TD 4 : Réseau direct et réseau réciproque

1 A 2 dimensions

Pour chaque réseau de la Fig. 1 :

1. Tracer les vecteurs de base $\vec{a}$, $\vec{b}$ et $\vec{c}$ d'une maille primitive.
   Voir les vecteurs verts sur la Fig. 1
2. Donner le motif associé, c'est à dire les coordonnées de tous les atomes du motif.
   a et b : un atome noir en (0,0,0)
   c : 2 atomes noirs en (0,0,0) et (1/3,2/3,0)
   d : un atome noir en (0,0,0) et d'un atome jaune et rouge en (1/2,0,0)
   e : un atome gris en (0,0,0) et d'un atome noir en (1/2,1/2,0)
   f : un atome noir en (0,0,0) et d'un atome jaune en en (2/3,1/3,0,0)
3. Représenter les 2 vecteurs de base du réseau réciproque sans chercher à faire le calcul.
   En sachant que $\vec{a}^*$ est perpendiculaire à $\vec{b}$ et $\vec{c}$, $\vec{b}^*$ est perpendiculaire à $\vec{a}$ et $\vec{c}$, et $\vec{c}^*$ est perpendiculaire à $\vec{a}$ et $\vec{b}$, voir les vecteurs en bleu Fig. 1.
4. Calculer les vecteurs $\vec{a}^*$, $\vec{b}^*$ et $\vec{c}^*$ du réseau réciproque en donnant leurs expression dans la base x,y, z donnée, pour les réseaux des Fig. 1 a, b et c.
   Pour la Fig. 1 a :
   - $\vec{a} = a\vec{u}_x$
   - $\vec{b} = b\vec{u}_y$
   - $\vec{c} = c\vec{u}_z$
   - Donc $V = \vec{a}.(\vec{b} \wedge \vec{c}) = abc$
   - Donc $\vec{a}^* = \frac{2\pi}{V}\vec{b} \wedge \vec{c} = \frac{2\pi}{abc}bc\vec{u}_x = \frac{2\pi}{a}\vec{u}_x$
   - De même $\vec{b}^* = \frac{2\pi}{b}\vec{u}_y$
   - De même $\vec{c}^* = \frac{2\pi}{c}\vec{u}_z$

   Pour la Fig. 1 b :
   - $\vec{a} = a\ sin(60)\vec{u}_x - a\ cos(60)\vec{u}_y = \frac{\sqrt{3}}{2}a\vec{u}_x - \frac{1}{2}a\vec{u}_y$
   - $\vec{b} = b\vec{u}_y$
   - $\vec{c} = c\vec{u}_z$
   - Donc $V = \vec{a}.(\vec{b} \wedge \vec{c}) = (\frac{\sqrt{3}}{2}a\vec{u}_x - \frac{1}{2}a\vec{u}_y).(bc)\vec{u}_x = \frac{\sqrt{3}}{2}abc$
   - Donc $\vec{a}^* = \frac{2\pi}{V}\vec{b} \wedge \vec{c} = \frac{4\pi}{\sqrt{3}abc}bc\vec{u}_x = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\vec{u}_x$
   - De même $\vec{b}^* = \frac{2\pi}{a}\vec{u}_y + \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\vec{u}_x$
   - De même $\vec{c}^* = \frac{2\pi}{c}\vec{u}_z$

