui indique un point du réseau au centre du cube définissant le réseau conventionnel cubique), de maille  $a = 3.48 \text{ \AA}$ .

- a) en supposant que les atomes (assimilés à des sphères) sont en contact le long des rangées  $[111]$ , représenter la distribution de ces atomes selon les faces  $(100)$ ,  $(110)$   $(111)$



- b) pour chacun des édifices 2D ainsi représentés, préciser la direction et le module de leur maille élémentaire (ainsi que l'angle qu'ils forment).



## 5.2 Quelques petites questions

1. Quelle est la différence entre des indices  $[uvw]$  et  $[nu \ nv \ nw]$ , ainsi que entre  $(hkl)$  et  $(nh \ nk \ nl)$  où  $n$  est un entier ?

[ ] correspond au réseau réel et ( ) au réseau réciproque.

$$[uvw] \iff u\vec{a}_1 + v\vec{a}_2 + w\vec{a}_3$$

Alors,

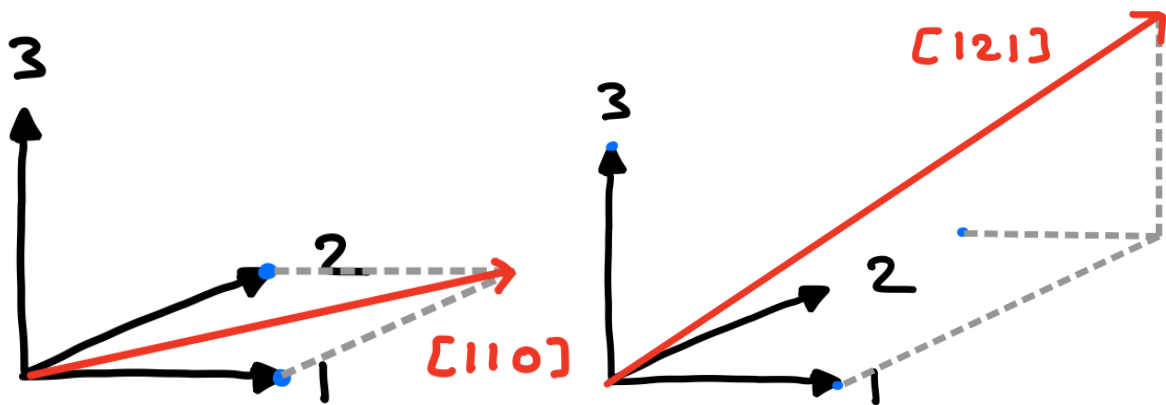
$$[nu \ nv \ nw] \iff nu\vec{a}_1 + nv\vec{a}_2 + nw\vec{a}_3 = n[uvw]$$

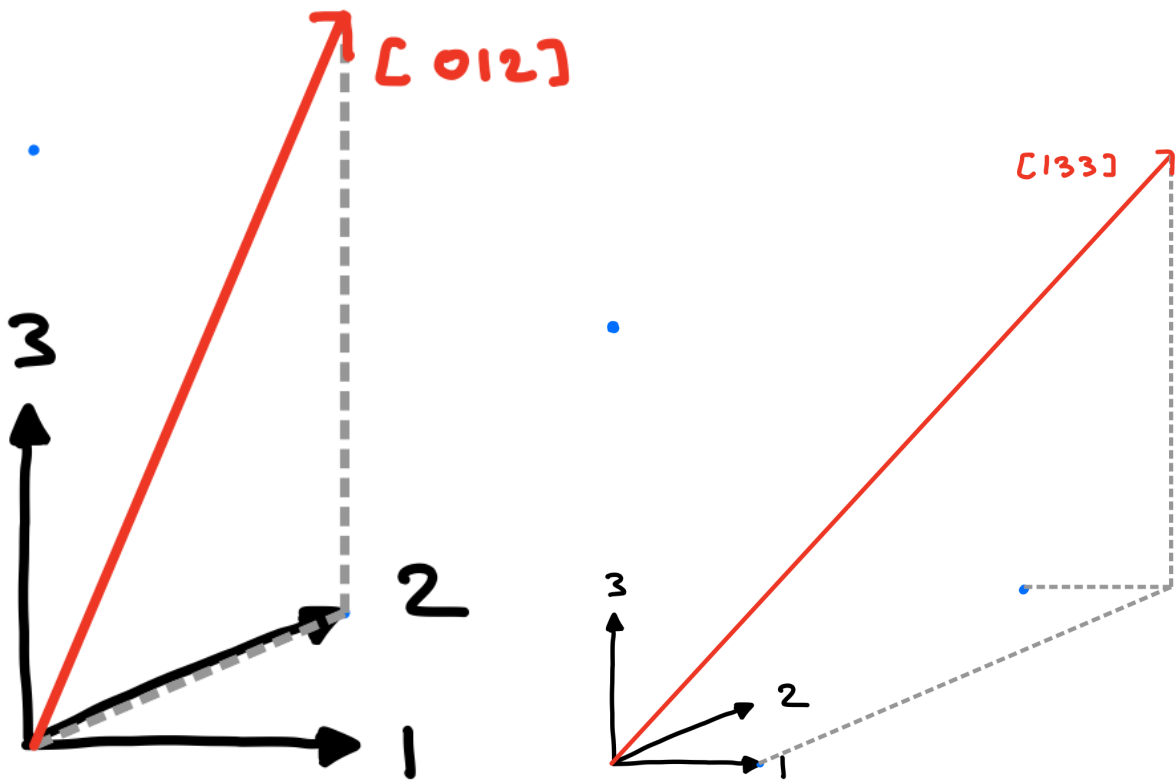
Cela correspond aux directions d'arêtes d'un cristal.

