

## Atelier cristal, réseau direct

Greg Cabailh • Sorbonne Université • Institut des NanoSciences de Paris  
 17 octobre 2022 • Synchrotron SOLEIL

### A - Réseaux de Bravais et motifs

1. Rappeler les trois réseaux de Bravais du système cubique.
2. Pour chacune des structures du système cubique, déterminer le nombre de nœuds par maille.
3. Indiquer le réseau de Bravais et la position des atomes qui constituent le motif pour chacun des différents édifices cristallins représentés dans la figure 1.

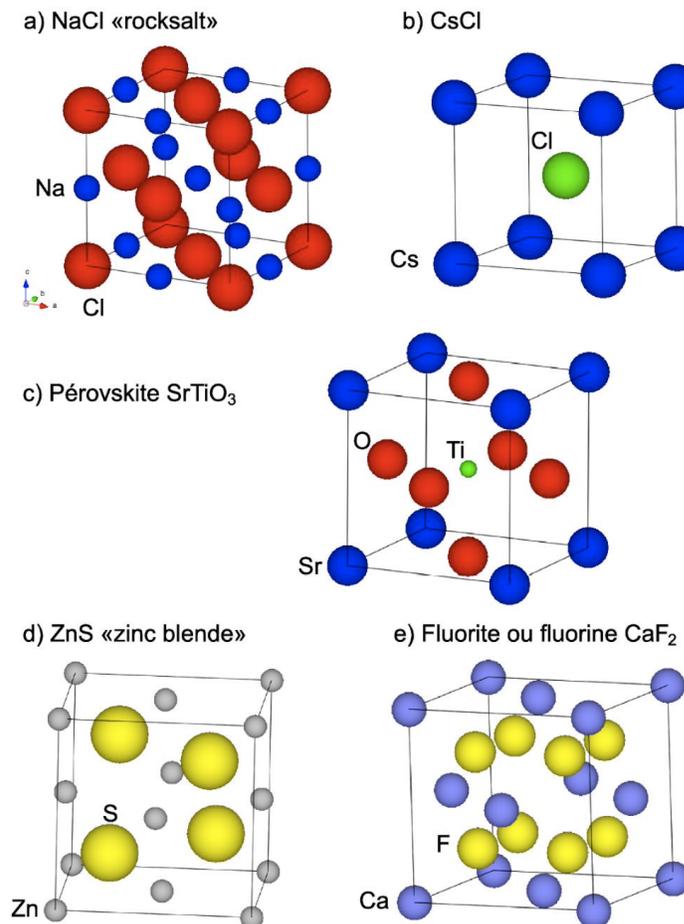


FIGURE 1 – Réseaux de Bravais et motifs

## B - Réseau rhomboédrique

Considérons un réseau rhomboédrique, représenté sur la Figure 2. Ses vecteurs de base sont  $\vec{LP} = \vec{a}$ ,  $\vec{LM} = \vec{b}$  et  $\vec{LN} = \vec{c}$ . Le plan MNP est un plan (111) noté  $\Pi_1$ . On note  $\Pi_0$  le plan (111) contenant le nœud L,  $\Pi_2$  celui qui contient les nœuds Q, R et S et  $\Pi_3$  celui qui contient T.

