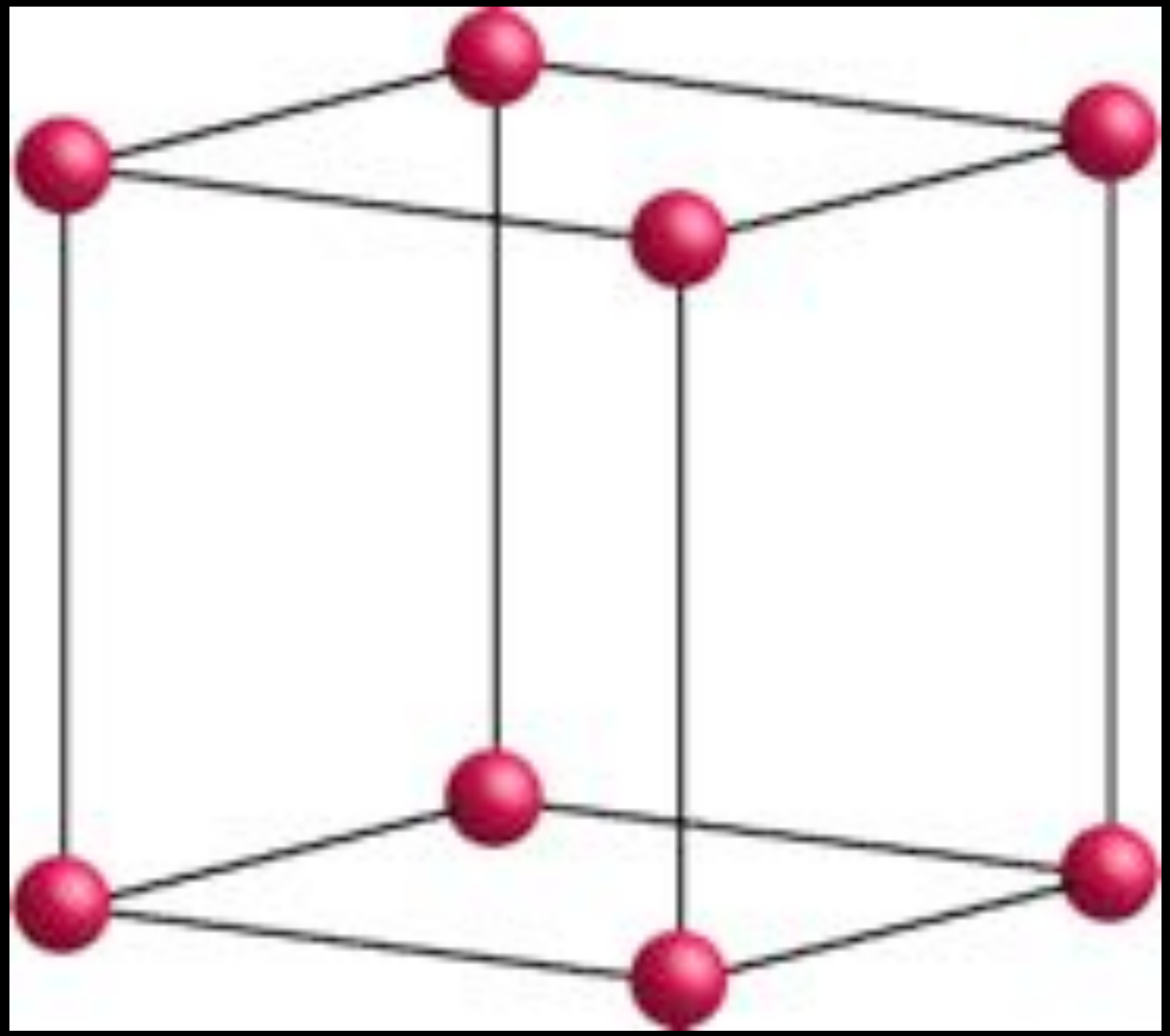
Atelier cristal, réseau direct

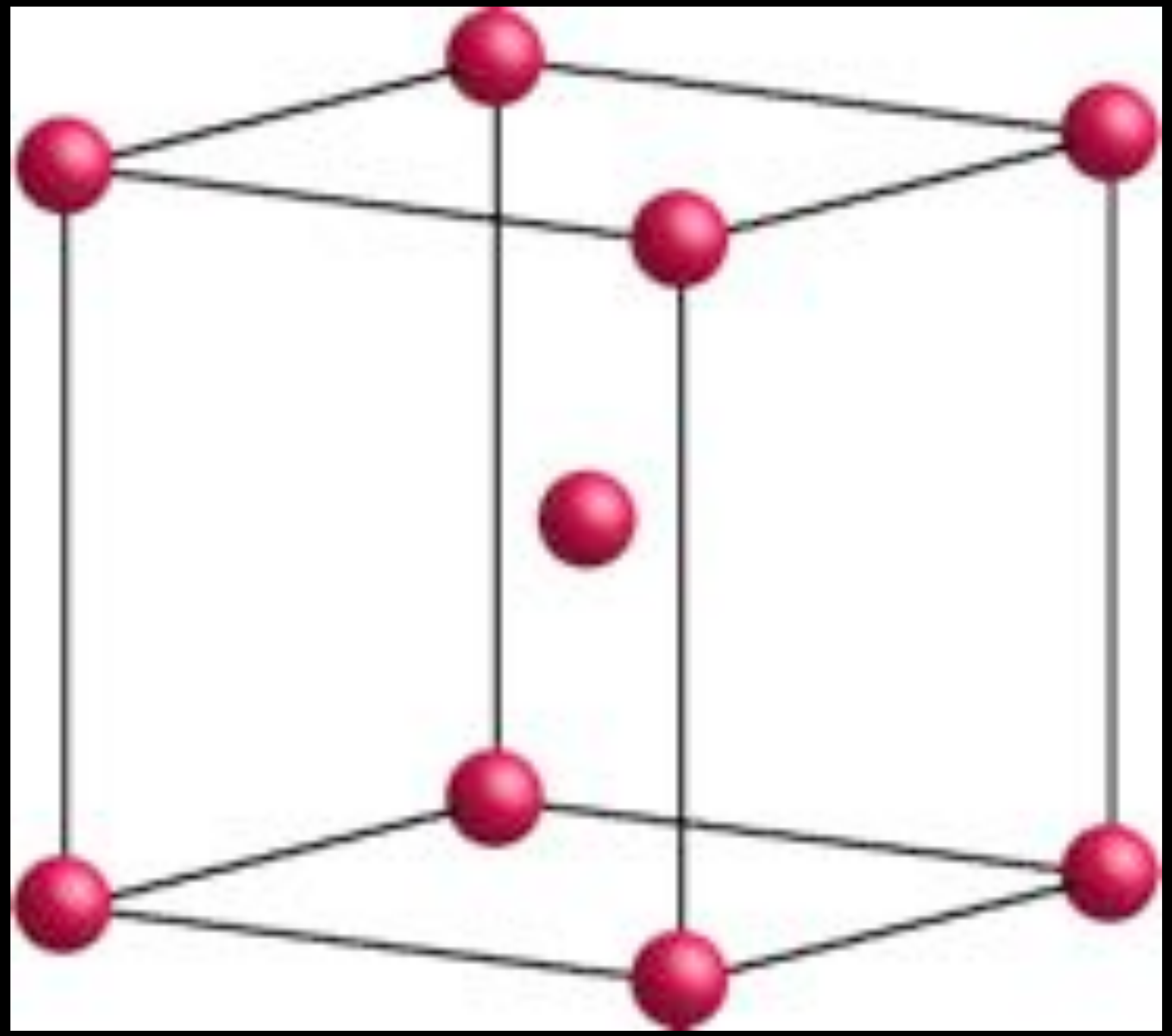
Greg Cabailh, 17 au 21 octobre 2022 • Synchrotron SOLEIL

A) Réseaux de Bravais et motifs.

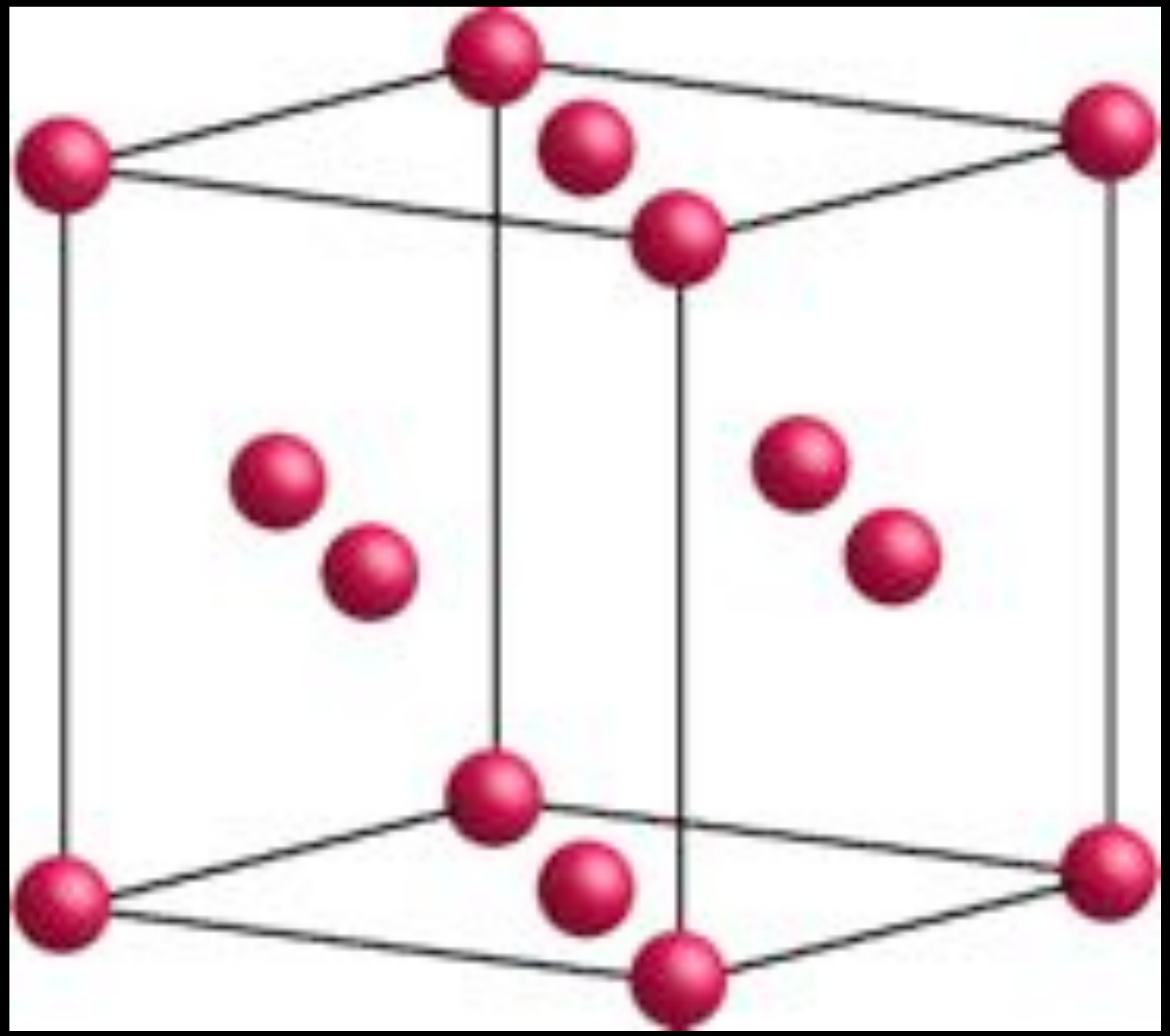
1. Rappeler les trois réseaux de Bravais du système cubique



Cubique P
Cubique simple (ou primitif)
(sc - simple cubic)



Cubique I
Cubique corps centré (“inner”)
(bcc - body centred cubic)

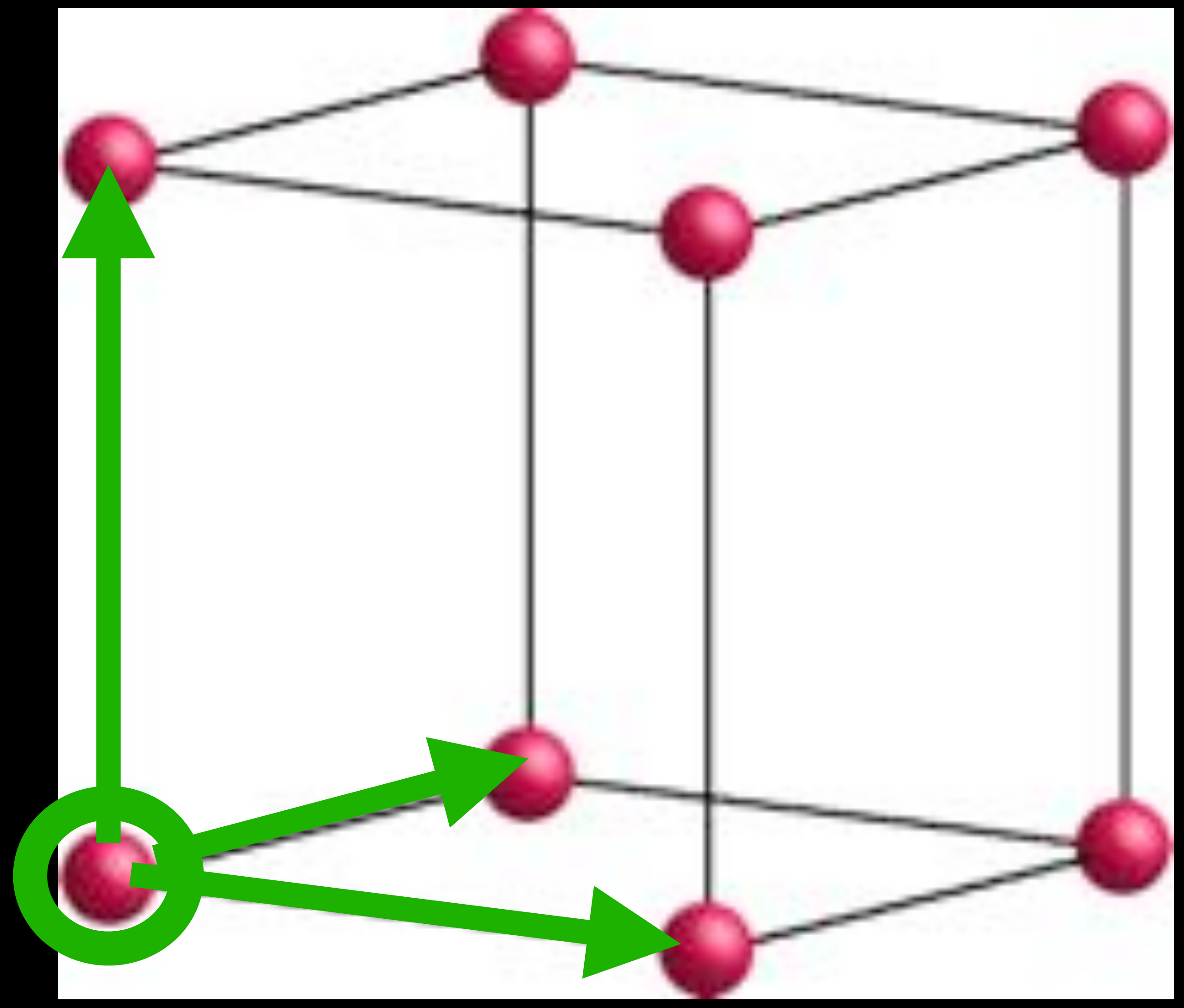


Cubique F
Cubique face centrée
(fcc - face centred cubic)

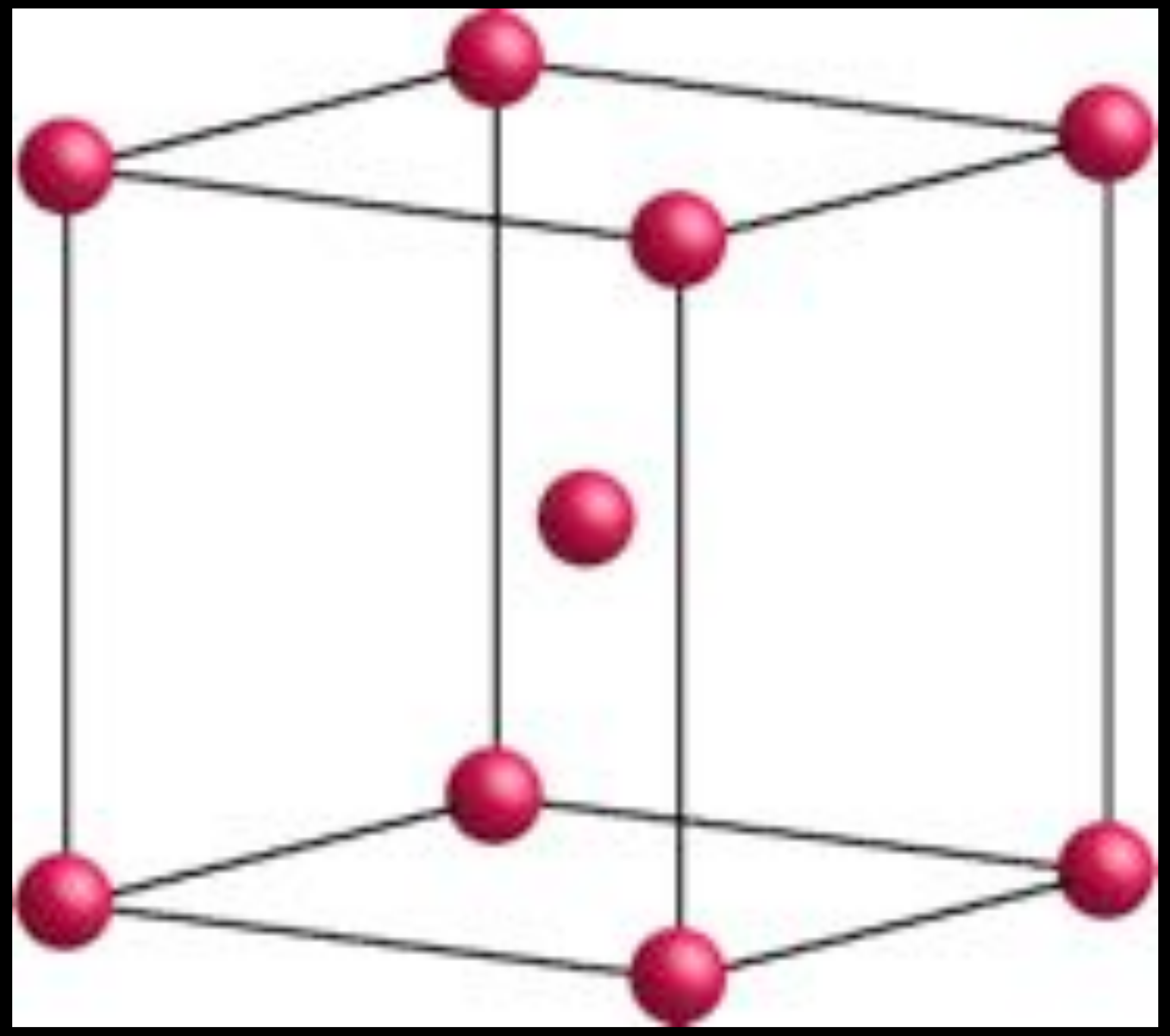
$$a_1 = a_2 = a_3 \qquad \alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$$

A) Réseaux de Bravais et motifs.

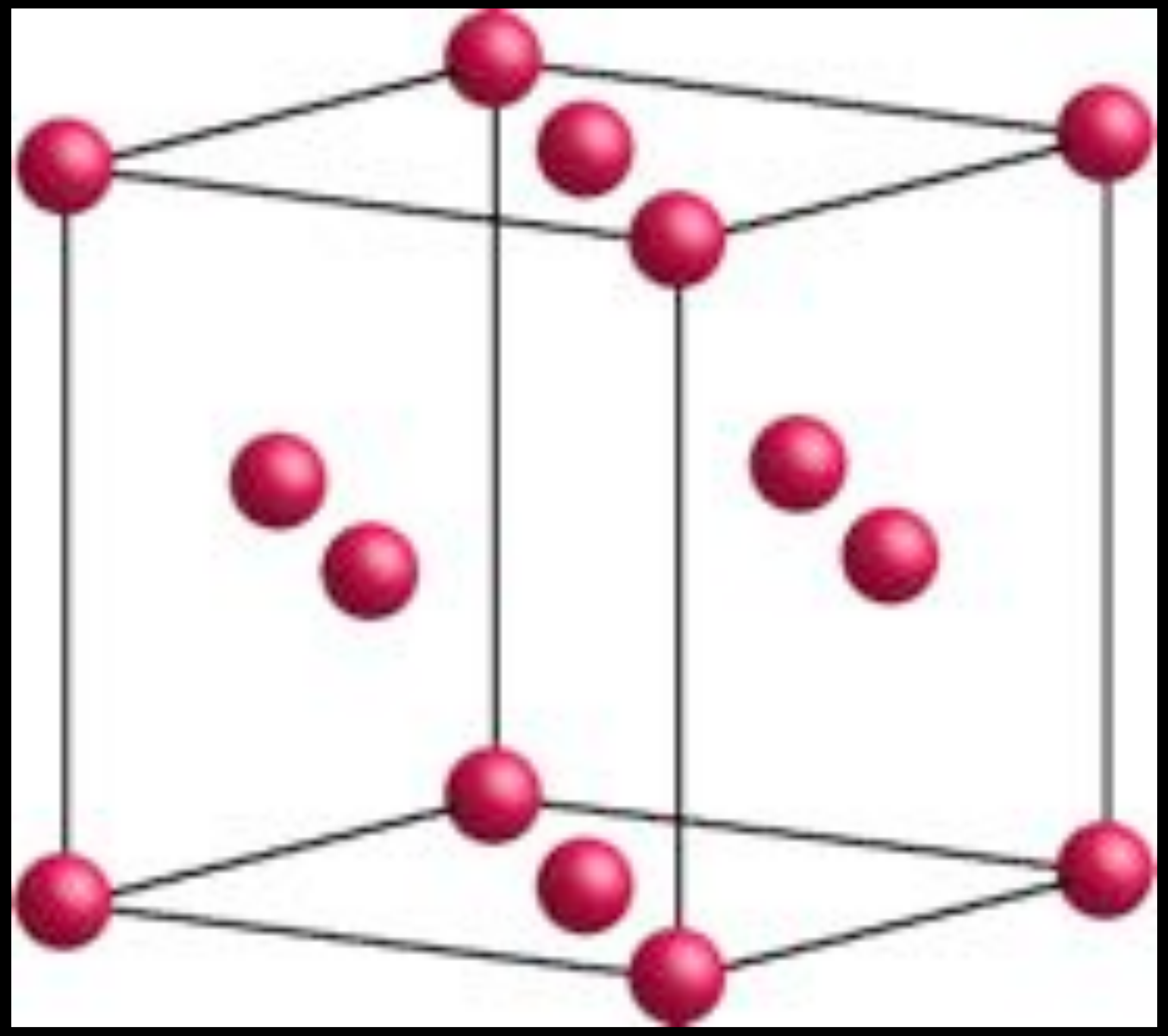
2. Pour chacune des structures, déterminer le nombre de nœuds par maille



Cubique P
Cubique simple (ou primitif)
(sc - simple cubic)



Cubique I
Cubique corps centré
(bcc - body centred cubic)

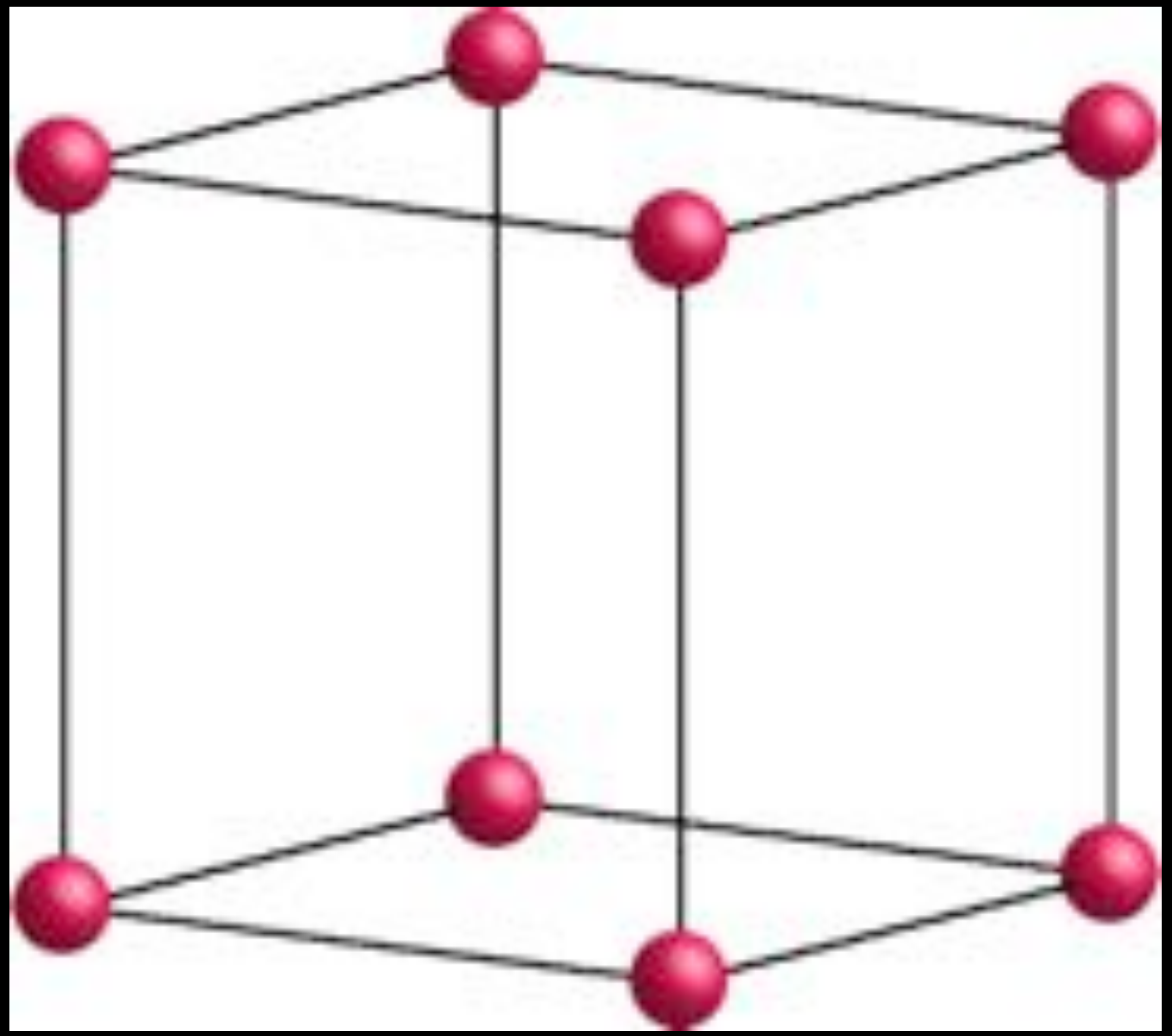


Cubique F
Cubique face centrée
(fcc - face centred cubic)

$8 \times \frac{1}{8} = 1$ noeud/maille
1 noeud/maille
(0,0,0)

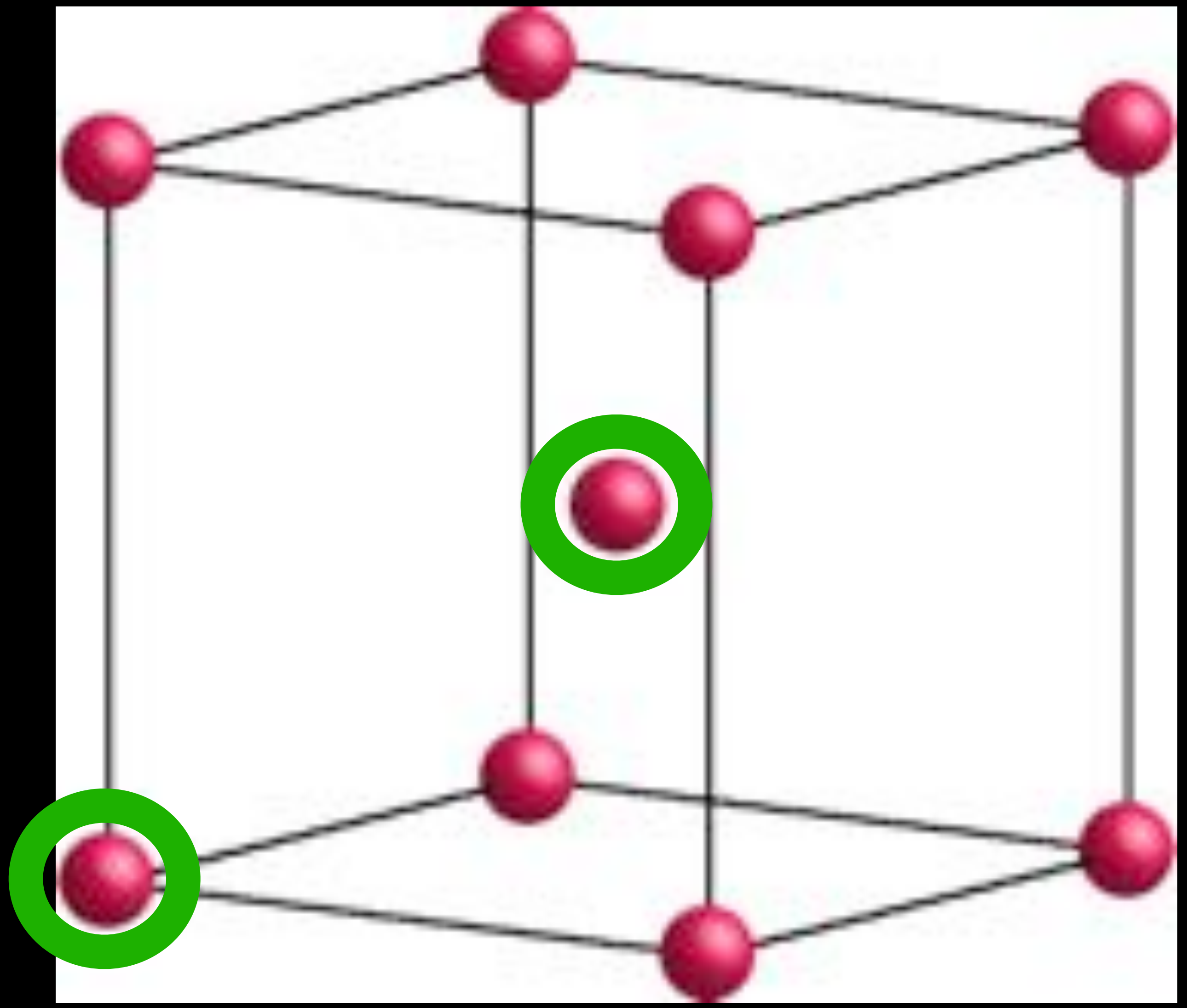
A) Réseaux de Bravais et motifs.

2. Pour chacune des structures, déterminer le nombre de nœuds par maille



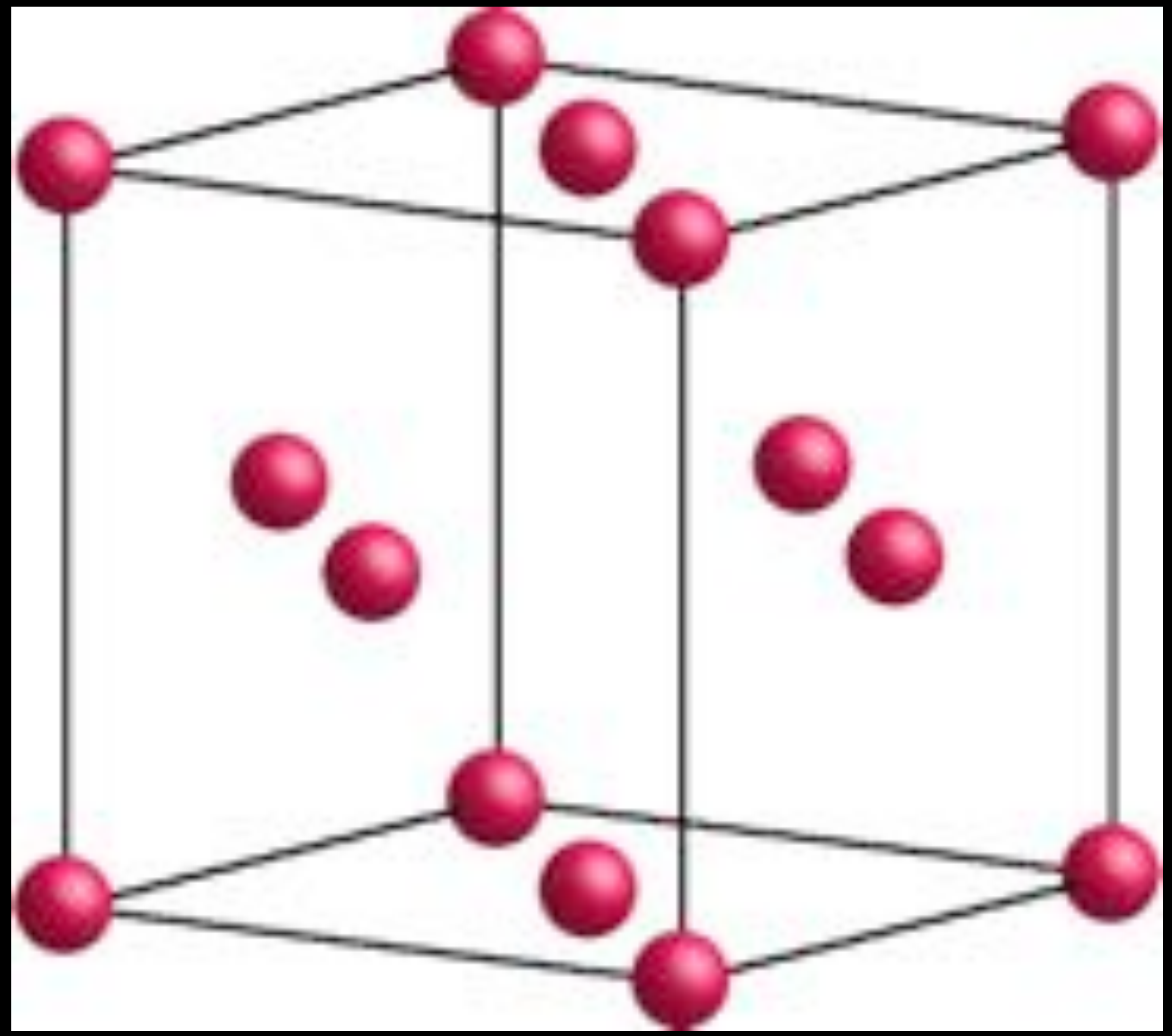
Cubique P
Cubique simple (ou primitif)
(sc - simple cubic)

$8 \times \frac{1}{8} = 1$ noeud/maille
1 noeud/maille
(0,0,0)



Cubique I
Cubique corps centré
(bcc - body centred cubic)

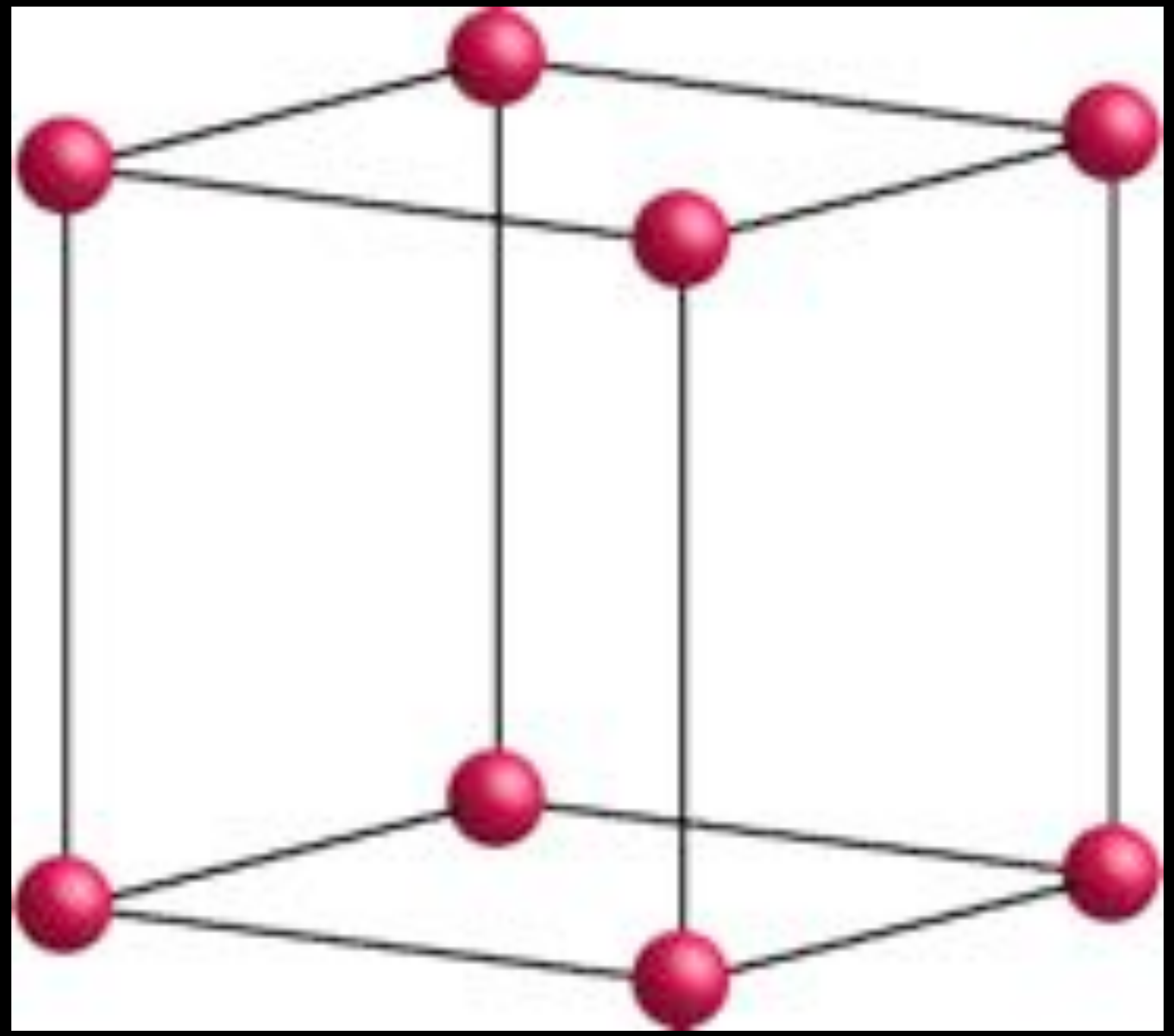
$8 \times 1/8 + 1 = 2$ noeuds/maille
(0,0,0)
(1/2,1/2,1/2)



Cubique F
Cubique face centrée
(fcc - face centred cubic)

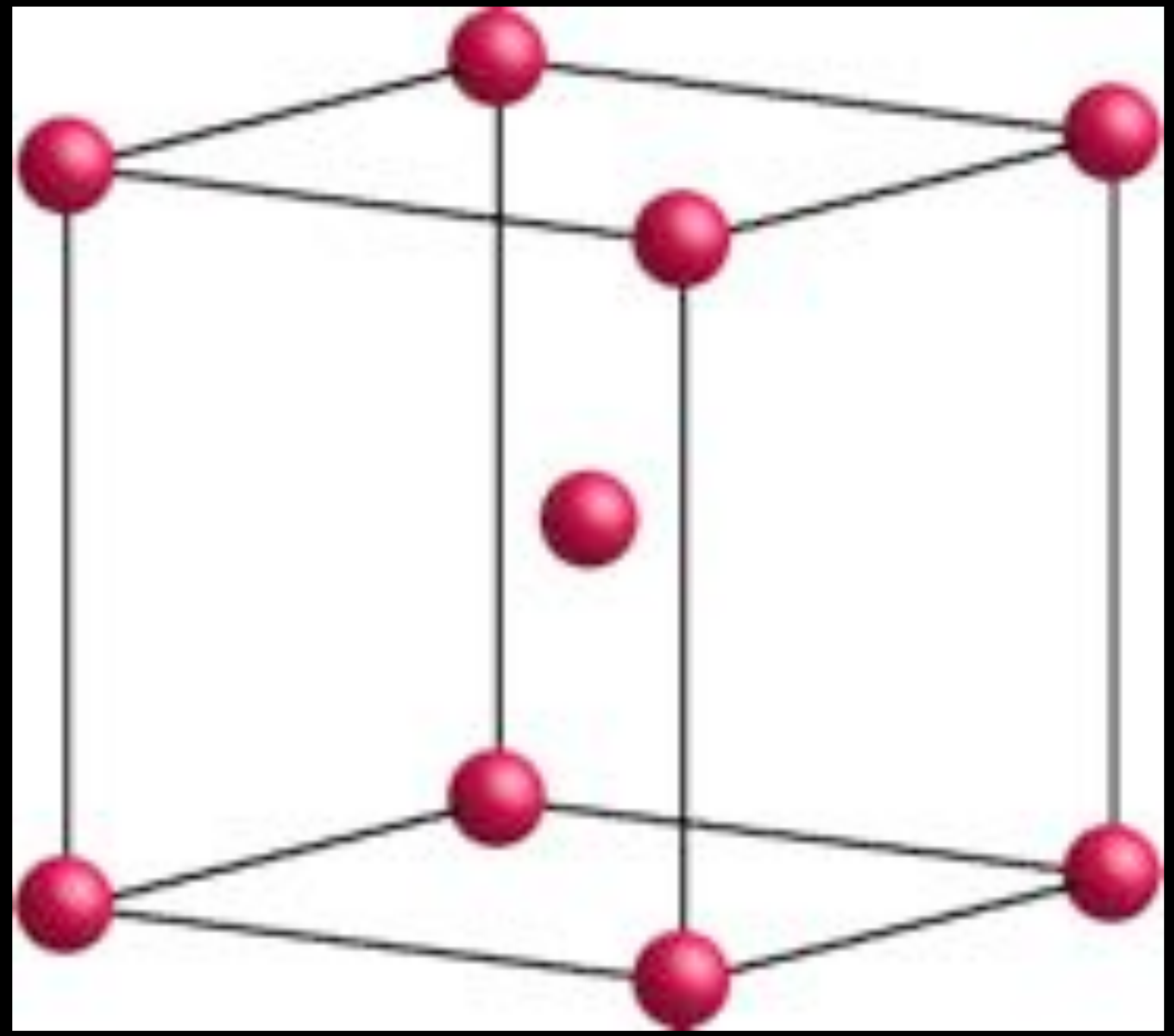
A) Réseaux de Bravais et motifs.

