VERSITE SIDI MOHAMMED BEN ABDELLAH

FACULTE DES SCIENCES

- T E T O U A N -

ANNEE: 1988/1989

P.4

T.D. de Physique du Solide

Série N°1

1/- Le paramètre du réseau Nacl est a = 5,63Å. La masse atomique du Na est 23 et la masse moléculaire de cl est 71. Calculer la densité de Nacl.

2/- On considère un réseau oblique à deux dimensions de vecteurs primitifs $\vec{a}$ et $\vec{b}$. Montrer que, par un choix judicieux d'un vecteur $\vec{v}$, on peut former une nouvelle base primitive avec le vecteur $\vec{u} = 2\vec{a} + 3\vec{b}$. Vérifier que l'aire du parallèlogramme $(\vec{u},\vec{v})$ est égale à celle de $(\vec{a},\vec{b})$.

3/- Montrer que le volume de la maille primitive d'un réseau de Bravais est indépendant du choix de la base primitive et vaut $\frac{1}{n}$ où n est la densité des noeuds du réseau. En déduire une méthode simple de construction d'une maille primitive.
et que $d = 1/\sigma$, σ densité surfacique de noeuds de la plan.

4/- On se propose de déterminer les différents réseaux de Bravais possibles à deux dimensions. On suppose pour cela que le système possède un axe de rotation d'ordre n et on considère deux noeuds O et A distants du paramètre du réseau a. On pose $\varphi = 2\pi/n$, angle de rotation. Montrer que les seules valeurs possibles de n compatibles avec la symétrie de translation sont 1,2,3,4 et 6. Quel est le réseau qui correspond à chaque valeur de n ainsi trouvée. Construire dans chaque cas le maille de Wiquer Seitz et vérifier qu'elle est invariante dans la rotation considérée.

5/- Calculer le taux maximal de remplissage de l'espace par des sphères dures identiques rangées suivant une structure périodique pour: le réseau cubique simple, cubique faces centrées, cubique centré, hexagonal compact et pour la structure diamant.

- Soit un ion Cs^+ de coordonnées 000 dans la maille élementaire d'un réseau cubique simple (CsCl).

  a) Donnez le nombre des plus proches voisins (cl^-) puis des seonds (Cs^+) et troisièmes plus proches voisins (Cs^+).

  b) Calculez les coordonnées x, y, z de tous les premiers, seconds et troisièmes plus proches voisins de Cs^+ placé en 000.

7/- 1) Calculer les indices de Miller de la famille de plans définie par les deux axes

$|u\ \ v\ \ w|$ et $|u'\ \ v'\ \ w'|$ Application numérique

$|\bar{2}\ \ 1\ \ 0| + |0\ \ \bar{3}\ \ 2| \longrightarrow (h\ k\ l)$?

2) Calculer les indices u v w de l'axe cristallographique $[u\ \ v\ \ w]$ intersection des deux familles (h k l) et (h' k' l'). Application numérique.

$(1\ \ 1\ \ 1) + (\bar{1}\ \ 1\ \ 0) \longrightarrow [u\ \ v\ \ w]$?

.../...

8/- a) Montrer que tout vecteur du réseau réciproque $\vec{G} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}$ est perpendiculaire aux plans de mêmes indices (h k l) de l'espace direct.

b) Montrer que la distance d_{hkl} entre deux plans (h k l) consécutifs est inversement proportionnelle à $|\vec{G}|$.

c) En déduire l'expression de d_{hkl} :

- pour un réseau cubique simple,
- pour un réseau orthorhombique.

T.D. de Physique du Solide

Serie N° 2

9°/ 1) Trouver, à partir des relations de définition, le réseau réciproque (RR) du
- réseau cubique simple (CS)
- réseau cubique faces centrées (CFC)
- réseau cubique centré (CS)

2) Décrire dans chaque cas la structure géométrique de la première zone de Bril...