$$(hkl) = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$$

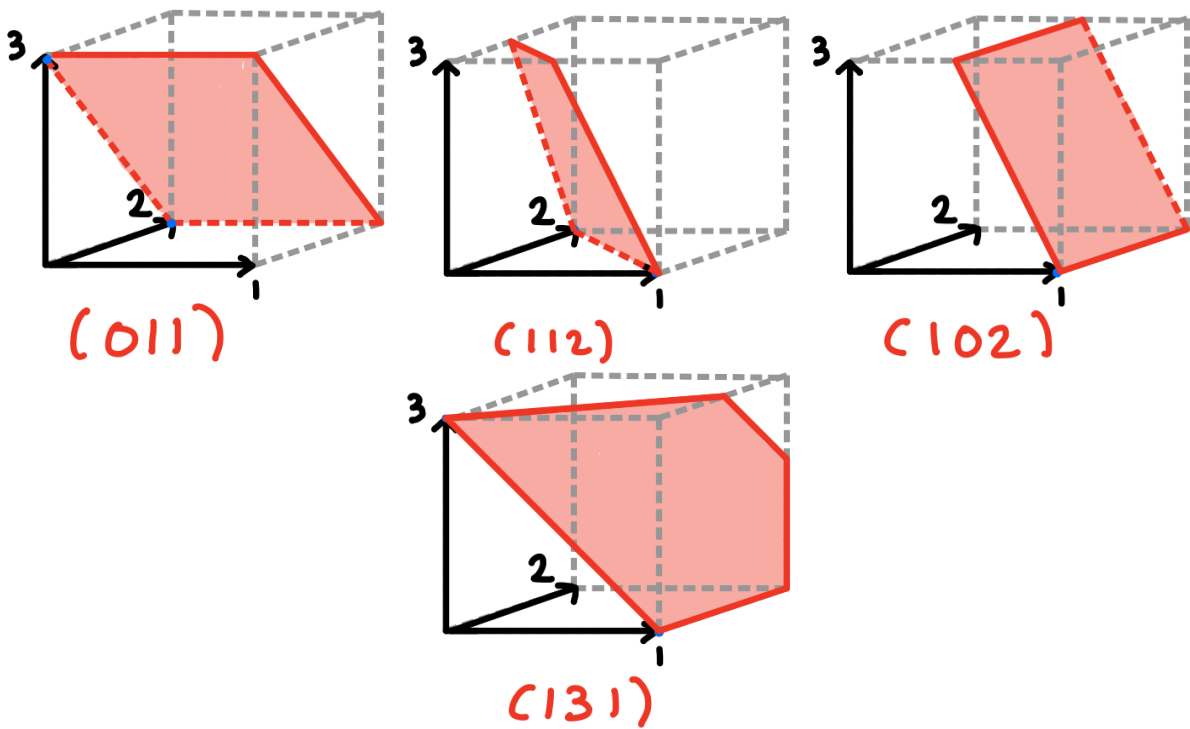
correspond à la norme a des plans d'un cristal, l'ensemble des plans parallèles séparées par une distance  $d_{(hkl)}$ .

