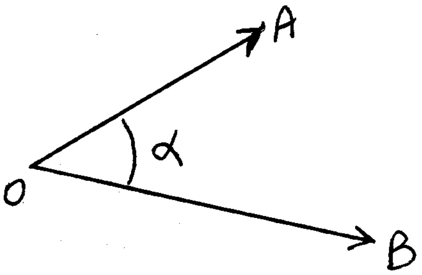
Rappels : Calculs vectoriels

Soient 2 Vecteurs $\overrightarrow{OA}$ et $\overrightarrow{OB}$ tels que :



Coordonnées des points :

$A(x_A, y_A, z_A)$

$B(x_B, y_B, z_B)$

* Module : $\|\overrightarrow{OA}\| = \sqrt{\overrightarrow{OA}\cdot\overrightarrow{OA}}$

$= \sqrt{(x_A\vec{a} + y_A\vec{b} + z_A\cdot\vec{c})\cdot(x_A\cdot\vec{a} + y_A\cdot\vec{b} + z_A\cdot\vec{c})}$

$\Rightarrow \|\overrightarrow{OA}\| = \sqrt{x_A^2 a^2 + y_A^2 b^2 + z_A^2 c^2 + 2x_A y_A \vec{a}\cdot\vec{b} + 2z_A x_A \vec{a}\cdot\vec{c} + 2\cdot y_A\cdot z_A\cdot\vec{b}\cdot\vec{c}}$

pour calculer $\vec{a}\cdot\vec{b}$ ou $\vec{a}\cdot\vec{c}$ ou $\vec{b}\cdot\vec{c}$ il faut tenir compte des angles entre les différents vecteurs $\vec{a}$, $\vec{b}$ et $\vec{c}$.

* Produit scalaire : $\overrightarrow{OA}\cdot\overrightarrow{OB} = \|\overrightarrow{OA}\|\cdot\|\overrightarrow{OB}\|\cdot\cos(\widehat{\overrightarrow{OA}, OB})$

$\overrightarrow{OA}\cdot\overrightarrow{OB} = \|\overrightarrow{OA}\|\cdot\|\overrightarrow{OB}\|\cdot\cos\theta$

On peut aussi calculer : $\cos\theta = \dfrac{\overrightarrow{OA}\cdot\overrightarrow{OB}}{\|\overrightarrow{OA}\|\cdot\|\overrightarrow{OB}\|}$

$= \dfrac{(x_A\cdot\vec{a} + y_A\cdot\vec{b} + z_A\cdot\vec{c})\cdot(x_B\vec{a} + y_B\cdot\vec{b} + z_B\cdot\vec{c})}{\|\overrightarrow{OA}\|\cdot\|\overrightarrow{OB}\|}$

* Produit Vectoriel = $\overrightarrow{OA}\wedge\overrightarrow{OB}$ = vecteur $\perp$ au plan$(\overrightarrow{OA}, \overrightarrow{OB})$

$\overrightarrow{OA}\wedge\overrightarrow{OB} = \|\overrightarrow{OA}\|\cdot\|\overrightarrow{OB}\| \sin(\widehat{\overrightarrow{OA}, \overrightarrow{OB}})\cdot\vec{u}$

avec $\vec{u}$ = vecteur unitaire $\perp$ plan $(\overrightarrow{OA}, \overrightarrow{OB})$

On a aussi $\overrightarrow{OA}\wedge\overrightarrow{OB} = \begin{vmatrix} x_A \\ y_A \\ z_A \end{vmatrix} \wedge \begin{vmatrix} x_B \\ y_B \\ z_B \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} +(y_A\cdot z_B - z_A\cdot y_B) \\ -(x_A z_B - z_A\cdot x_B) \\ +(x_A\cdot y_B - y_A\cdot x_B) \end{vmatrix}$

* Volume à partir de 3 Vecteurs non coplanaires ($\notin$ m̂ plan)

$V = \overrightarrow{OC}\cdot(\overrightarrow{OA}\wedge\overrightarrow{OB}) = \begin{vmatrix} x_C & x_A & x_B \\ y_C & y_A & y_B \\ z_C & z_A & z_B \end{vmatrix}$ ou $\begin{vmatrix} x_C & y_C & z_C \\ x_A & y_A & z_A \\ x_B & y_B & z_B \end{vmatrix}$