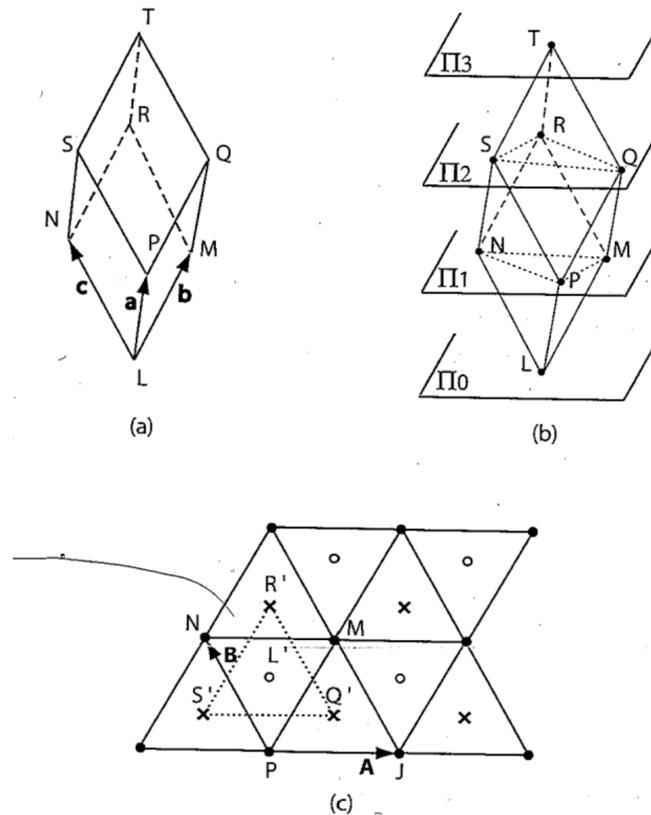


FIGURE 2 – Réseau rhomboédrique : (a) Maille élémentaire. (b) Mise en évidence des plans (111) successifs. (c) Projection du réseau sur le plan  $\Pi_1$  perpendiculaire à l'axe d'ordre 3 : cercles vides pour les nœuds de  $\Pi_0$  et  $\Pi_3$ , cercles pleins pour les nœuds de  $\Pi_1$  et croix pour les nœuds de  $\Pi_2$ . D'après "Symétries et propriétés physiques des cristaux". C. Malgrange, Ch. Ricolleau et F. Lefauchaux. EDP editions, CNRS editions 2011

1. Montrer que les nœuds de chacun de ces plans (111) forment un réseau plan hexagonal.
2. On voit sur la figure 2-c que le réseau rhomboédrique peut être décrit par une maille hexagonale de vecteurs de base  $\vec{A}$ ,  $\vec{B}$  et  $\vec{C}$ . Ecrire  $\vec{A}$ ,  $\vec{B}$  et  $\vec{C}$  en fonction de  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  et  $\vec{c}$ .
3. Quelle est la multiplicité de cette nouvelle maille ?

---

## C - La maille primitive d'un cfc est rhomboédrique !

---

On voit bien sur la figure 3 que la maille cubique à faces centrées est multiple et permet de mettre en évidence la symétrie du réseau (en particulier la face carrée du cube).

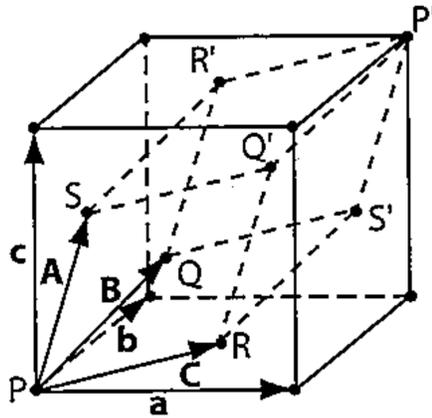


FIGURE 3 – Maille cfc et sa maille primitive rhomboédrique. D'après "Symétries et propriétés physiques des cristaux". C. Malgrange, Ch. Ricolleau et F. Lefaucheur. EDP editions, CNRS editions 2011

1. Quelle est la multiplicité de la maille cubique dessinée dans la figure 3 ?
2. Montrer que les trois angles  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$  (angles entre  $\vec{A}$  et  $\vec{B}$ ,  $\vec{B}$  et  $\vec{C}$ ,  $\vec{A}$  et  $\vec{C}$ ) valent  $60^\circ$ .

La structure du réseau cubique F peut être décrite comme un empilement selon les axes de type  $[111]$  de couches de type (111) identiques mais décalées. On dit alors que l'empilement est ABCABC.

3. Dessiner l'empilement de la structure cfc dans la direction  $[111]$ . Comparer avec la figure 2b.
4. Ecrire les vecteurs  $\vec{A}$ ,  $\vec{B}$  et  $\vec{C}$  en fonction de  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  et  $\vec{c}$ .

Cet empilement ABCABC du réseau cubique F est le plus compact possible. Cependant, il existe une autre possibilité d'empilement qui conduit au même taux de remplissage que celui de la structure c.f.c. mais dans ce cas, la structure obtenue présente alors une symétrie hexagonale comme vue dans la partie A. Cette structure peut être décrite comme un empilement ABABAB et elle est appelée structure hexagonale compacte.