2. Tracez les directions suivantes dans une maille élémentaire cubique :  $[110]$ ,  $[121]$ ,  $[012]$  et  $[133]$ .

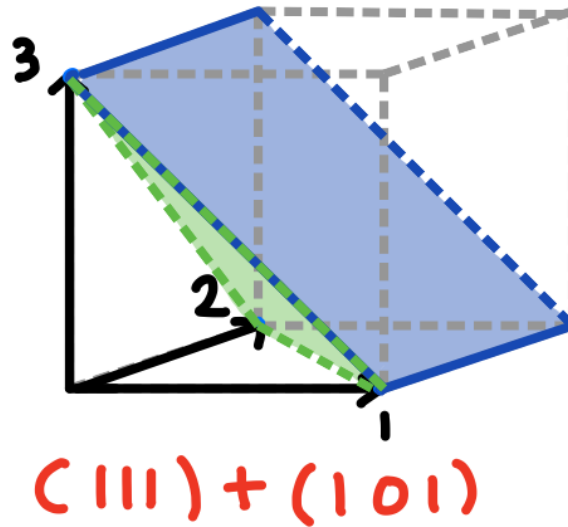




3. Tracez les plans suivants dans la maille élémentaire cubique : (011), (112), (102) et (131).



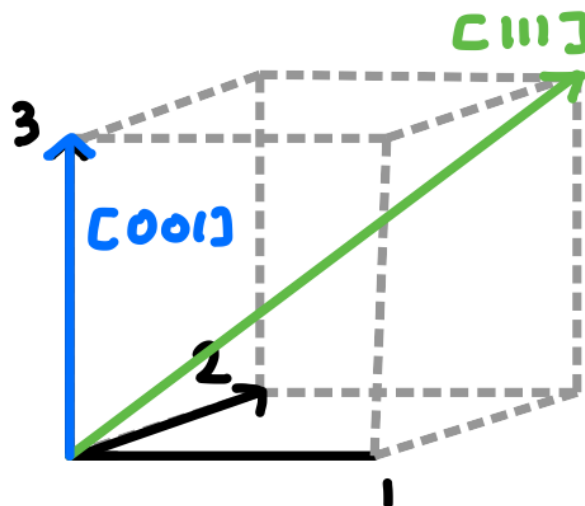
4. Quelles sont les indices de la droite d'intersection du plan (111) avec le plan (101) dans le système cristallin cubique ?



La droite est :

$$[\bar{1}01]$$

5. Quelle est la valeur de l'angle entre les directions [111] et [001] dans le système cristallin cubique ?



$$[111] \rightarrow \vec{r}_1 = \vec{a}_1 + \vec{a}_2 + \vec{a}_3$$

$$[001] \rightarrow \vec{r}_2 = \vec{a}_3$$

Et on sait que :

$$\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 = \|\vec{r}_1\| \|\vec{r}_2\| \cos \alpha$$

On impose que :

$$a_1 = a_2 = a_3 = a$$

Alors,

$$a_3^2 = a^2 = (\sqrt{3}a)a \cos \alpha$$

On trouve alors :

$$\cos \alpha = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

Ce qui donne :

$$\alpha \approx 54.73^\circ$$

6. Pour les systèmes cristallins cubiques, la distance entre deux plans parallèles de mêmes indices de Miller,  $d_{hkl}$ , est reliée au paramètre de maille  $a$  par la relation

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

Appliquer cette relation aux plans (110).

$$d_{(110)} = \frac{a}{\sqrt{1+1}} = \frac{a}{\sqrt{2}}$$

7. Combien y a-t-il d'atomes par mètre dans les directions [111] et [110] du cristal d'aluminium (réseau CFC de paramètre de maille  $a = 0.405$  nm) ?