2. Pour chacune des structures, déterminer le nombre de nœuds par maille



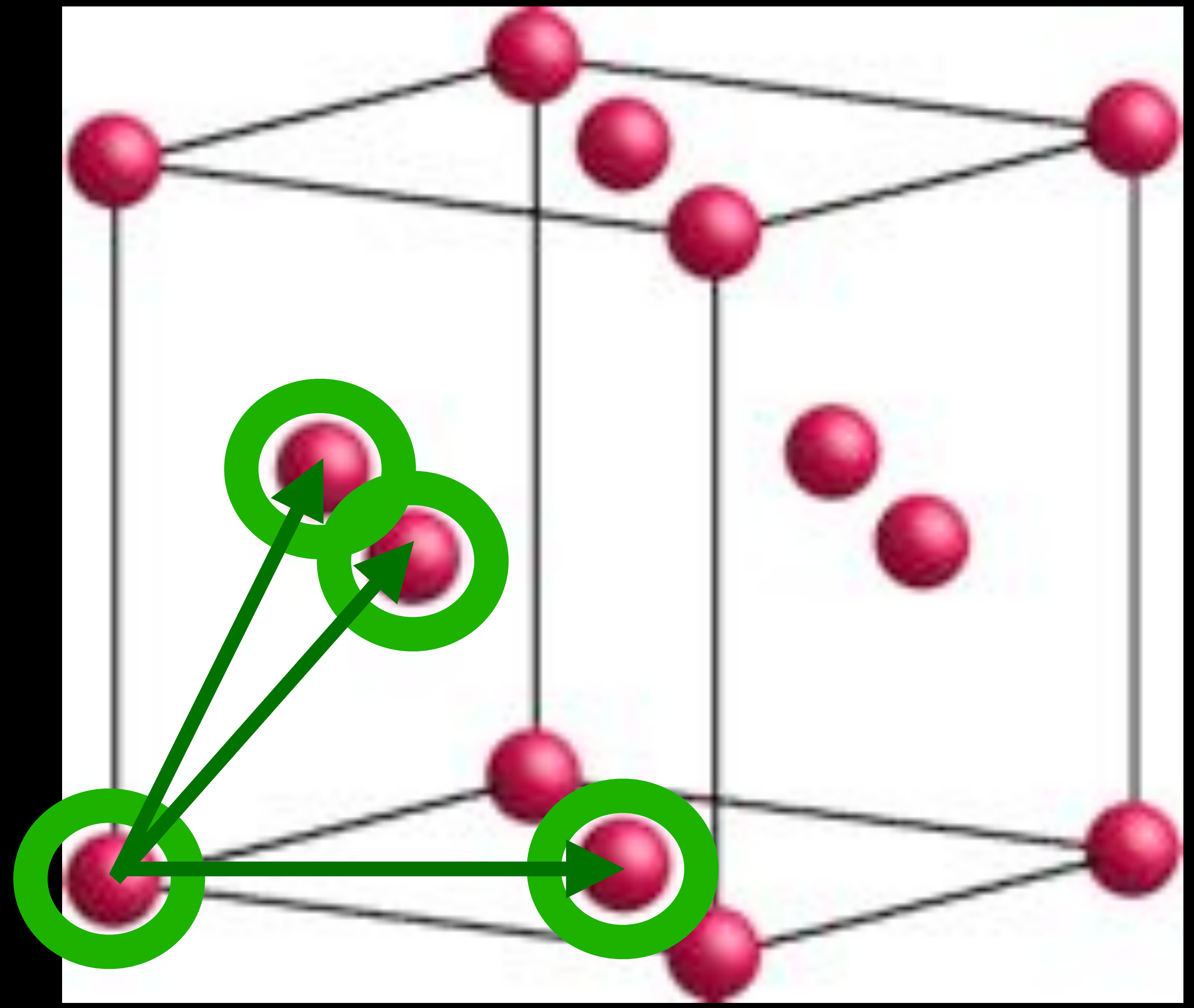
Cubique P
Cubique simple (ou primitif)
(sc - simple cubic)

$8 \times ⅛ = 1$ noeud/maille
1 noeud/maille
(0,0,0)



Cubique I
Cubique corps centré
(bcc - body centred cubic)

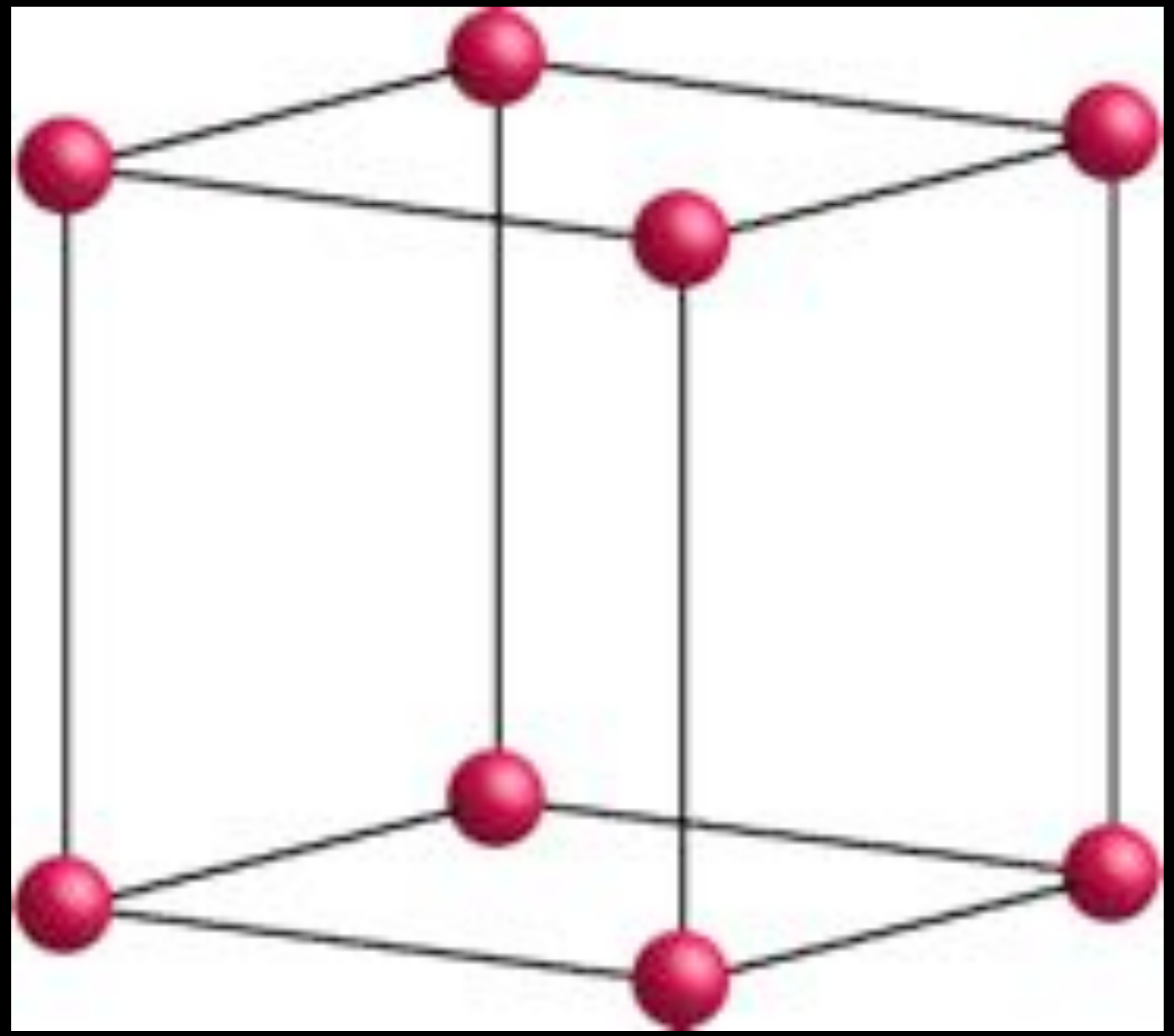
$8 \times 1/8 + 1 = 2$ noeuds/maille
(0,0,0)
(1/2,1/2,1/2)



Cubique F
Cubique face centrée
(fcc - face centred cubic)

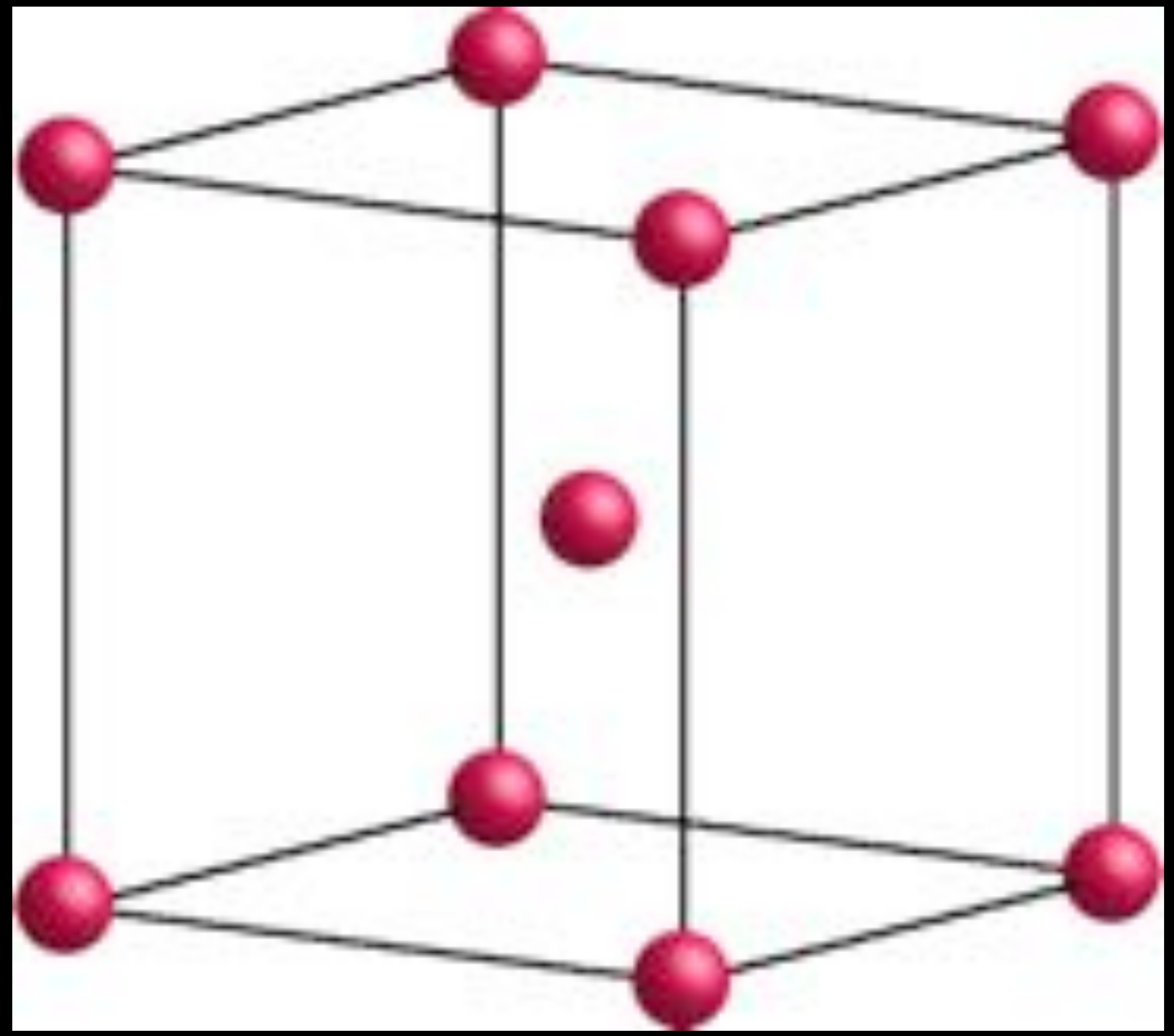
A) Réseaux de Bravais et motifs.

2. Pour chacune des structures, déterminer le nombre de nœuds par maille



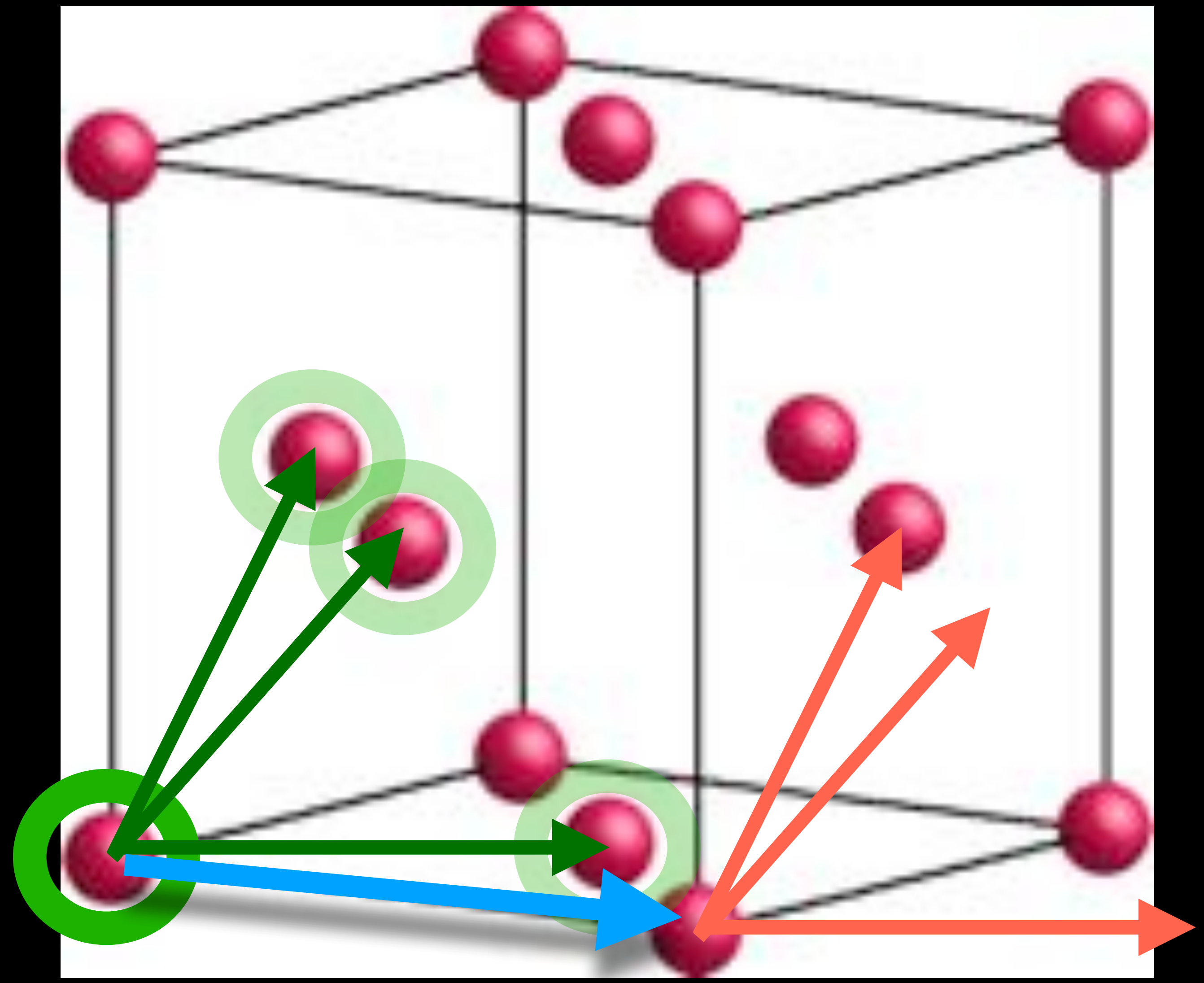
Cubique P
Cubique simple (ou primitif)
(sc - simple cubic)

8 × ⅛ = 1 noeud/maille
1 noeud/maille
(0,0,0)



Cubique I
Cubique corps centré
(bcc - body centred cubic)

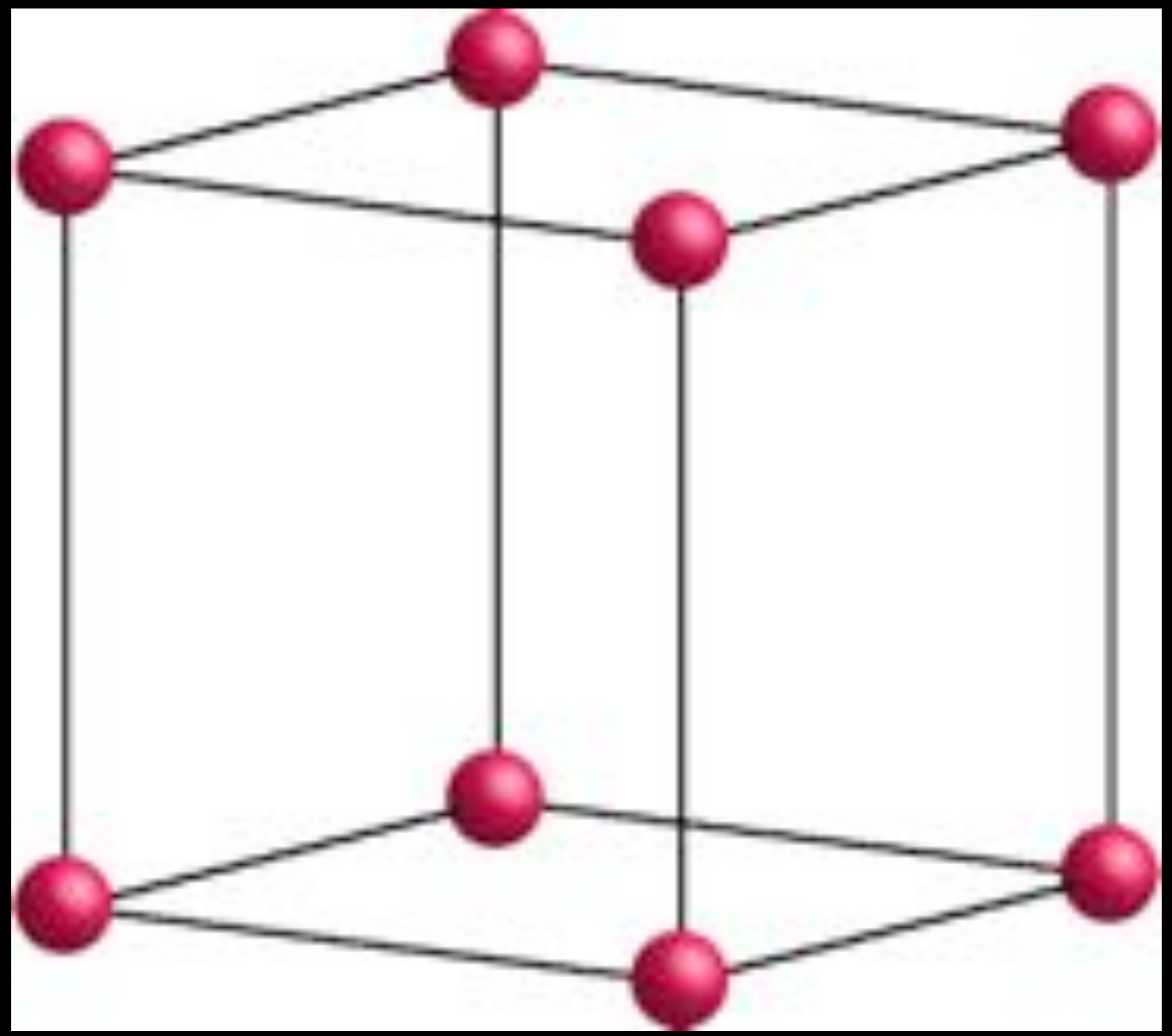
8 × 1/8 + 1 = 2 noeuds/maille
(0,0,0)
(1/2,1/2,1/2)



Cubique F
Cubique face centrée
(fcc - face centred cubic)

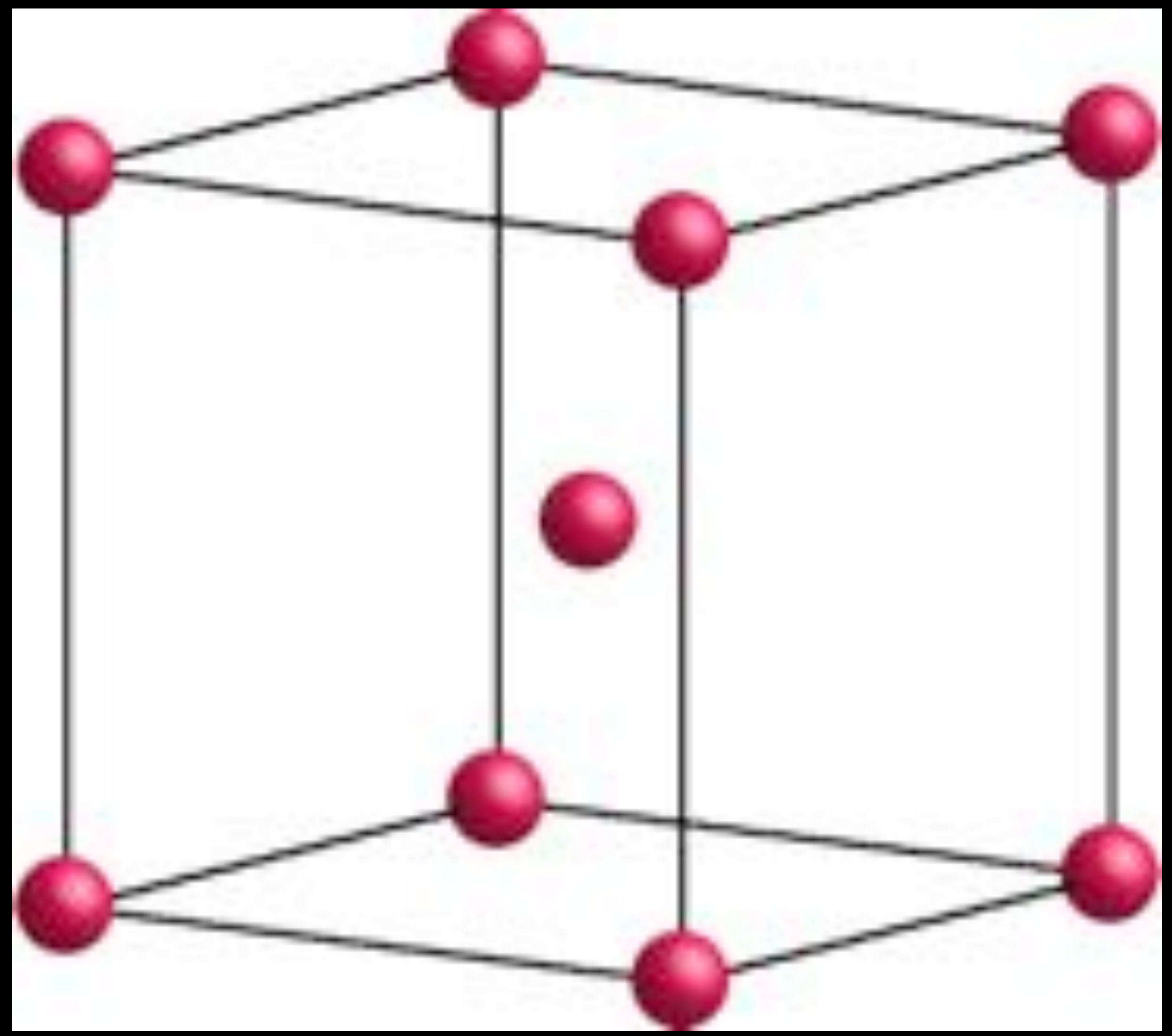
A) Réseaux de Bravais et motifs.

2. Pour chacune des structures, déterminer le nombre de nœuds par maille



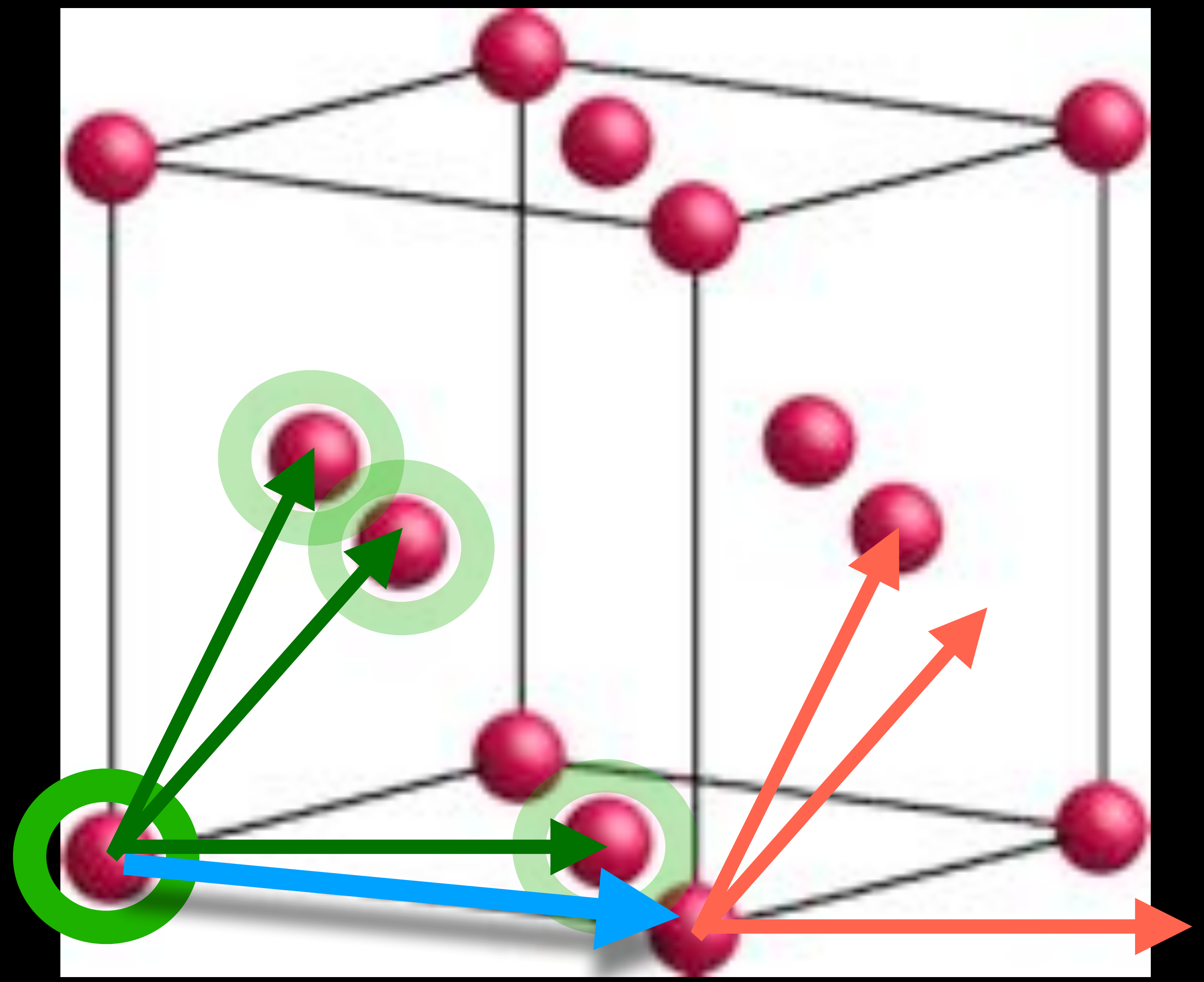
Cubique P
Cubique simple (ou primitif)
(sc - simple cubic)

$8 \times ⅛ = 1$ noeud/maille
1 noeud/maille
(0,0,0)



Cubique I
Cubique corps centré
(bcc - body centred cubic)

$8 \times 1/8 + 1 = 2$ noeuds/maille
(0,0,0)
(1/2,1/2,1/2)

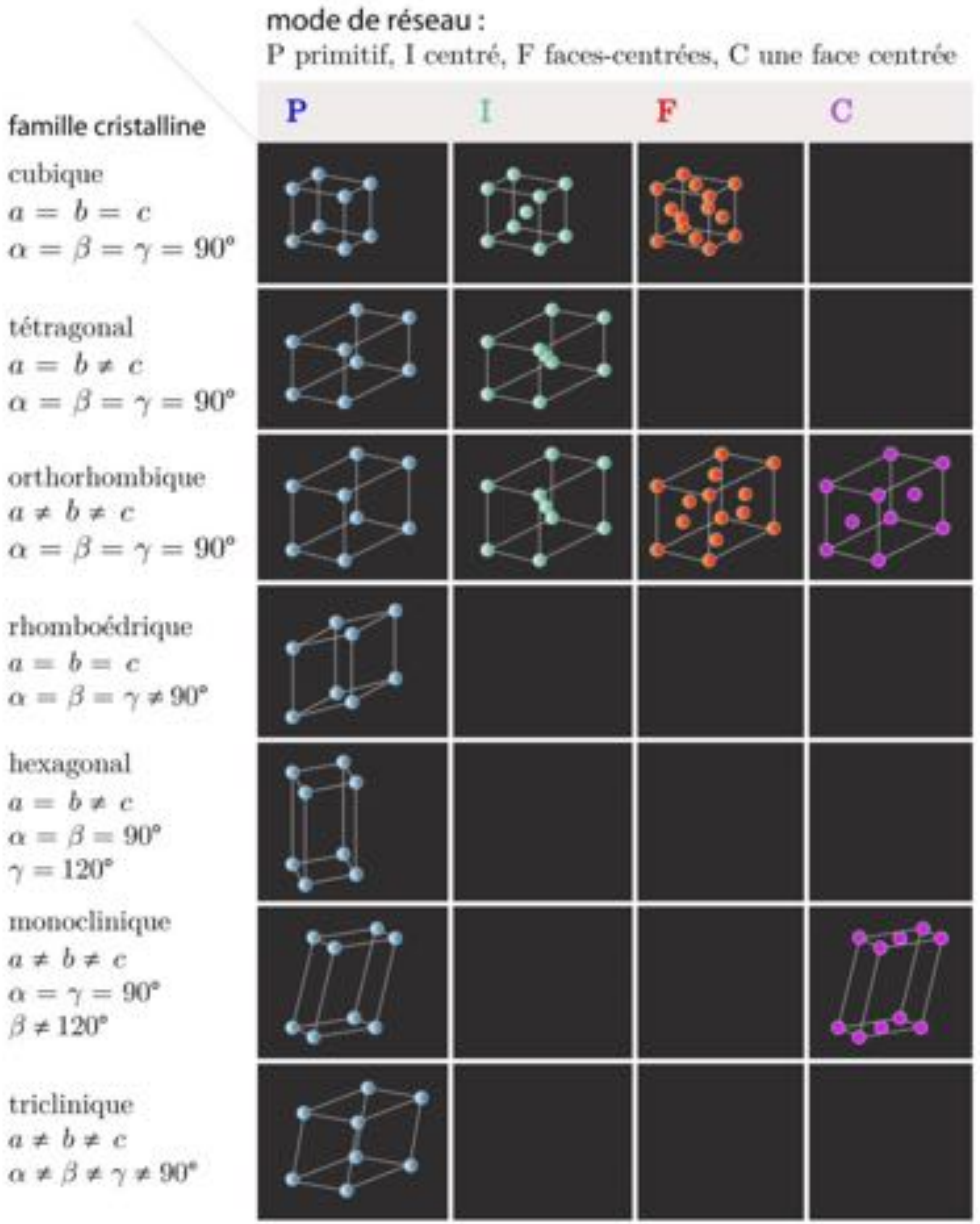


Cubique F
Cubique face centrée
(fcc - face centred cubic)

$8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4$ noeuds/maille
(0,0,0)
(1/2,1/2,0)
(1/2,0,1/2)
(0,1/2,1/2)

7 familles de cristal
4 modes de réseau

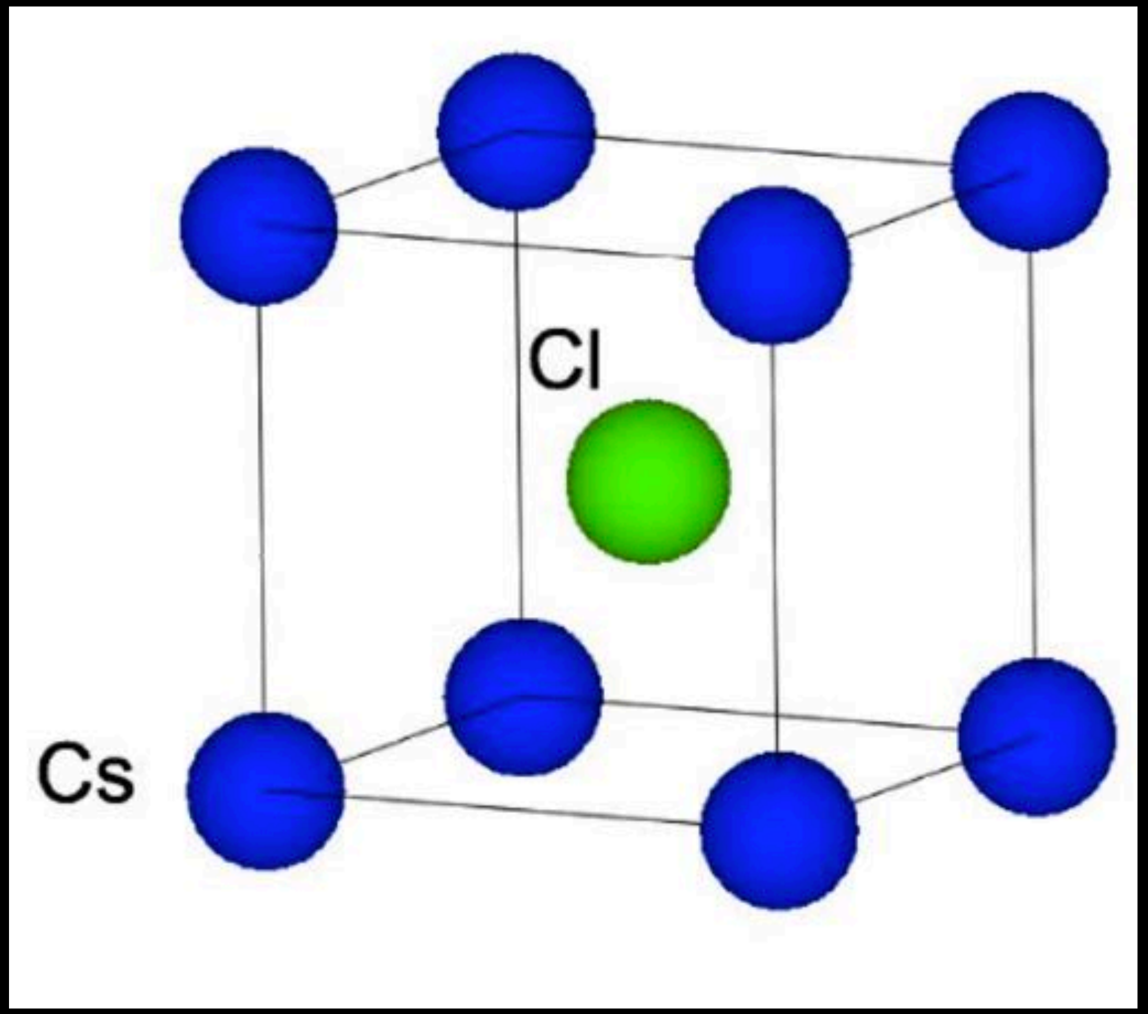
14 réseaux de Bravais 3D



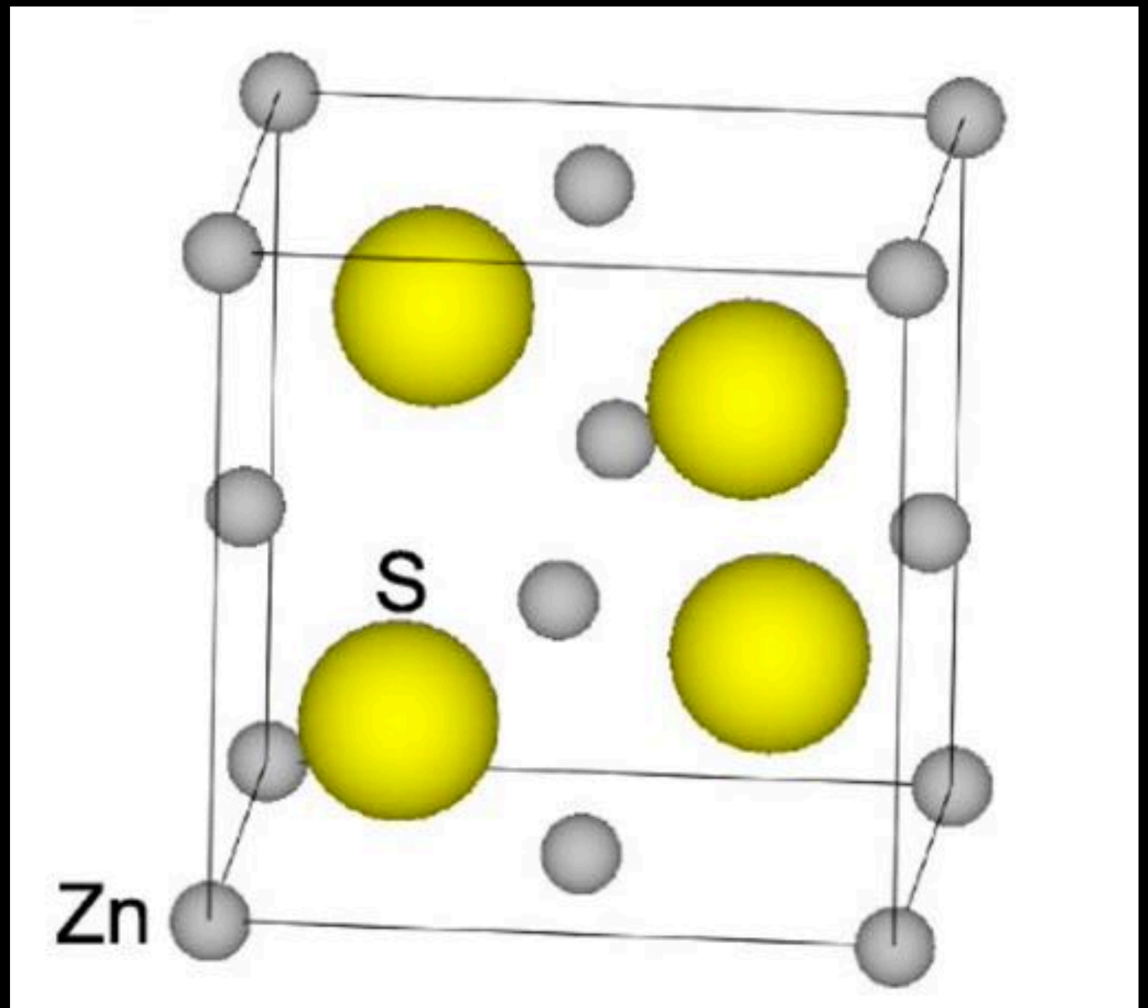
A) Réseaux de Bravais et motifs.

3. Indiquer le réseau de Bravais et la position des atomes qui constituent le motif pour chacun des édifices cristallins de la figure

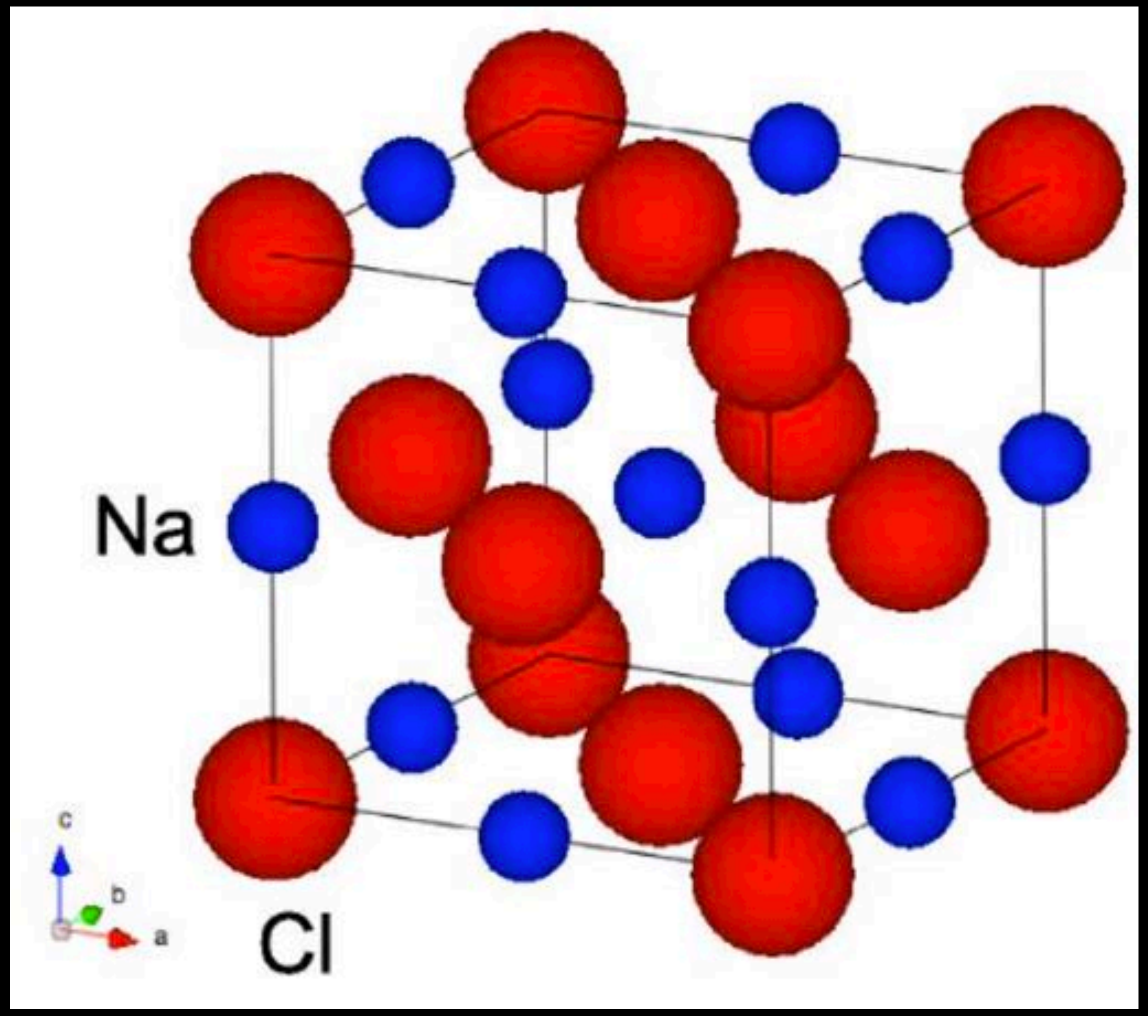
b) CsCl



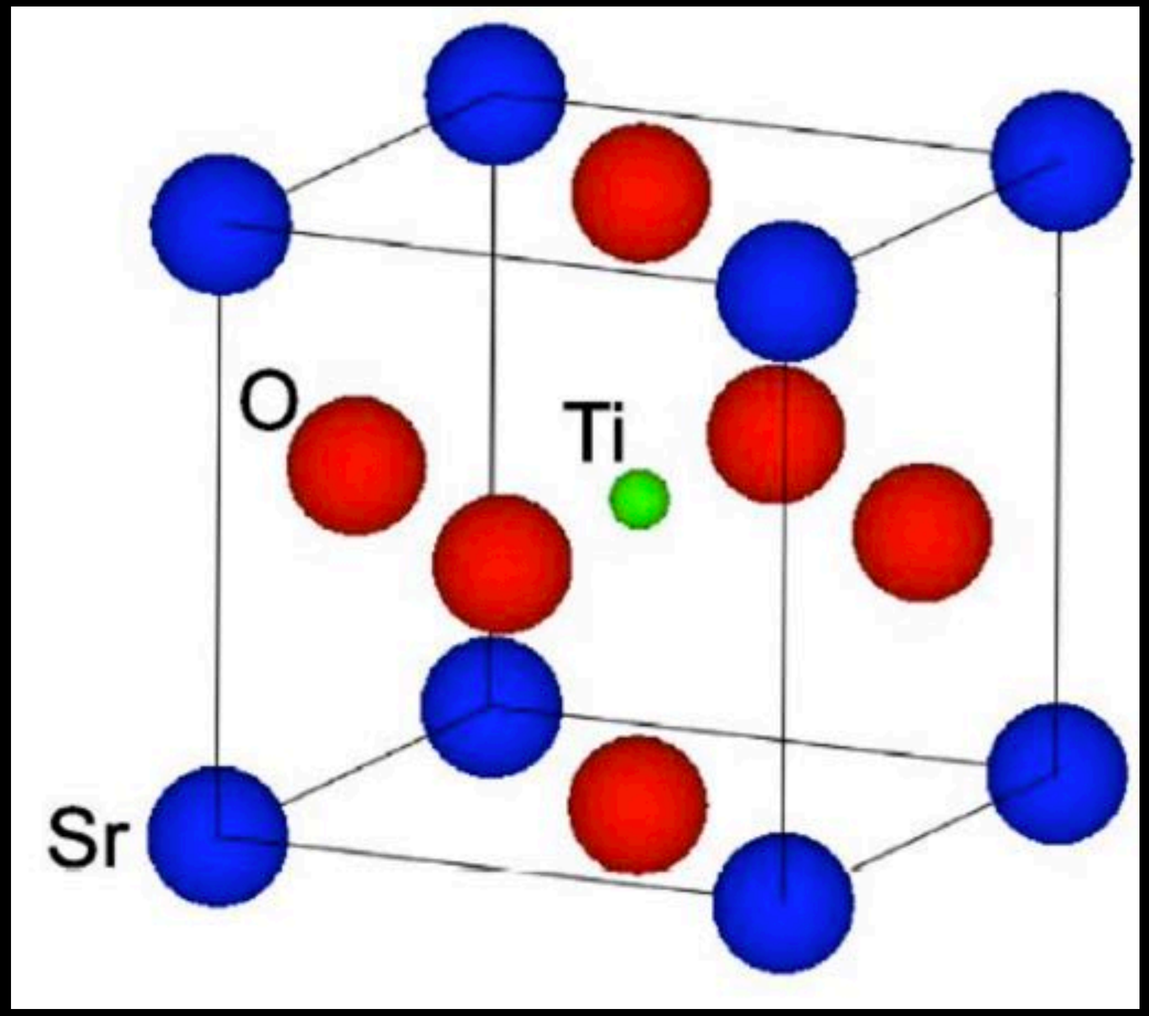
d) ZnS “zinc blende”