5. Représenter la structure et donner le nombre d'atomes par maille.
6. Proposer des positions atomiques permettant de définir parfaitement la structure.
7. Calculer le rapport  $c/a$  de la structure hexagonale compacte.

---

## D - Le cas diabolique de SiC

---

Une de particularités majeures du SiC est son polytypisme. Il cristallise sous différentes formes caractérisés par une séquence unique d'empilement de bicouches Si-C. Les polytypes les plus connus sont schématisés dans la figure 5. Plus de 200 polytypes ont été identifiés à ce jour !

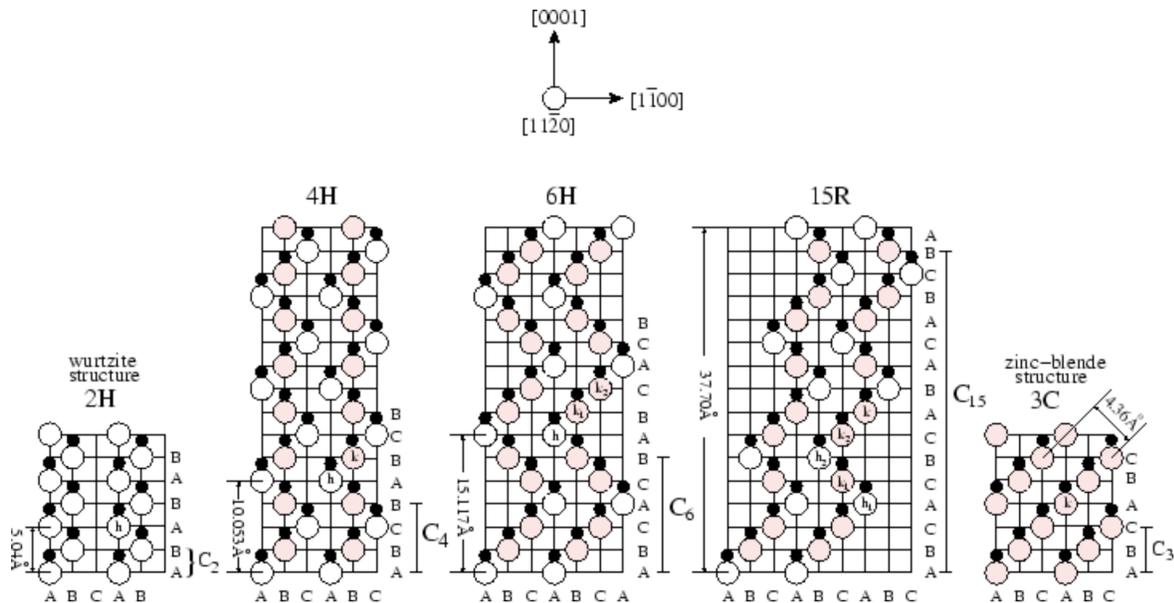


FIGURE 4 – Les polytypes principaux de SiC.

1. Montrer que le polytype 4H contient un site cubique et un site hexagonal et que le 6H contient 2 sites cubiques et un site hexagonal.
2. Quel est le type de sites dans le polytype 3C ?

---

## E - Microscopie STM du graphène sur 6H-SiC

---

La structure du graphite est constituée de feuillets hexagonaux en nid d'abeilles. Dans chaque feuillet, chaque atome de carbone est fortement lié par des liaisons covalentes. Entre les feuillets les liaisons sont faibles de type Liaison de van der Waals, ce qui explique le clivage et la faible dureté. La structure cristalline du graphite est reportée dans la figure 5.

1. Exprimer la structure cristalline du graphite dans la forme RB + atomes du motif.
2. La figure 6 représente une image STM (à l'échelle atomique!) d'une feuille de graphène sur 6H SiC obtenue par une méthode décrite dans l'article A. Ouerghi *et al.* ACS Nano 6 6075 (2012). L'on peut remarquer que le graphène 2ML (2 monocouches = 2 feuillets) présente un réseau triangulaire et celui 1 ML (1 monocouche) un réseau hexagonale. A partir de la figure 5 (structure cristalline du graphite) donner une possible interprétation de l'image STM.
3. En 2013 des théoriciens (Kopnin *et al.* Phys. Rev. B 87, 140503(R) (2013)) ont fait la prédiction que le graphite rhomboédrique serait supraconducteur à 250K. Proposer un bon substrat de SiC pour stabiliser cette phase.