   Pour la Fig. 1 c :
   - $\vec{a} = \frac{1}{2}a\vec{u}_x - \frac{\sqrt{3}}{2}a\vec{u}_y$
   - $\vec{b} = \frac{1}{2}b\vec{u}_x + \frac{\sqrt{3}}{2}b\vec{u}_y$
   - $\vec{c} = c\vec{u}_z$
   - Donc $V = \vec{a}.(\vec{b} \wedge \vec{c}) = (\frac{1}{2}a\vec{u}_x - \frac{\sqrt{3}}{2}a\vec{u}_y).((\frac{1}{2}b\vec{u}_x + \frac{\sqrt{3}}{2}b\vec{u}_y) \wedge c\vec{u}_z) = (\frac{1}{2}a\vec{u}_x - \frac{\sqrt{3}}{2}a\vec{u}_y).(-\frac{1}{2}bc\vec{u}_y + \frac{\sqrt{3}}{2}bc\vec{u}_x) = \frac{\sqrt{3}}{4}abc + \frac{\sqrt{3}}{4}abc = \frac{\sqrt{3}}{2}abc$
   - Donc $\vec{a}^* = \frac{2\pi}{V}\vec{b} \wedge \vec{c} = \frac{2\pi}{a}\vec{u}_x - \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\vec{u}_y$
   - De même $\vec{b}^* = \frac{2\pi}{a}\vec{u}_x + \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\vec{u}_y$
   - De même $\vec{c}^* = \frac{2\pi}{c}\vec{u}_z$