Quelques définitions sur le système cristallin :

* un cristal = un système où les atomes occupent des positions (ou nœuds) d'une façon ordonnée $\longrightarrow$ système ordonné
* un système où les atomes sont positionnés d'une façon aléatoire est 1 système amorphe.
* un nœud est un point du réseau qui peut être occupé par 1 atome ou bien vide.
* position d'1 atome : (x, y, z) dans la base $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$

A- **Rangées réticulaires**: dans un réseau cristallin, une rangée est une droite qui passe par des nœuds du réseau. Elle est définie par ses indices notés entre crochets **[u v w]** où u, v, w sont des nombres entiers. Ces indices sont les composantes d'un vecteur $\vec{R}_{[u\,v\,w]}$ tel que

(relatifs premiers entre eux)

$$\vec{R}_{[u\,v\,w]} = u.\vec{a} + v.\vec{b} + w.\vec{c}$$

Le paramètre d'une rangée est défini comme la distance séparant deux nœuds consécutifs voisins de cette rangée. Ce paramètre est le module du vecteur rangée $\vec{R}_{[u\,v\,w]}$ tel que :

$$\|\vec{R}_{[u\,v\,w]}\| = \sqrt{|\vec{R}_{[u\,v\,w]}.\vec{R}_{[u\,v\,w]}|}$$

Toute rangée possède une rangée parallèle passant par n'importe quel nœud du réseau ; on définit ainsi une famille de rangées.

1) Montrer que les indices u, v, w de la rangée $R_{[uvw]}$ peuvent s'écrire : u = x'-x ; v= y'-y ; w = z'-z pour deux nœuds **A (x, y, z)** et **B (x', y', z')**.

Soit 1 rangée $[uvw]$ passant par les points (nœuds) A et B est définie par son vecteur directeur $\vec{R}_{[uvw]}$ tq :

$$\left.\begin{array}{l} \vec{R} = u.\vec{a} + v.\vec{b} + w.\vec{c} \\ \left\{\begin{array}{l} \vec{OA} = x.\vec{a} + y.\vec{b} + z.\vec{c} \\ \vec{OB} = x'.\vec{a} + y'.\vec{b} + z'\vec{c} \end{array}\right. \end{array}\right\} \text{où} \left\{\begin{array}{l} u = x'-x \\ v = y'-y \\ w = z'-z \end{array}\right.$$

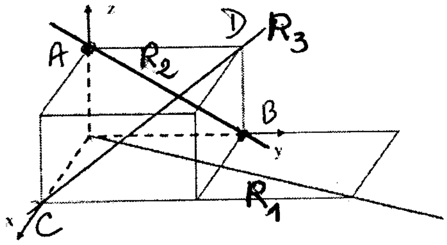
$$\vec{R} = \vec{AB} = \vec{AO} + \vec{OB} = -\vec{OA} + \vec{OB} = \vec{OB} - \vec{OA}$$
$$= (x'-x)\vec{a} + (y'-y)\vec{b} + (z'-z)\vec{c}$$

si on prend $\vec{R} = \vec{BA} \Rightarrow$ rangée $[\bar{u}\ \bar{v}\ \bar{w}]$

(voir exemples (suite))

Exemples de rangées réticulaires :

2) Applications :



a/ Tracer les rangées suivantes dans un repère orthonormé: $[1\ 0\ \bar{1}]$; $[0\ 1\ 1]$

b/ Indexer les rangées représentées dans la maille suivante :

3) Montrer que les trois rangées $[2\ 1\ \bar{1}]$, $[1\ 2\ 0]$, $[3\ 0\ \bar{2}]$ d'un réseau sont coplanaires (et trouver les indices (h k ℓ) de ce plan)

4) Dans le cas d'un réseau cubique de paramètre a, calculer l'angle entre les rangées **[111]** et **[100]**

5) Dans le cas d'un réseau hexagonal, calculer l'angle entre les rangées [1 3 5] et [1 1 1]. $\left(c/a = \sqrt{8/3}\right)$