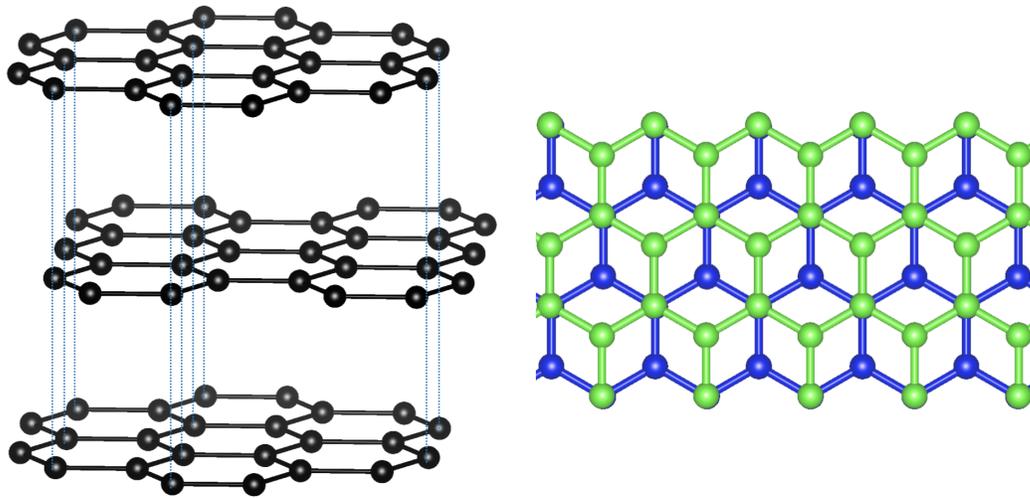


FIGURE 5 – Structure cristalline du graphite. Gauche : vue latérale du graphite composée de trois feuillets. Droite : vue du dessus de deux feuillets.

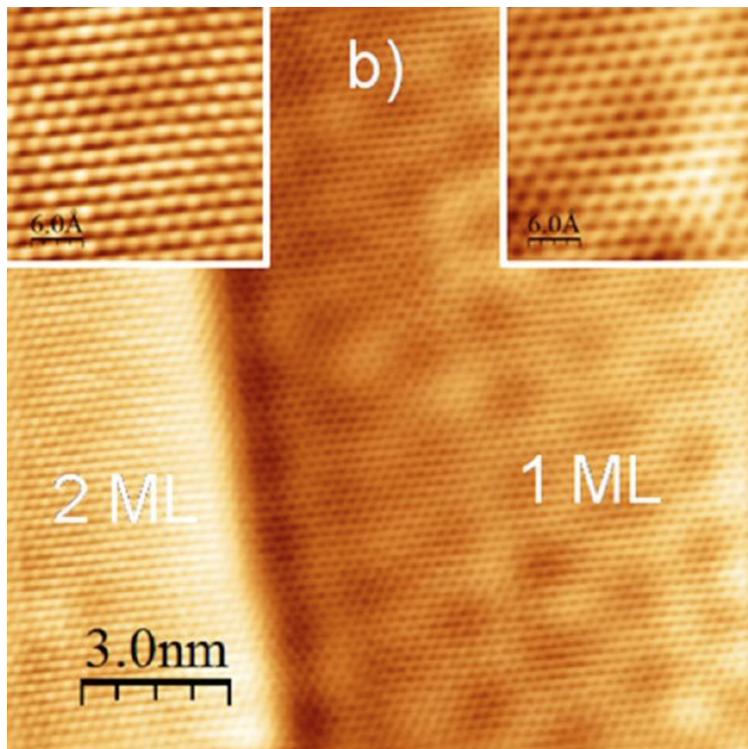


FIGURE 6 – Image STM de graphène sur 6H SiC (d'après Ouerghi *et al.* ACS Nano 6 6075 (2012)).