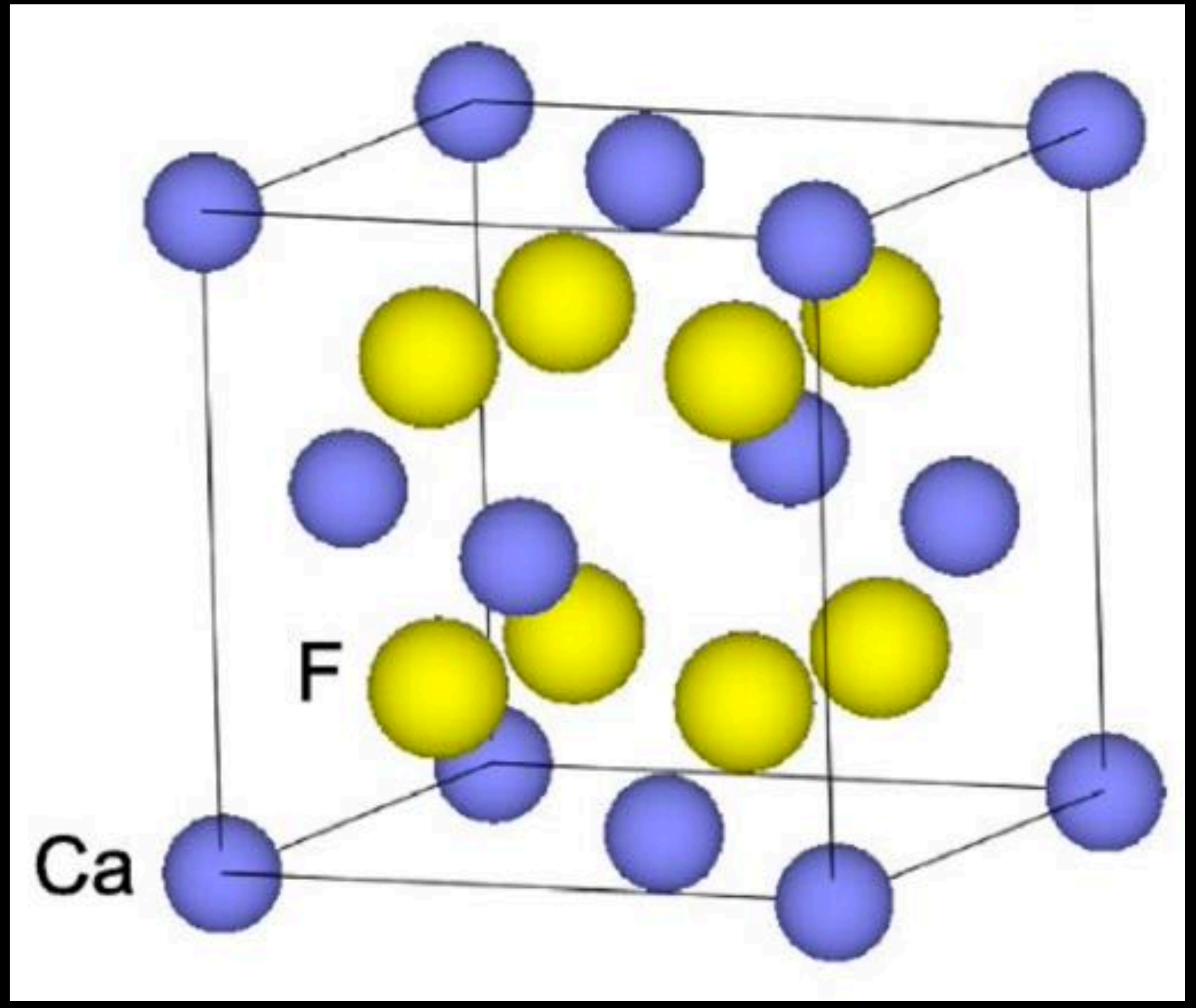
a) NaCl “rocksalt”



c) Pérosvskite $SrTiO_3$



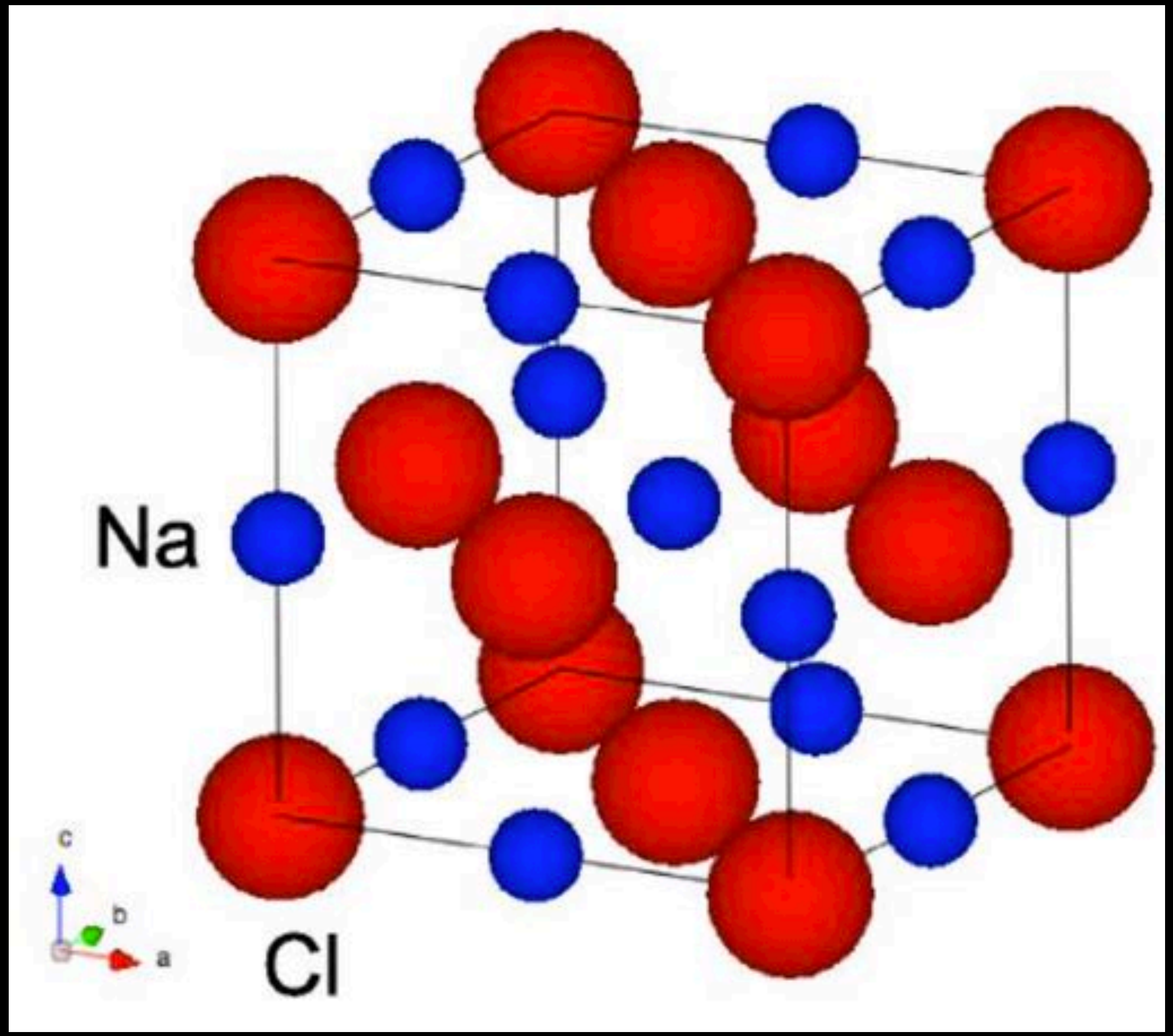
e) Fluorite ou fluorine CaF_2



A) Réseaux de Bravais et motifs.

3. Indiquer le réseau de Bravais et la position des atomes qui constituent le motif pour chacun des édifices cristallins de la figure

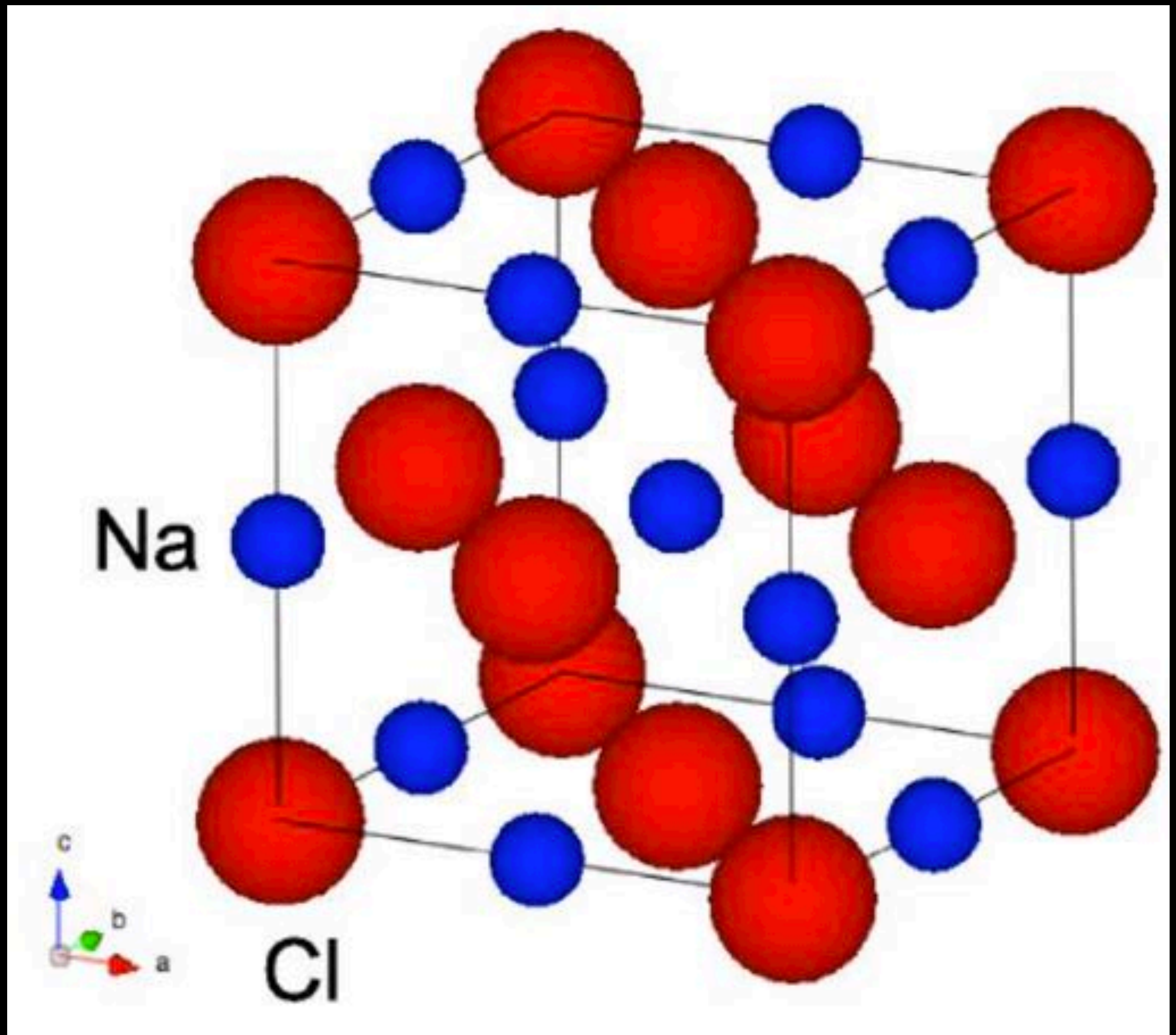
a) NaCl "rocksalt"



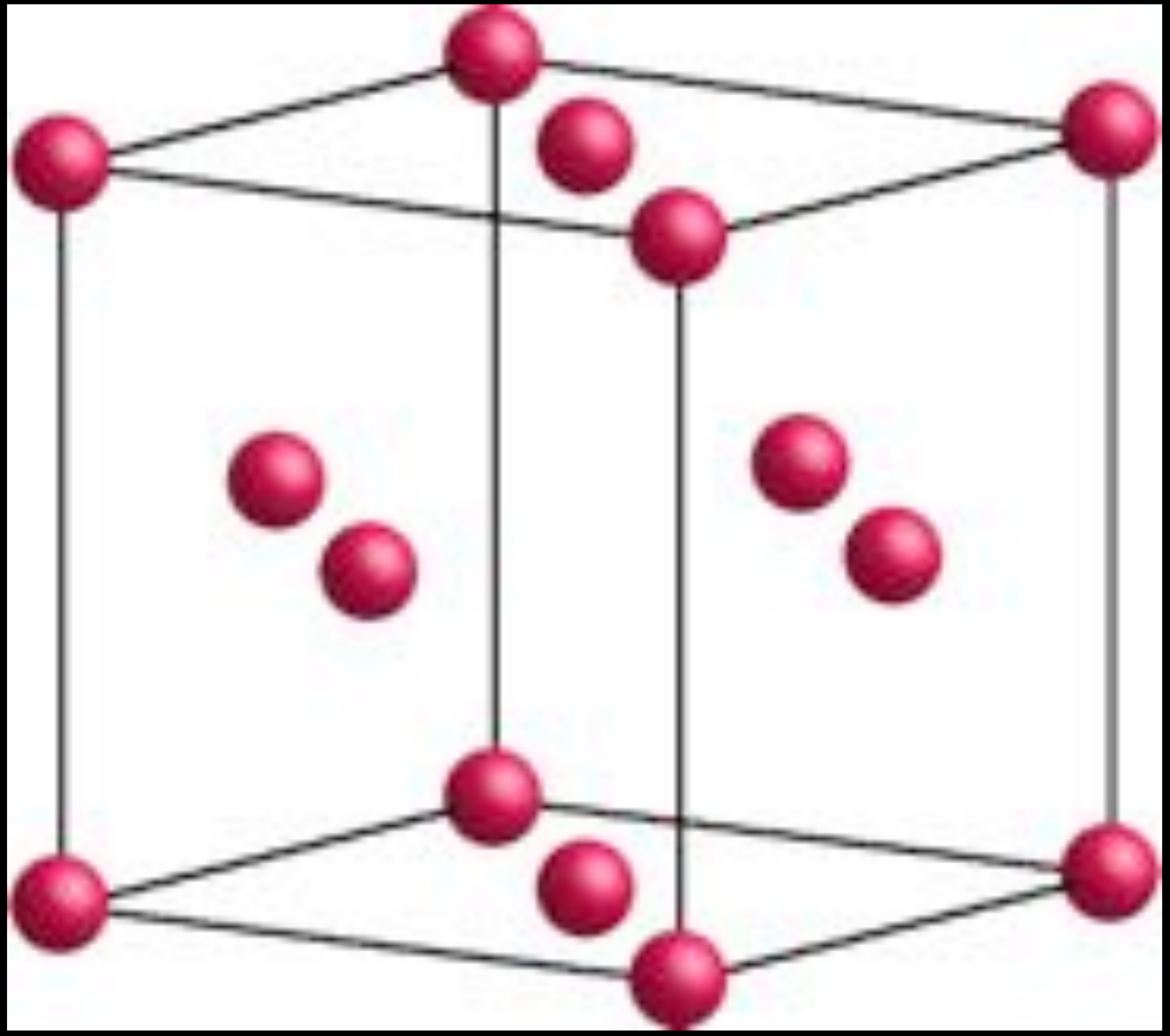
A) Réseaux de Bravais et motifs.

3. Indiquer le réseau de Bravais et la position des atomes qui constituent le motif pour chacun des édifices cristallins de la figure

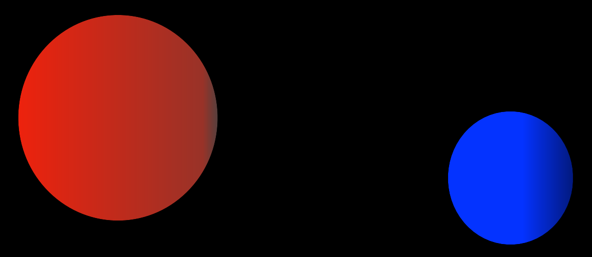
a) NaCl “rocksalt”



Cubique F - fcc



+



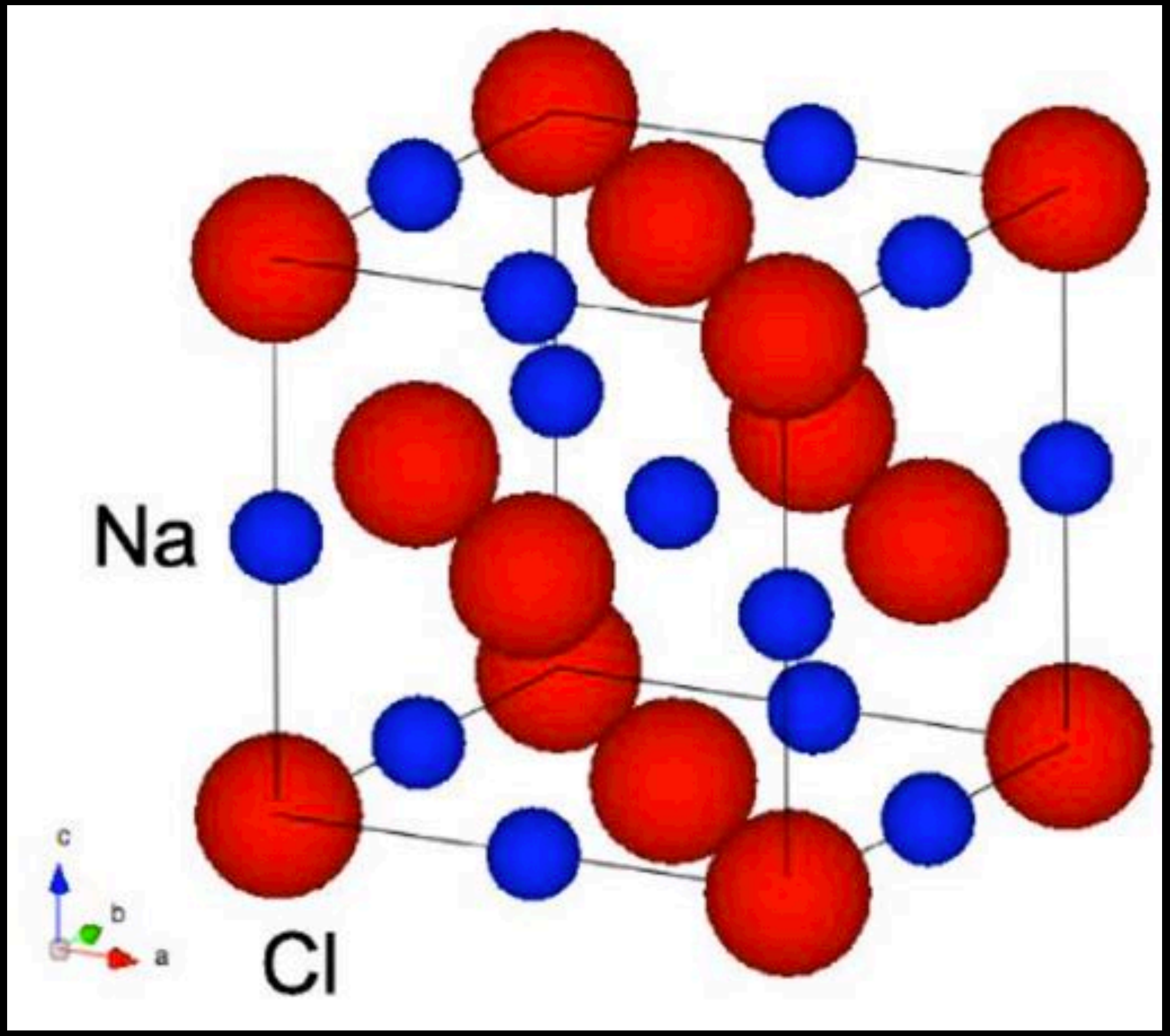
motif: 1 atome Cl en (0,0,0)

1 atome Na en (½, 0, 0)

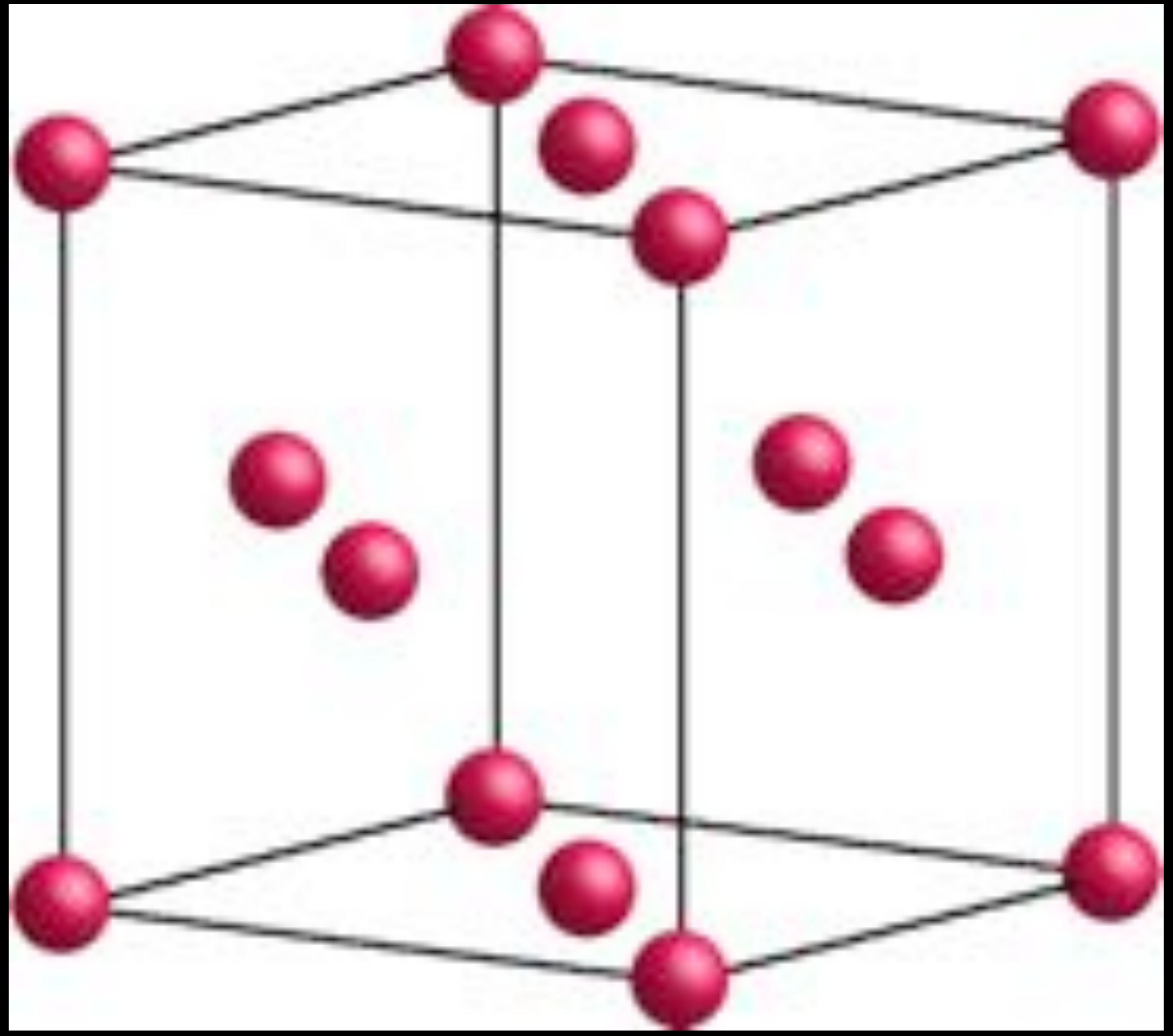
A) Réseaux de Bravais et motifs.

3. Indiquer le réseau de Bravais et la position des atomes qui constituent le motif pour chacun des édifices cristallins de la figure

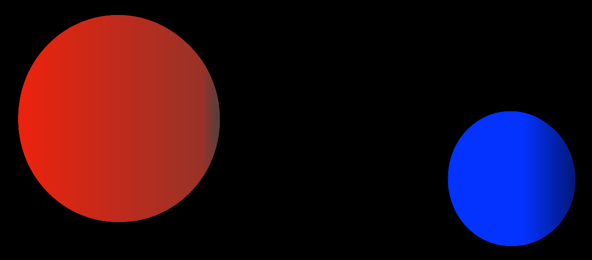
a) NaCl “rocksalt”



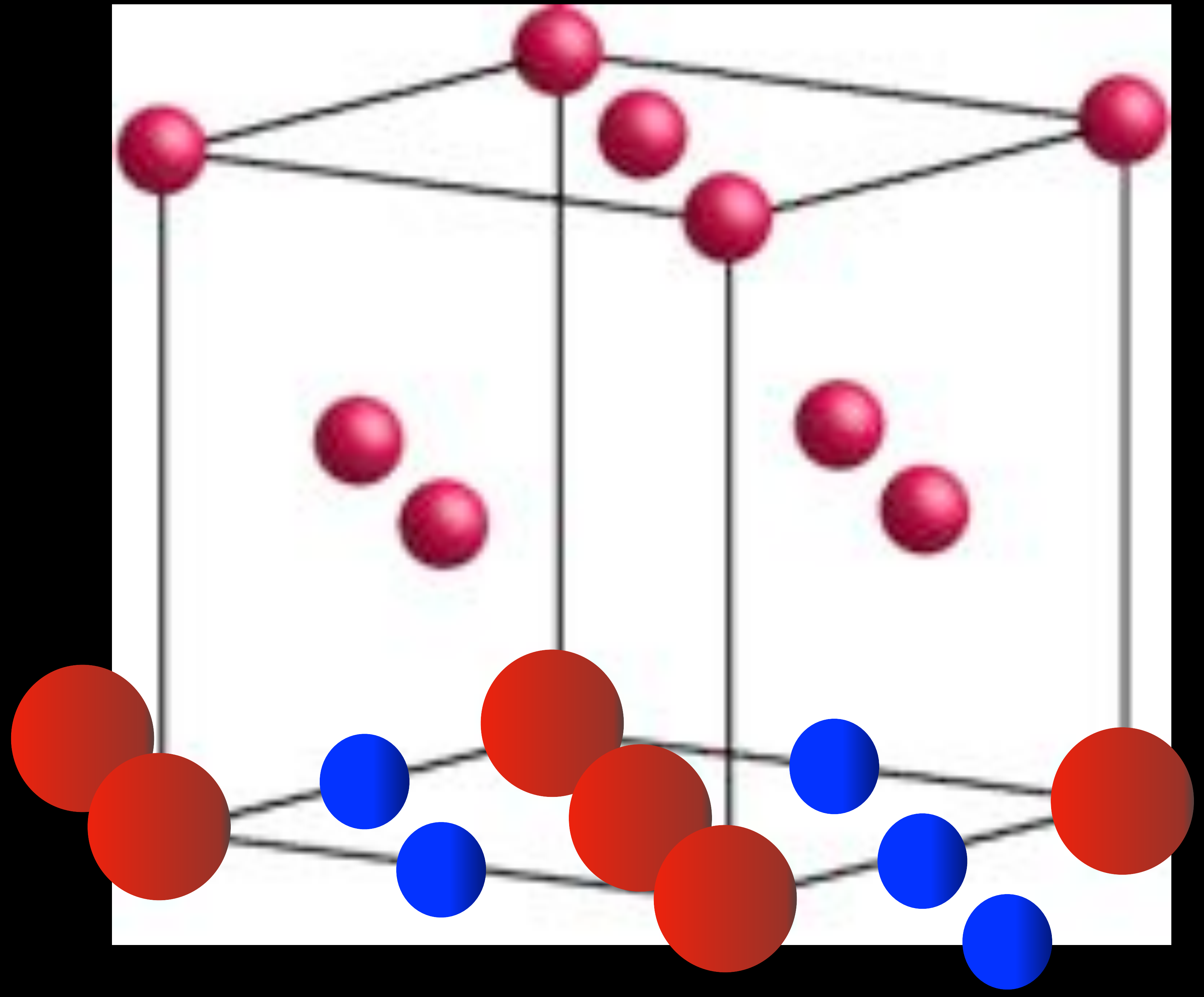
Cubique F - fcc



+



=



motif: 1 atome Cl en (0,0,0)

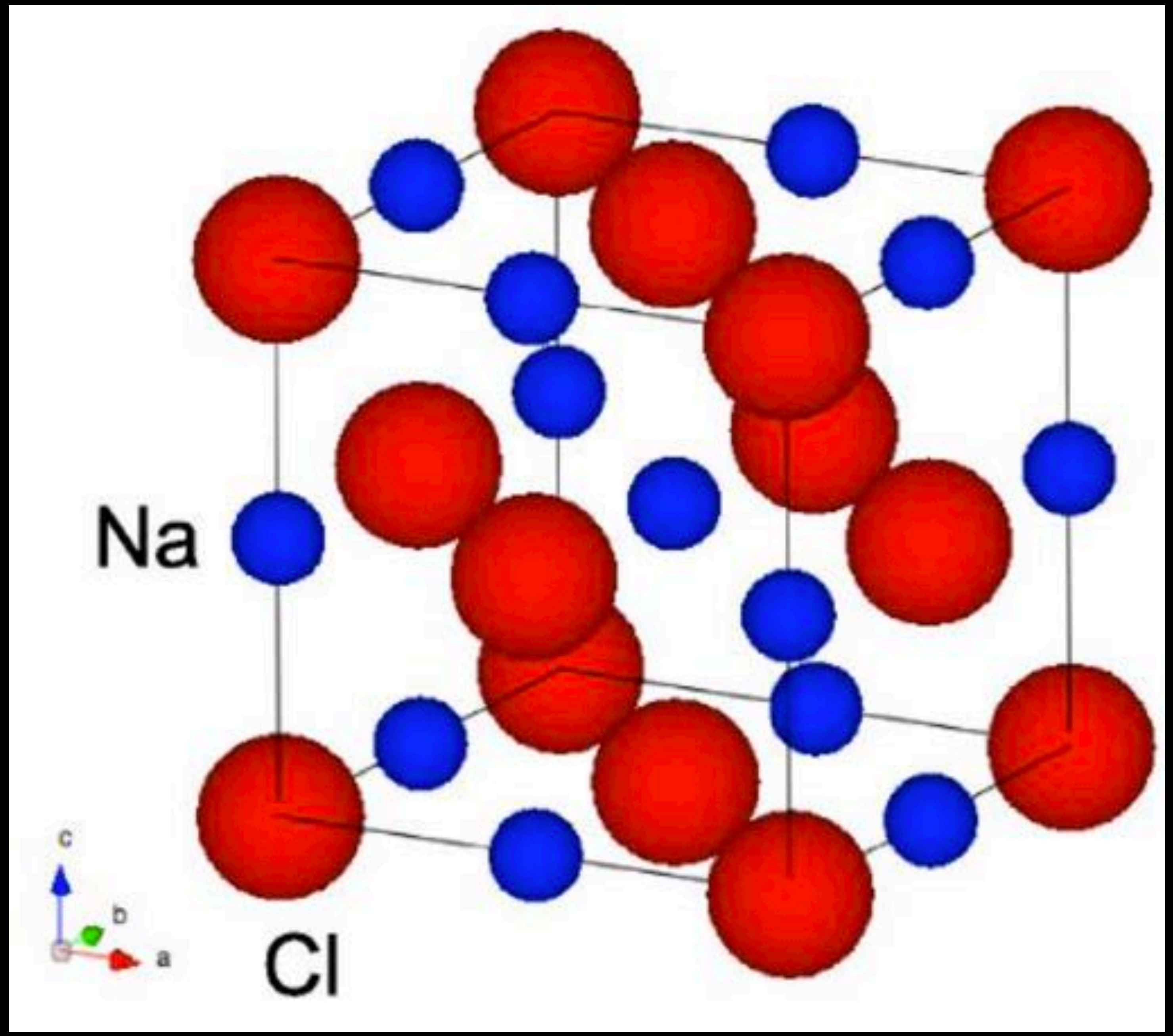
1 atome Na en (½, 0, 0)

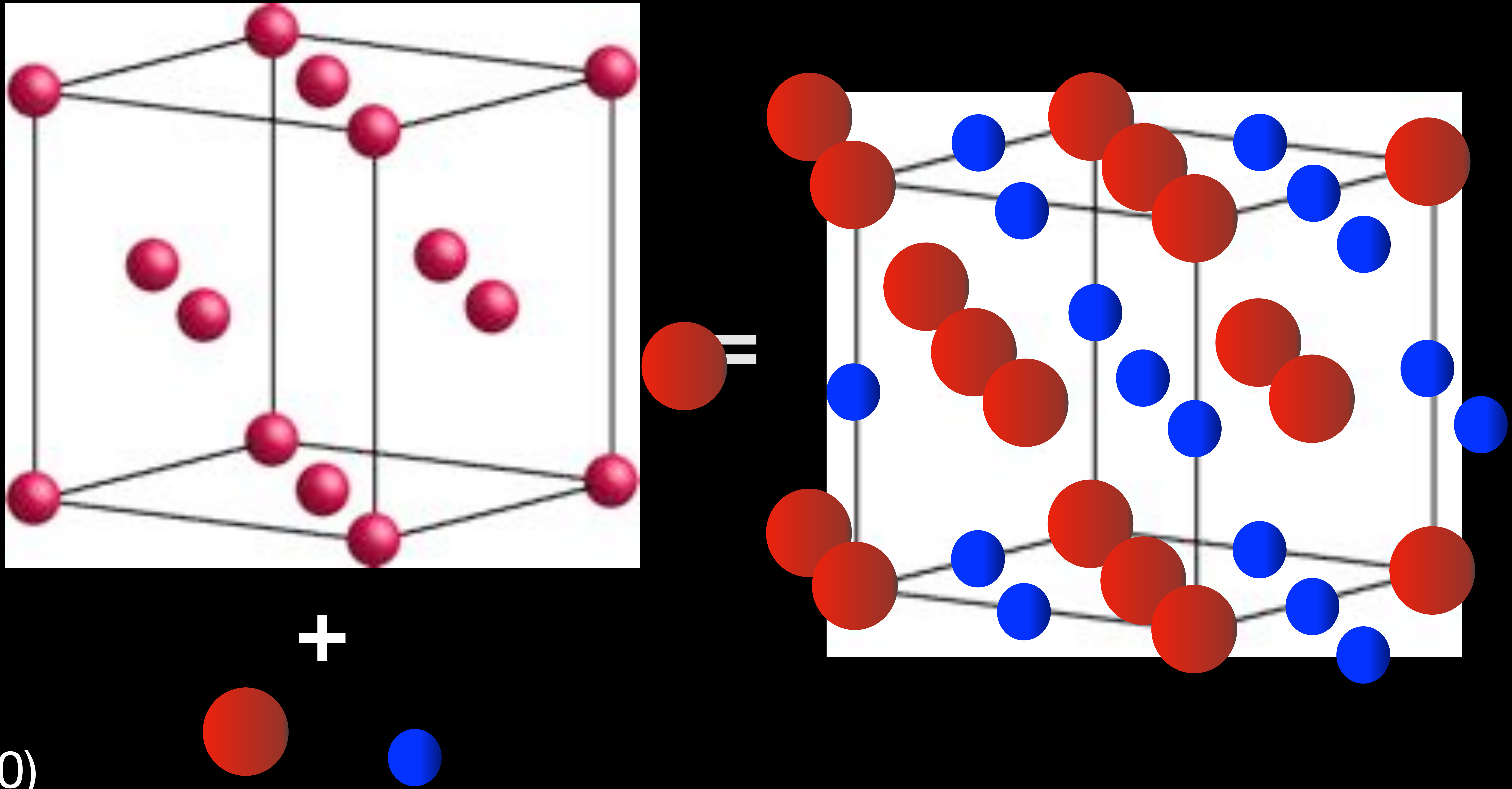
A) Réseaux de Bravais et motifs.

3. Indiquer le réseau de Bravais et la position des atomes qui constituent le motif pour chacun des édifices cristallins de la figure

a) NaCl “rocksalt”

Cubique F - fcc



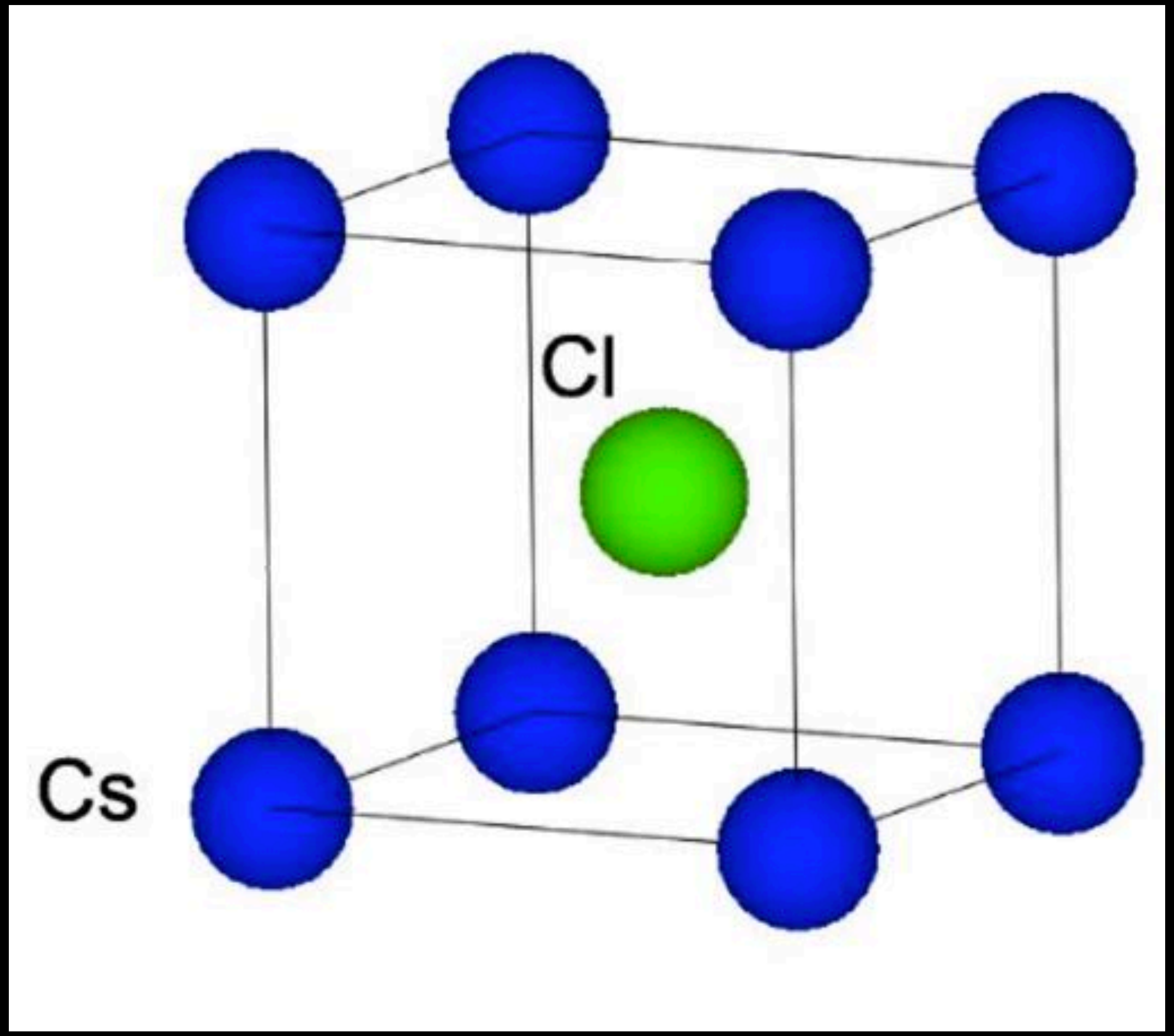


motif: 1 atome Cl en (0,0,0)
1 atome Na en (½, 0, 0)

A) Réseaux de Bravais et motifs.

3. Indiquer le réseau de Bravais et la position des atomes qui constituent le motif pour chacun des édifices cristallins de la figure

b) CsCl

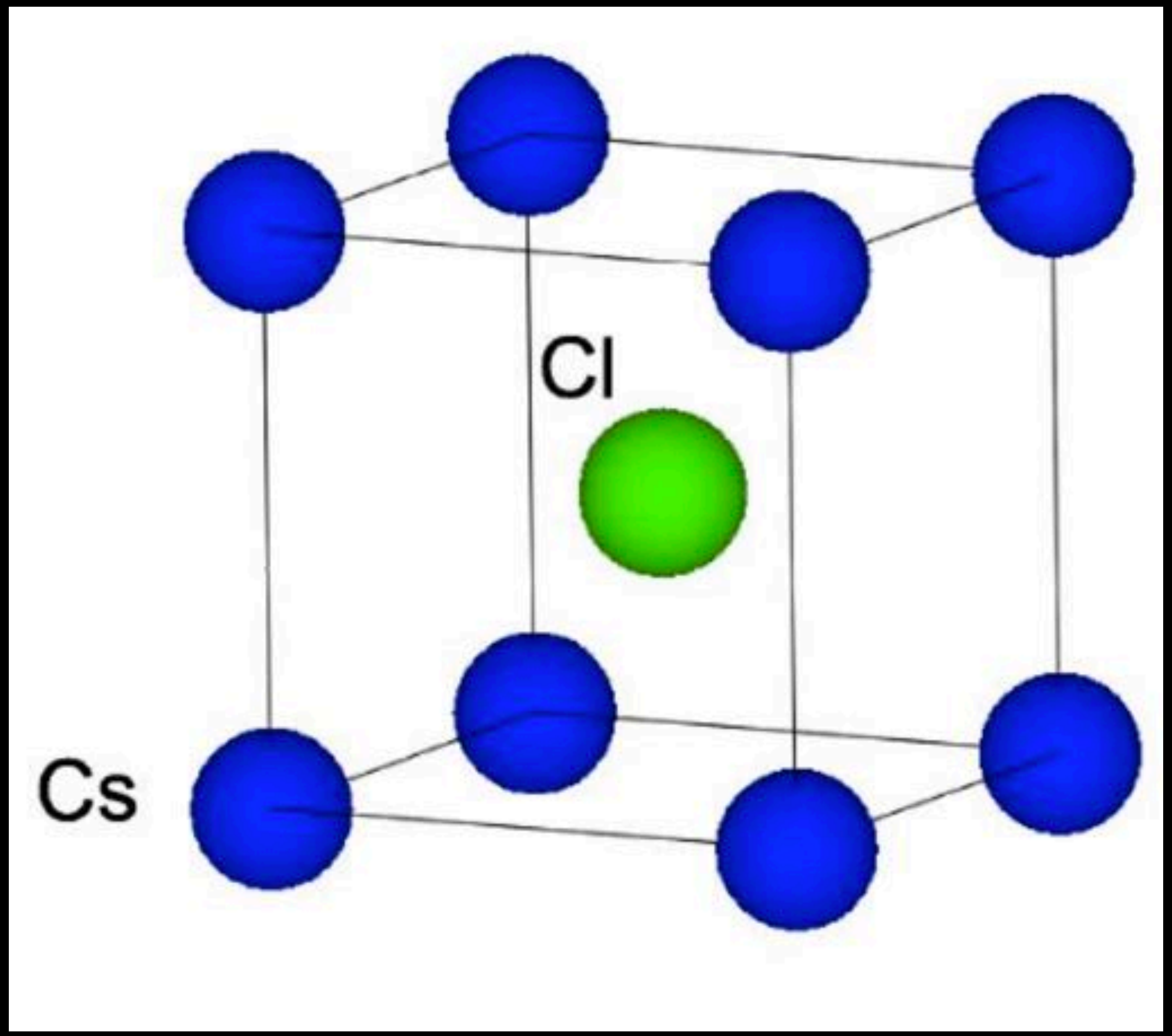


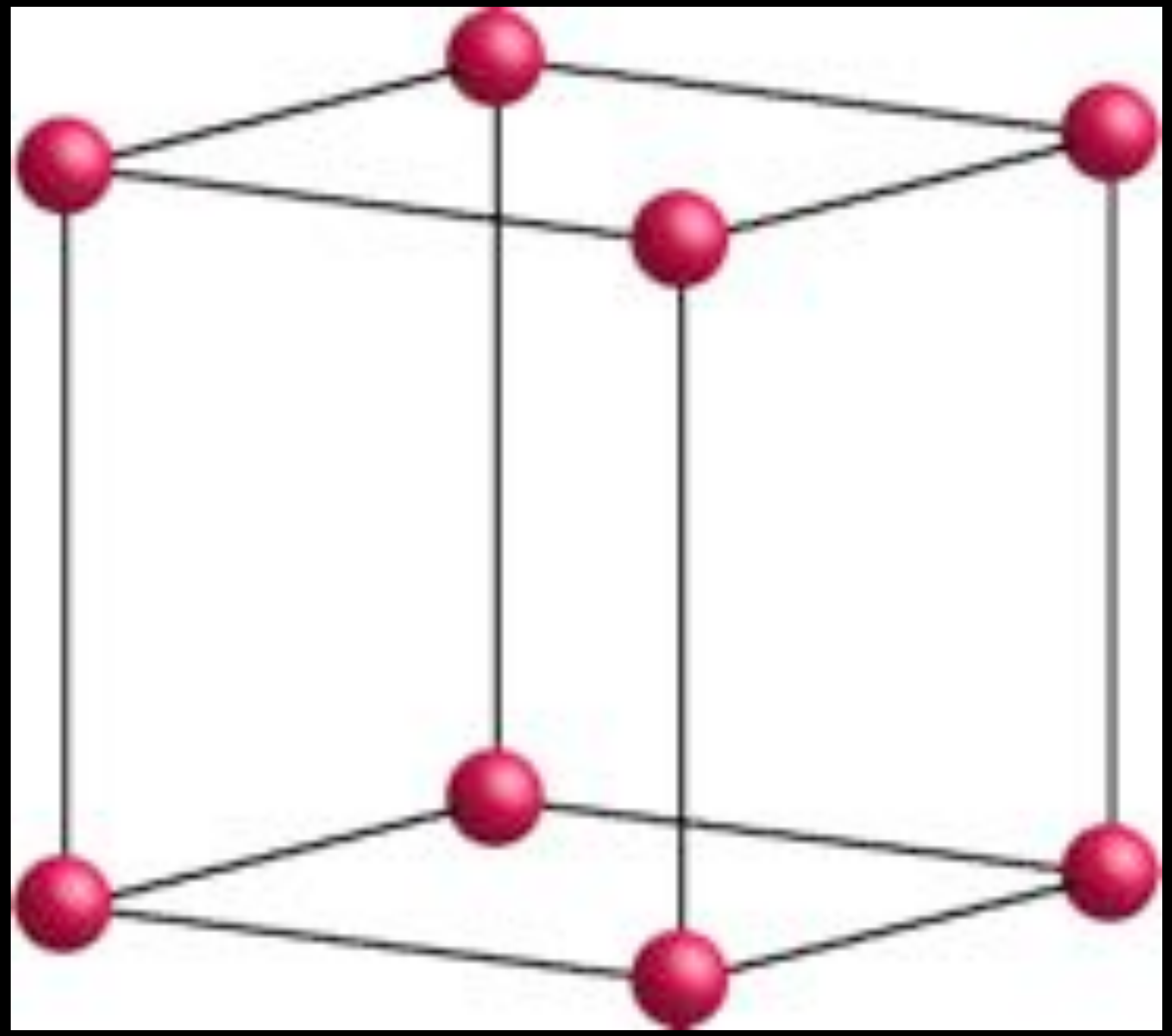
A) Réseaux de Bravais et motifs.