2°) a- $[1\ 0\ \bar{1}] = [u\ v\ w]$

$$\begin{cases} u = x' - x \\ v = y' - y \\ w = z' - z \end{cases}$$

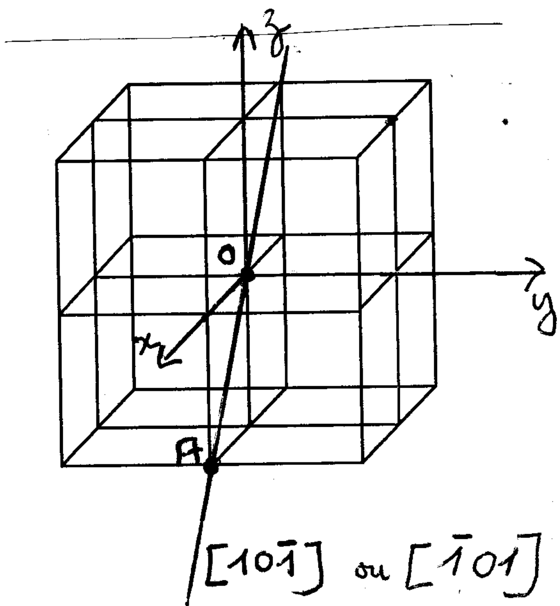
/ $[1 0 \bar{1}]$ passent par l'origine $(0,0,0)$ et le pt (x',y',z') : A

$\Rightarrow$ $u = 1 = x' - 0 \rightarrow x' = 1$

$v = 0 \Rightarrow y' - 0 = 0 \rightarrow y' = 0$

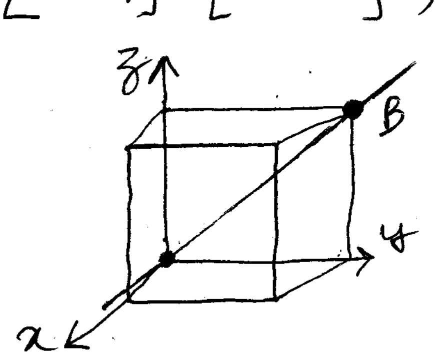
$w = \bar{1} = z' - 0 \rightarrow z' = \bar{1}$

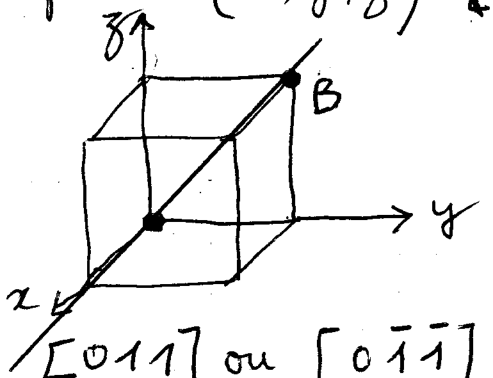
$\Rightarrow (x', y', z') \equiv (1, 0, \bar{1})$



$[1 0 \bar{1}]$ ou $[\bar{1} 0 1]$

$[0 1 1] = [u' v' w'] \rightarrow$ point $B(x'', y'', z'') \equiv (0, 1, 1)$





$[0 1 1]$ ou $[0 \bar{1} \bar{1}]$

b- une rangée $\vec{R}_{[uvw]}$ passe par 2 pts $\begin{vmatrix} x \\ y \\ z \end{vmatrix}$ et $\begin{vmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{vmatrix}$

tq
$$\begin{cases} u = x' - x \\ v = y' - y \\ w = z' - z \end{cases}$$

* Rangée R_1 passe par $(0,0,0)$ et $(1,2,0)$ $\Rightarrow$ $[1\,2\,0]$ ou $[\bar{1}\,\bar{2}\,0]$

* Rangée R_2 passe par $A(0,0,1)$ et $B(0,1,0)$
$\hookrightarrow [0\,1\,\bar{1}]$ ou $[0\,\bar{1}\,1]$

* Rangée R_3 passe par $C(1,0,0)$ et $D(0,1,1)$
$\Rightarrow [\bar{1}\,1\,1]$ ou $[1\,\bar{1}\,\bar{1}]$.