3) L'espace est rapporté au trièdre orthonormé $(O, \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ centré au sommet du cube et dont les axes sont portés par les arêtes du cube. On désigne par $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ la base primitive du réseau considéré. On pose :

$$\begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \\ \vec{c} \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \vec{i} \\ \vec{j} \\ \vec{k} \end{pmatrix}$$

A désignant ainsi la matrice caractéristique du réseau considéré. On définit de même la matrice B caractéristique du RR, soit $(\vec{A}, \vec{B}, \vec{C}) = (\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})B$.
Montrer que $BA = 2\pi$. Retrouver les résultats de 1).

10°/ 1) Trouver le réseau réciproque du réseau de Bravais hexagonal simple de paramèt... c et a.

2) Trouver la condition sur c et a pour que le rapport c/a ait la même valeur dans le RD et dans le réseau RR.

11°/ Montrer que la densité des noeuds (par unité de surface) dans un plan réticulaire est égale à $\frac{d}{v}$ où v est le volume de la maille primitive et d la distance entre le plan considéré et un plan de la même famille immédiatement voisin. En déduire que les plans réticulaires contenant le plus grand nombre de noeuds sont les plans $\{1\ 1\ 1\}$ dans le réseau C f C et les plans $\{1\ 1\ 0\}$ dans le réseau cubique centré.

12°/ 1) Soit un réseau linéaire à une dimension, de période a.
Une onde plane de longueur d'onde λ tombe sur ce réseau sous l'angle α_o.
Montrer qu'on obtient un maximum d'interférence dans la direction α si la condition

$$a(\cos\alpha - \cos\alpha_o) = n\lambda \qquad (1)$$

est satisfaite.
Montrer que si l'on place une plaque photographique à une certaine distance du réseau, les traces obtenues, lieux géométriques des maximums d'interférence, sont des branch... d'hyperpoles.

2) On considère maintenant un réseau plan à deux dimensions de périodes a et b dans directions Ox et Oy perpendiculaires. Il est attaqué par une onde plane λ qui forme les angles α_o et β_o respéctivement avec ces axes. Examiner comme en 1) la condition du maximum d'intérférence. Qu'observera-t-on sur la plaque photographique disposée à une certaine distance du plan ?

.../...

3) Envisager enfin le cas d'un réseau spatial de périodes a,b,c. Ecrire ... équations (équations de Laue) que doivent vérifier les angles d'incidence et (α, α_o) (β, β_o) (γ, γ_o) pour obtenir une interférence constructive. Discuter la possibilité d'obtention des tâches de diffraction sur la plaque photographique. Montrer que les équations de Laue sont en fait équivalentes à l'équation de Wulff-Bragg .

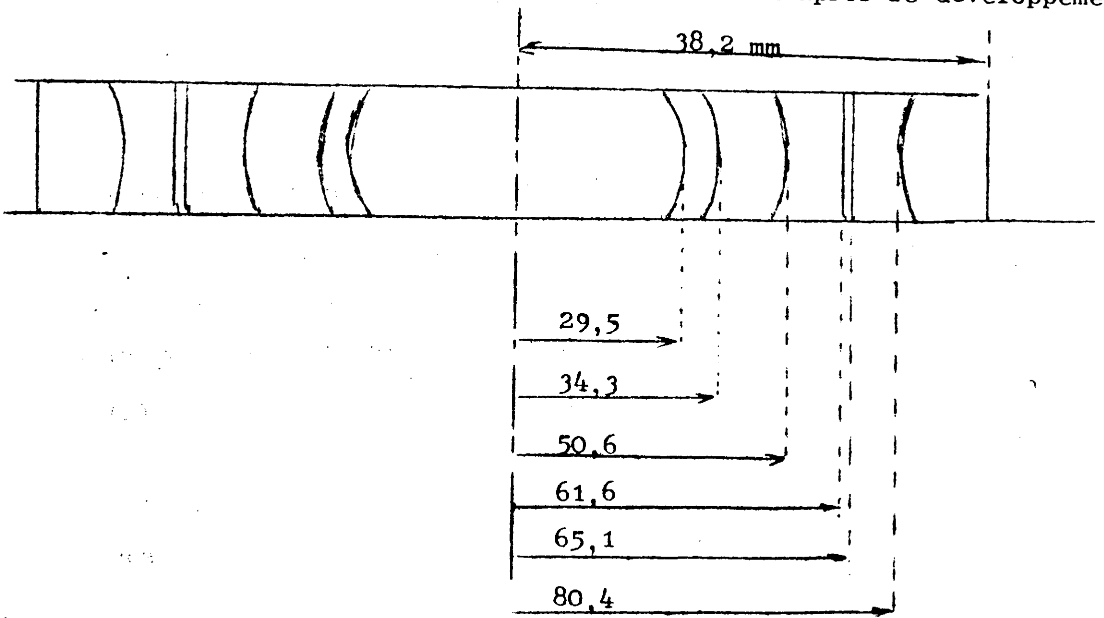
13°/ Quelle est la nature de l'anticathode que l'on devra choisir pour qu'à l'aide de la raie K_α corespondante on puisse observer la reflexion de Bragg (333) sur un cristal cubique de maille a = 3,6Å . Quelle devra être l'énergie cinétique minimale en eV des électrons sur l'anticathode pour pouvoir obtenir ce rayonnement.