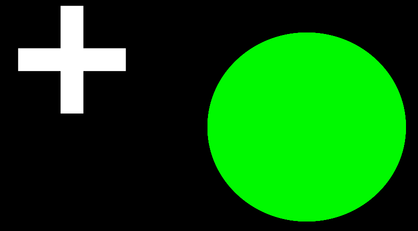
3. Indiquer le réseau de Bravais et la position des atomes qui constituent le motif pour chacun des édifices cristallins de la figure

b) CsCl

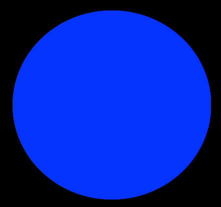
Cubique P - sc







motif: 1 atome Cs en (0,0,0)
1 atome Cl en (½, ½, ½)

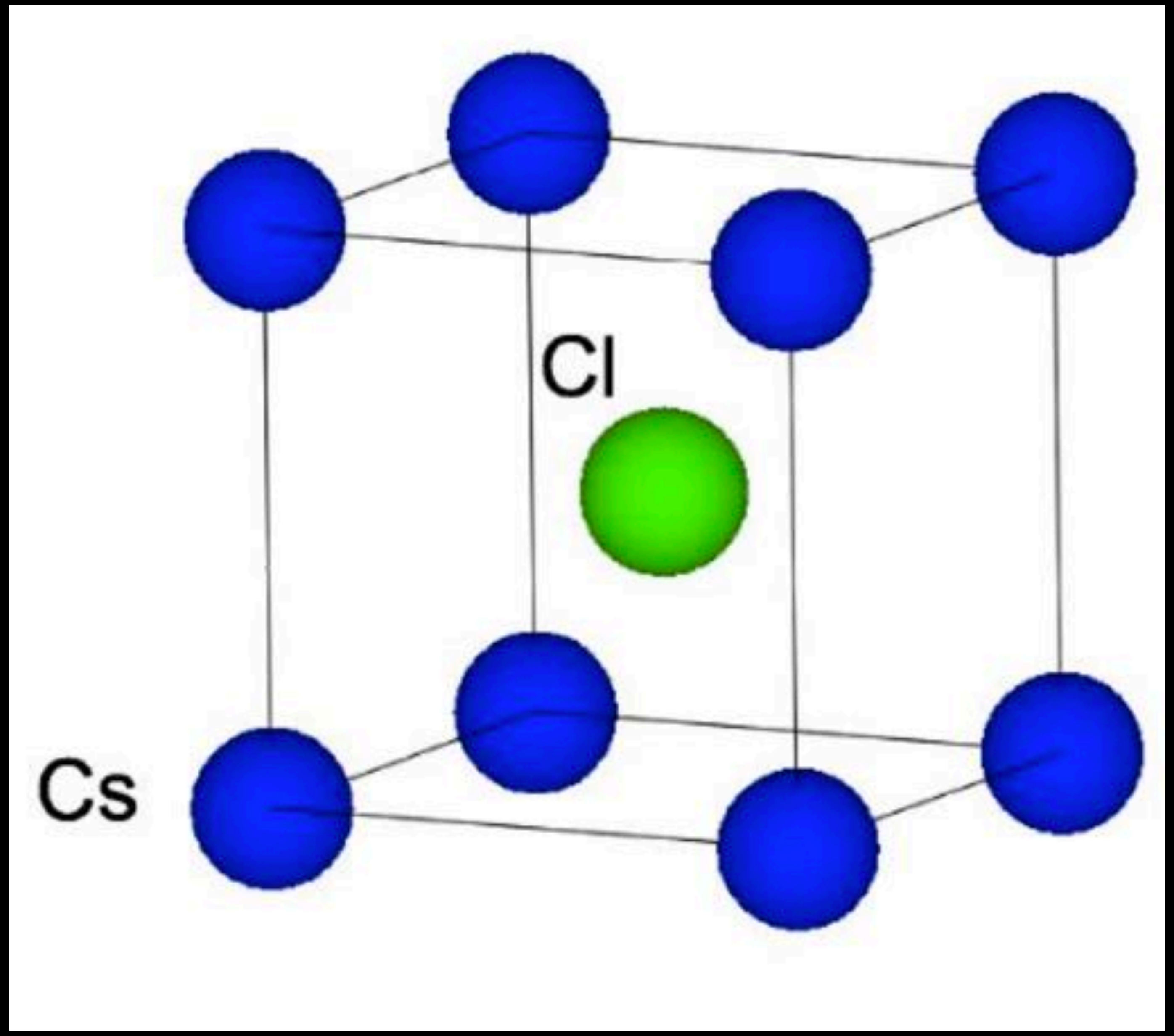


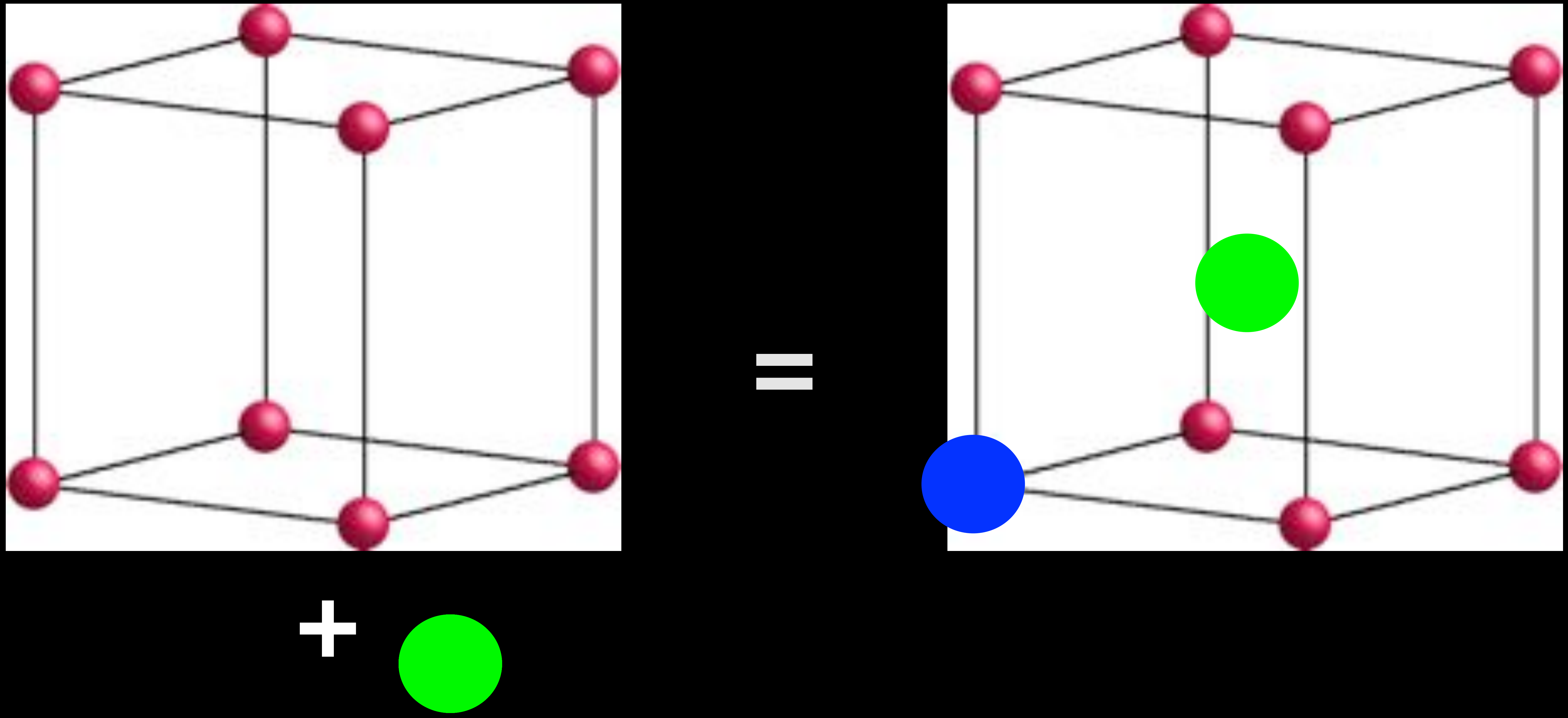
A) Réseaux de Bravais et motifs.

3. Indiquer le réseau de Bravais et la position des atomes qui constituent le motif pour chacun des édifices cristallins de la figure

b) CsCl

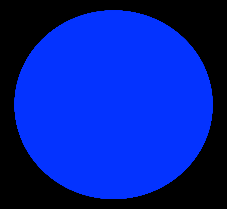
Cubique P - sc





motif: 1 atome Cs en (0,0,0)

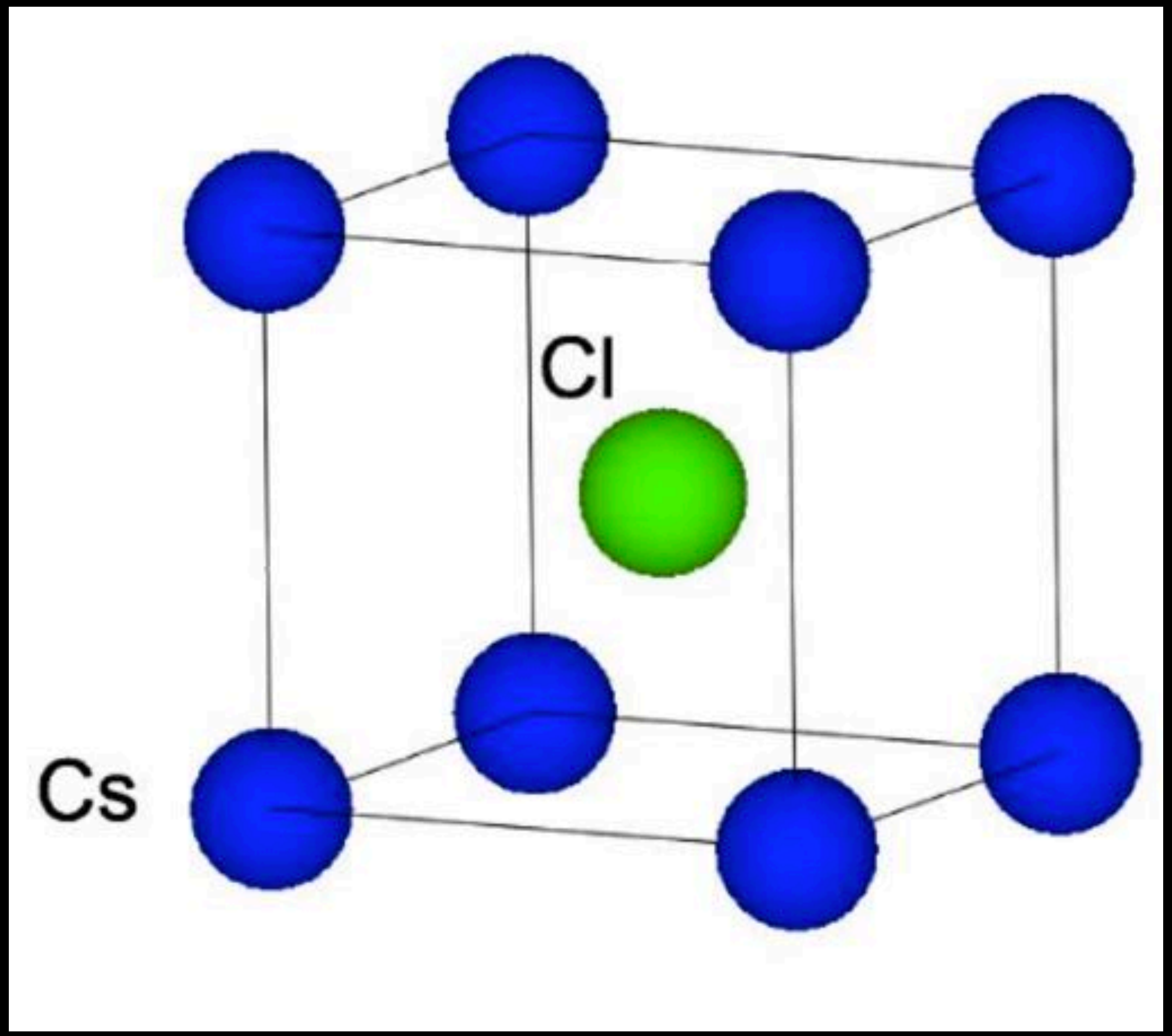
1 atome Cl en (½, ½, ½)



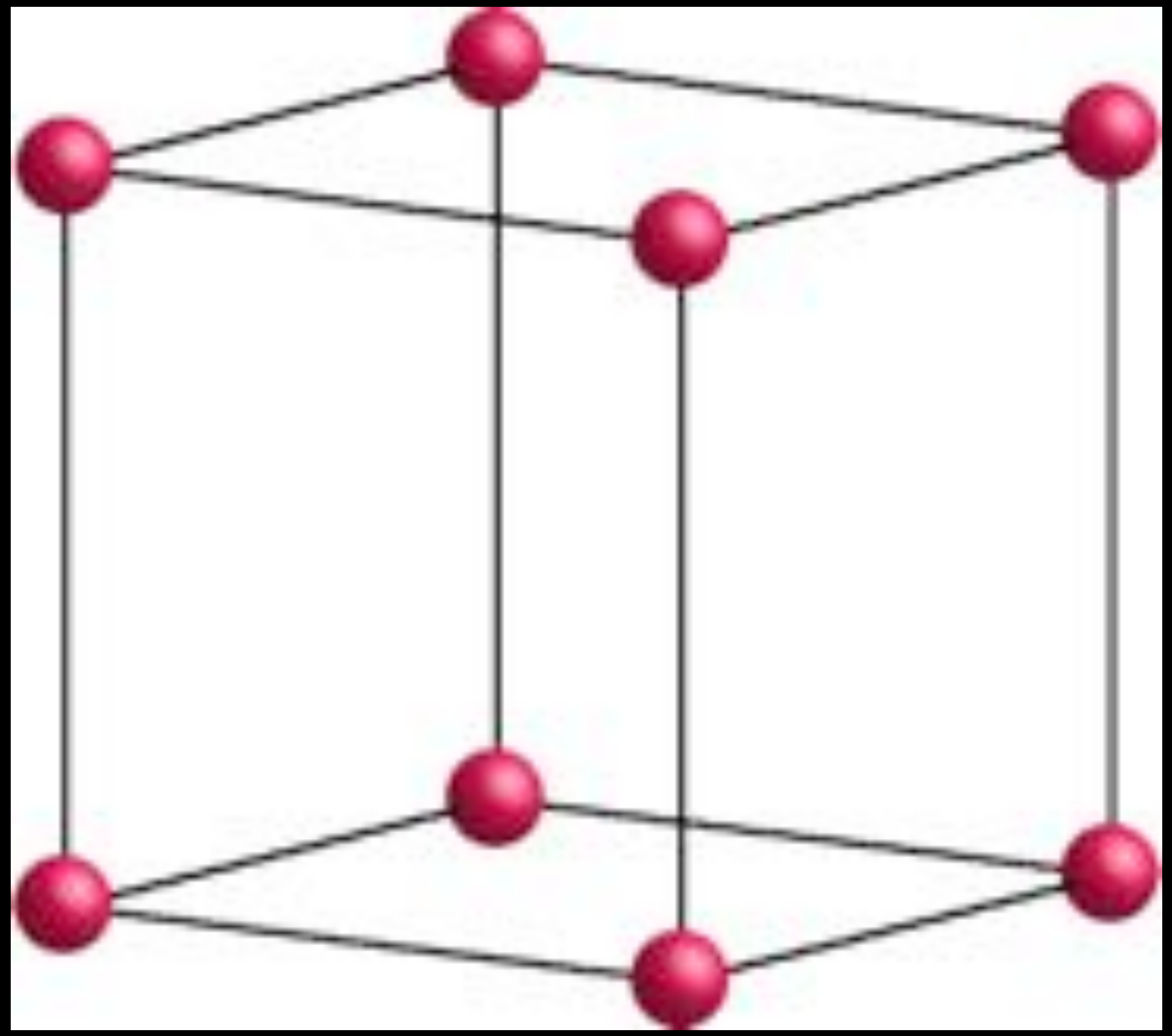
A) Réseaux de Bravais et motifs.

3. Indiquer le réseau de Bravais et la position des atomes qui constituent le motif pour chacun des édifices cristallins de la figure

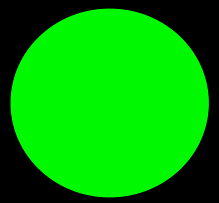
b) CsCl



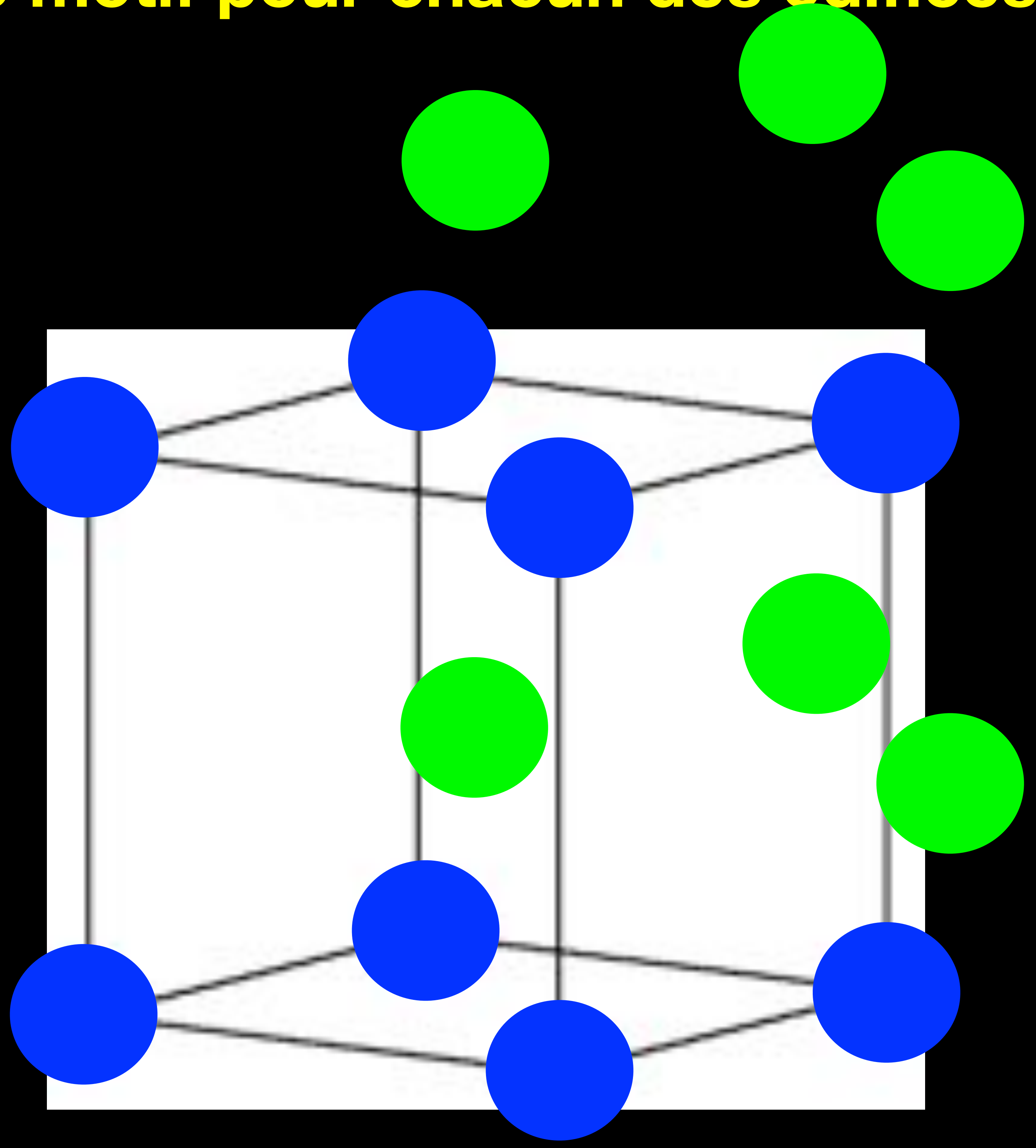
Cubique P - sc



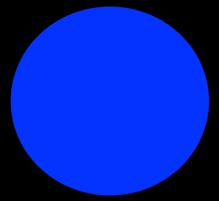
+



=



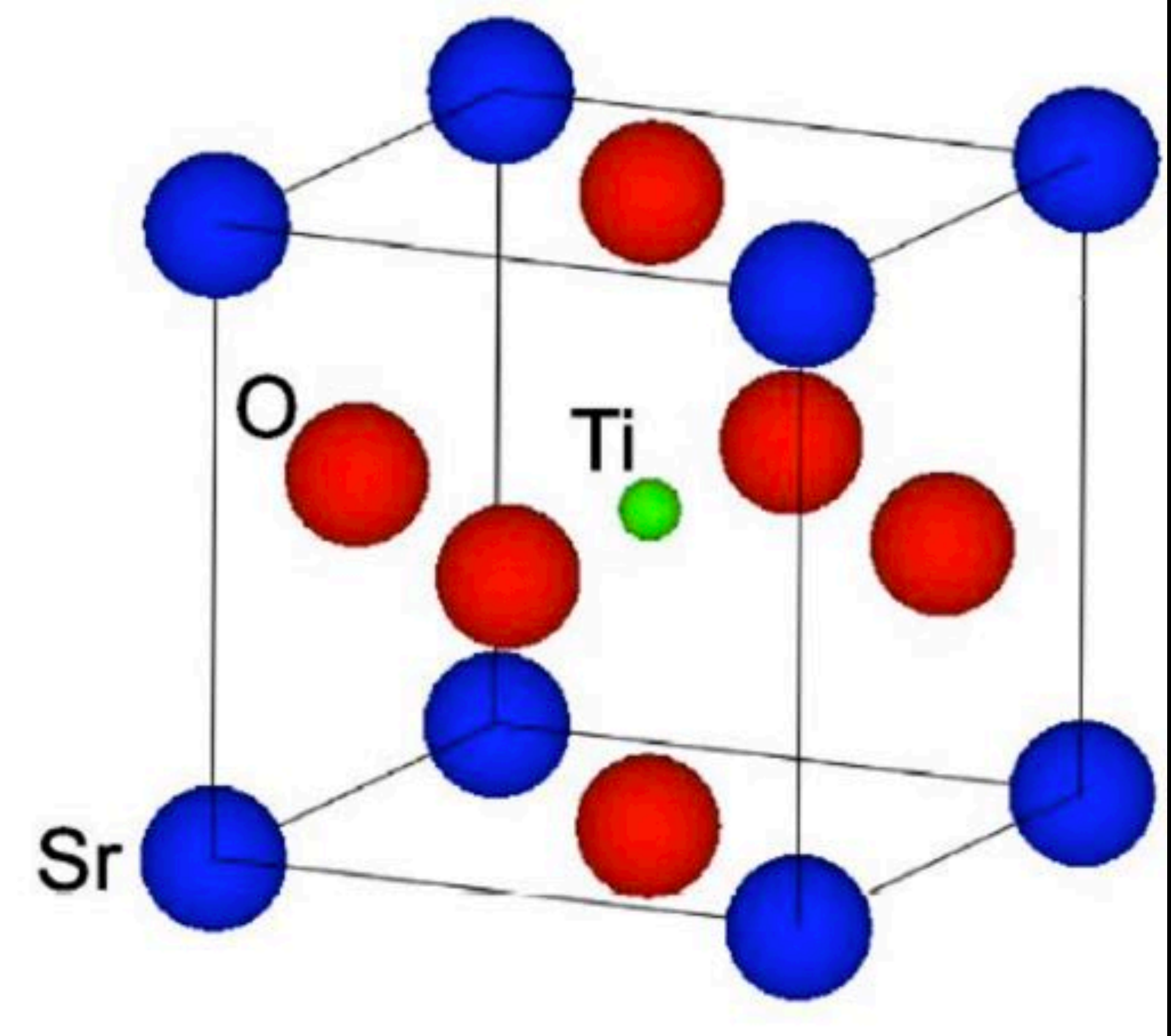
motif: 1 atome Cs en (0,0,0)
1 atome Cl en (½, ½, ½)



A) Réseaux de Bravais et motifs.

3. Indiquer le réseau de Bravais et la position des atomes qui constituent le motif pour chacun des édifices cristallins de la figure

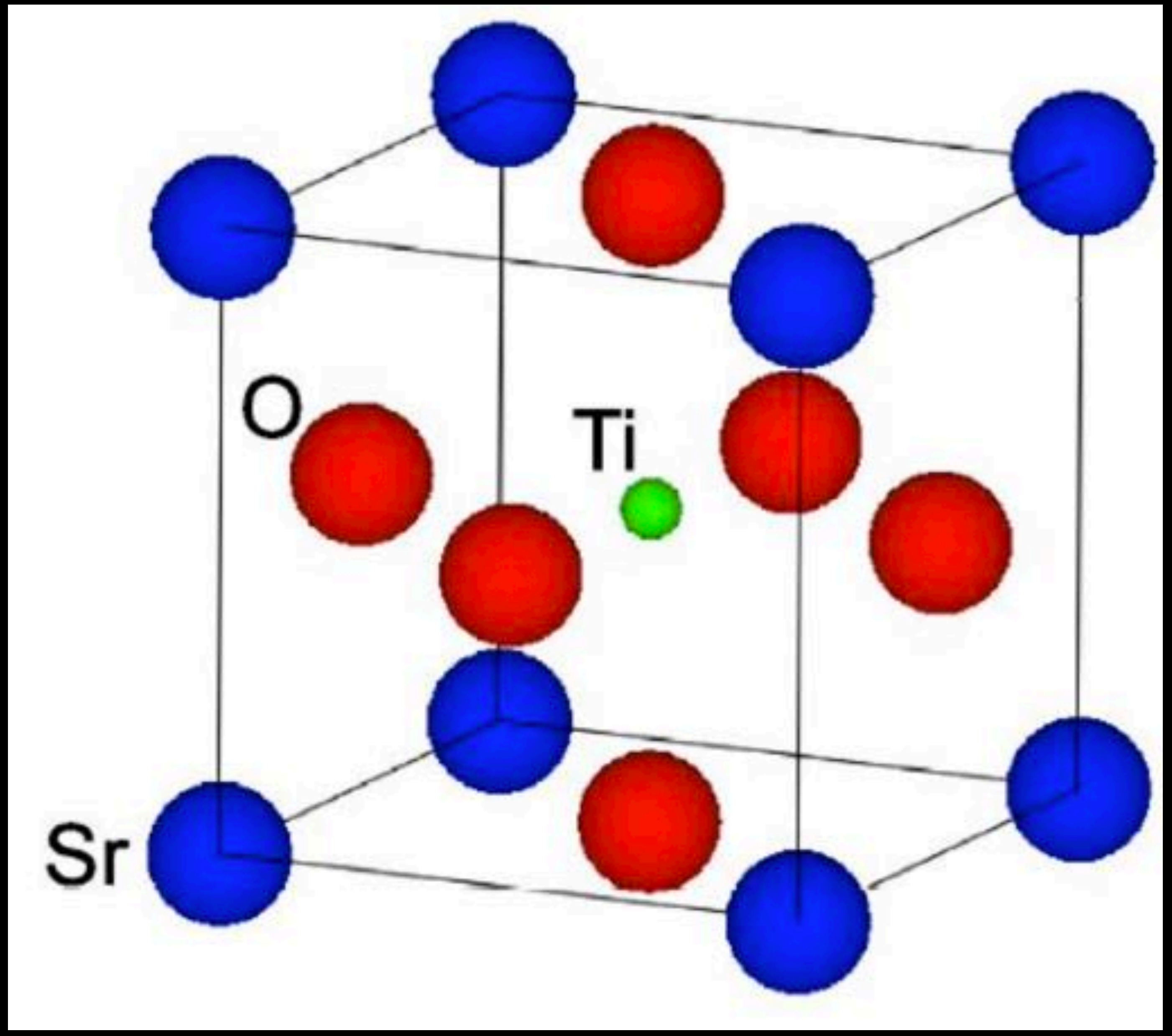
c) Pérosvskite $SrTiO_3$



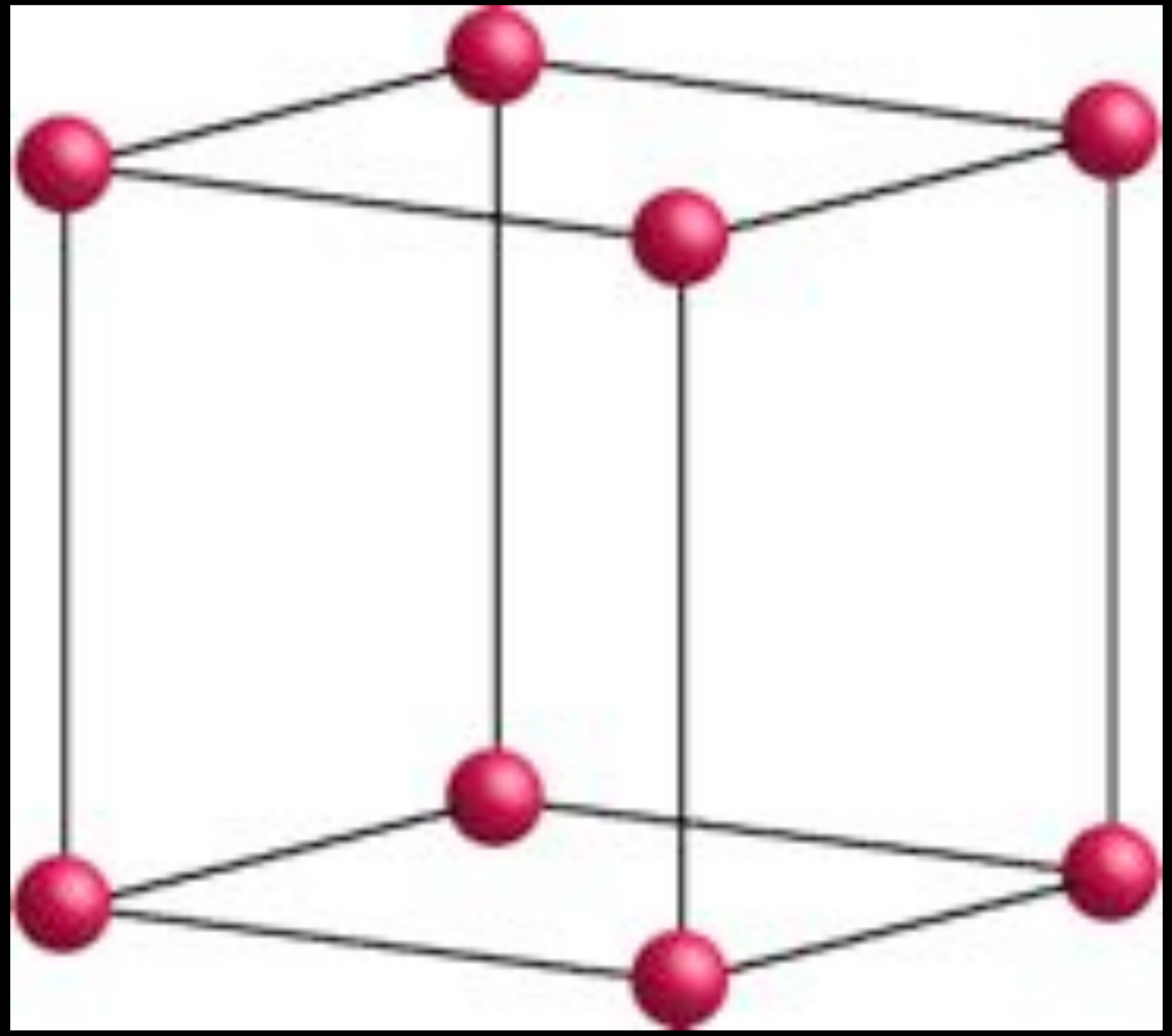
A) Réseaux de Bravais et motifs.

3. Indiquer le réseau de Bravais et la position des atomes qui constituent le motif pour chacun des édifices cristallins de la figure

c) Pérosvskite $SrTiO_3$

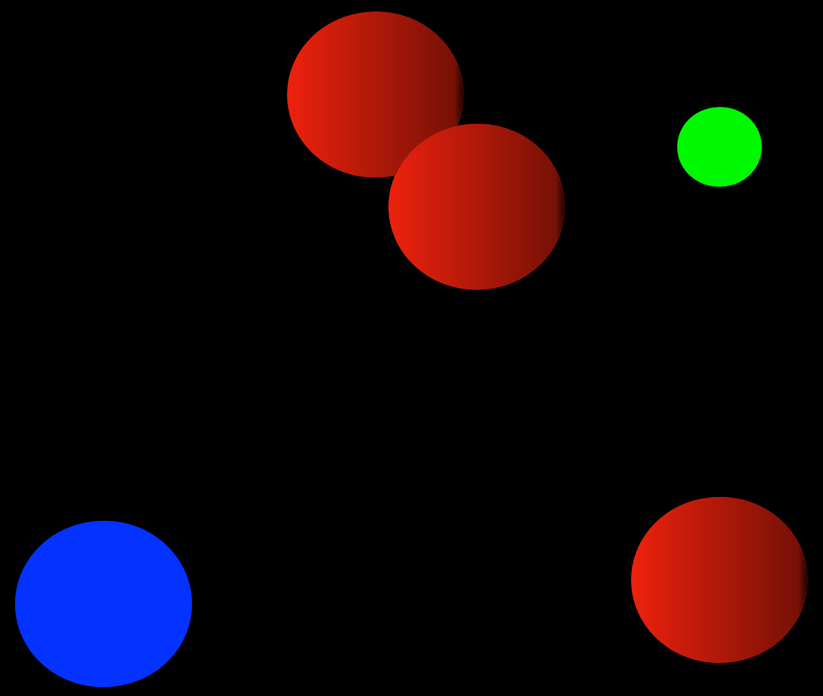


Cubique P - sc



=

+

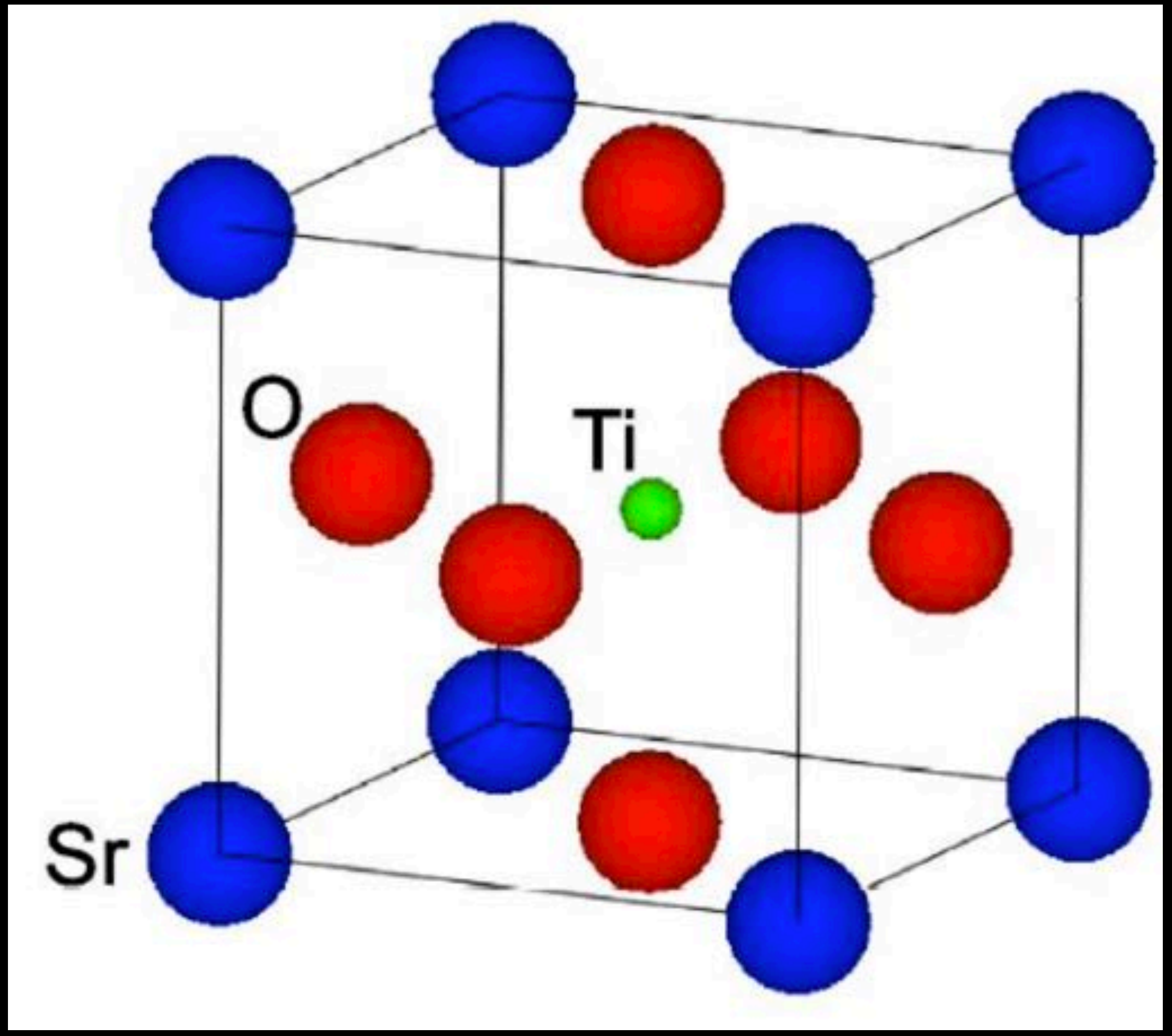


motif:
1 atome Sr en (0,0,0)
1 atome Ti en (½, ½, ½)
3 atomes 0 en (½, ½, 0), (½, 0, ½)
et (0, ½, ½)

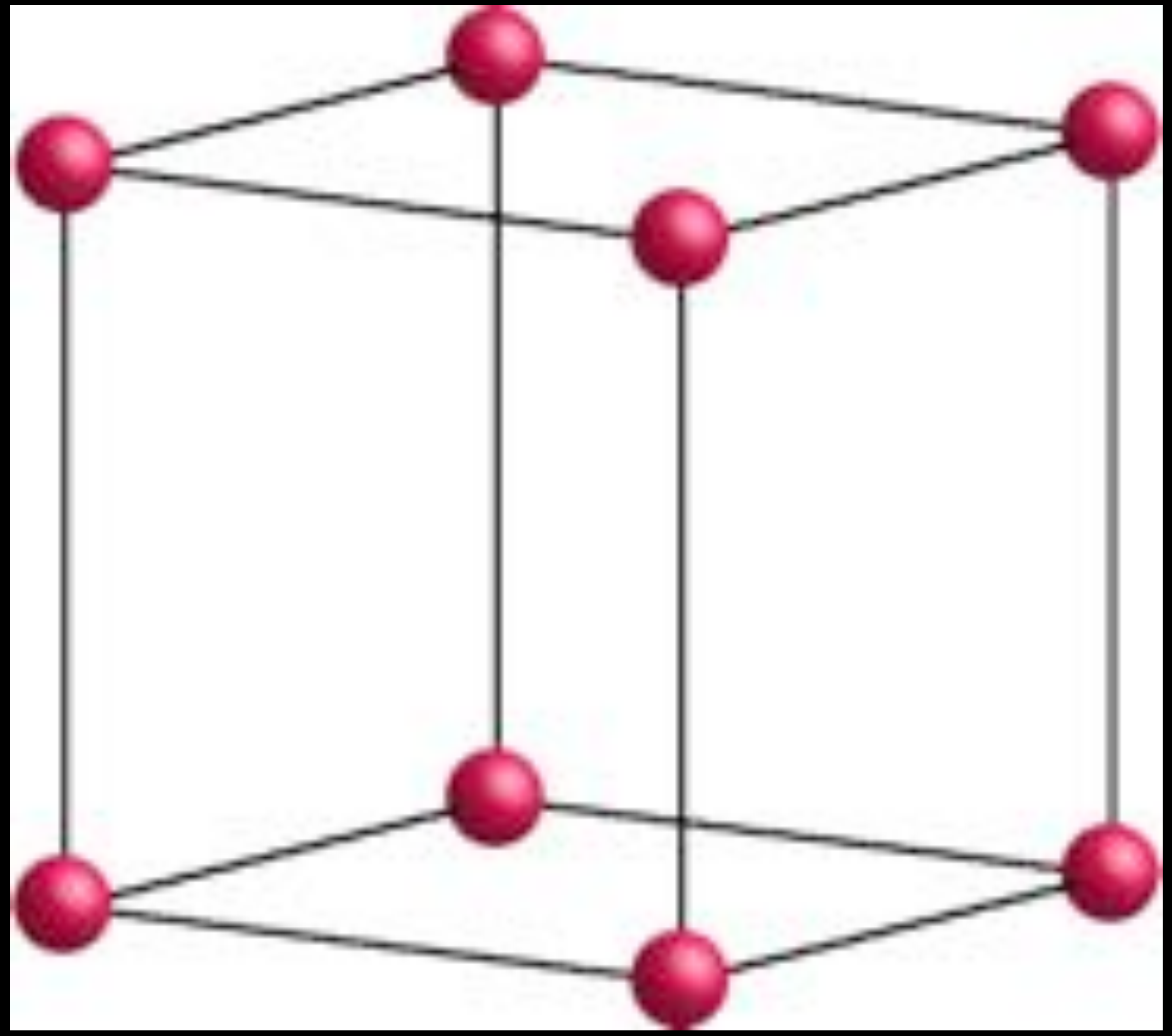
A) Réseaux de Bravais et motifs.