[111] c'est la direction diagonale volume du cube, la longueur est de  $\sqrt{3}a$ , cela correspond à la distance entre deux voisins dans cette direction, alors :

$$\Delta_1 = \sqrt{3} \times 0.405 \text{ nm} = 0.701 \text{ nm}$$

On obtient alors la densité linéique :

$$\frac{1}{\Delta_1} = 1.49 \times 10^9 \text{ atomes/m}$$

[110] c'est la direction diagonal face du cube, la longueur est de  $\sqrt{2}a$ , et cela correspond à deux fois la distance entre les atomes.

$$\Delta_2 = \frac{\sqrt{2}}{2} \times 0.405 \text{ nm} = 0.286 \text{ nm}$$

On obtient alors la densité linéique :

$$\frac{1}{\Delta_2} = 3.5 \times 10^9 \text{ atomes/m}$$

8. Combien y a-t-il d'atomes par  $\text{cm}^2$  dans le plan (110) du chrome (réseau CC de paramètre de maille  $a = 0.288 \text{ nm}$ ) ?

Dans un plan (110) du cube, il y a deux atomes sur une surface de  $a \times \sqrt{2}a$ , alors :

$$n \equiv \frac{\text{nombre atomes}}{\text{surface}} = \frac{2}{a^2\sqrt{2}} = 1.71 \times 10^{19} \text{ atomes/m}^2$$

9. Calculer et comparer les densités linéaires des directions [110] et [111] de la structure CC.

On remarque :

$$\frac{1}{\Delta_2} > \frac{1}{\Delta_1}$$

10. Calculer la masse volumique  $\rho$  de l'aluminium (masse molaire  $M = 26.98 \text{ g.mol}^{-1}$ ).

$$n = \frac{\text{nombre atomes dans une maille}}{\text{volume maille}} = \frac{4}{a^3} = \frac{4}{(0.405)^3} = 60.21 \text{ atomes/nm}^{-3}$$

Alors, le volume d'une mole est de :

$$\text{volume mole} = \frac{\mathcal{N}_A}{n} = \frac{6.022 \times 10^{23}}{60.21 \times 10^{21}} = 10 \text{ cm}^3$$

Et une mole a une masse de :

$$m = M \times 1 = 26.98 \text{ g}$$

Alors,

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{26.98}{10} = 2.698 \text{ g/cm}^3$$

11. Montrer que la compacité  $k$  de la structure CC est 0.68.

$$\text{compacité} = \frac{\text{volume occupé par les atomes}}{\text{volume objet}}$$

Il y a deux atomes par maille cubique centrée :

$$k_{\text{CC}} = \frac{\text{volume atome}}{\text{volume maille}} = \frac{2 \times \frac{\sqrt{3}}{16} \pi a^3}{a^3} = \frac{\sqrt{3}}{8} \pi \approx 0.68$$

Et pour la maille cubique face centrée :

$$k_{\text{CFC}} = \frac{\text{volume atome}}{\text{volume maille}} = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{2}}{4}\right)^3 a^3}{a^3} \approx 0.74$$



12. Le fer subit une transformation allotropique à 912 °C en passant du système CC au système CFC. Sachant que les rayons respectifs des atomes de fer CC et de fer CFC sont égaux à 0.124 et 0.127 nm respectivement, calculer la variation relative du volume lors de la transformation allotropique.

$$\Delta V = \frac{\frac{4}{3}\pi r_1^3}{\frac{4}{3}\pi r_2^3} \times \frac{0.74}{0.68} = \frac{\frac{4}{3}\pi(0.124)^3}{\frac{4}{3}\pi(0.127)^3} \times \frac{0.74}{0.68} = 1.012$$

Alors il y a une augmentation relative de 1.2% du volume.

### 5.3 Faces d'un cristal

Un fragment de cristal est monté sur un goniomètre et les intersections des faces du cristal sont déterminées de la façon suivante :

Face cristal	axes		
	a	b	c
1	0,257	1	0,211
2	-0,257	1	$\infty$
3	$\infty$	3	0,105
4	0,257	$\infty$	$\infty$
5	0,770	2	0,105
6	0,514	$\infty$	0,105

Étant donné que les intersections de la première ligne définissent un plan, celui-ci peut être arbitrairement appelé (111). Trouver les indices de Miller des autres faces.

	$h$	$k$	$l$
1	1	1	1
2	$\bar{1}$	1	0
3	0	1	6
4	1	0	0
5	2	3	12
6	1	0	4