3°) Trois rangées $[2\,1\,\bar{1}]$, $[1\,2\,0]$ et $[3\,0\,\bar{2}]$ sont coplanaires (càd elles appartiennent au m̂ plan) si leurs vecteurs directeurs $\in$ m̂ plan $\longrightarrow$ ils ne peuvent pas engendrer un volume càd $V = \vec{R_1} \cdot (\vec{R_2} \wedge \vec{R_3}) = 0$:

$$V = \begin{vmatrix} 2 & 1 & 3 \\ 1 & 2 & 0 \\ \bar{1} & 0 & \bar{2} \end{vmatrix} \text{ ou bien } \begin{vmatrix} 2 & 1 & \bar{1} \\ 1 & 2 & 0 \\ 3 & 0 & \bar{2} \end{vmatrix}$$

$$V = 2 \begin{vmatrix} 2 & 0 \\ 0 & \bar{2} \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 1 & 3 \\ 0 & \bar{2} \end{vmatrix} + \bar{1} \begin{vmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 0 \end{vmatrix}$$

$$= 2(-4) - (-2) + \bar{1}(-6) = -8 + 2 + 6 = 0$$

$\Rightarrow V = 0 \Rightarrow$ les 3 rangées st coplanaires.

4°) angle entre les rangées $[1\,1\,1]$ et $[1\,0\,0]$ dans un réseau cubique de paramètre a

$$\vec{R}_{[111]} = \vec{a} + \vec{b} + \vec{c} \qquad \vec{R'}_{[100]} = \vec{a}$$

$$\vec{R} \cdot \vec{R'} = \|\vec{R}\| \cdot \|\vec{R'}\| \cdot \cos(\widehat{\vec{R}, \vec{R'}})$$

$(\vec{a} + \vec{b} + \vec{c}) \cdot \vec{a} = \sqrt{3a^2} \times \sqrt{a^2} \cdot \cos\theta$ $\qquad (\vec{a} \perp \vec{b} \perp \vec{c})$ et $(a=b=c)$

syst. cubique $\Rightarrow$ $\cos\theta = \dfrac{1}{\sqrt{3}} \longrightarrow \theta = 54{,}73°$

$=$ angle entre $[1\,1\,1]$ et $[1\,0\,0]$

5°) Angle θ entre rangées [135] et [111] dans le cas d'un système hexagonal avec $\frac{c}{a} = \sqrt{8/3} = 1,633$.

$\vec{R}_{[135]} = \vec{a} + 3\vec{b} + 5\vec{c}$ $\qquad$ $\vec{R}_{[111]} = \vec{a} + \vec{b} + \vec{c}$

$\vec{R}_{[135]} \cdot \vec{R}_{[111]} = \| \vec{R}_{[135]} \| \cdot \| \vec{R}_{[111]} \| . \cos\theta$

$\underbrace{(\vec{a} + 3\vec{b} + 5\vec{c}) \cdot (\vec{a} + \vec{b} + \vec{c})} = \| \vec{R}_{[135]} \| \cdot \| \vec{R}_{[111]} \| . \cos\theta$

$a^2 + 3ab\cos 120° + ab\cos 120° + 3b^2 + 5c^2$

$= 4a^2(1 + \cos 120°) + 5c^2$ $\qquad$ Car $a = b$.

$= 4a^2(1 - 1/2) + 5\times(a\sqrt{\frac{8}{3}})^2$ $\qquad$ Car $\frac{c}{a} = \sqrt{8/3}$.

$= 2a^2 + 5 \times a^2 \times \frac{8}{3} = \frac{6a^2}{3} + \frac{40}{3}a^2 = \frac{46}{3}a^2$ //

$\| \vec{R}_{[135]} \| = \sqrt{(\vec{a} + 3\vec{b} + 5\vec{c}) \cdot (\vec{a} + 3\vec{b} + 5\vec{c})}$

$= \sqrt{a^2 + 3ab\cos 120° + 3ab\cos 120° + 9b^2 + 25c^2}$

$= \sqrt{10a^2 + 6a^2\cos 120° + 25 . a^2 \times \frac{8}{3}}$

$(\widehat{a,b}) = 120°$; $a = b$
$\vec{a} \perp \vec{c}$ $\quad$ $c = a\sqrt{\frac{8}{3}}$
$\vec{b} \perp \vec{c}$