3. Indiquer le réseau de Bravais et la position des atomes qui constituent le motif pour chacun des édifices cristallins de la figure

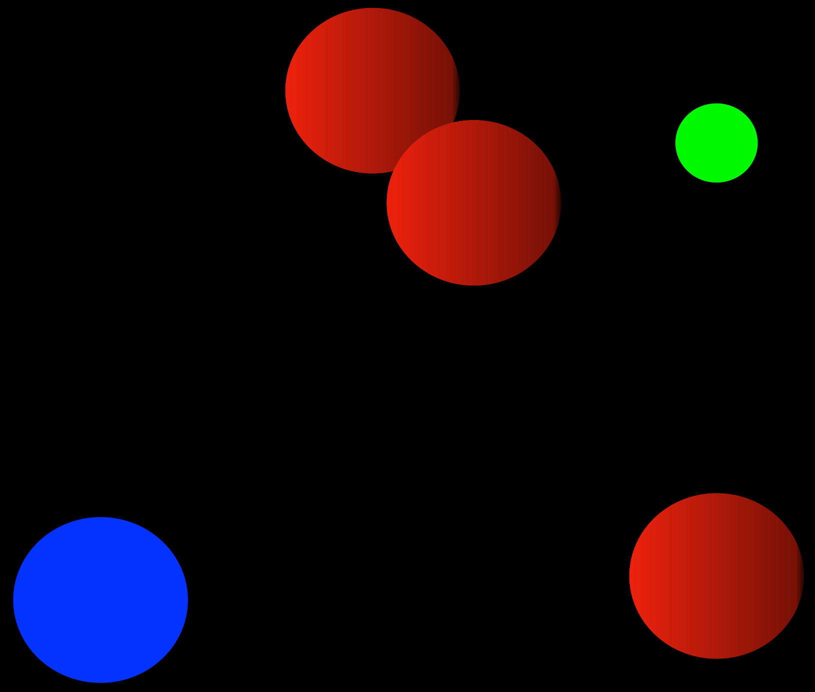
c) Pérosvskite $SrTiO_3$



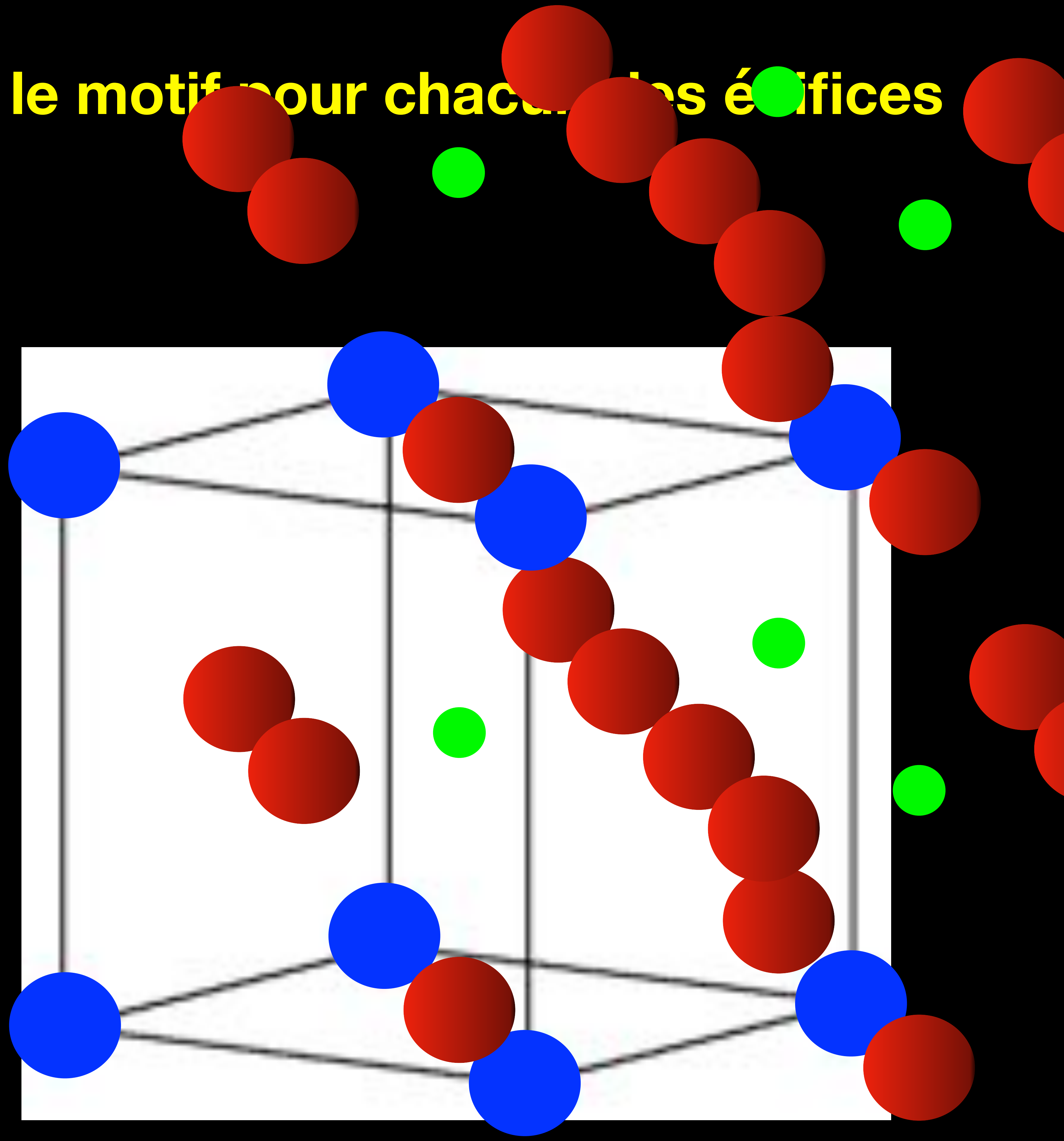
Cubique P - sc



+



=

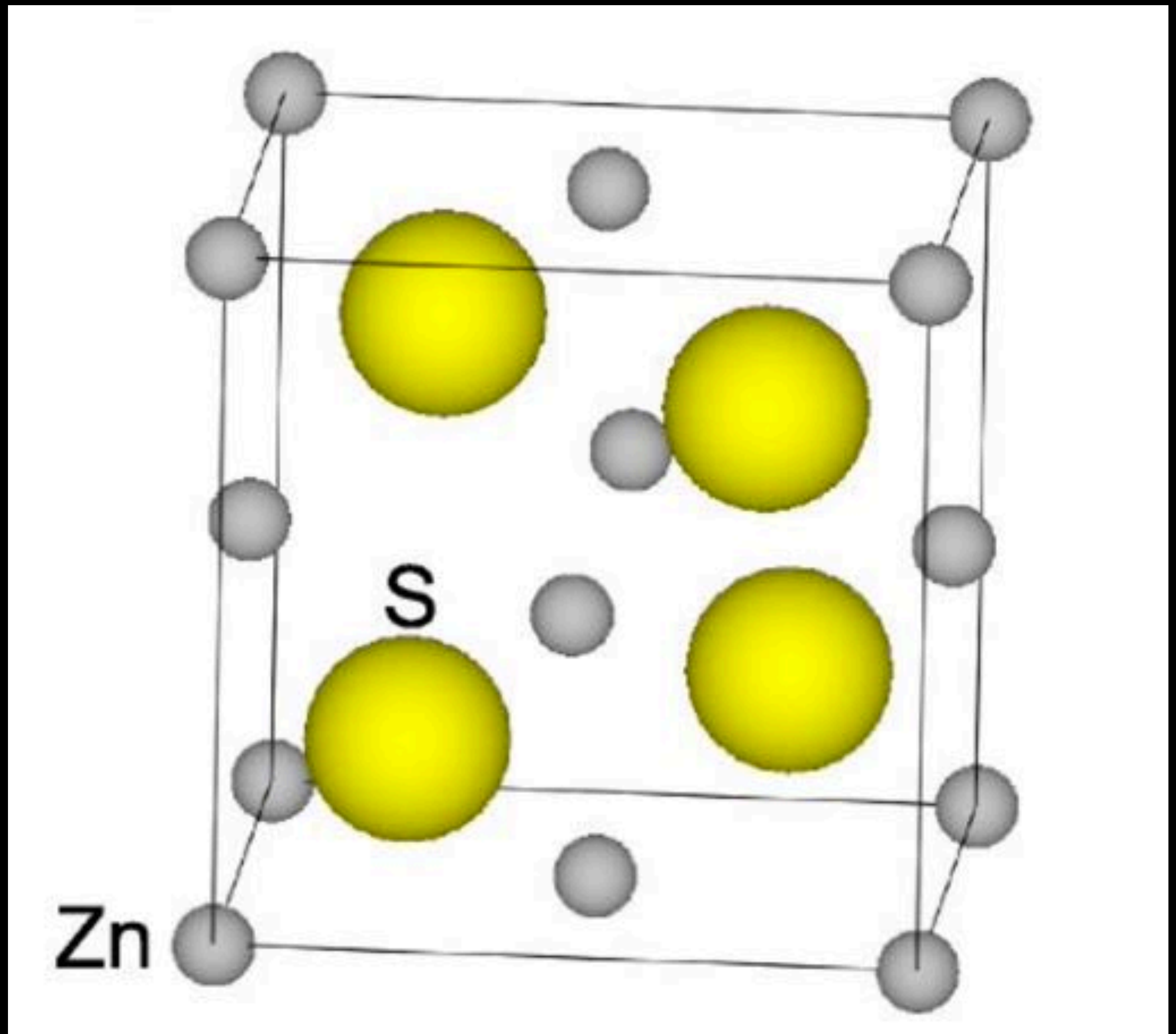


motif:
1 atome Sr en (0,0,0)
1 atome Ti en (½, ½, ½)
3 atomes 0 en (½, ½, 0), (½, 0, ½)
et (0, ½, ½)

A) Réseaux de Bravais et motifs.

3. Indiquer le réseau de Bravais et la position des atomes qui constituent le motif pour chacun des édifices cristallins de la figure

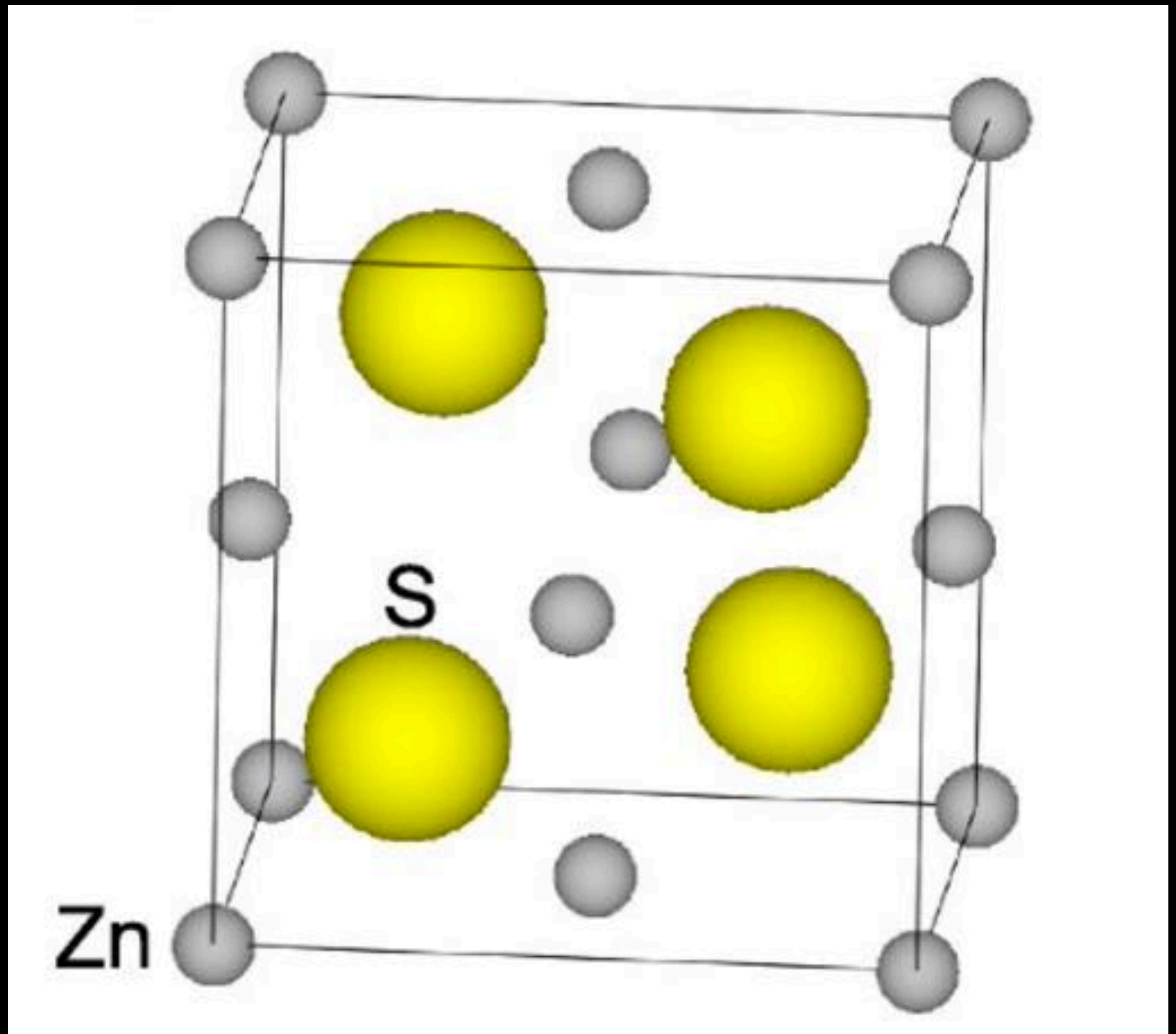
d) ZnS “zinc blende”



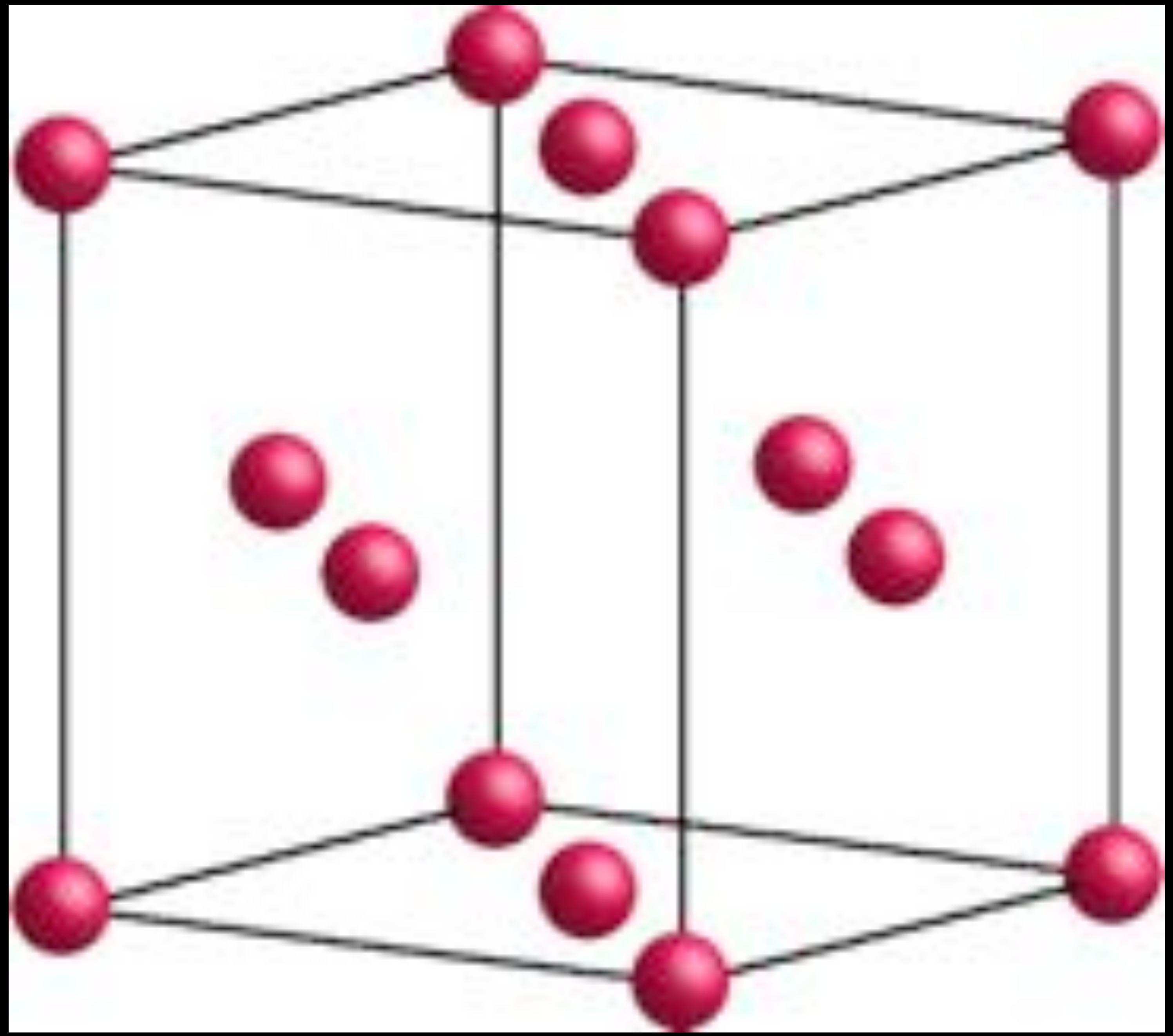
A) Réseaux de Bravais et motifs.

3. Indiquer le réseau de Bravais et la position des atomes qui constituent le motif pour chacun des édifices cristallins de la figure

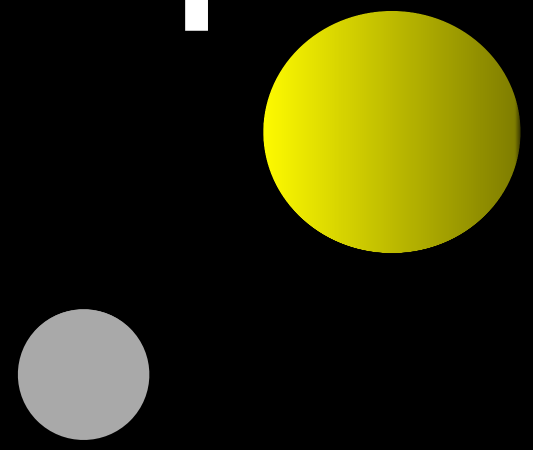
d) ZnS “zinc blende”



Cubique F - fcc



+



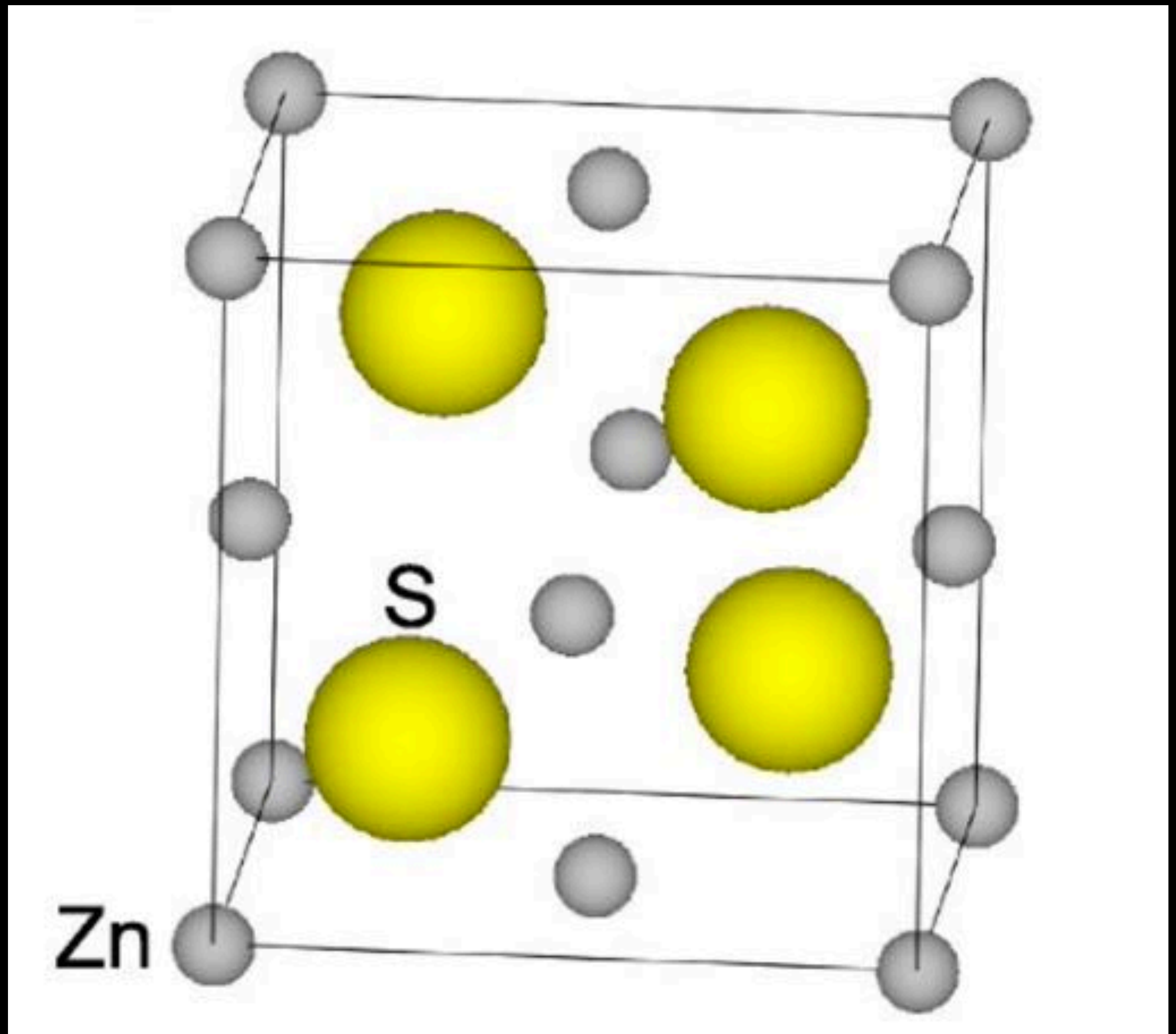
motif: 1 atome Zn en (0,0,0)

1 atome S en (¼, ¼,¼)

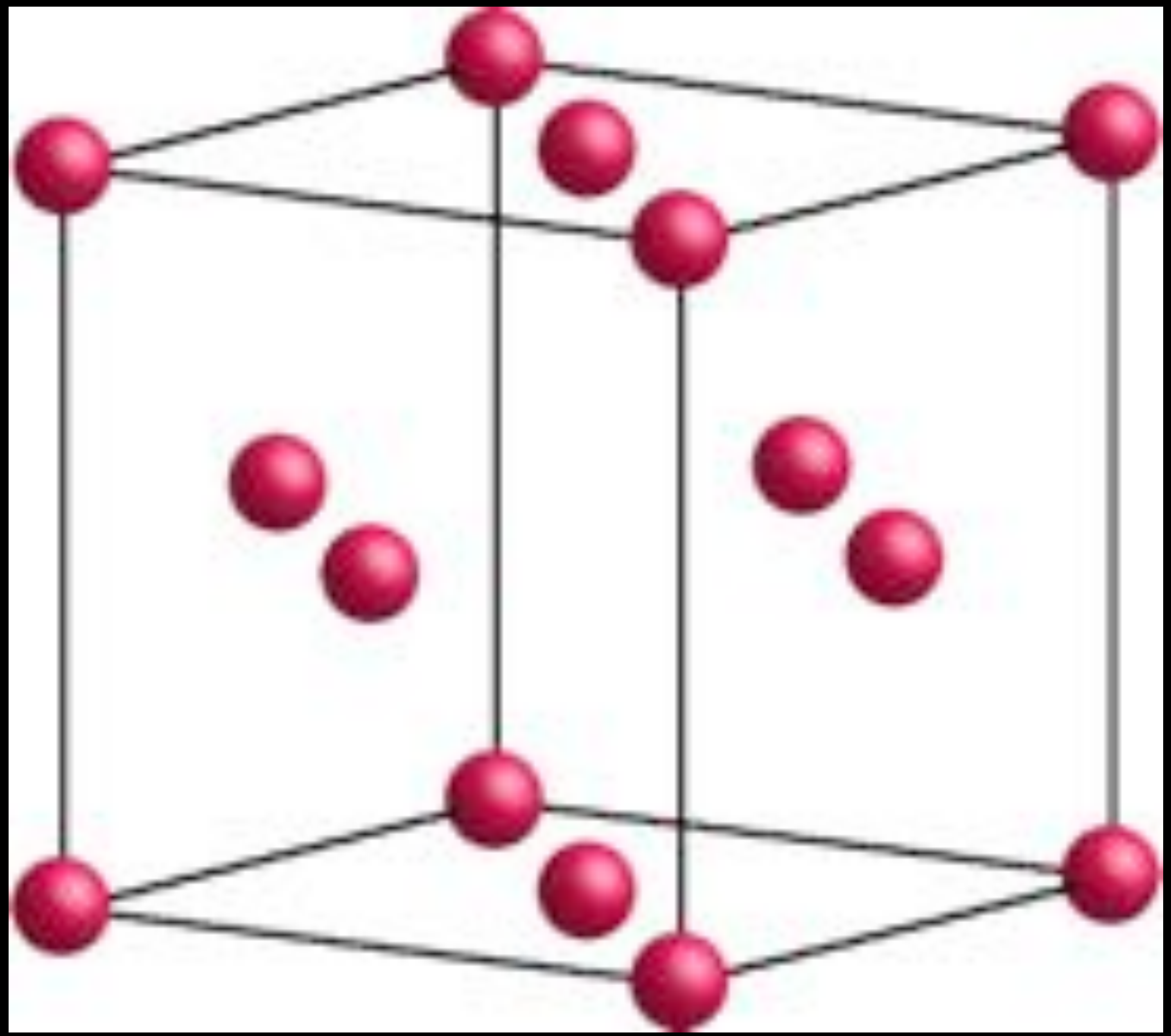
A) Réseaux de Bravais et motifs.

3. Indiquer le réseau de Bravais et la position des atomes qui constituent le motif pour chacun des édifices cristallins de la figure

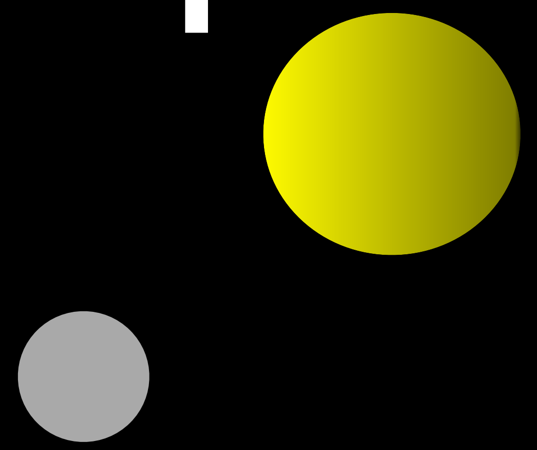
d) ZnS “zinc blende”



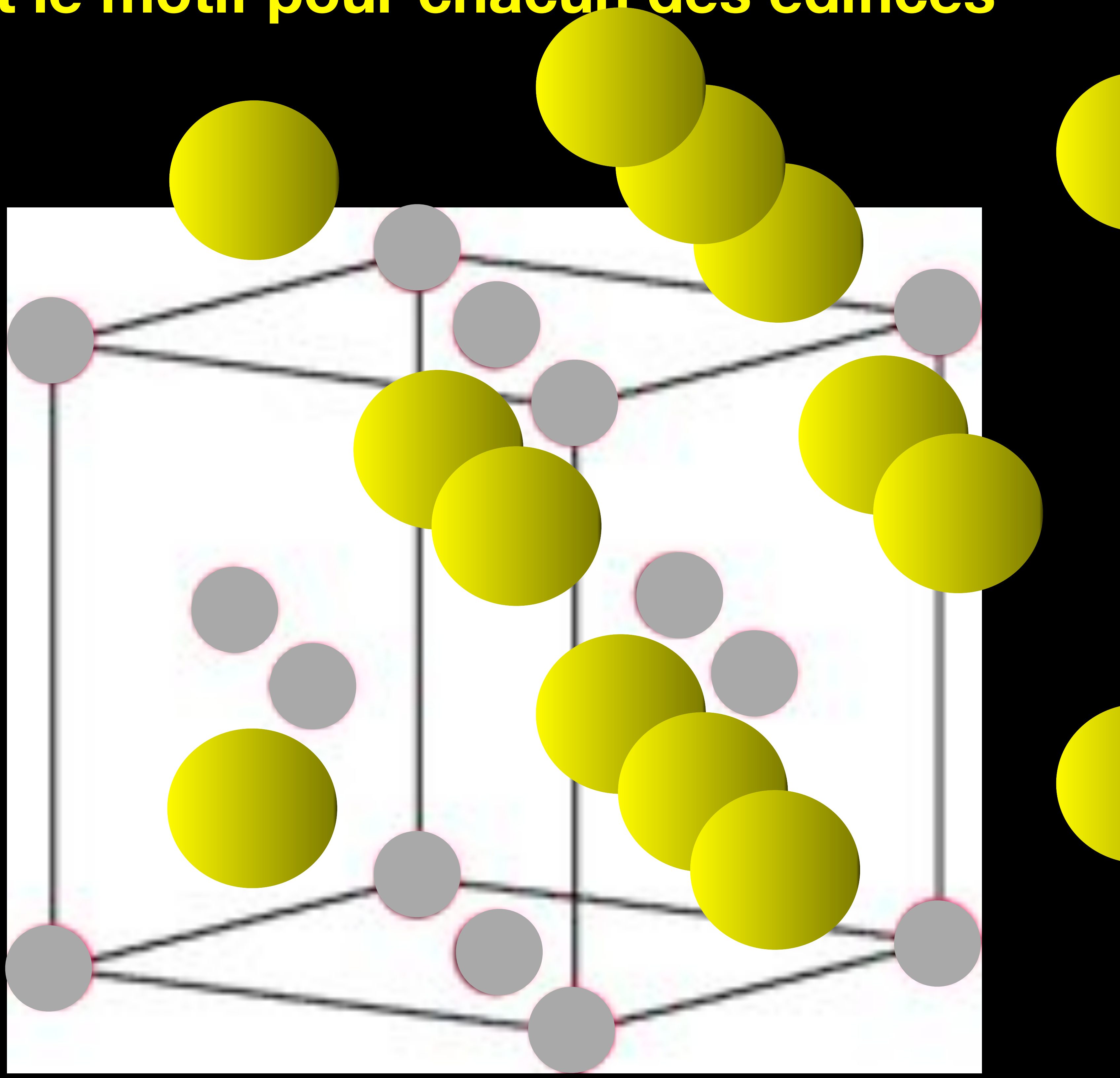
Cubique F - fcc



+



=



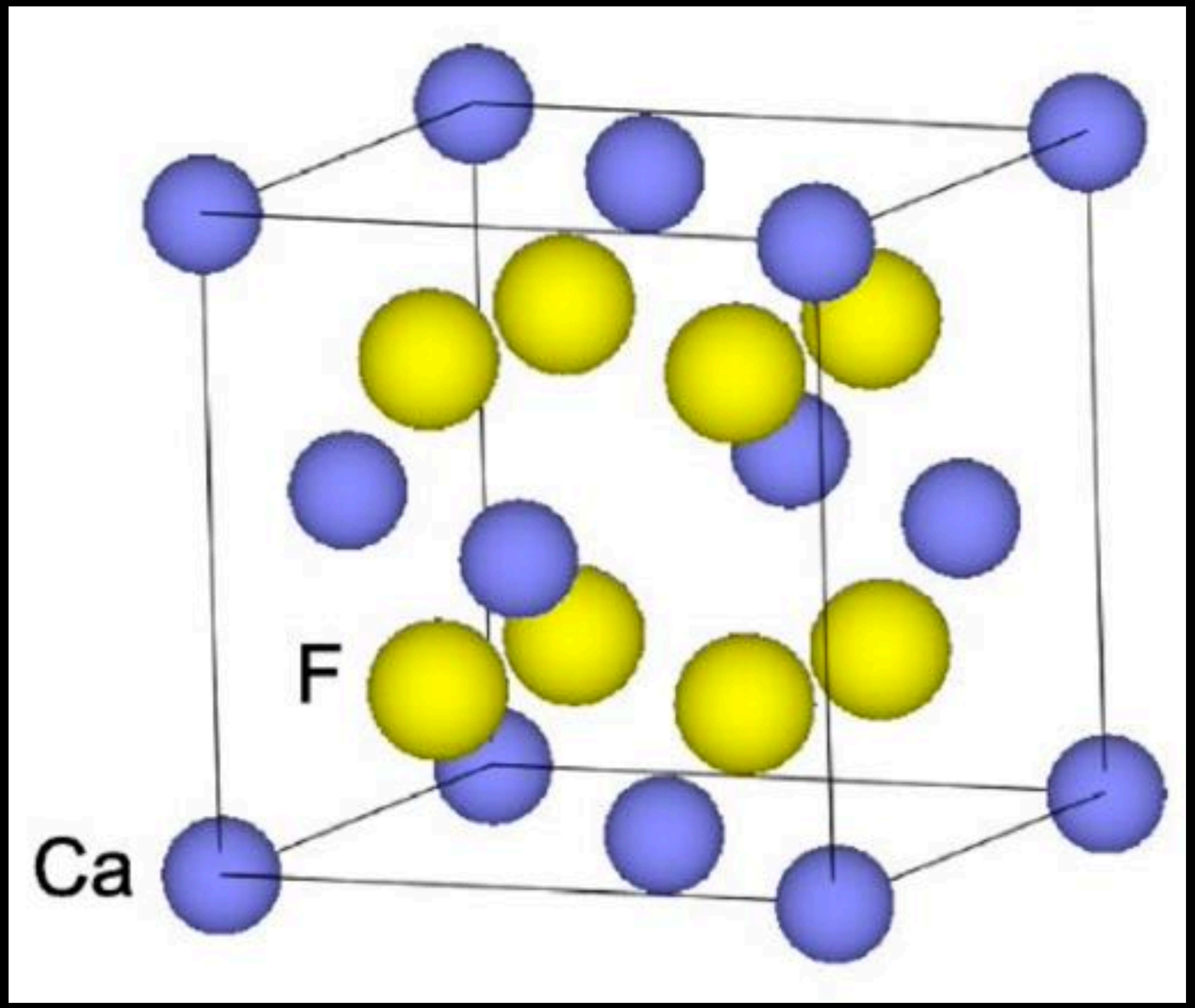
motif: 1 atome Zn en (0,0,0)
1 atome S en (¼, ¼,¼)

S et Zn occupent les points d'un réseau cubique à faces centrées, les deux réseaux étant décalés de telle sorte que le Zn soit coordonnés de manière tétraédrique au S

A) Réseaux de Bravais et motifs.

3. Indiquer le réseau de Bravais et la position des atomes qui constituent le motif pour chacun des édifices cristallins de la figure

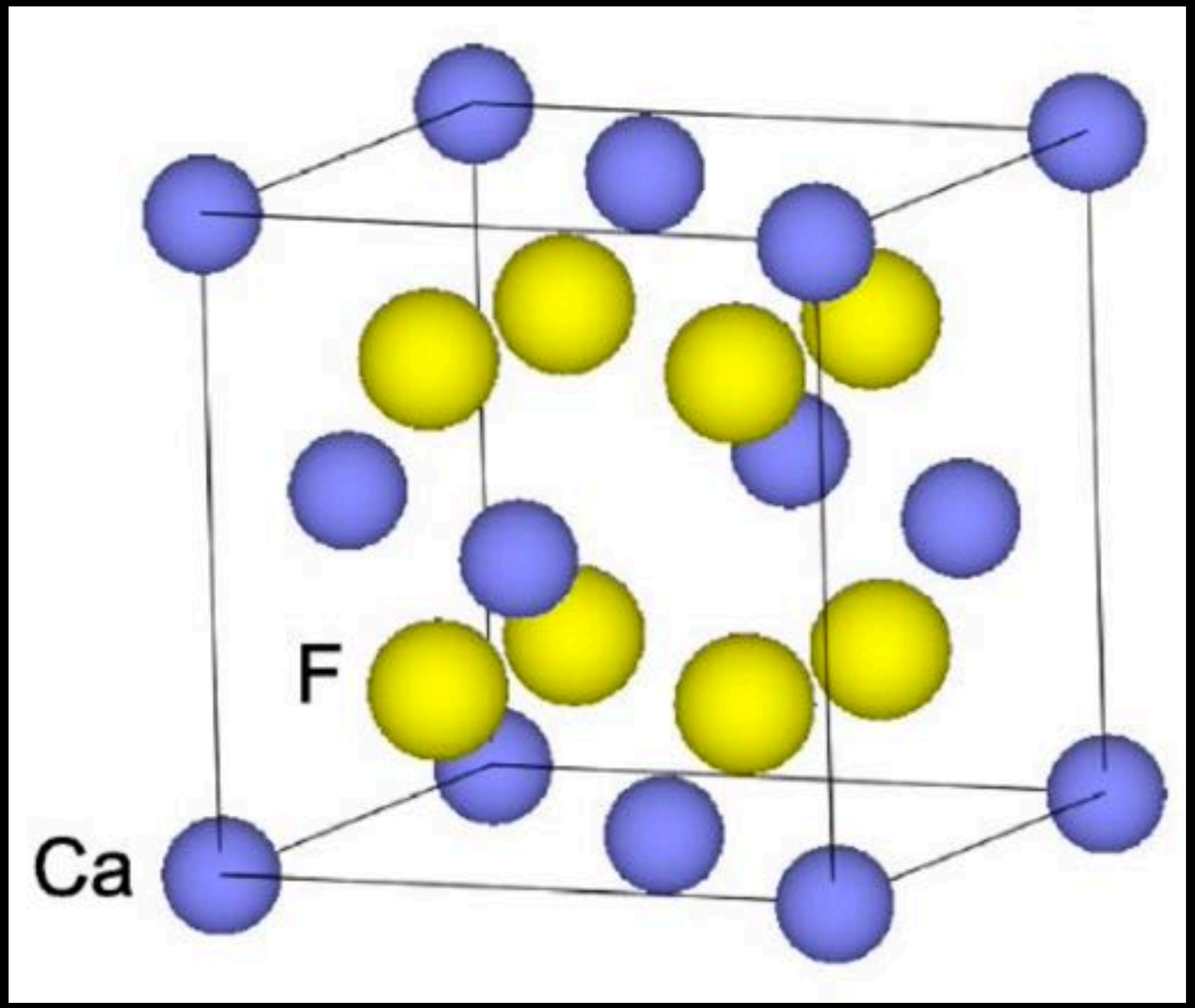
e) Fluorite ou fluorine CaF_2



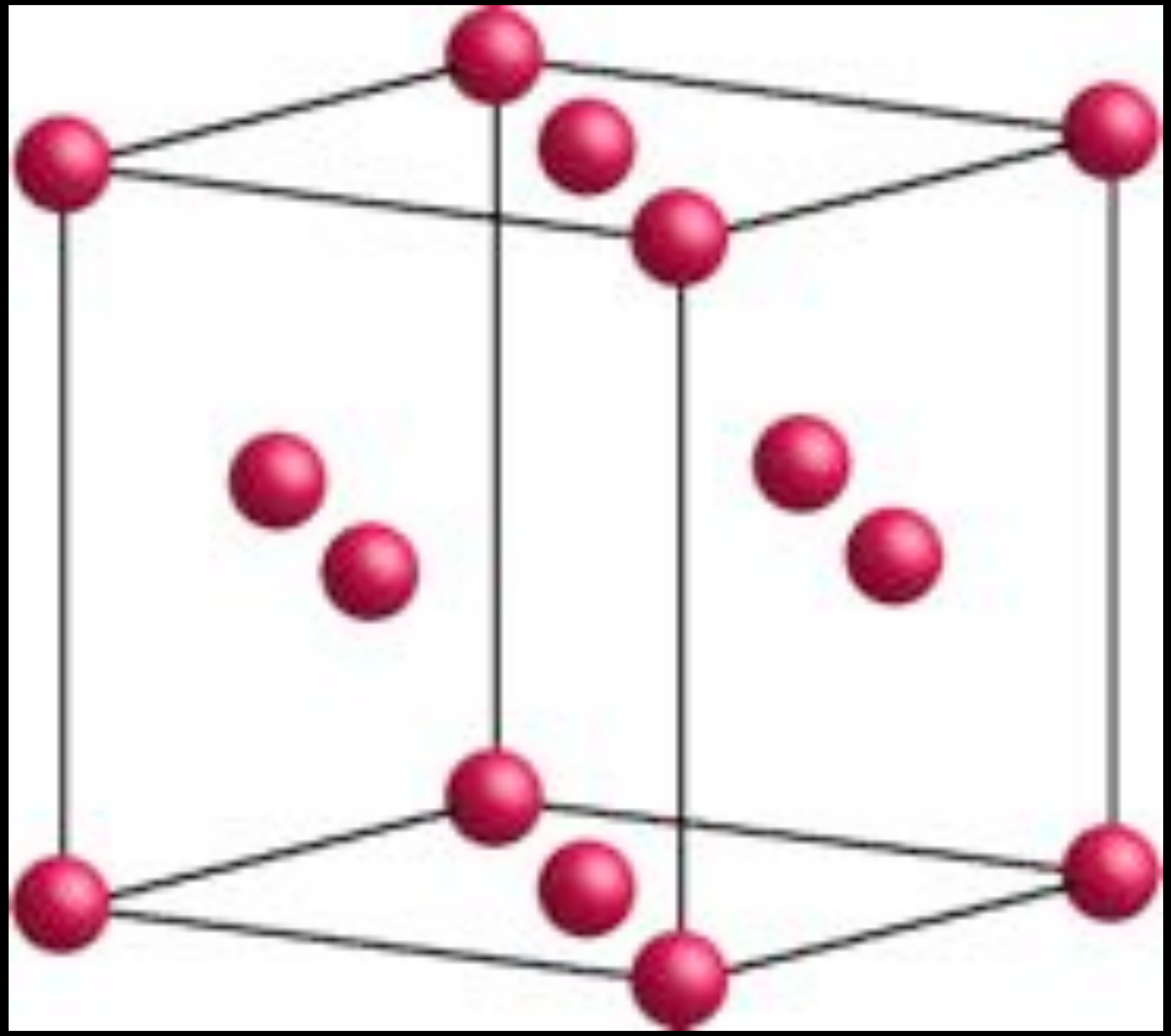
A) Réseaux de Bravais et motifs.