14°/ Montrer que les reflexions provenant des plans (n, o, o) du Ge sont nulles sauf lorsque n est un multiple de 4. Quelle est la plus grande longueur d'onde pour laquelle les reflexions sur les plans (4, 0, 0) sont observées sachant que le poids atomique du Ge est 72 et que sa densité est 5,3. ?

15°/ 1) Classer par ordre croissant et pour chacun des réseaux CS, CC et CFC les valeurs $h^2 + k^2 + l^2$ des plans (hkl) qui peuvent donner des tâches de diffraction.

2) L'aluminium cristallise dans le réseau CFC (a = 4,05 Å). Calculer les distances réticulaires provoquant une reflexion de Bragg.

3) Inversement, on veut appliquer les résultats précedents à l'analyse d'une poudre métallique de Cobalt β pour déterminer sa structure. La longueur d'onde utilisée est celle de la raie K_α du cuivre (1, 542 Å) et le rayon de la chambre cylindrique est de 38,2mm. On donne sur la figure la représentation du film après le développement.



a) Déterminer les six distances réticulaires correspondant aux six raies représentées.

b) Déterminer le côté de la maille cubique et spécifier de quel réseau il s'agit puis indexer chacune des six raies.

c) Calculer le rayon atomique du Coβ (demi distance entre deux atomes plus proches (voisins). Déterminer la densité du Cobalt. On donne la masse atomique du Co . 58,94.

.../...

UNIVERSITE SIDI MOHAMMED BEN ABDELLAH

FACULTE DES SCIENCES

- T E T O U A N -

T.D de Physique du Solide

16/- Trouver le facteur de structure du diamant. Montrer que les reflexions permises satisfont à ~~h + 1~~ h+k+l = 4n où tous les indices sont pairs et n entier quelconque ou alor les indices sont impairs.

17/- Soit un cristal linéaire monoatomique de paramètre a. Montrer que l'amplitude de diffusion atomique est proportionnelle à la quantité

$$A = \frac{1 - \exp(-i\, M\vec{a} . \Delta\vec{k})}{1 - \exp(-i\, \vec{a} . \Delta\vec{k})}$$

où M est le nombre des noeuds du réseau. Calculer $|A|^2$.

On modifie lègèrement $\Delta\vec{k}$ et on définit ε, qui donne le premier zéro de $|A|^2$ par :

$$\vec{a} . \Delta\vec{k} = 2\pi h + \varepsilon$$

Montrer que la largeur du maximum de diffraction est inversement proportionnelle à M.

18/- Construction d'Ewald - Zone de Brillouin.

Un élément cristallise avec un réseau de Bravais orthorhombique I(centré) tel que $a = \frac{b}{2} = \frac{c}{4} = 3,14$ Å (et $\alpha = \beta = \gamma = 90°$).

a) Construire le réseau réciproque et indexer les différents noeuds contenus dans le plan $(\vec{A}, \vec{B})$ (échelle conseillée 1 $Å^{-1}$ = 1 cm).

b) Construire dans ce plan la trace de la sphère d'Ewald correspondant à un rayonnement X monochromatique incident ($k_o \simeq 2,5$ $Å^{-1}$) parallèle à la direction [230] et déterminer les indices du (ou des) plan(s) obéissant aux conditions de diffraction (ainsi que les angles de Bragg correspondants).

c) Construire, dans le plan $\vec{A}, \vec{B}$, les traces des 2 premières zones de Brillouin et vérifier graphiquement que si le vecteur incident s'appuie sur une zone de Brillouin, les conditions de diffraction sont satisfaites.