$= \sqrt{10a^2 - 3a^2 + \frac{200}{3}a^2}$

$= \sqrt{7a^2 + \frac{200}{3}a^2} = a\sqrt{\frac{221}{3}}$ //

$\| \vec{R}_{[111]} \| = \sqrt{(\vec{a} + \vec{b} + \vec{c}) \cdot (\vec{a} + \vec{b} + \vec{c})} = \dots = a\sqrt{\frac{11}{3}}$ //

Donc : $\vec{R}_{[135]} \cdot \vec{R}_{[111]} = \frac{46a^2}{3} = a\sqrt{\frac{221}{3}} \times a\sqrt{\frac{11}{3}} . \cos\theta$

$\Rightarrow \cos\theta = \frac{46}{\sqrt{221} \times \sqrt{11}} = 0,932965$

$\Rightarrow \theta = \arccos(0,932965)$

$\theta = 21,098°$

= angle entre [135] et [111]

B/ Plan réticulaire (hkl) passe par les pts H, K, L

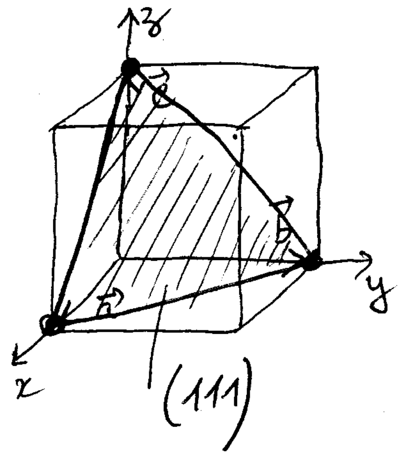
tq : $\begin{cases} \overrightarrow{OH} = \dfrac{\vec{a}}{h} \\ \overrightarrow{OK} = \vec{b}/k \\ \overrightarrow{OL} = \vec{c}/l \end{cases}$

avec $\begin{cases} h, k, l \in \mathbb{Z} \\ \text{premiers entre eux} \end{cases}$

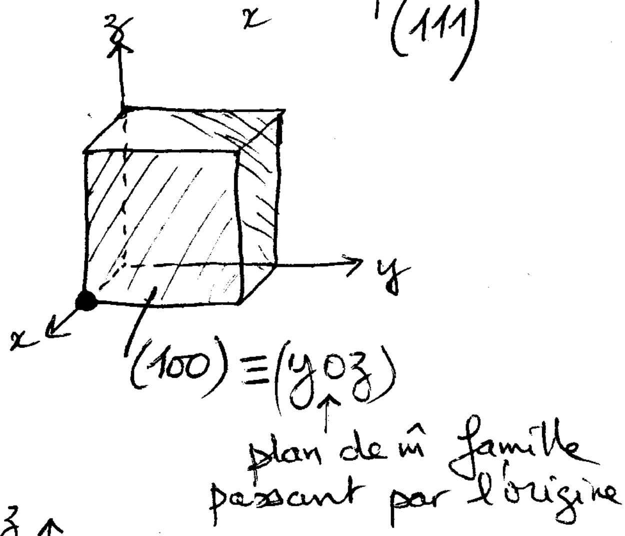
à tout plan (hkl) il existe un plan de m̂ famille passant par l'origine

a, b, c = paramètres d'1 maille élémentaire.

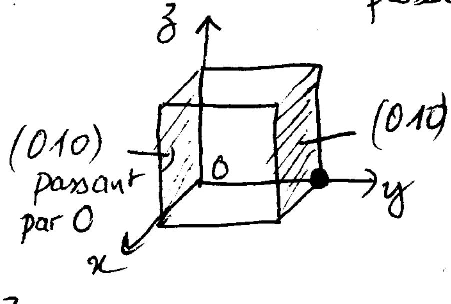
1°) (111) coupe l'axe $\vec{a}$ en $\vec{a}/1$
$\vec{b}$ en $\vec{b}/1$
$\vec{c}$ en $\vec{c}/1$



$(100) \Rightarrow \begin{cases} \text{coupe l'axe } \vec{a} \text{ en } \vec{a} = \vec{a}/1 \\ /\!/ Oy \text{ et } /\!/ Oz \end{cases}$



$(010) \Rightarrow \begin{cases} \text{plan } /\!/ Ox \\ \text{plan } /\!/ Oz \\ \text{passe par } \vec{b}/1 \end{cases}$



$(110) \Rightarrow$ plan $/\!/ Oz$