3. Indiquer le réseau de Bravais et la position des atomes qui constituent le motif pour chacun des édifices cristallins de la figure

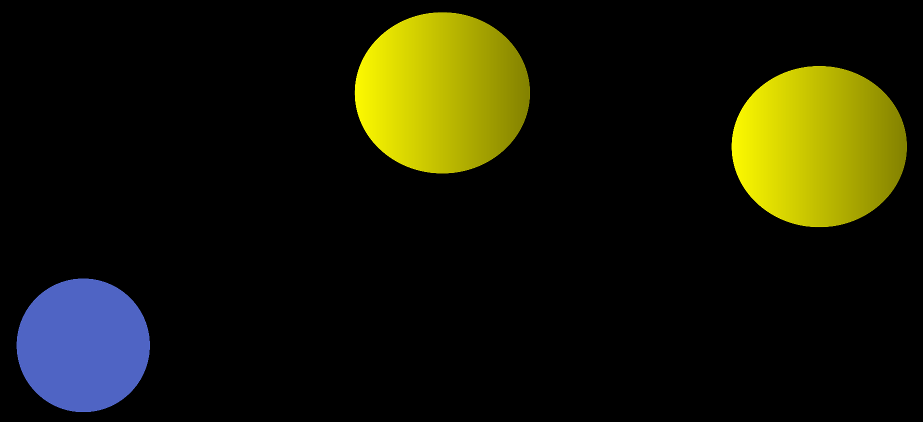
e) Fluorite ou fluorine CaF_2



Cubique F - fcc



+



=

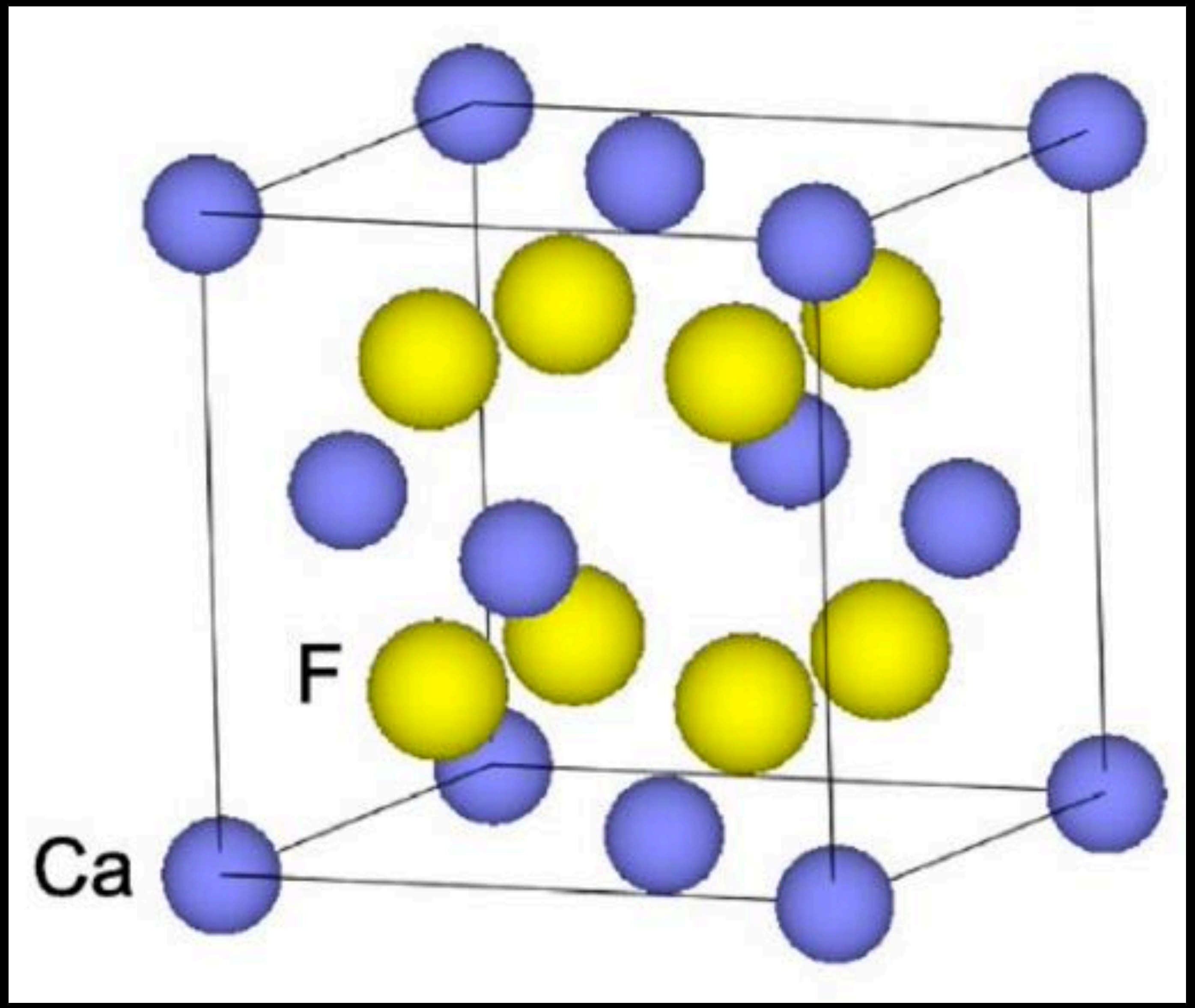
motif: 1 atome Ca en (0,0,0)
2 atomes F en (¼, ¼,¼)
et (¾,¼,¼)

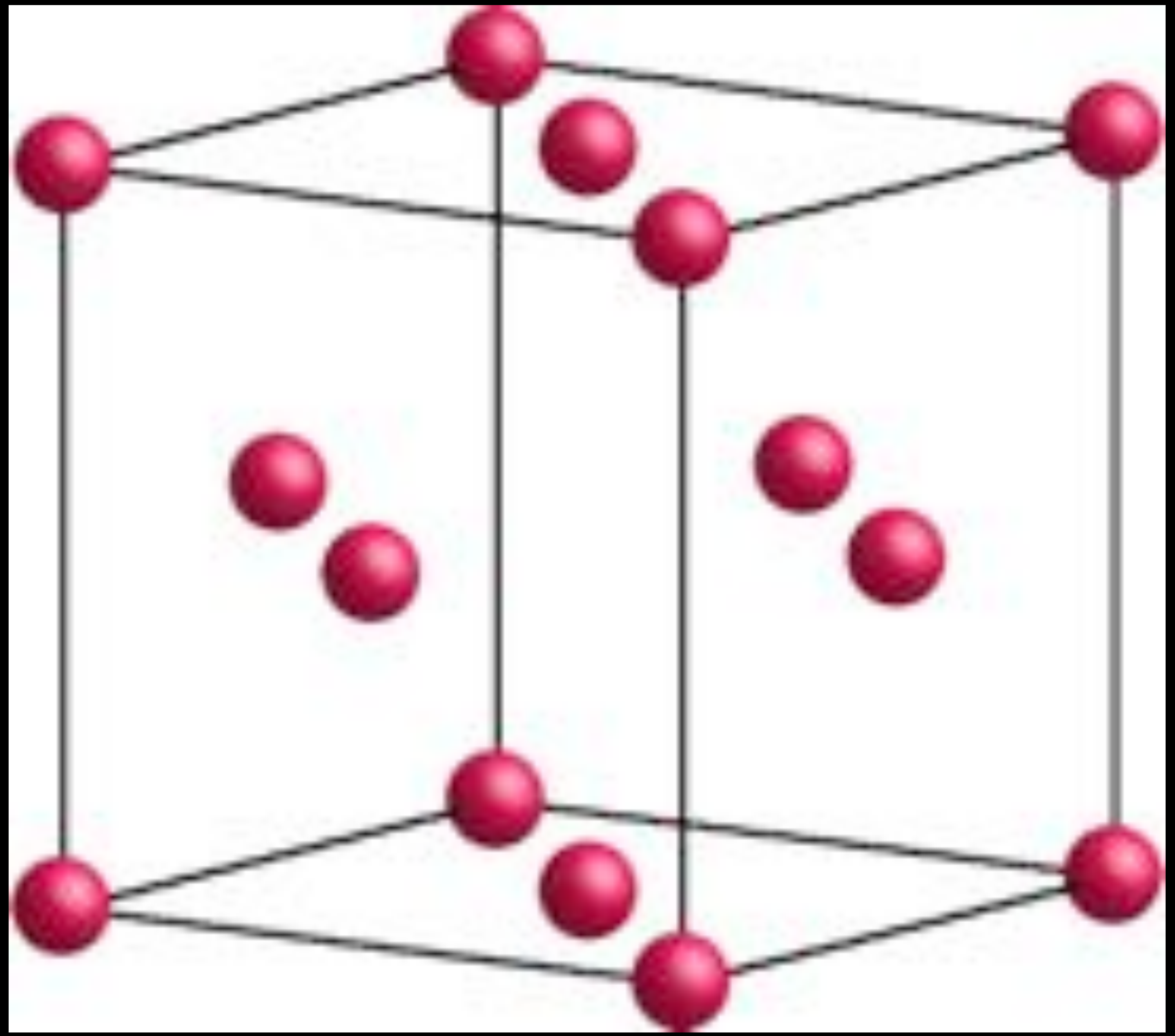
A) Réseaux de Bravais et motifs.

3. Indiquer le réseau de Bravais et la position des atomes qui constituent le motif pour chacun des édifices cristallins de la figure

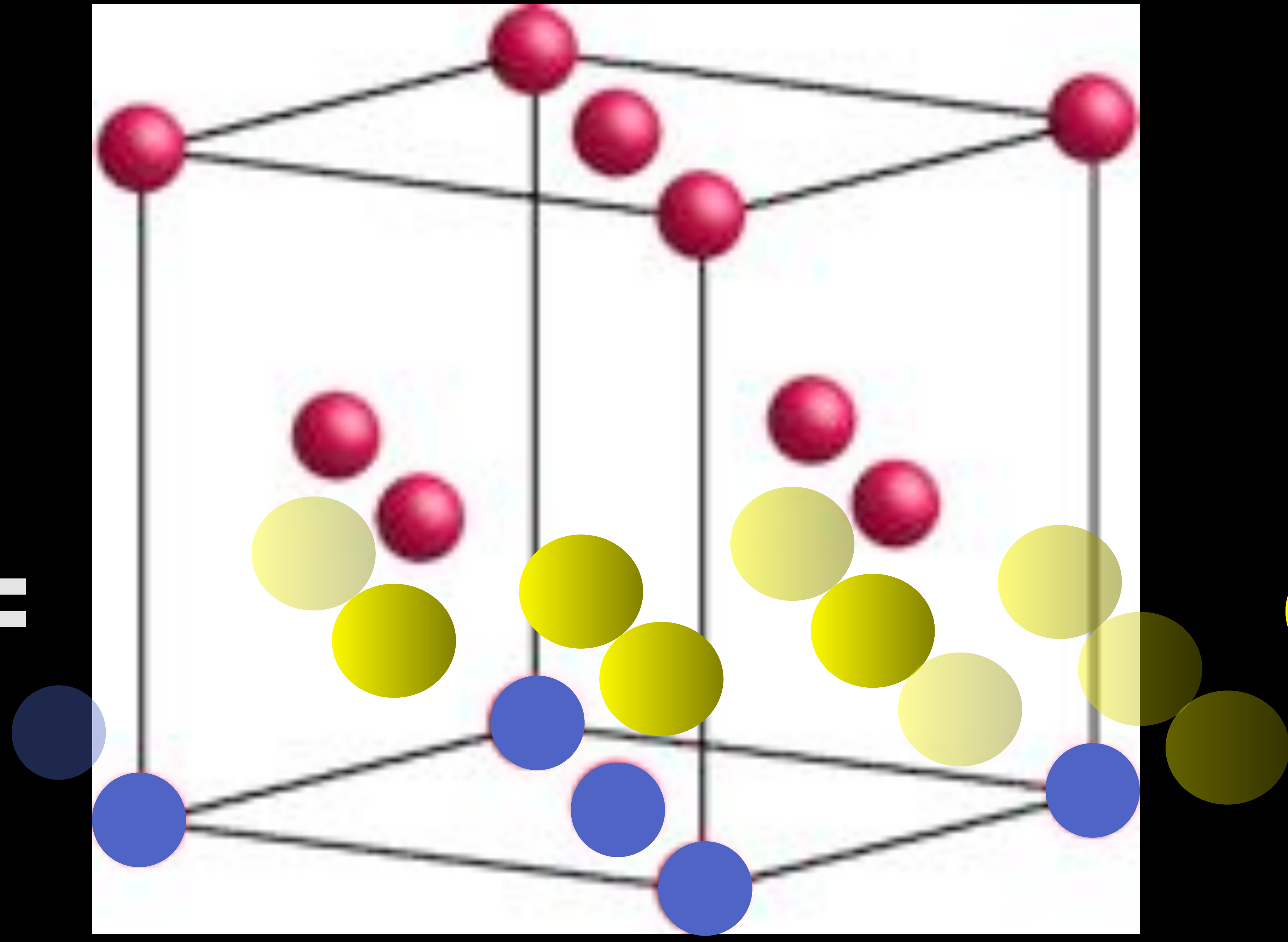
Cubique F - fcc

e) Fluorite ou fluorine CaF_2

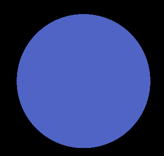




=



+

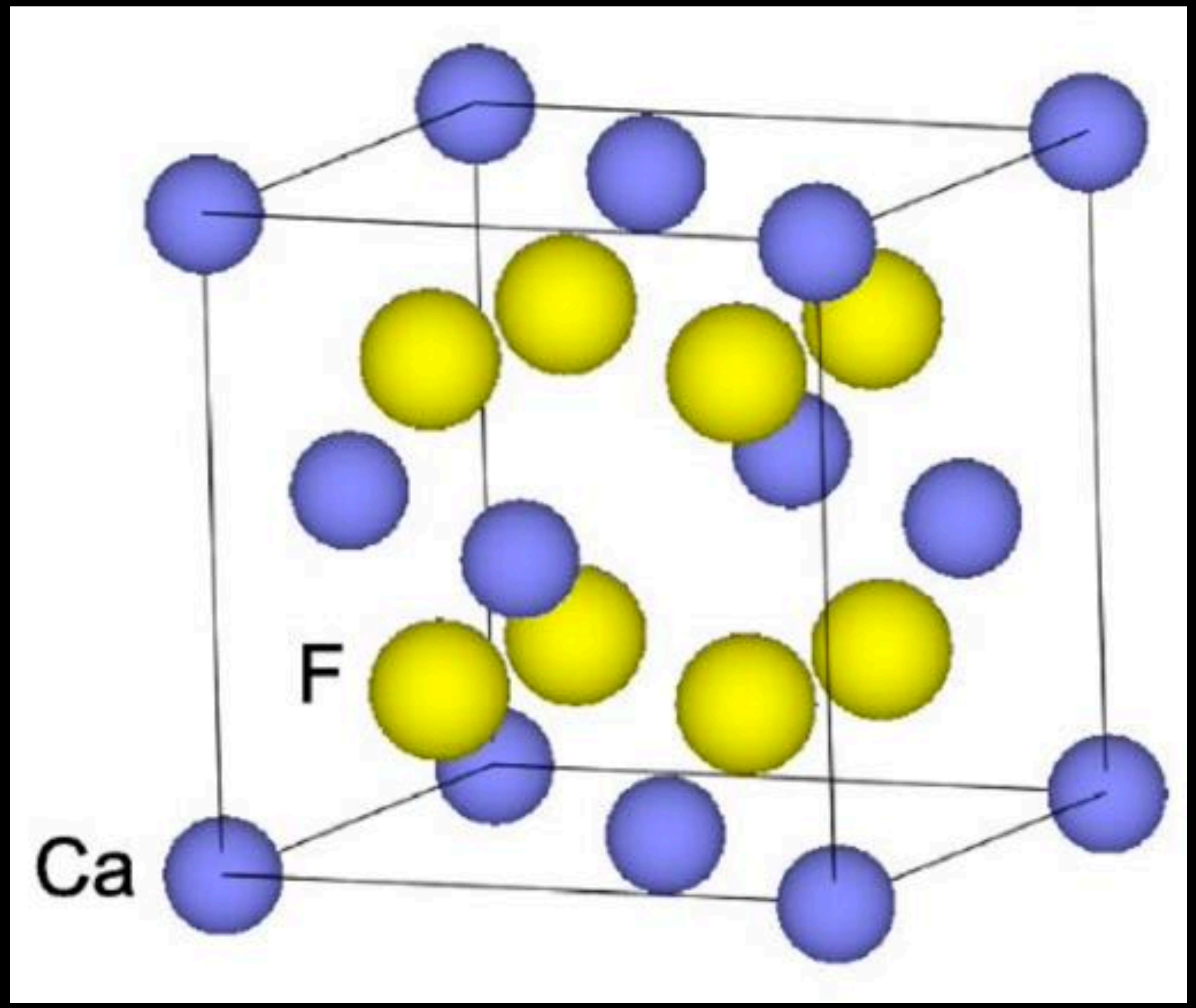


motif: 1 atome Ca en (0,0,0)
2 atomes F en (¼, ¼,¼)
et (¾,¼,¼)

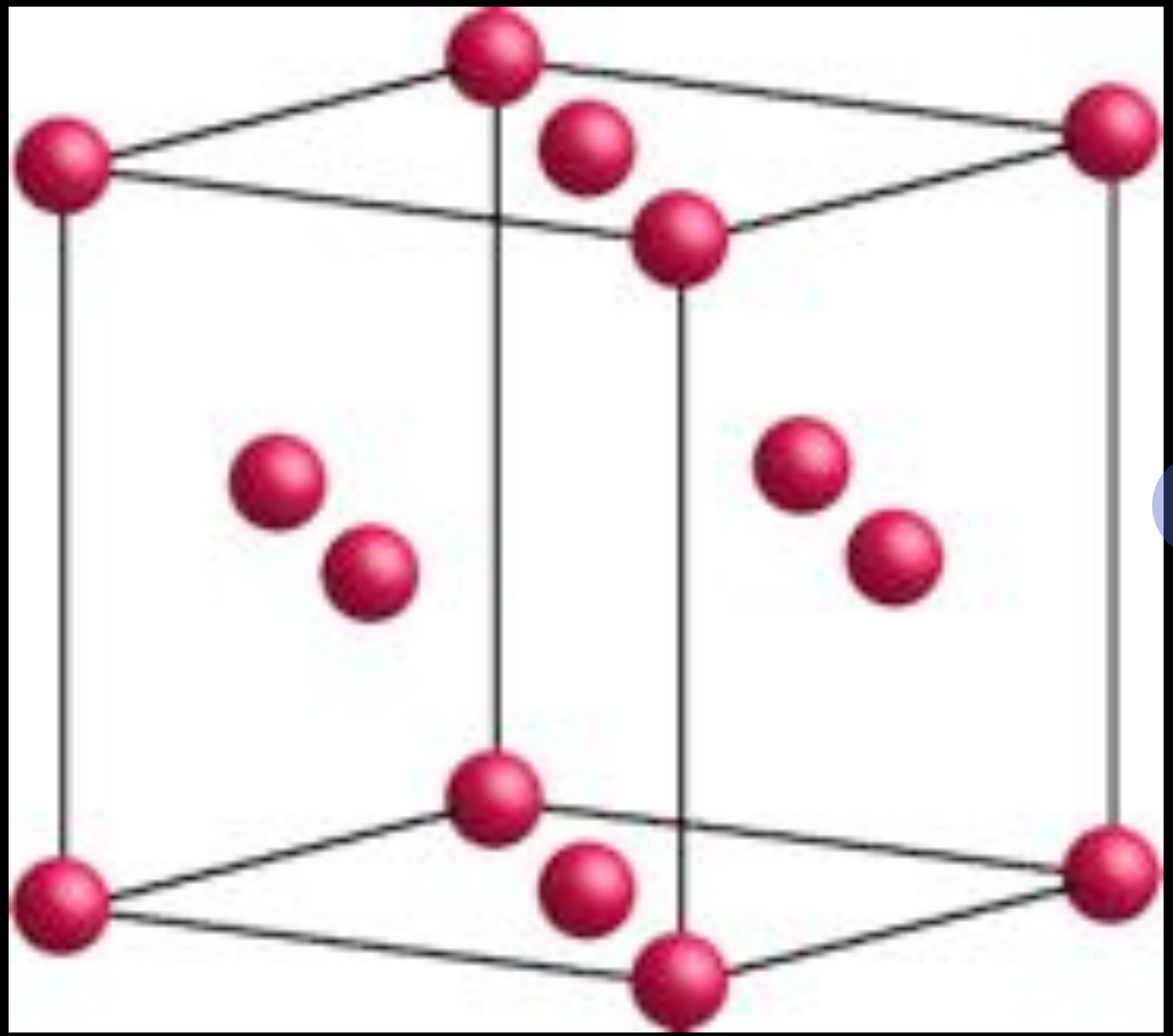
A) Réseaux de Bravais et motifs.

3. Indiquer le réseau de Bravais et la position des atomes qui constituent le motif pour chacun des édifices cristallins de la figure

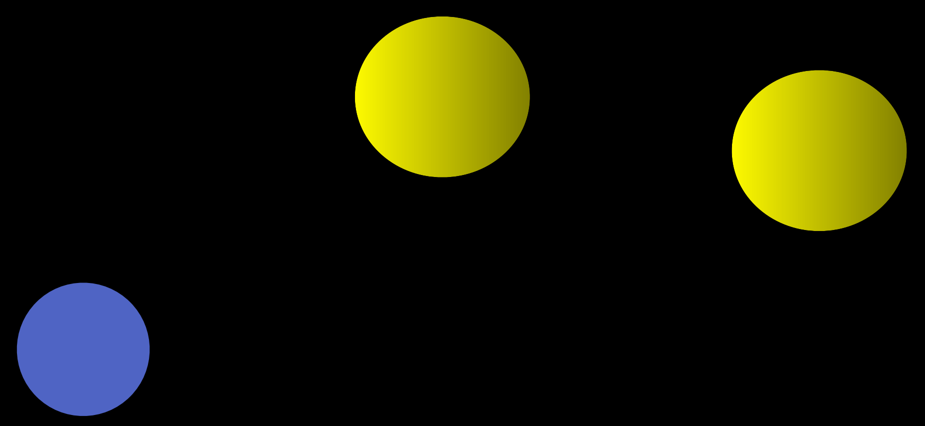
e) Fluorite ou fluorine CaF_2



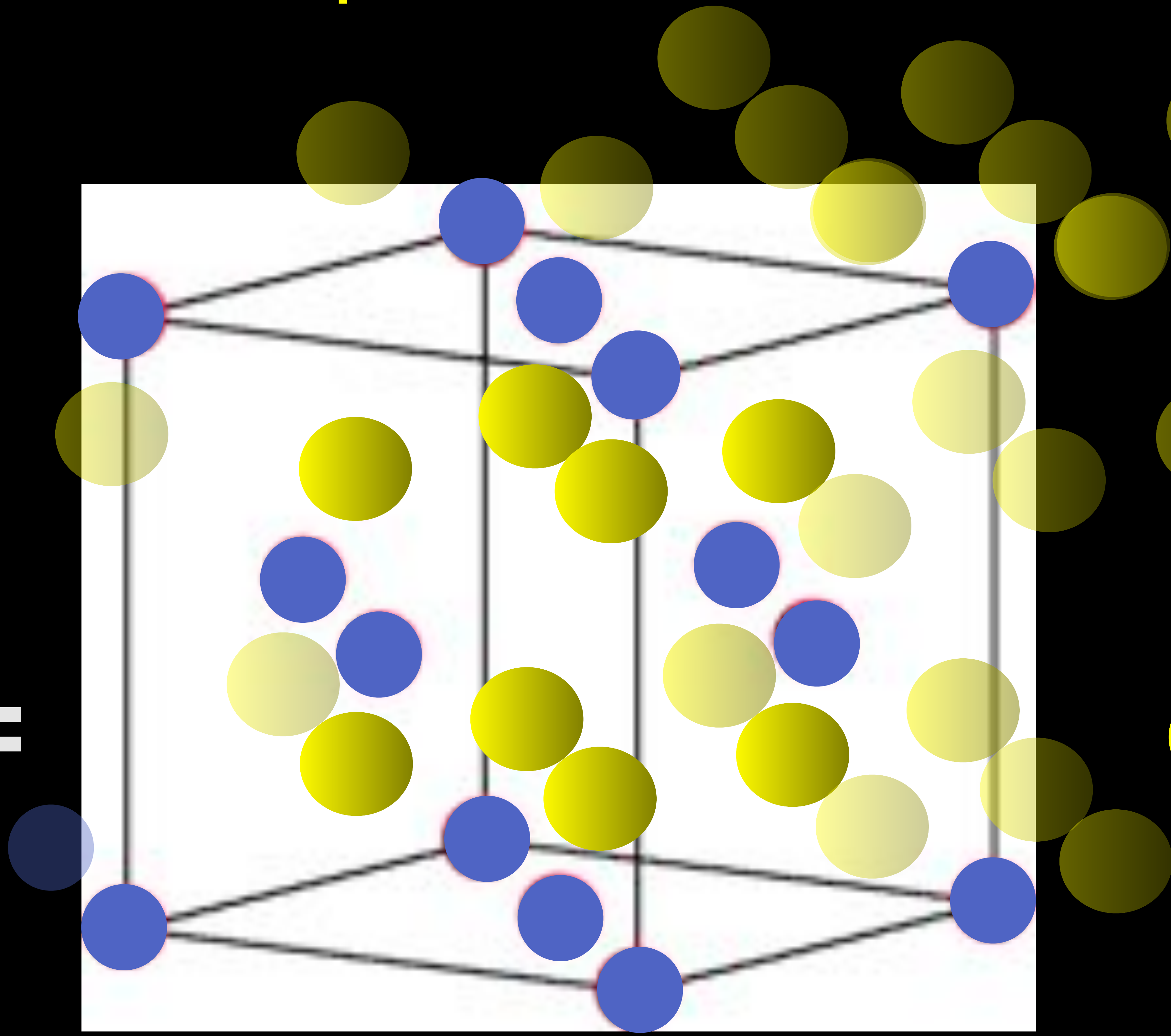
Cubique F - fcc



\+



=



motif: 1 atome Ca en (0,0,0)
2 atomes F en (¼, ¼,¼)
et (¾,¼,¼)

Les ions F occupent les 8 sites interstitiels tétraédriques

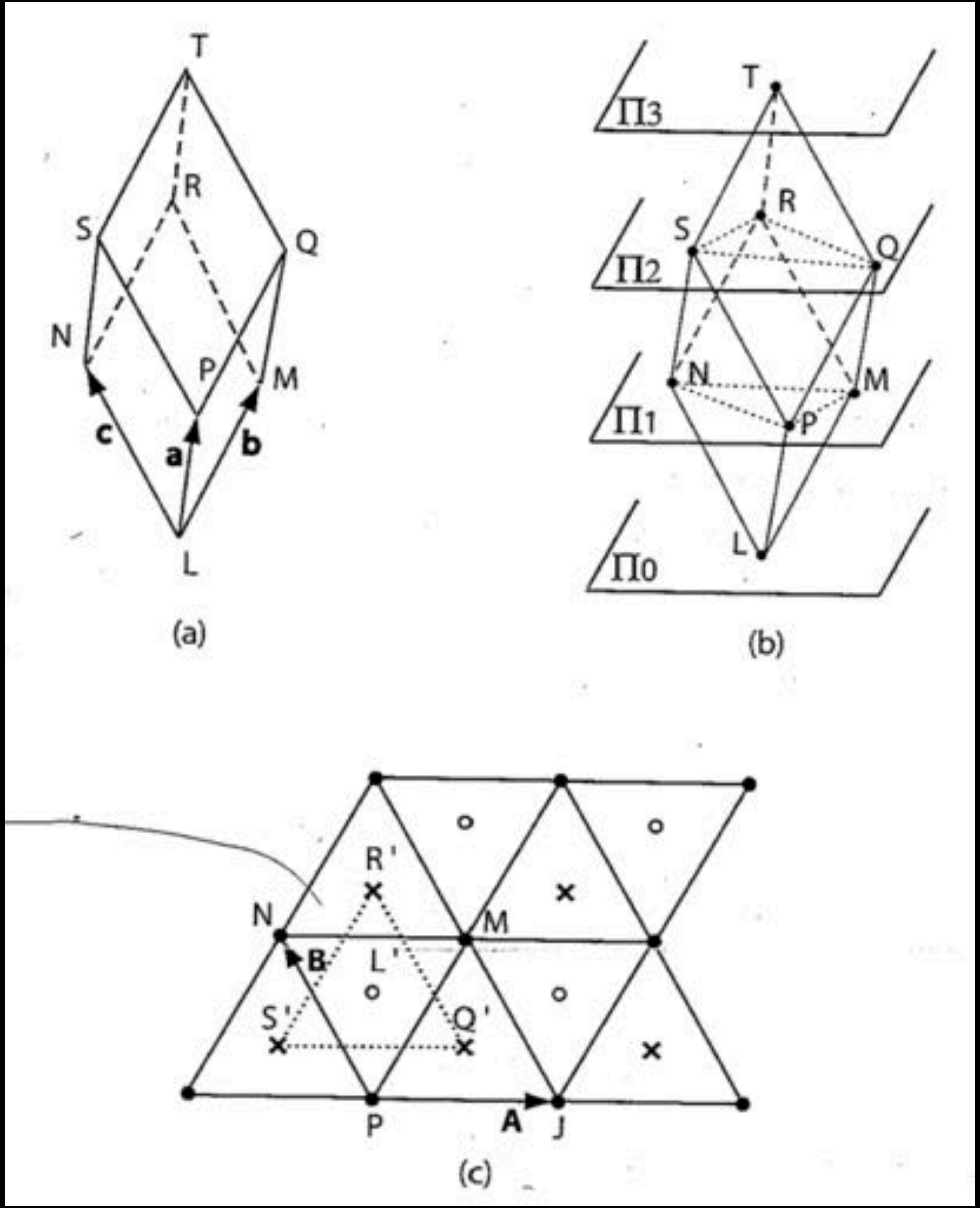
Les ions Ca occupent les sites réguliers d'une structure FCC

B) Réseau rhomboédrique

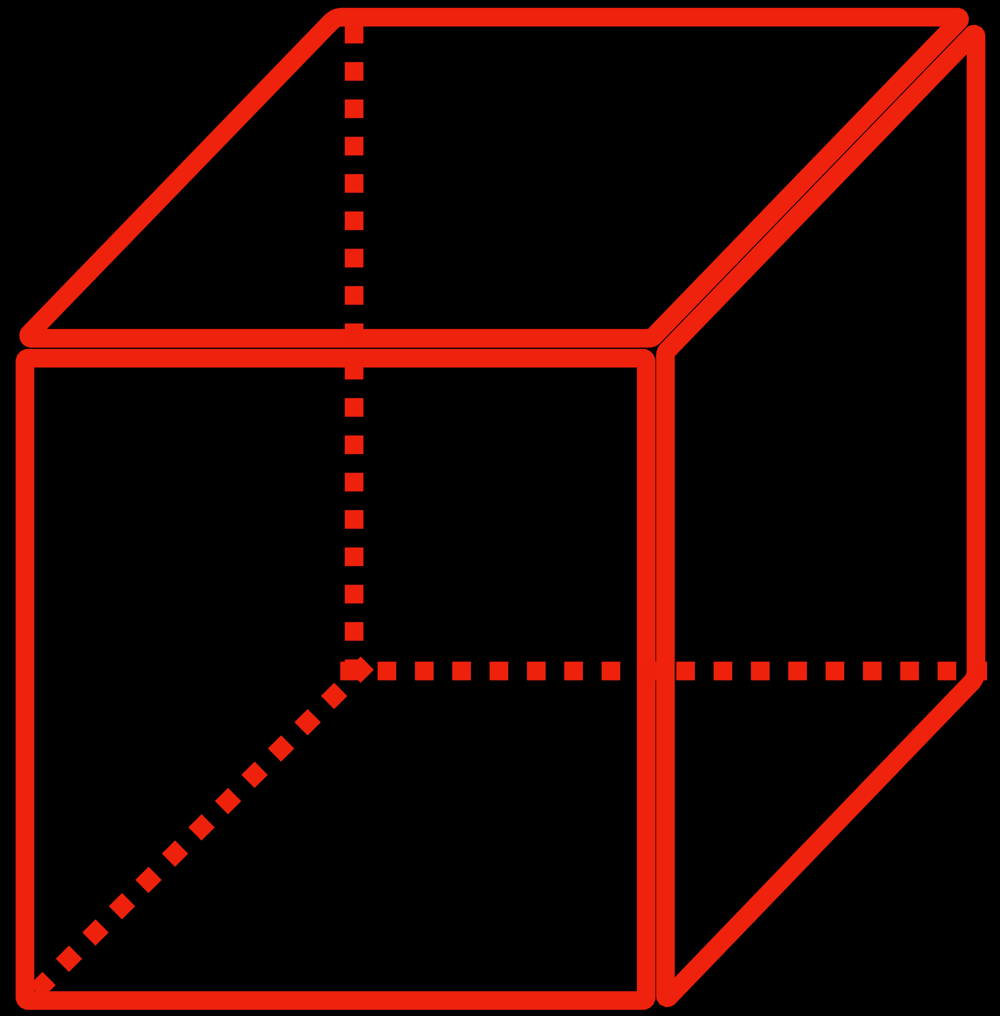
Considérons un réseau rhomboédrique. Ses vecteurs de base sont $\overrightarrow{LP} = \overrightarrow{a}$, $\overrightarrow{LM} = \overrightarrow{b}$ et $\overrightarrow{LN} = \overrightarrow{c}$.

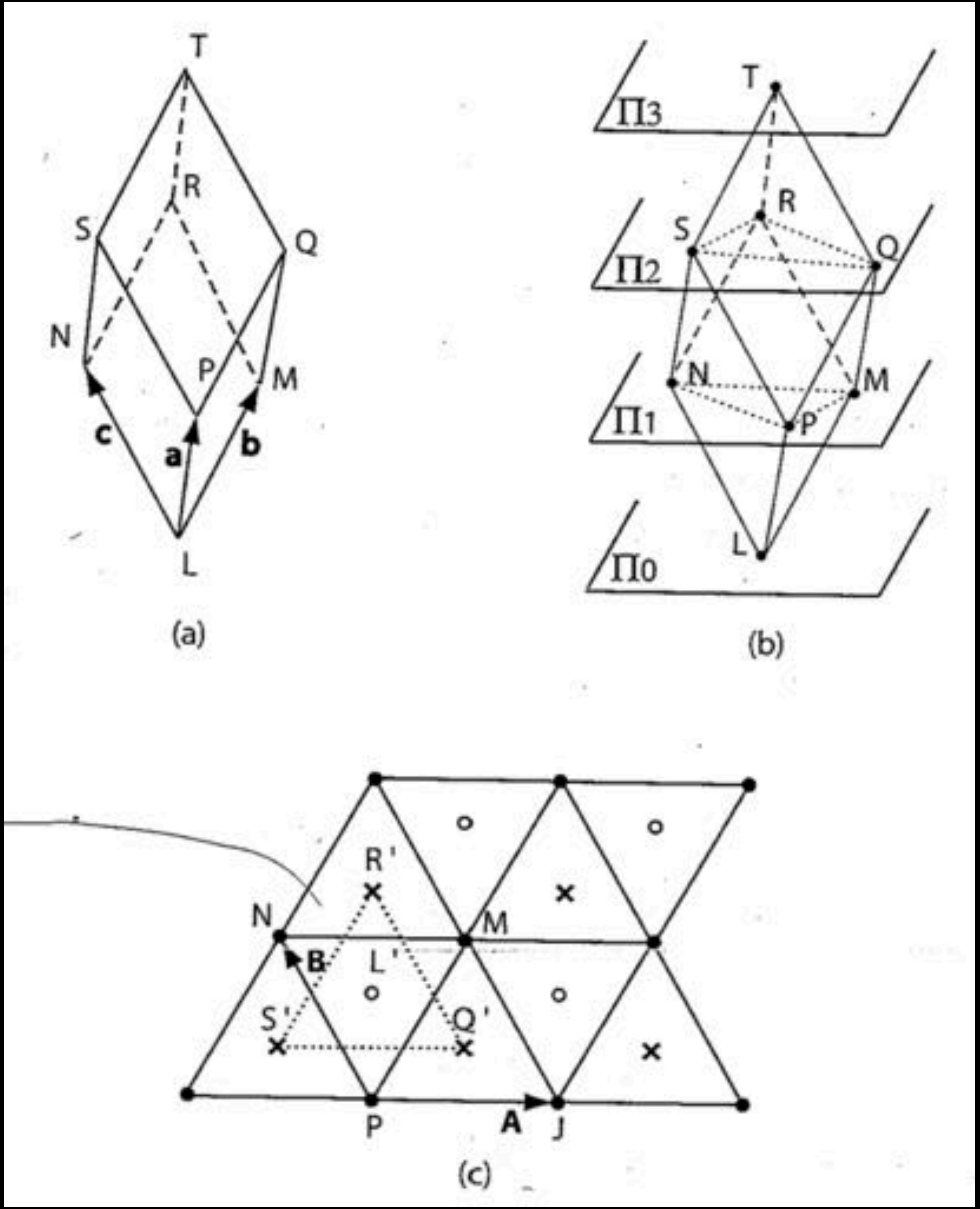
Le plan MNP est un plan (111) noté Π_1.

On note Π_0 le plan (111) contenant le nœud L, Π_2 celui qui contient les nœuds Q, R et S et Π_3 celui qui contient T.