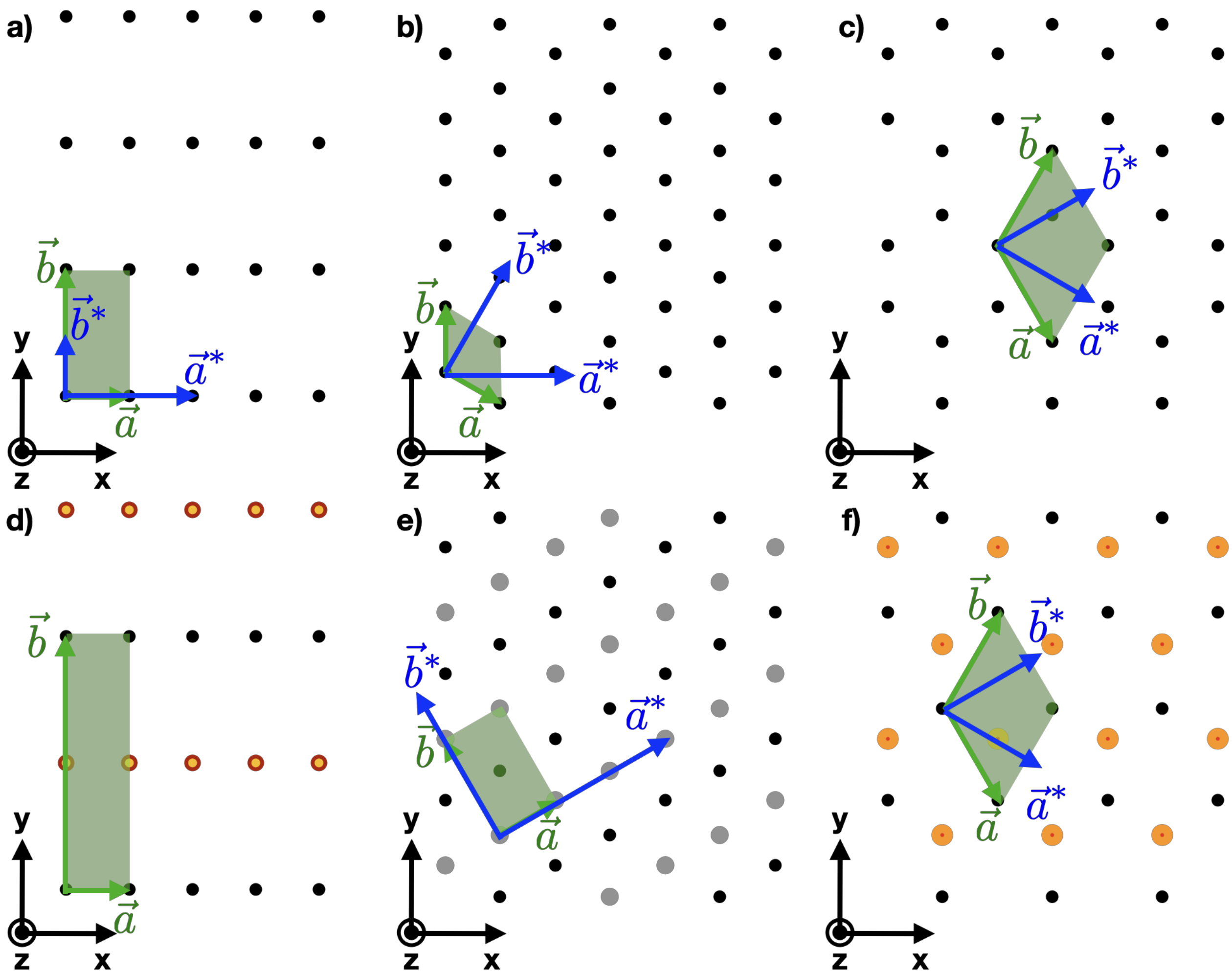

FIGURE 1 – Différents réseaux à 2 dimensions.

2 A 3 dimensions

Pour les 3 structures représentées Fig. 2 :

1. Représenter les 3 vecteurs de base $\vec{a}$, $\vec{b}$ et $\vec{c}$ de la maille conventionnelle. Voir Fig. 2
2. Représentez sans les calculer les vecteurs $\vec{a}^*$, $\vec{b}^*$ et $\vec{c}^*$ du réseau réciproque. Voir Fig. 2

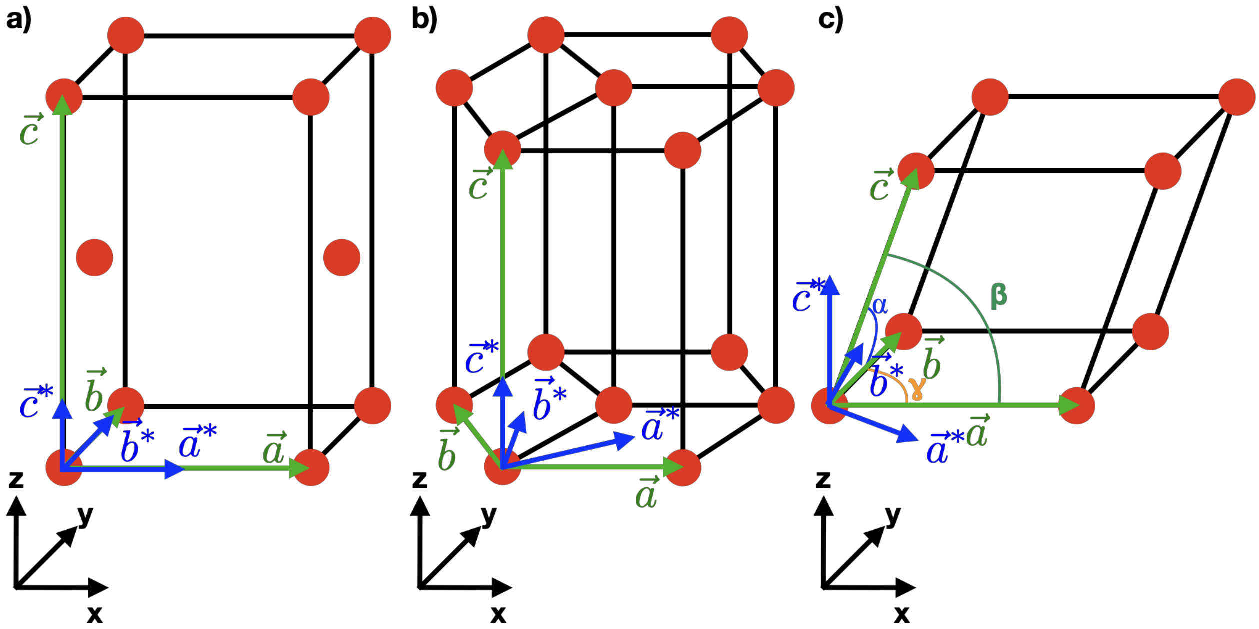

Figure 2 – Différents réseaux a 3 dimensions.