19/- On considère un cristal de NaCl. L'origine des axes orthogonaux Oxyz est prise sur un ion Na^+. On note r la plus petite distance $Na^+ - Cl^-$.

1) Pour évaluer le potentiel électrostatique V(O) en O, on tient compte de l'effet des ions contenus dans une sphère centrée en O et de rayon μr. On pose

$$\omega = \frac{4\pi\varepsilon_o \cdot r\, V(0)}{q} \qquad , \qquad q = 1|e|$$

Calculer la valeur de ω en fonction de μ^2 entier pour $1 < \mu^2 < 12$. Porter le résultat sur un graphique $\omega(\mu^2)$.

2) On utilise maintenant la méthode due à Evjen qui tient compte du seul effet des ions ou fractions d'ions contenus à l'intérieur d'un cube centré en O dont les arêtes de longueur $2\,\mu r$ ($\mu \in N$) parallèles aux axes Ox Oy Oz. Les ions sont supposés sphériques et d'électrisation uniforme.
Calculer la valeur de ω pour $\mu = 1$ et $\mu = 2$. Quelle est, pour ces valeurs de μ, la charge d'un cube de coté $2\,\mu r$? Comparer la méthode 1 et la méthode 2.

3) Un calcul plus complet ~~of~~ donne $\omega = \alpha = 1{,}7476$ où α est la constante de Madelung. Donner l'expression de l'énergie électrostatique d'interaction U_1 de tous les ions par kilomole.
On écrira $U_1 = -\frac{AN}{r}$, calculer A.

4) On admet que les forces de répulsion nécessaires à la stabilité du cristal s'excercent seulement entre ions Na^+ et Cl^- premiers voisins et que l'énergie mutuelle de répulsion d'un couple d'ions Na^+ et Cl^- peut se représenter par l'expression $U_2 = \lambda e^{-r/\rho}$ où λ et ρ sont des constantes. Exprimer l'énergie totale de répulsion U_2 de l'ensemble des ions (par K.mole) sous la forme $U_2 = BNe^{-r/\rho}$, $B(\lambda)$?

5) L'énergie de cohésion du cristal est $U = U_1 + U_2$. Expliciter la relation à partir de laquelle on peut calculer $\frac{r_o}{\rho}$ en fonction de $\frac{1}{K}$, où K est le coefficient de compressibilité au zéro absolu (entropie constante).

A.N/ $r_o = 2{,}814$ Å $\quad K = 4{,}26\ 10^{-11}$ SI, calculer $\frac{r_o}{\rho}$, ρ et λ

6) Calculer $U(r_o)$ en kilocalories par mole, comparer à la valeur expérimentale $U(r_o) = -184{,}7$ Kcal.mole^{-1}.

20/- Soit une ligne de 2N ions de charges égales alternativement à $\pm q$, avec une énergie potentielle de répulsion A/R^n entre plus proche voisins.

1) Montrer qu'à l'équilibre

$$(C\ G\ S) \quad U(R_o) = -\frac{2Nq^2 \log 2}{R_o} \cdot \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

2) Soit une compression du cristal qui transforme R_o en $R_o(1 - \delta)$. Montrer que le travail de compression par unité de longueur du cristal est approximativement égale à $\frac{1}{2} C \delta^2$ où

$$(C\ G\ S) \qquad C = \frac{(n - 1)\, q^2 \log 2}{R_o^2}$$

21/ Quelle serait la valeur du paramètre du réseau NaCl et de l'énergie de liaison si, l'énergie de répulsion étant inchangée.

1) Toutes les charges ioniques sont multipliées par p?

2) L'espace entre les ions est rempli d'un fluide homogène de constante diélectrique ε_r?

A.N/ $p = 2$, $\varepsilon_r = 80$(eau), exposant de l'énergie répulsive $n \simeq 10$ $a(NaCl) = 5{,}63$ Å

$U_o(NaCl) = 182$ kcal/mole.