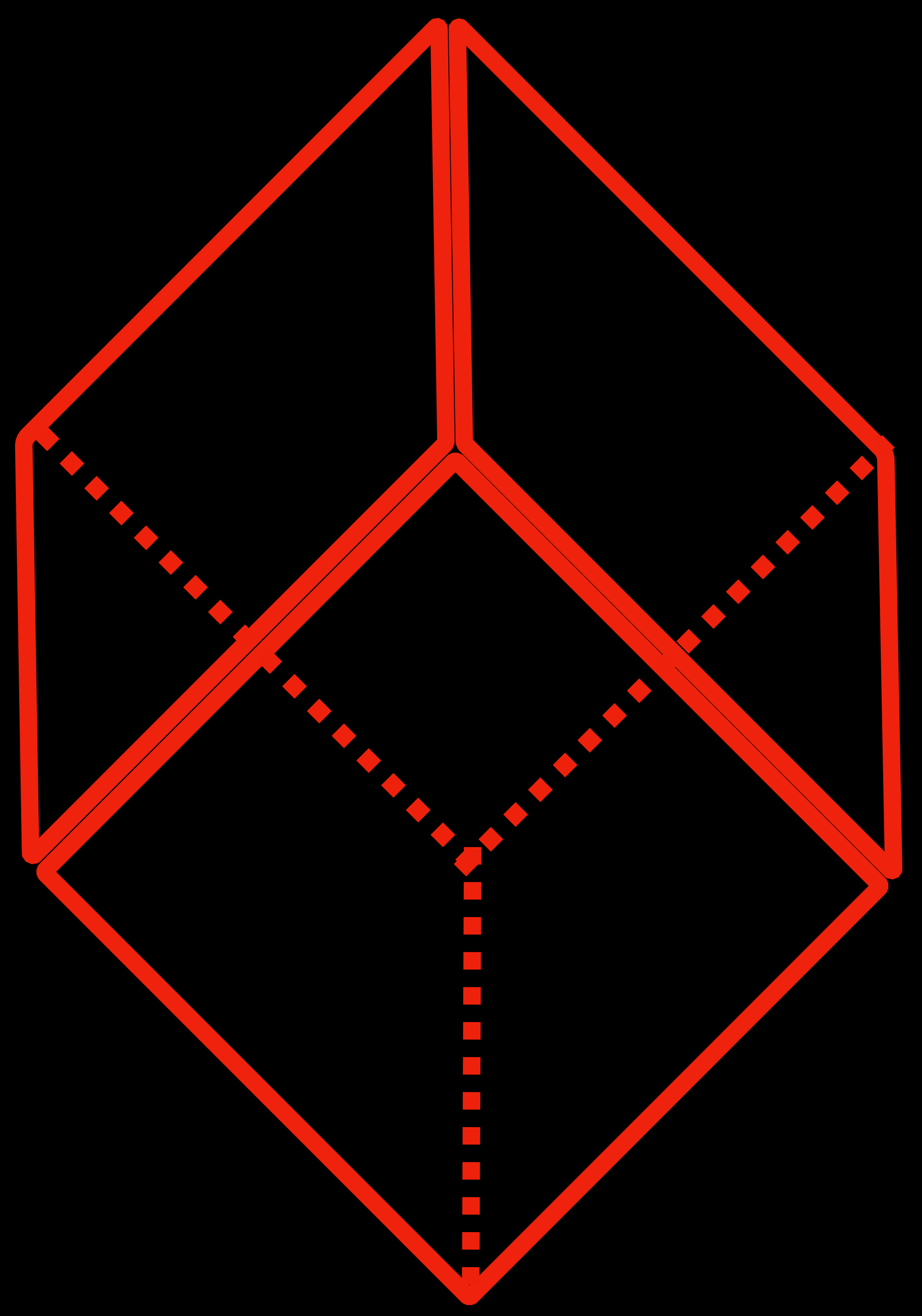


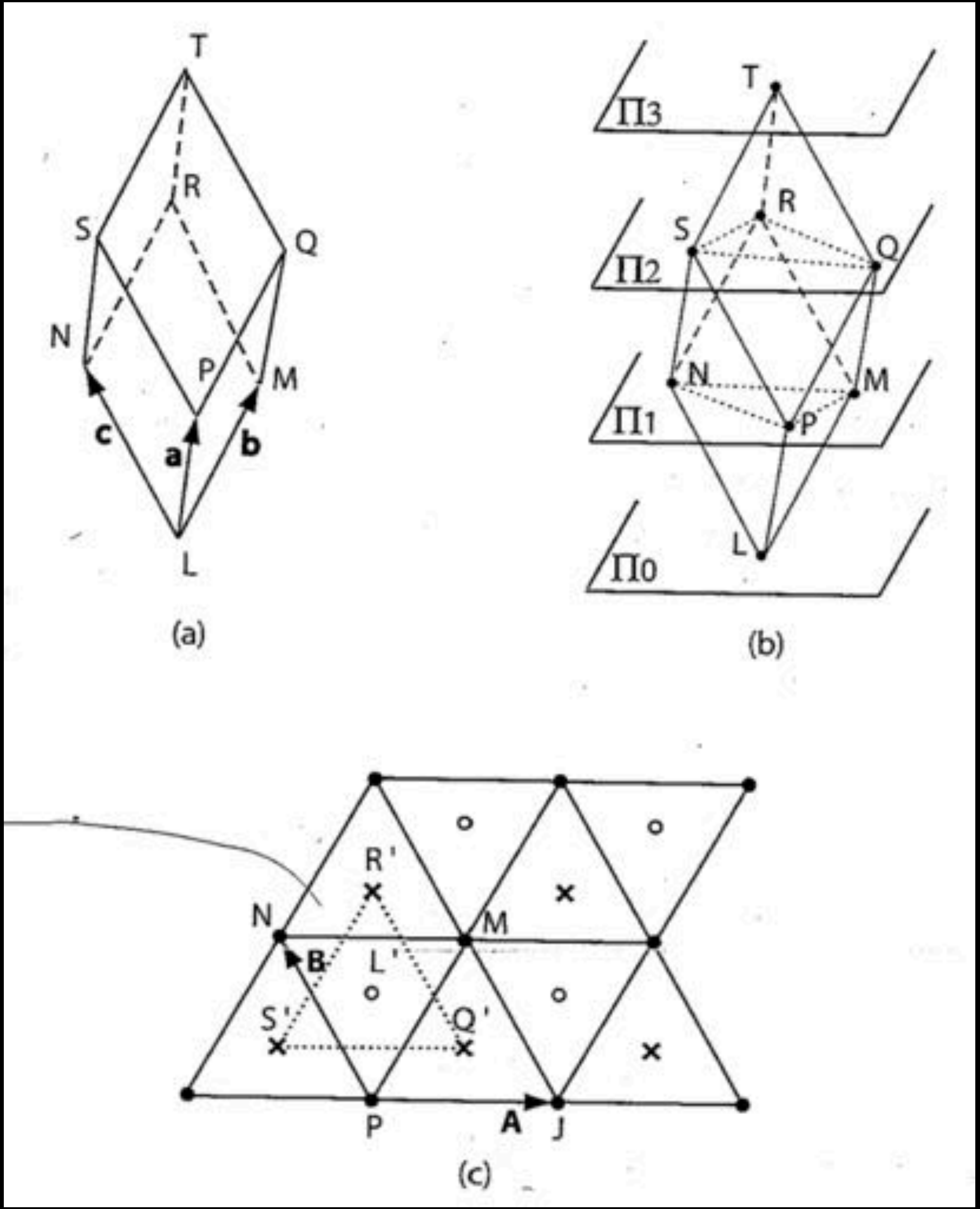
B) Réseau rhomboédrique





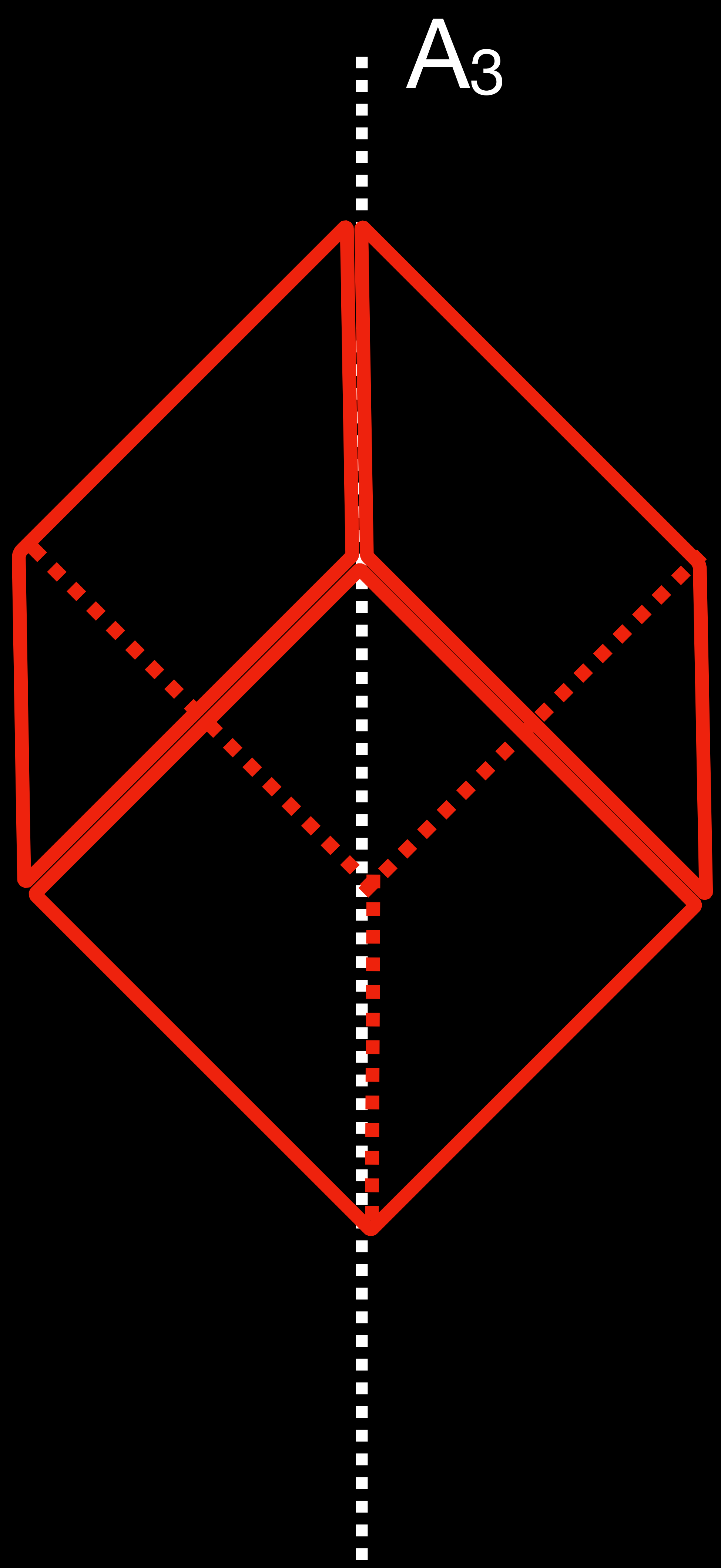
B) Réseau rhomboédrique

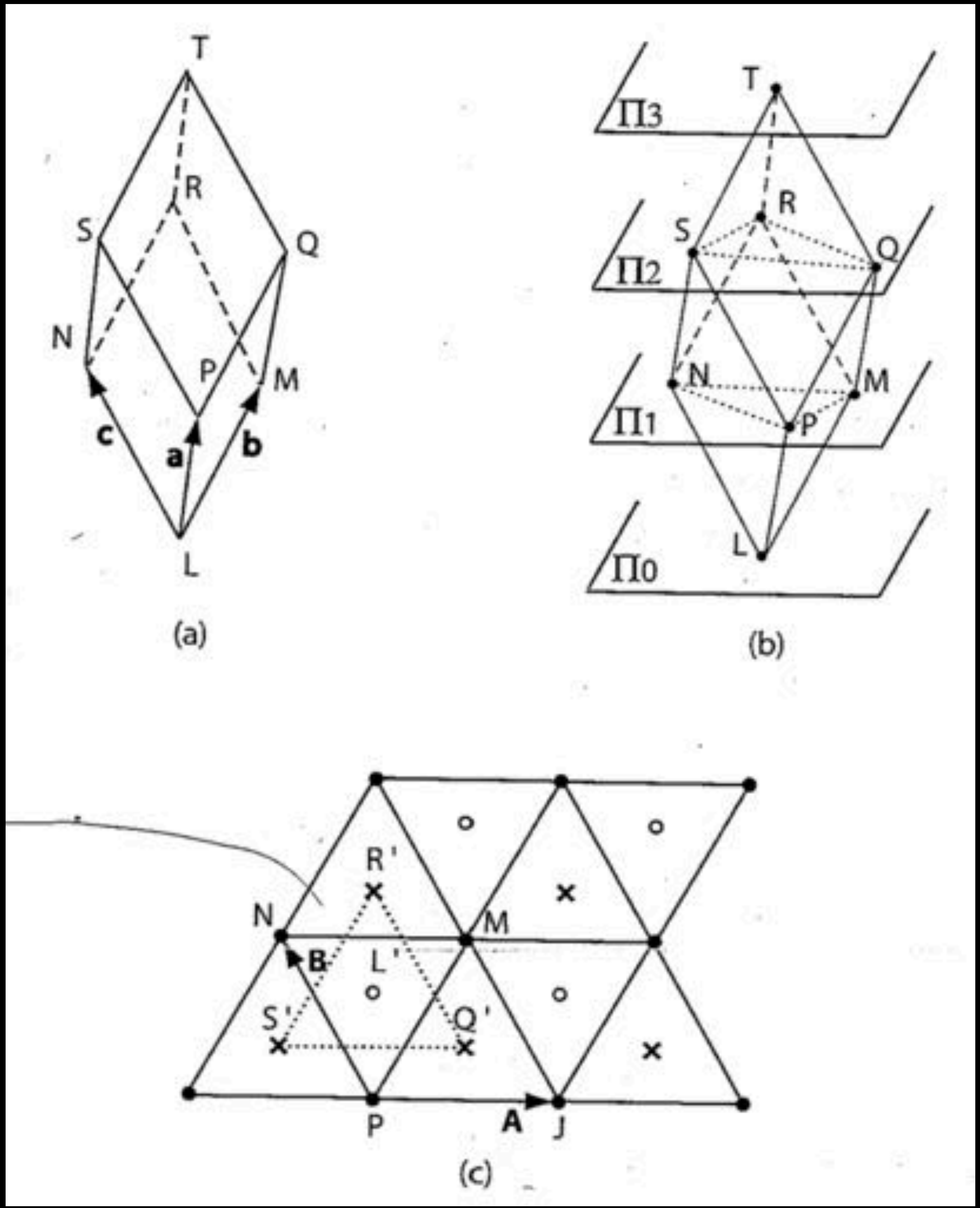




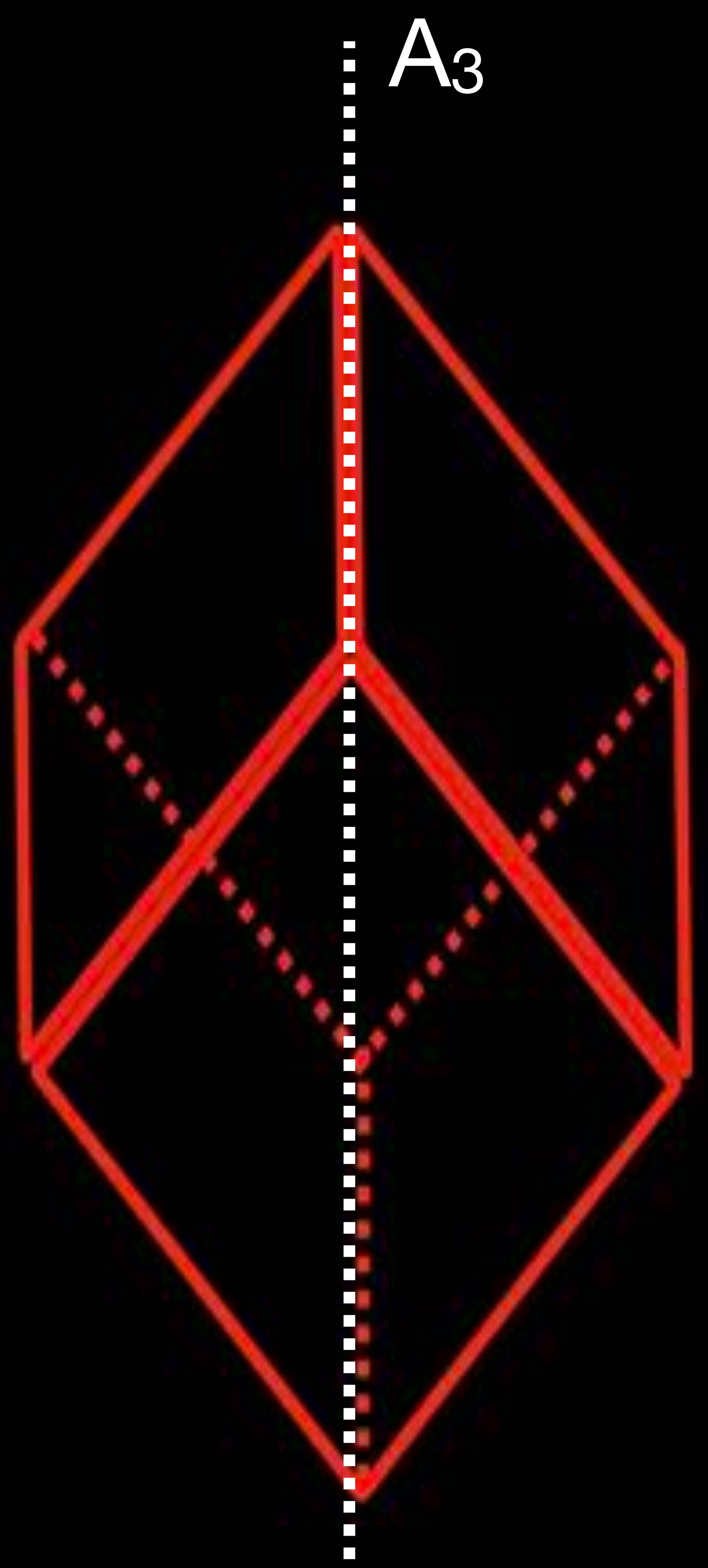
B) Réseau rhomboédrique

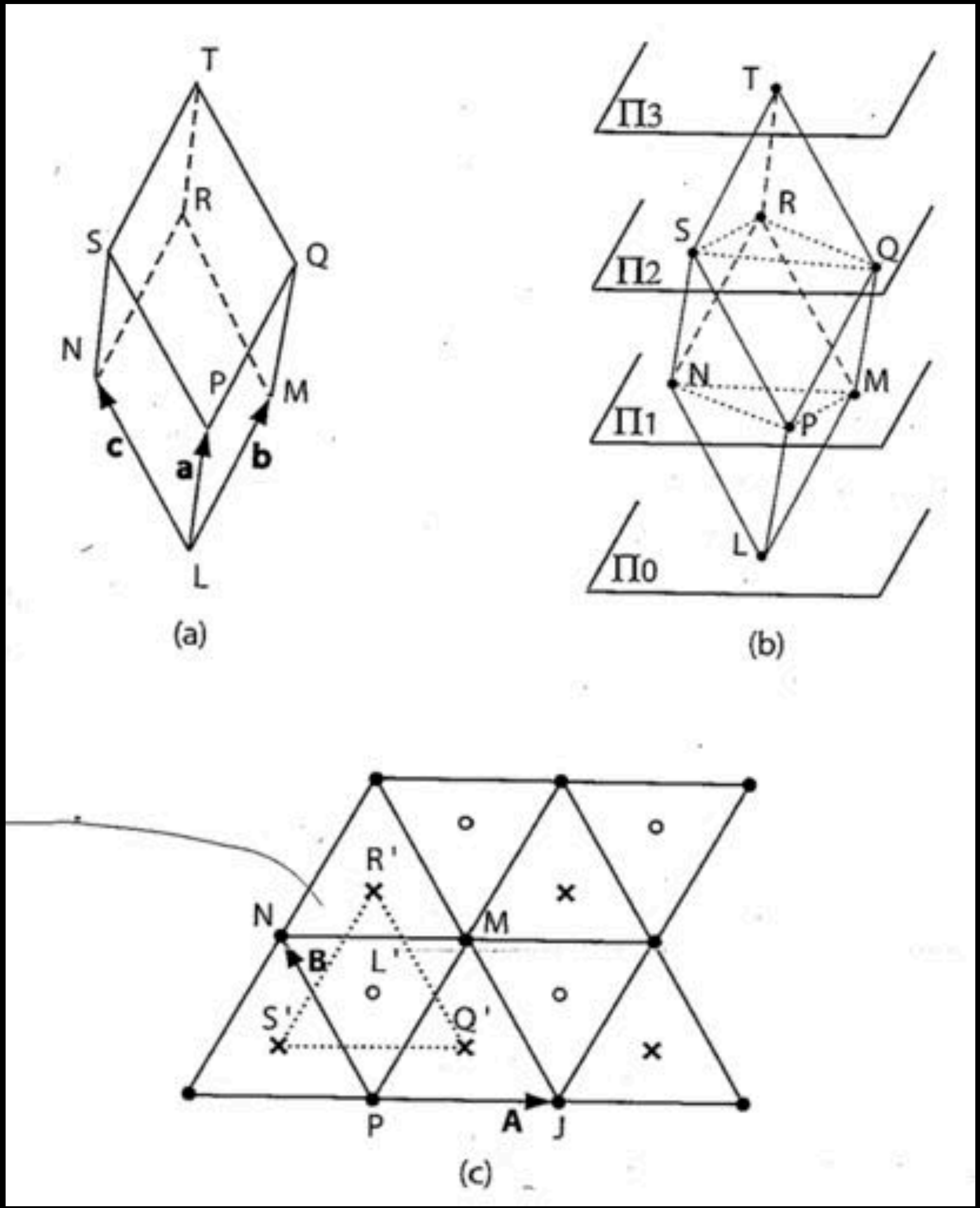
Axe ternaire A_3 (rotation de $2\pi/3 = 120°$) passant par la plus grande diagonale du rhomboèdre





B) Réseau rhomboédrique



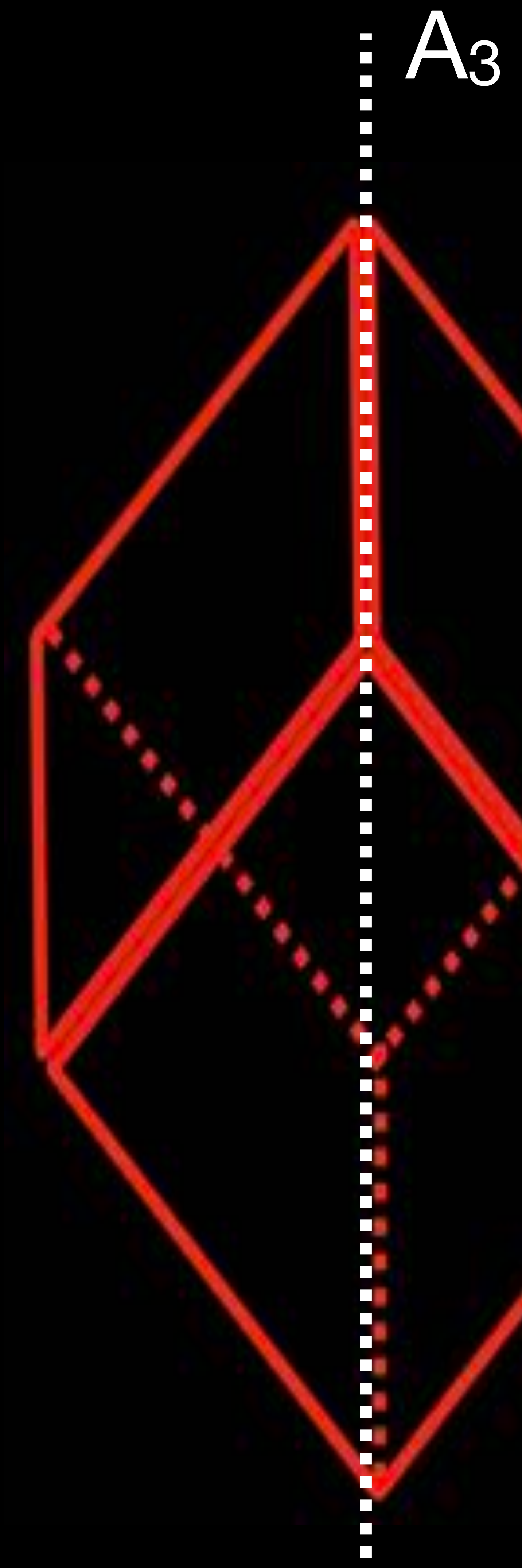


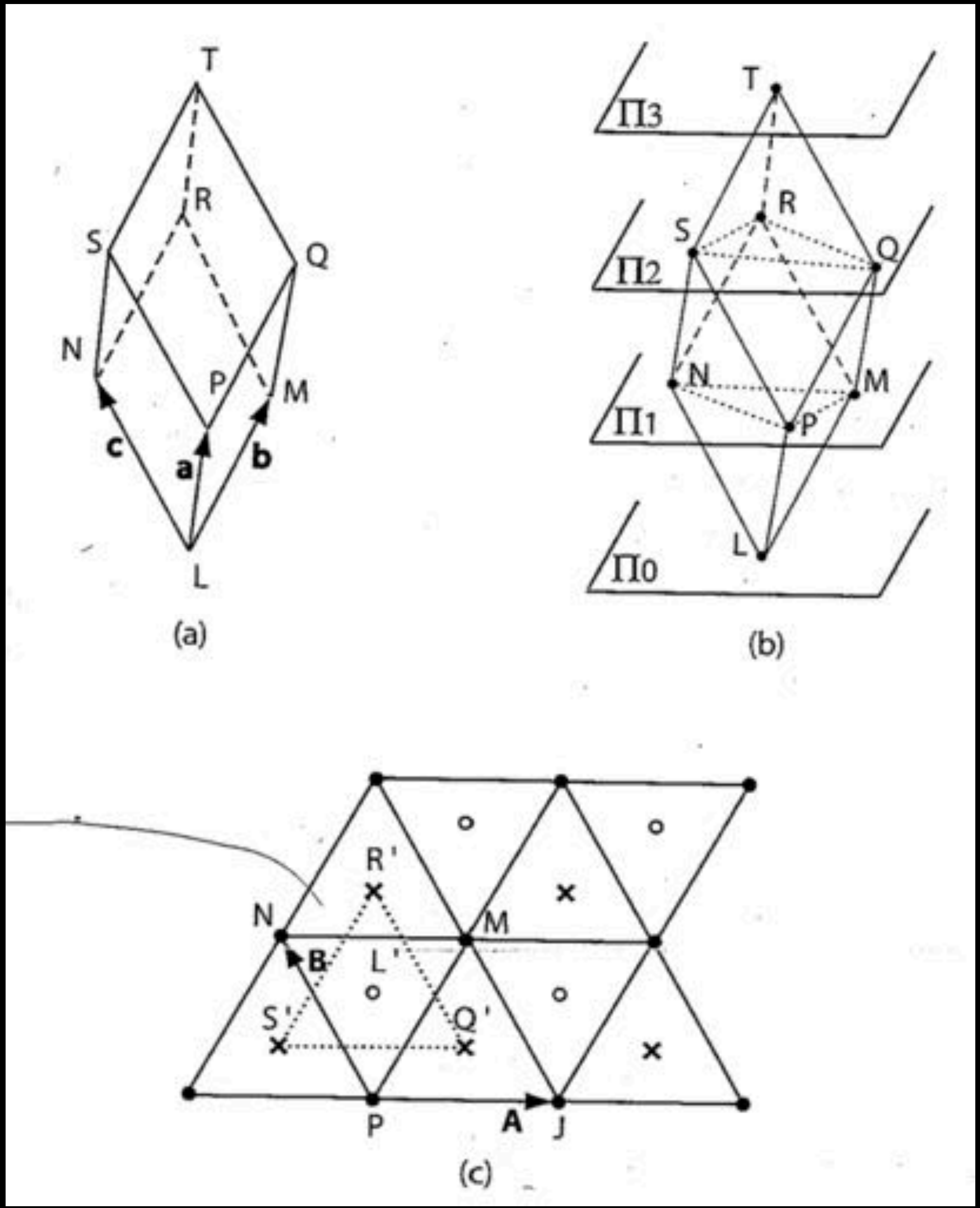
B) Réseau rhomboédrique

Déformation d'un réseau cubique le long de l'une de ses diagonales: rhomboèdre dont les 6 faces sont des losanges égaux
$\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$

La maille rhomboédrique est un rhomboèdre (ou cube incliné)

Peu d'éléments simples ont la symétrie rhomboédrique : Bi, Hg, As, Sb, Sm.



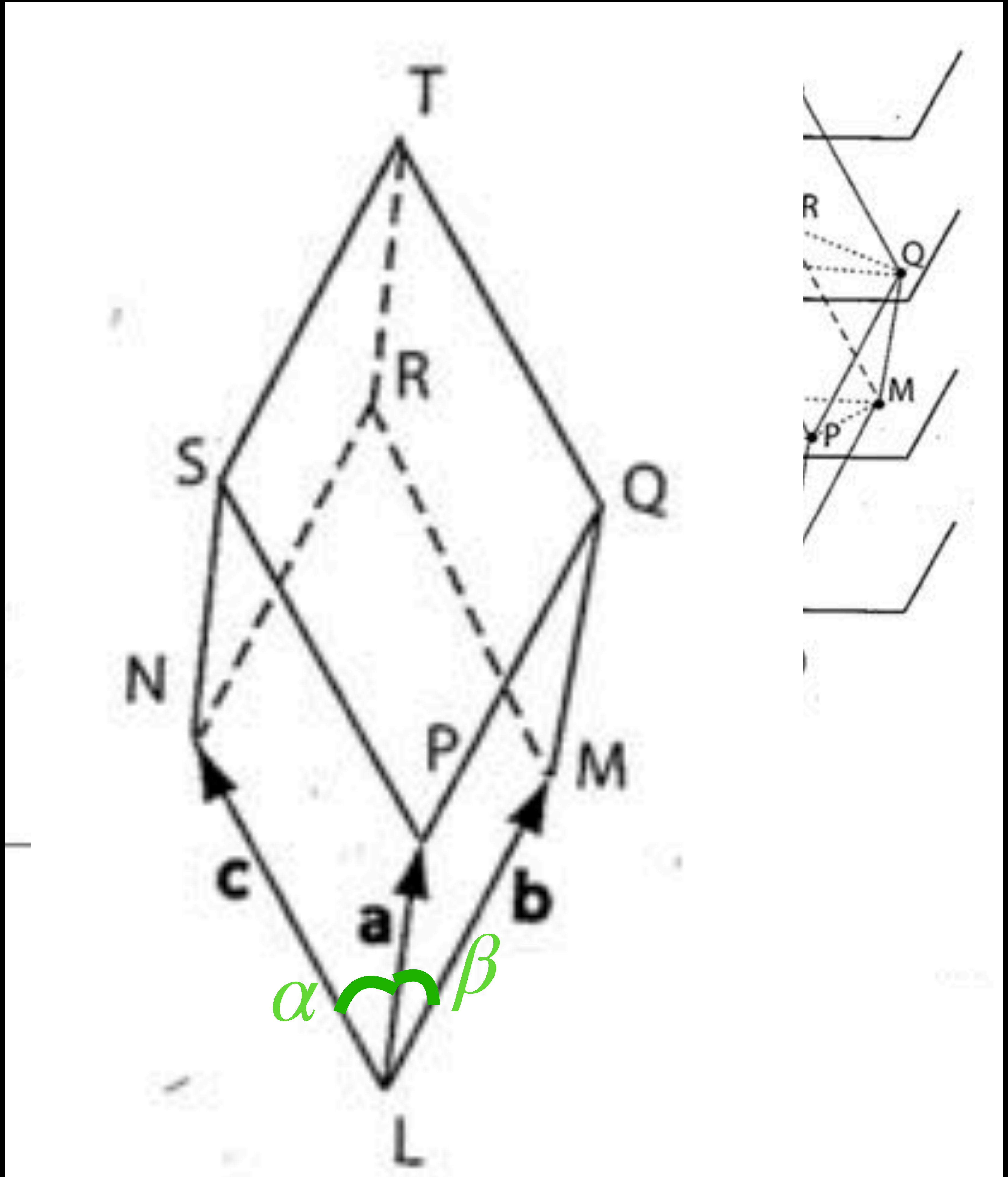


B) Réseau rhomboédrique

1. Montrer que les nœuds de chacun de ces plans (111) forment un réseau plan hexagonal

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$$

$$\|\vec{a}\| = \|\vec{b}\| = \|\vec{c}\|$$



Maille élémentaire

B) Réseau rhomboédrique

1. Montrer que les nœuds de chacun de ces plans (111) forment un réseau plan hexagonal

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$$

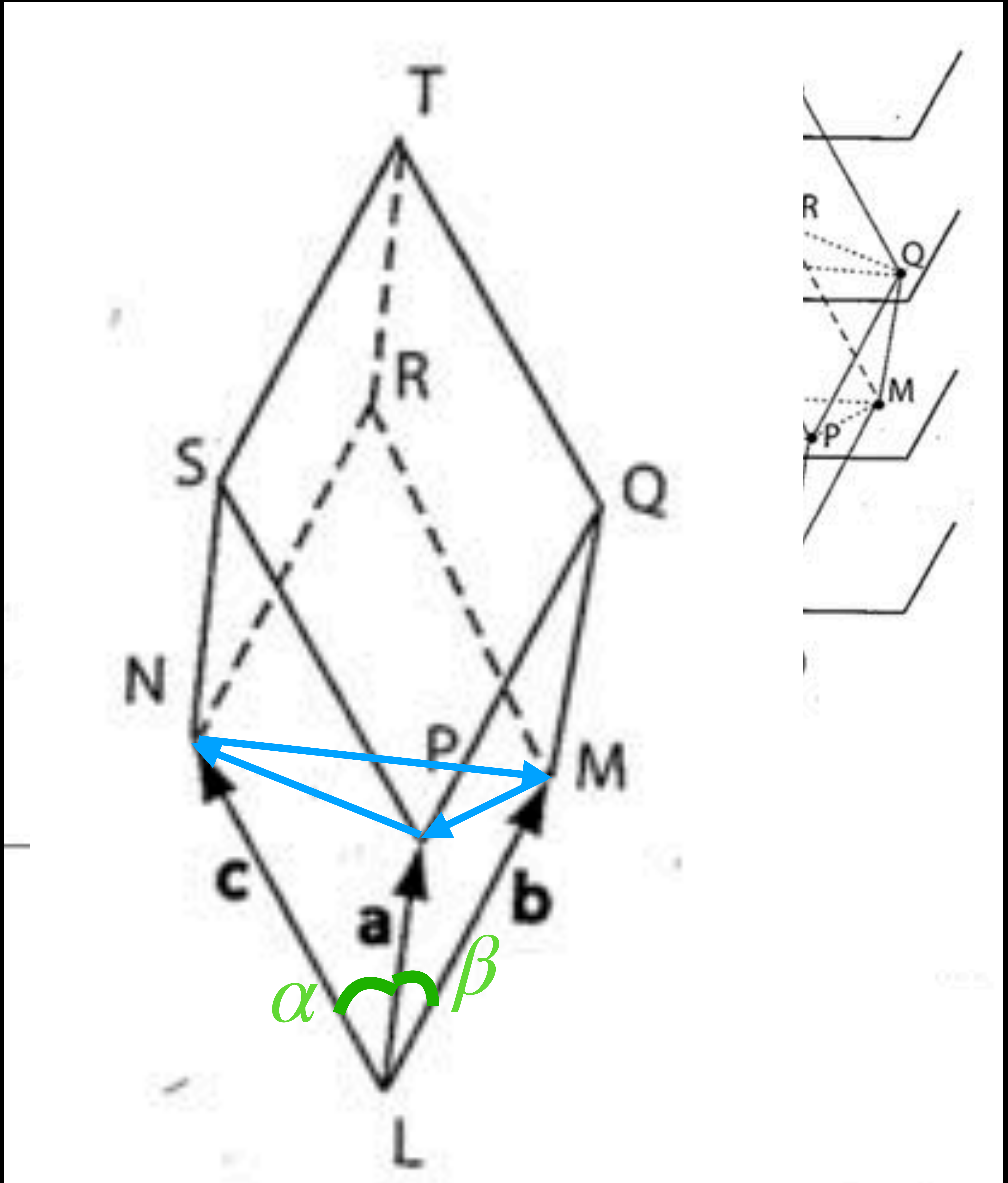
$$\|\vec{a}\| = \|\vec{b}\| = \|\vec{c}\|$$

donc

$$\|\overrightarrow{PN}\| = \|\overrightarrow{NM}\| = \|\overrightarrow{MP}\| = 2\|\vec{a}\| \sin\frac{\alpha}{2}$$

$\overrightarrow{PN}$, $\overrightarrow{NM}$, $\overrightarrow{MP}$ forment un triangle équilatéral: angles de 60°

→ réseau plan hexagonal

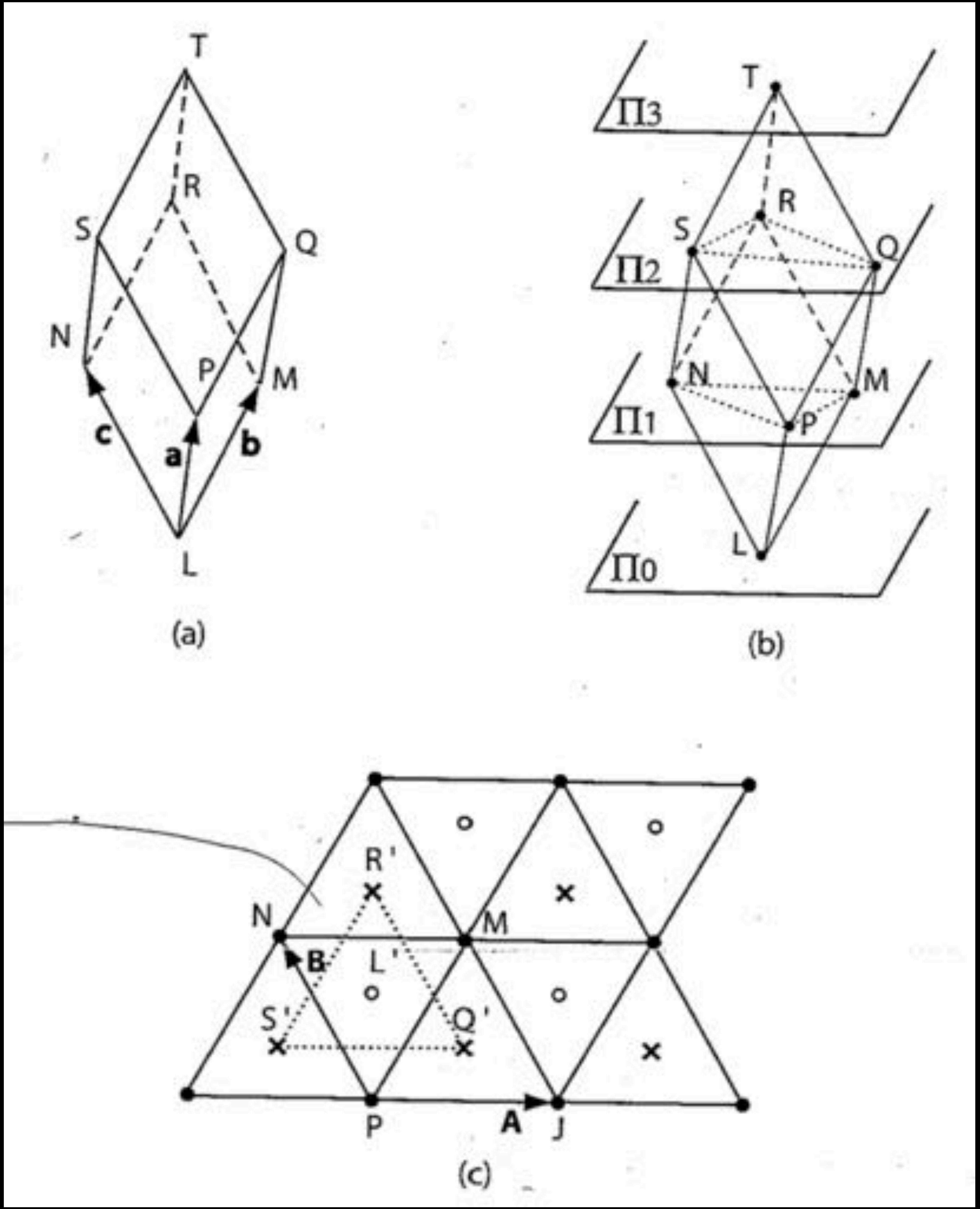


Maille élémentaire

B) Réseau rhomboédrique

2. On voit sur la figure 2-c que le réseau rhomboédrique peut être décrit par une maille hexagonale de vecteurs de base $\overrightarrow{A}$, $\overrightarrow{B}$ et $\overrightarrow{C}$

Ecrire $\overrightarrow{A}$, $\overrightarrow{B}$ et $\overrightarrow{C}$ en fonction de $\overrightarrow{a}$, $\overrightarrow{b}$ et $\overrightarrow{c}$

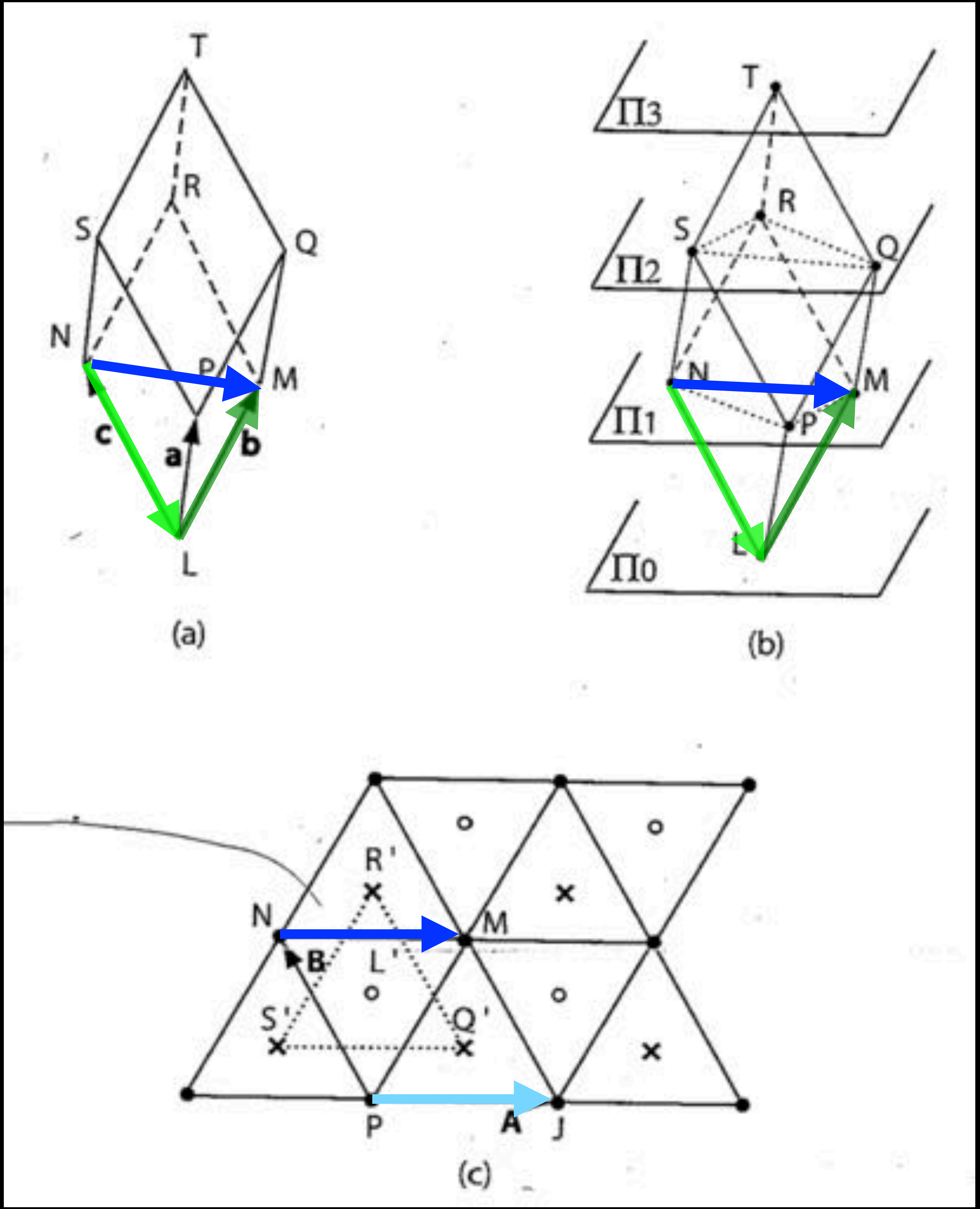


B) Réseau rhomboédrique

2. On voit sur la figure 2-c que le réseau rhomboédrique peut être décrit par une maille hexagonale de vecteurs de base $\overrightarrow{A}$, $\overrightarrow{B}$ et $\overrightarrow{C}$

Ecrire $\overrightarrow{A}$, $\overrightarrow{B}$ et $\overrightarrow{C}$ en fonction de $\overrightarrow{a}$, $\overrightarrow{b}$ et $\overrightarrow{c}$

$$\overrightarrow{A} = \overrightarrow{PJ} = \overrightarrow{NM} = \overrightarrow{NL} + \overrightarrow{LM} = \overrightarrow{b} - \overrightarrow{c}$$



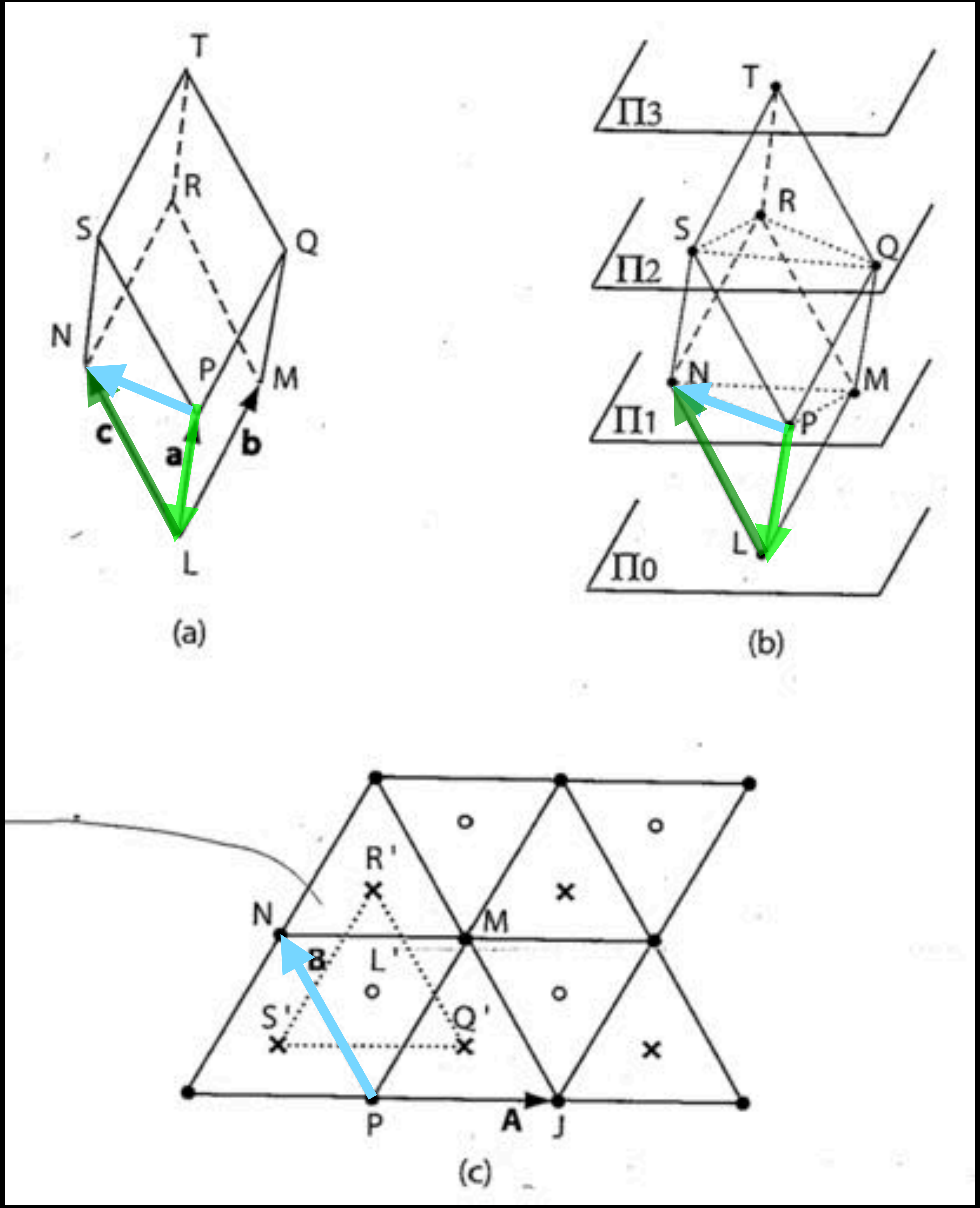
B) Réseau rhomboédrique

2. On voit sur la figure 2-c que le réseau rhomboédrique peut être décrit par une maille hexagonale de vecteurs de base $\overrightarrow{A}$, $\overrightarrow{B}$ et $\overrightarrow{C}$

Ecrire $\overrightarrow{A}$, $\overrightarrow{B}$ et $\overrightarrow{C}$ en fonction de $\overrightarrow{a}$, $\overrightarrow{b}$ et $\overrightarrow{c}$

$$\overrightarrow{A} = \overrightarrow{PJ} = \overrightarrow{NM} = \overrightarrow{NL} + \overrightarrow{LM} = \overrightarrow{b} - \overrightarrow{c}$$

$$\overrightarrow{B} = \overrightarrow{PN} = \overrightarrow{PL} + \overrightarrow{LN} = \overrightarrow{c} - \overrightarrow{a}$$



B) Réseau rhomboédrique

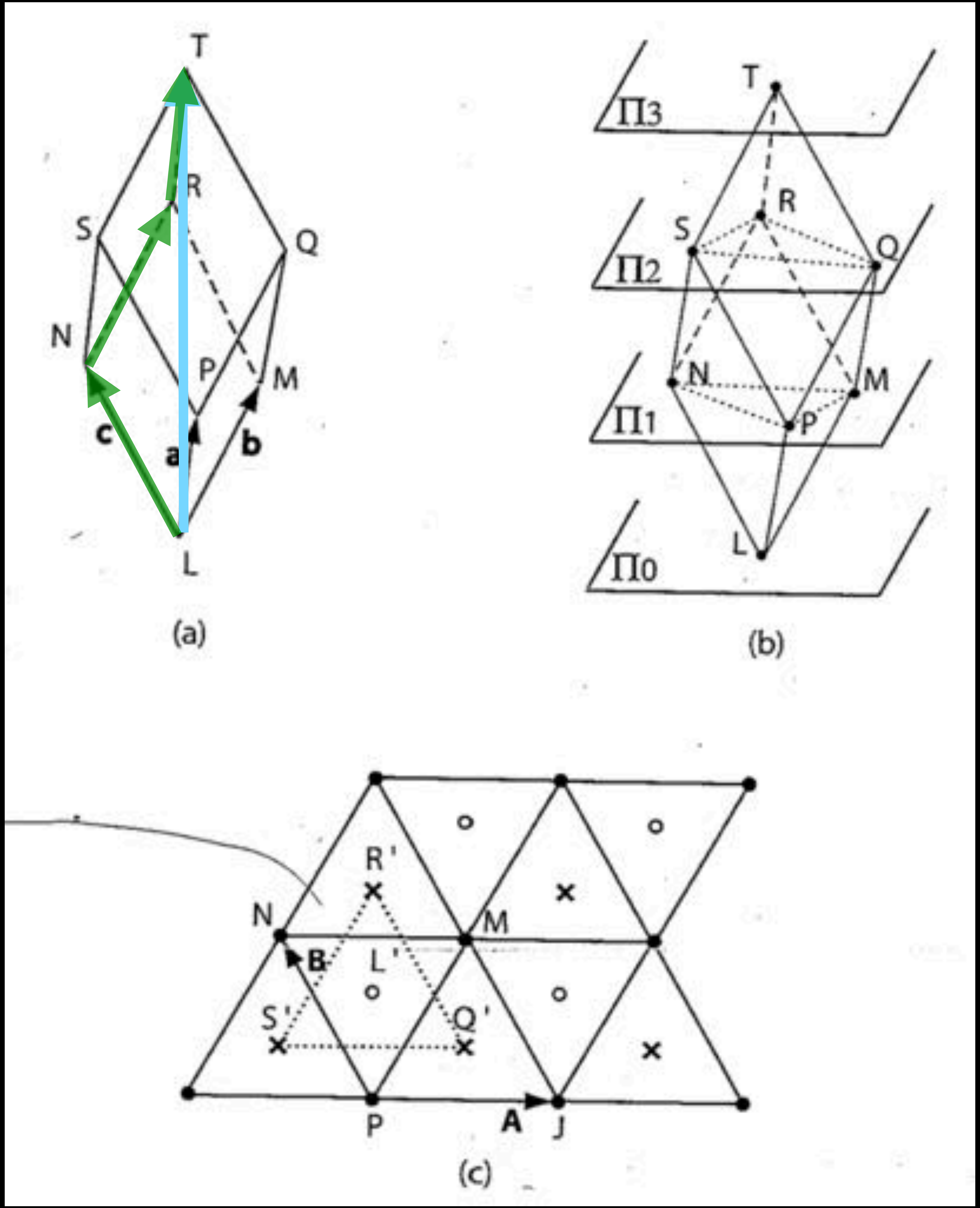
2. On voit sur la figure 2-c que le réseau rhomboédrique peut être décrit par une maille hexagonale de vecteurs de base $\overrightarrow{A}$, $\overrightarrow{B}$ et $\overrightarrow{C}$

Ecrire $\overrightarrow{A}$, $\overrightarrow{B}$ et $\overrightarrow{C}$ en fonction de $\overrightarrow{a}$, $\overrightarrow{b}$ et $\overrightarrow{c}$

$$\overrightarrow{A} = \overrightarrow{PJ} = \overrightarrow{NM} = \overrightarrow{NL} + \overrightarrow{LM} = \overrightarrow{b} - \overrightarrow{c}$$

$$\overrightarrow{B} = \overrightarrow{PN} = \overrightarrow{PL} + \overrightarrow{LN} = \overrightarrow{c} - \overrightarrow{a}$$

$$\overrightarrow{C} = \overrightarrow{LT} = \overrightarrow{LN} + \overrightarrow{NR} + \overrightarrow{RT} = \overrightarrow{a} + \overrightarrow{b} + \overrightarrow{c}$$



B) Réseau rhomboédrique

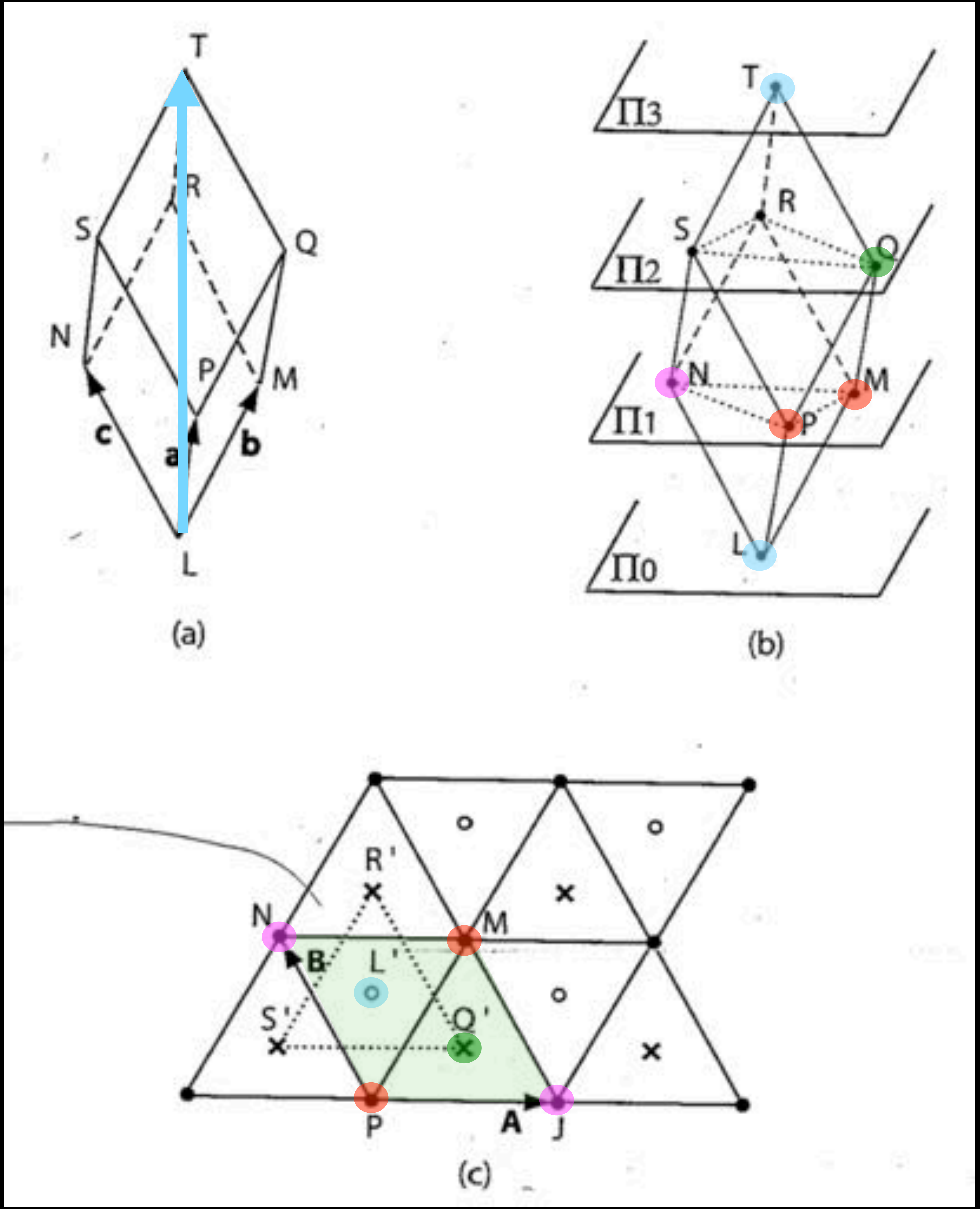
3. Quelle est la multiplicité de cette nouvelle maille ?

∘ projection de L et T sur le plan Π_1 → L'

x projections de Q, R et S sur le plan Π_1 → L'

$$\underbrace{\frac{1}{2}\times 2}_{\Pi_0,\,\Pi_3}+\underbrace{\frac{1}{3}\times 2}_{\Pi_1}+\underbrace{\frac{1}{6}\times 2}_{\Pi_1}+\underbrace{1}_{\Pi_2}=3$$

Multiplicité triple



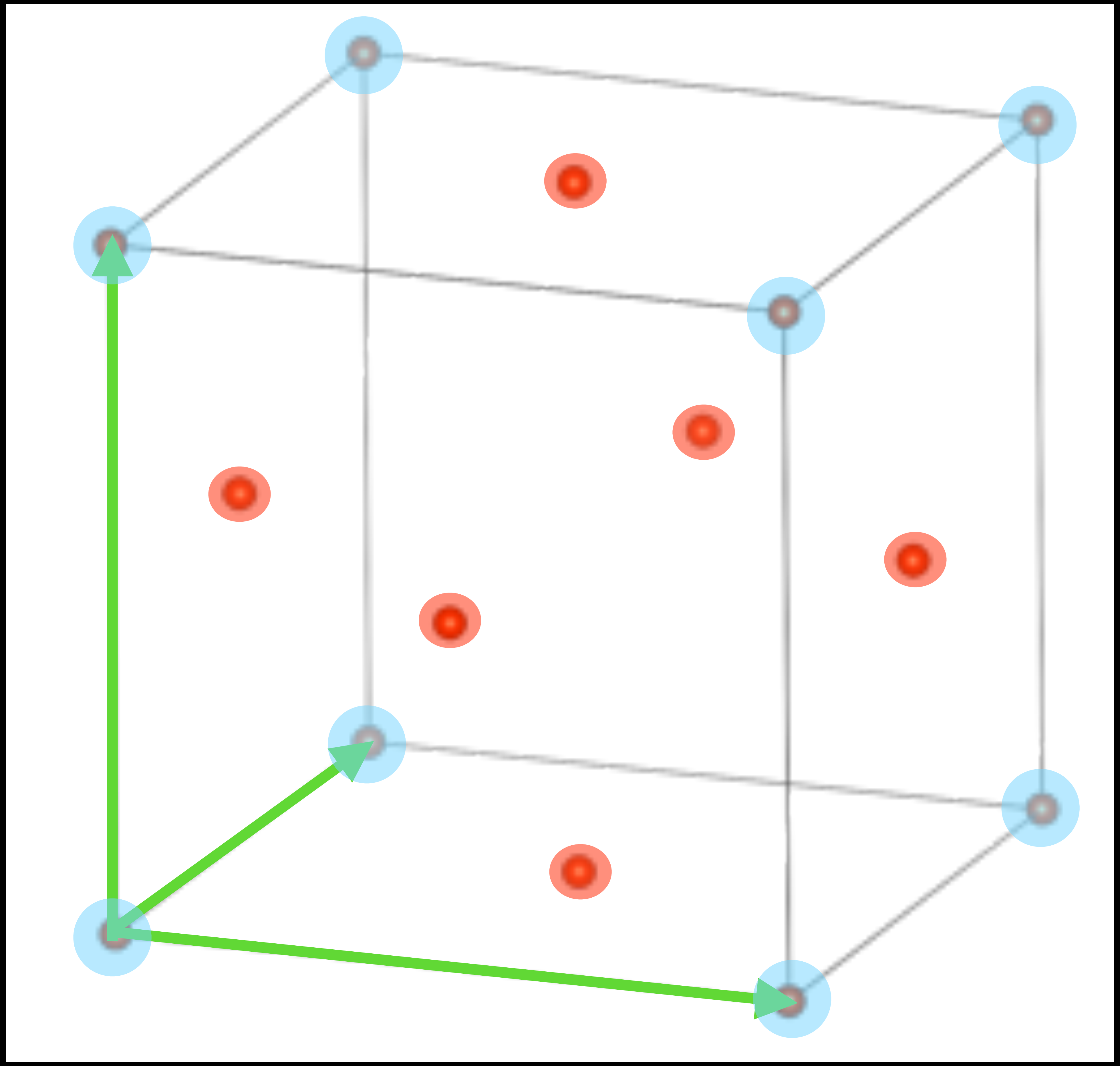
C) La maille primitive d'un cfc est rhomboédrique!

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

1. Quelle est la multiplicité de cette nouvelle maille ?

$$\underbrace{\frac{1}{8}\times 8}_{\text{coins}} + \underbrace{\frac{1}{2}\times 6}_{\text{faces}} = 4$$

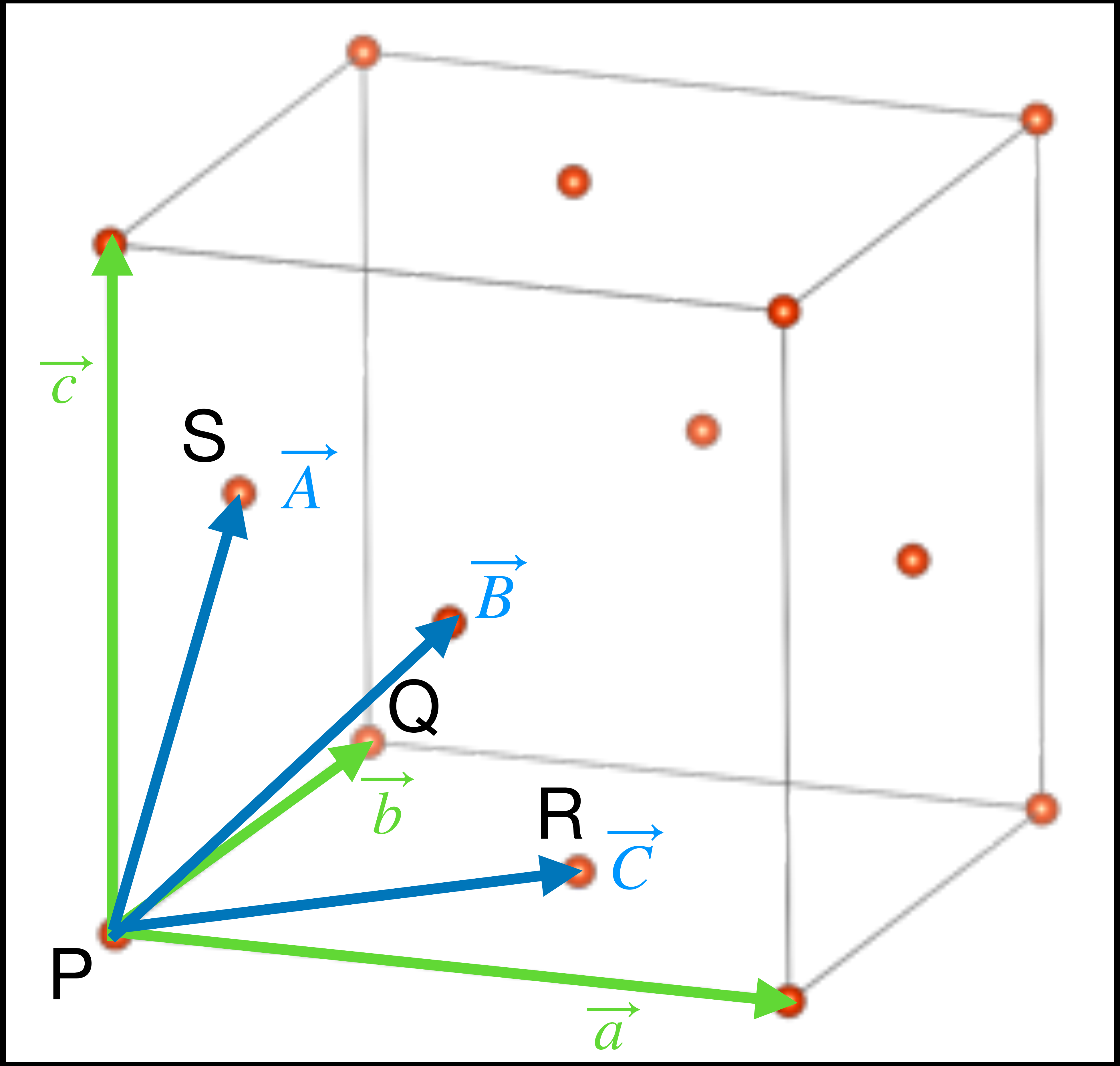
Multiplicité quatre



C) La maille primitive d'un cfc est rhomboédrique!

2. Montrer que les trois angles α, β et γ (angles entre $\overrightarrow{A}$ et $\overrightarrow{B}$, $\overrightarrow{B}$ et $\overrightarrow{C}$, $\overrightarrow{A}$ et $\overrightarrow{C}$) valent 60°.

$$\|\overrightarrow{A}\| = \|\overrightarrow{B}\| = \|\overrightarrow{C}\| = A$$



C) La maille primitive d'un cfc est rhomboédrique!

2. Montrer que les trois angles α, β et γ (angles entre $\vec{A}$ et $\vec{B}$, $\vec{B}$ et $\vec{C}$, $\vec{A}$ et $\vec{C}$) valent 60°.

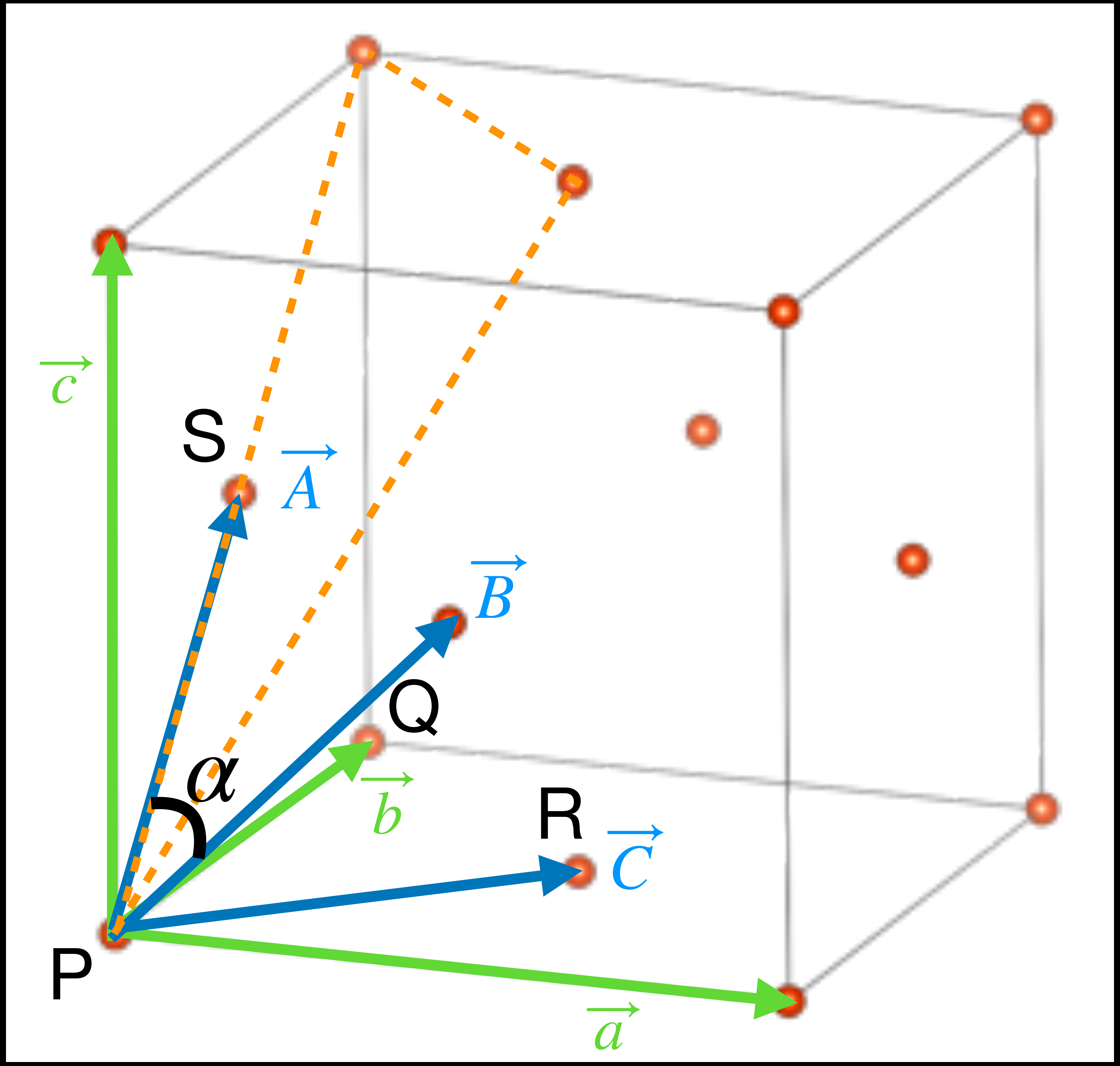
$$\|\vec{A}\| = \|\vec{B}\| = \|\vec{C}\| = A$$

$$\sin\frac{\alpha}{2} = \frac{A/2}{A} = \frac{1}{2} \quad \rightarrow \quad \frac{\alpha}{2} = 30^\circ$$

$$\rightarrow \quad \alpha = 60^\circ$$

Par symétrie:

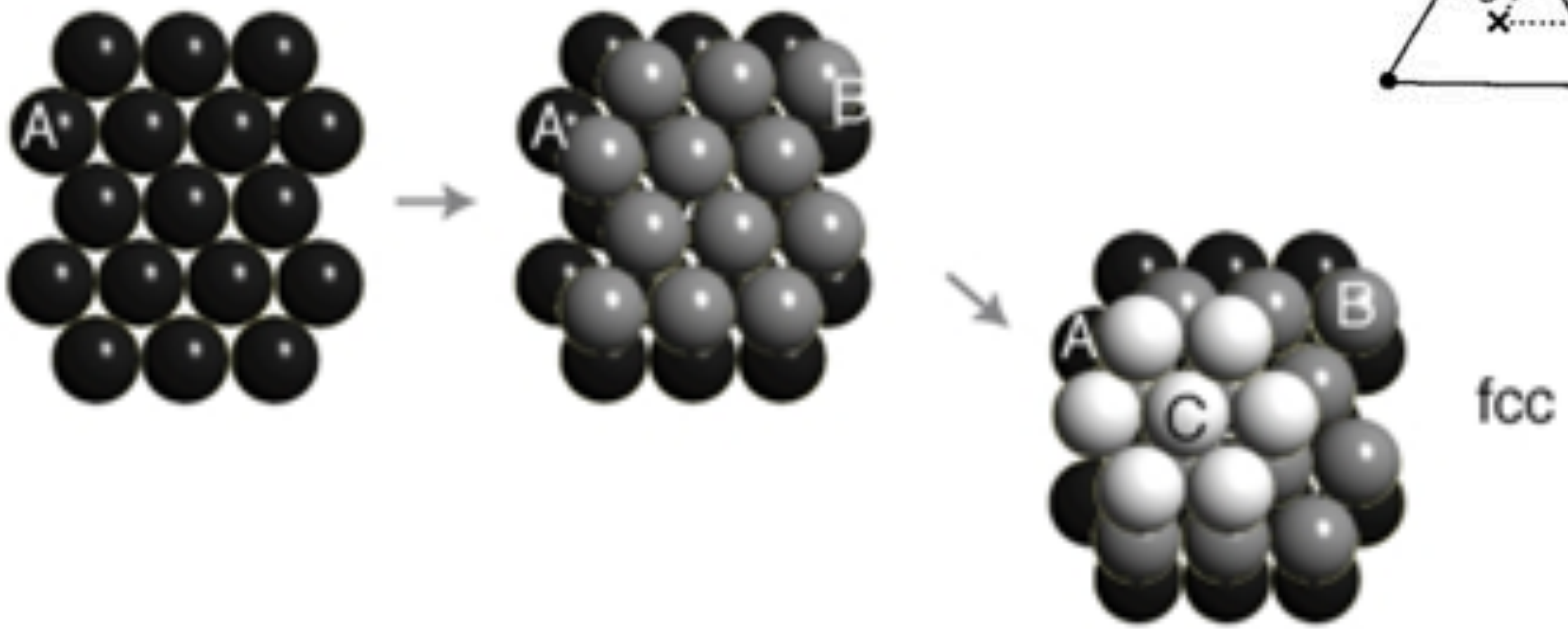
$$\rightarrow \quad \alpha = \beta = \gamma = 60^\circ$$

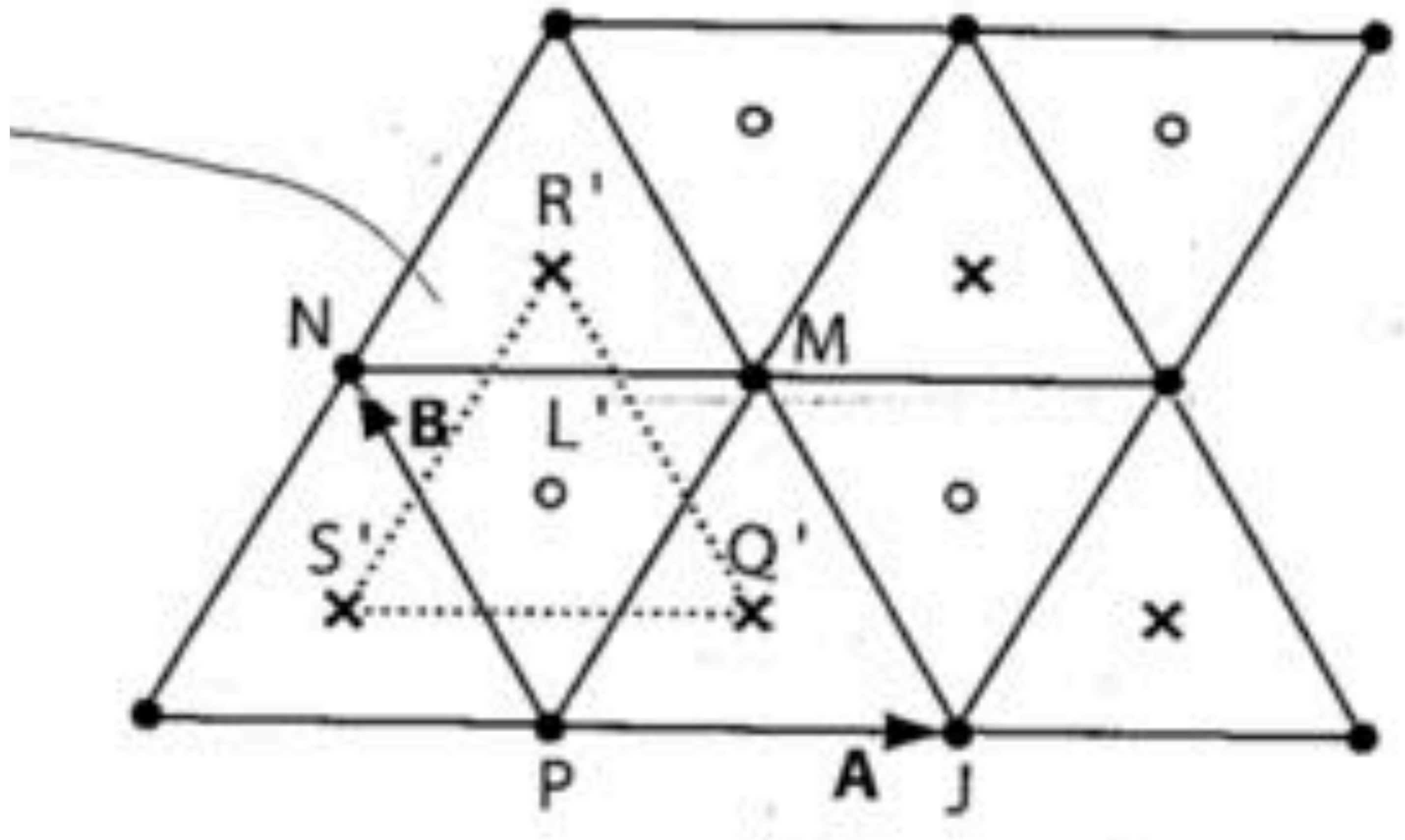


C) La maille primitive d’un cfc est rhomboédrique!

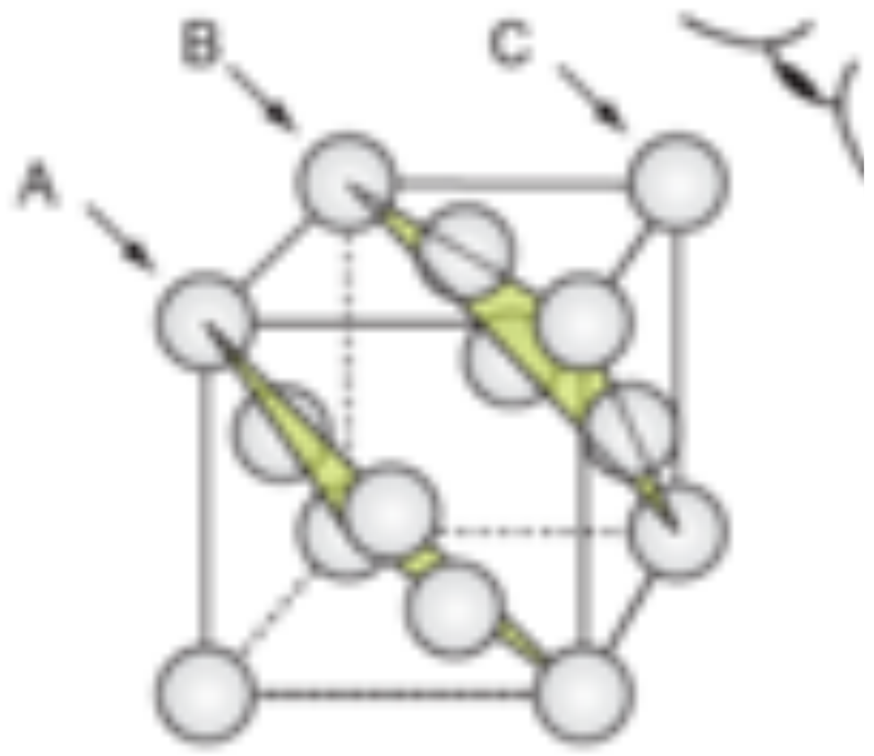
La structure du réseau cubique F peut être décrite comme un empilement selon les axes de type [111] de couches de type (111) identiques mais décalées. On dit alors que l’empilement est ABCABC.

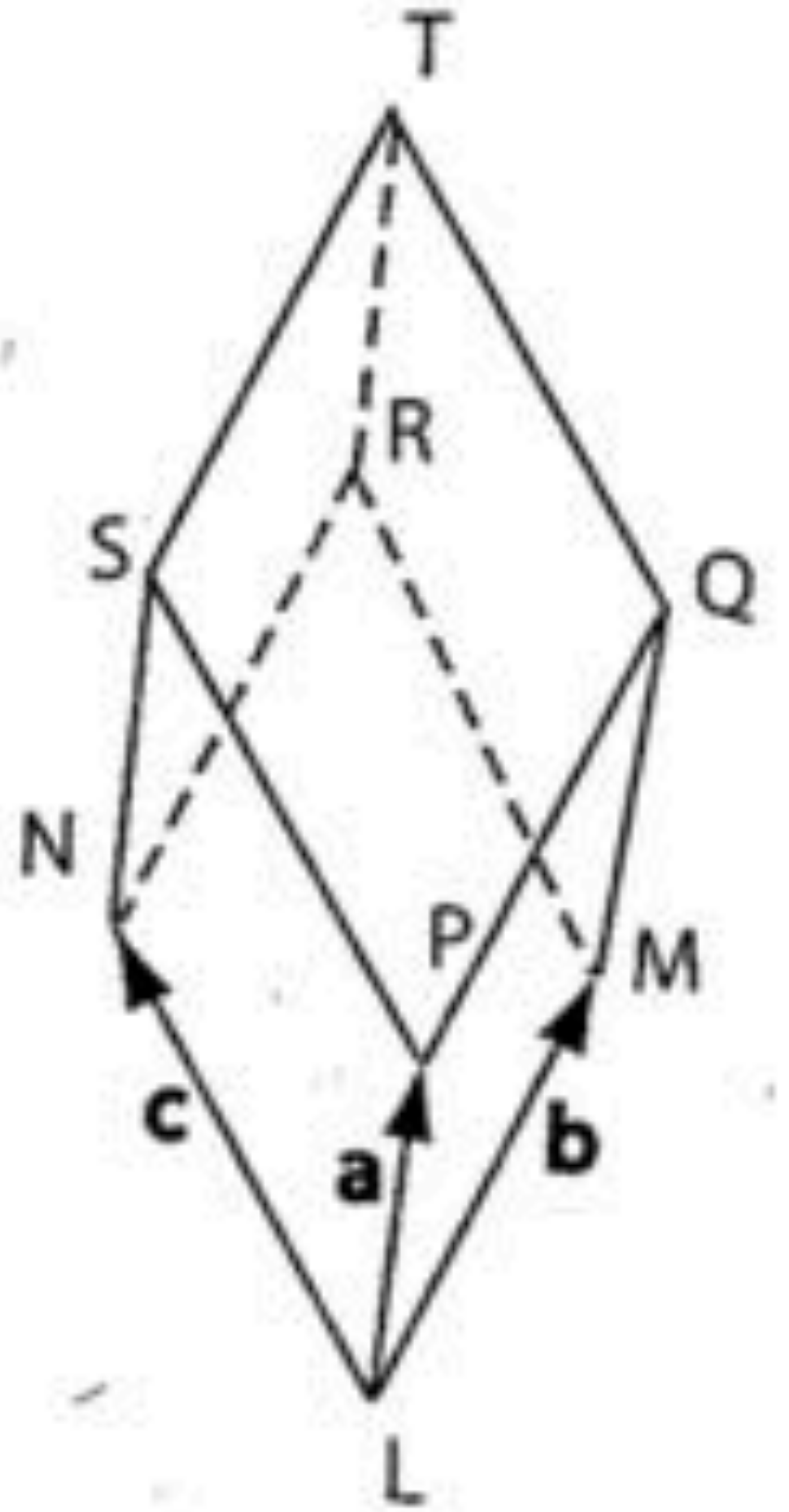
3. Dessiner l’empilement de la structure cfc dans la direction [111]. Comparer avec la figure 2b.





(c)





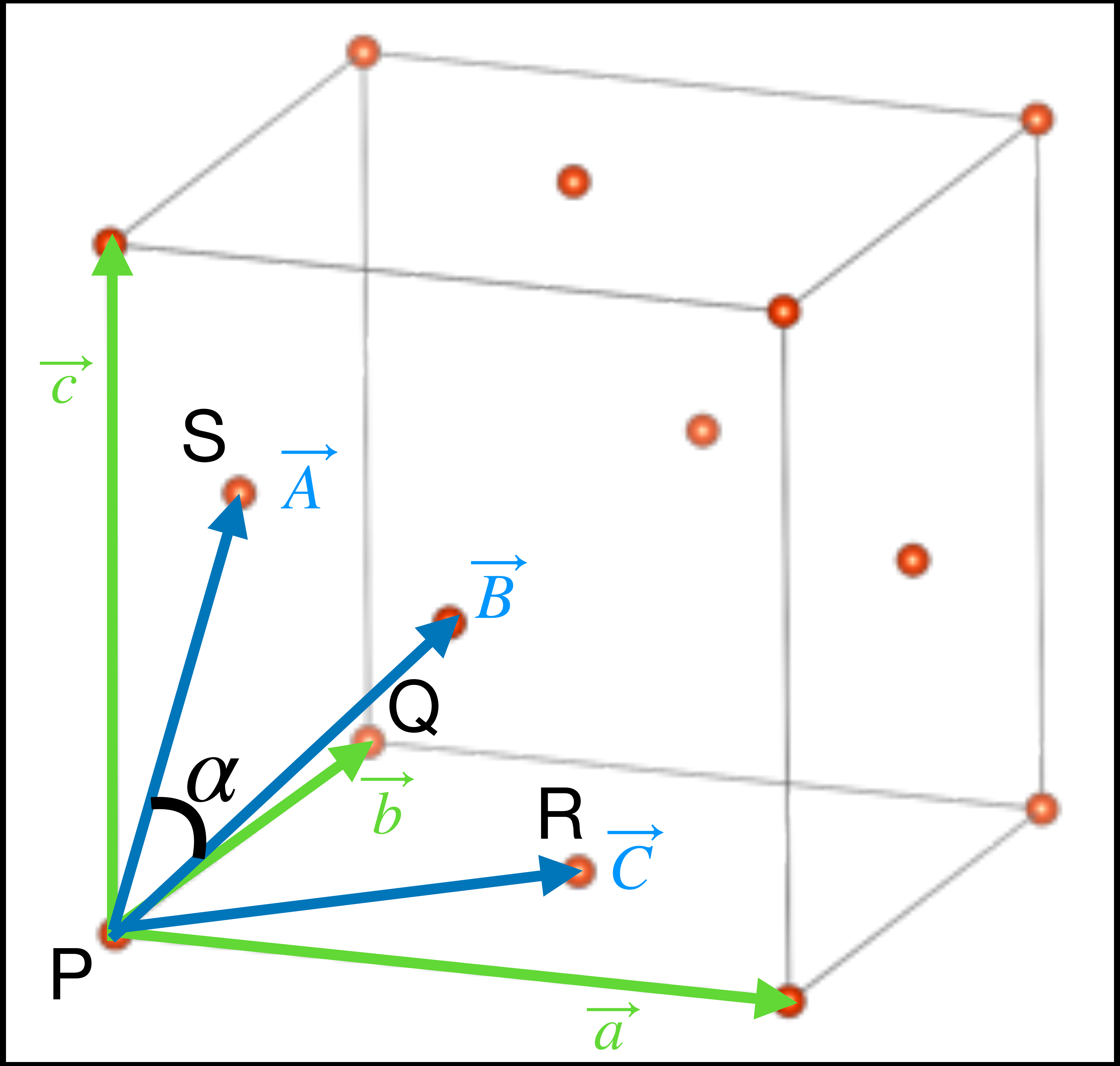
C) La maille primitive d'un cfc est rhomboédrique!

4. Ecrire les vecteurs $\overrightarrow{A}$, $\overrightarrow{B}$ et $\overrightarrow{C}$ en fonction de $\overrightarrow{a}$, $\overrightarrow{b}$ et $\overrightarrow{c}$

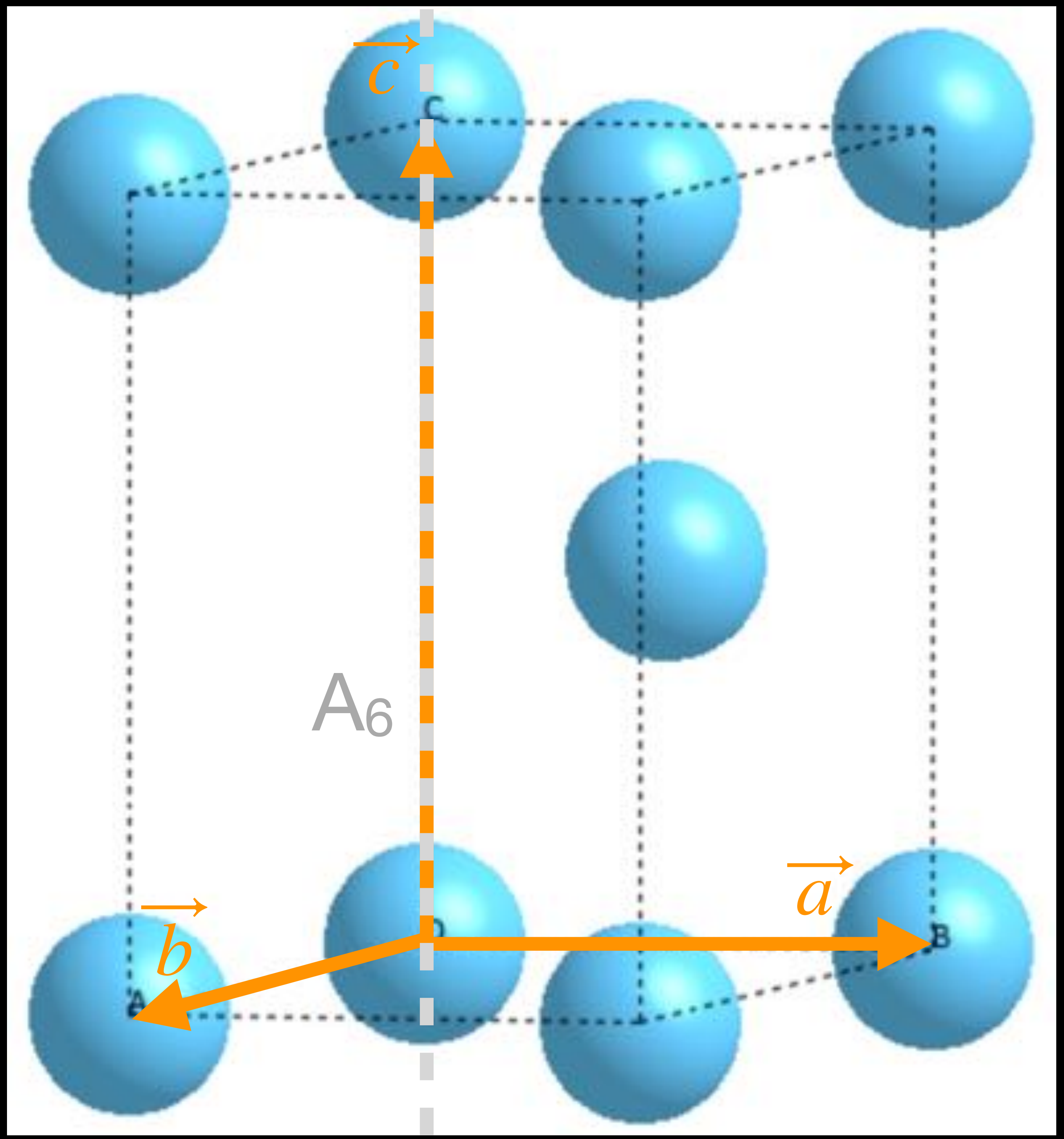
$$\overrightarrow{A} = \frac{1}{2}(\overrightarrow{b} + \overrightarrow{c})$$

$$\overrightarrow{B} = \frac{1}{2}(\overrightarrow{a} + \overrightarrow{c})$$

$$\overrightarrow{C} = \frac{1}{2}(\overrightarrow{a} + \overrightarrow{b})$$



5. Représenter la structure hexagonale compacte et donner le nombre d'atomes par maille.

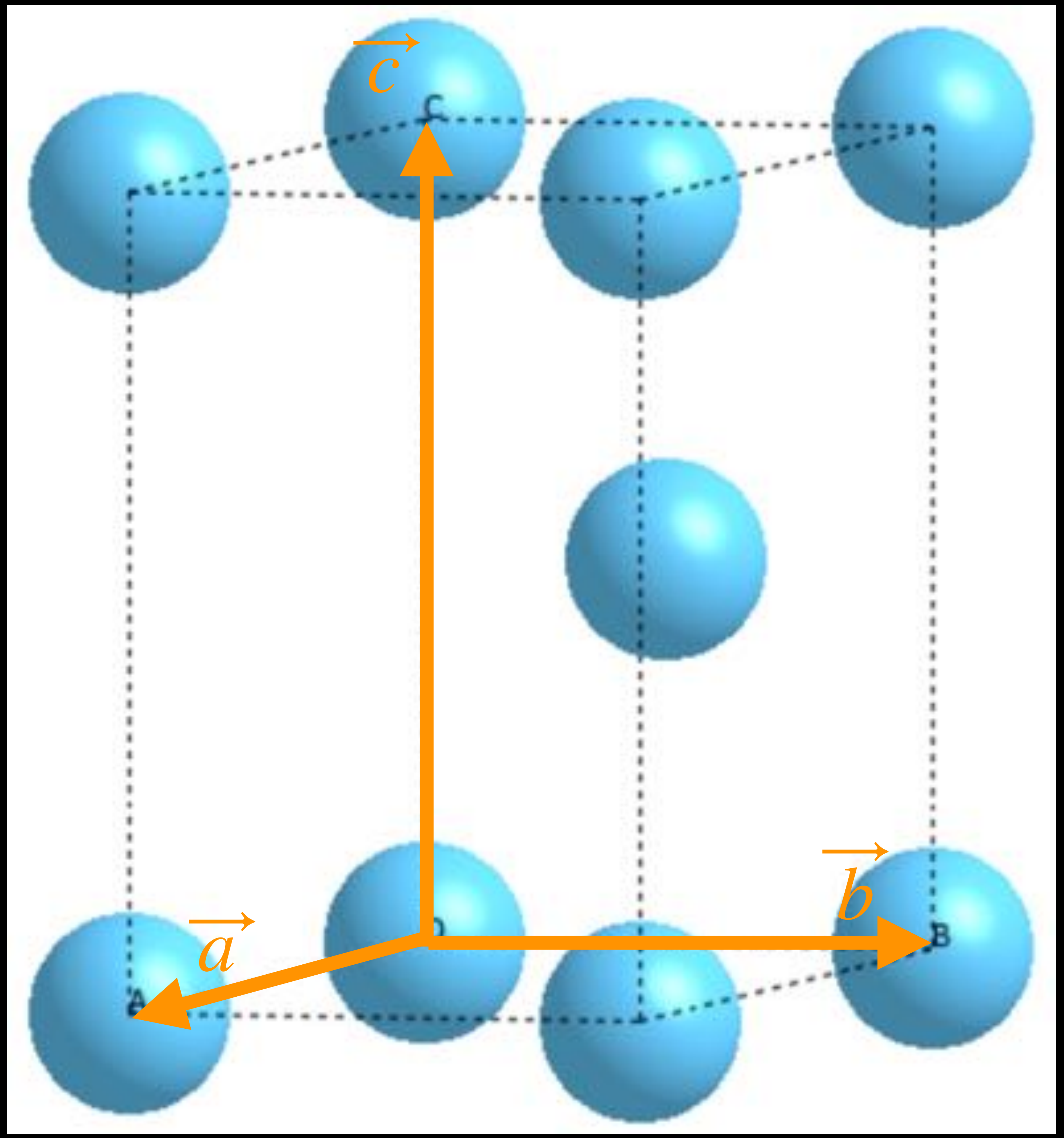


4 × 1/6 + 4 x 1/12 + 1 = 2 atomes/maille

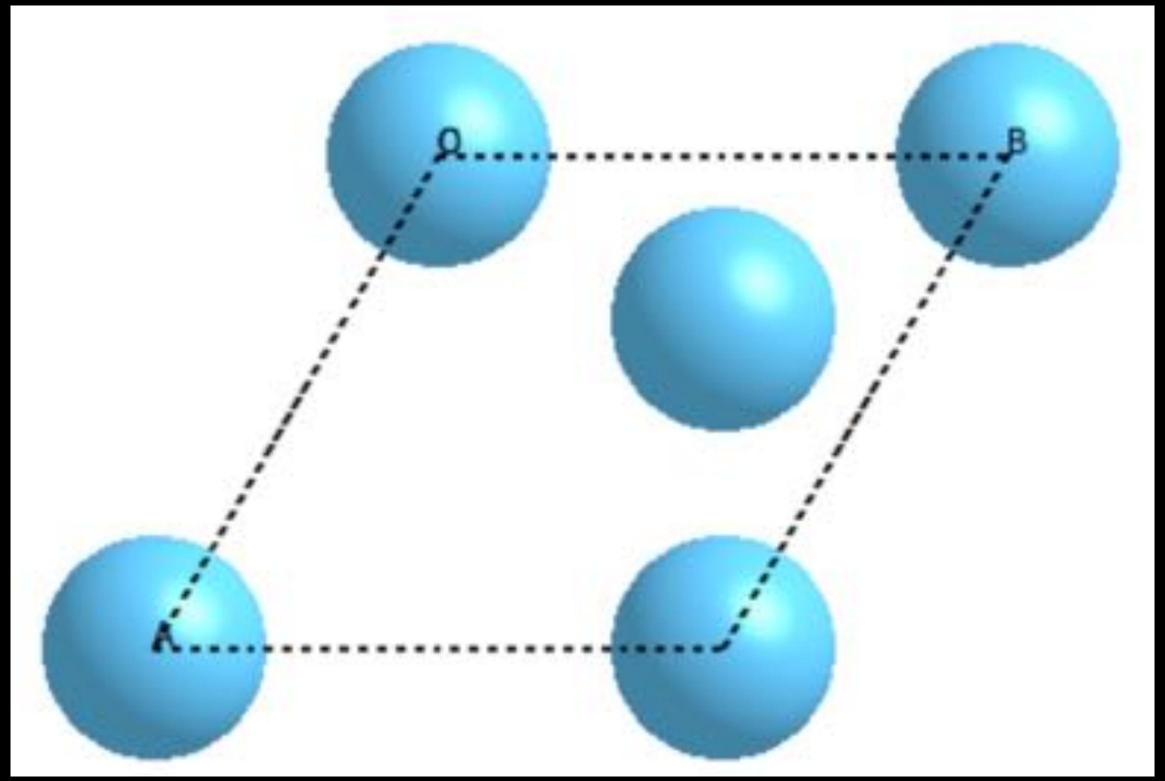
- Maille du système hexagonal : prisme droit à base losange
- $\|\vec{a}\| = \|\vec{b}\| \neq \|\vec{c}\|$
- $(\vec{a}, \vec{c}) = (\vec{b}, \vec{c}) = \dfrac{\pi}{2}$ et $(\vec{a}, \vec{b}) = \dfrac{2\pi}{3} = 120°$
- axe de symétrie d'ordre 6

6. Proposer des positions atomiques permettant de définir parfaitement la structure.

Vue de profil

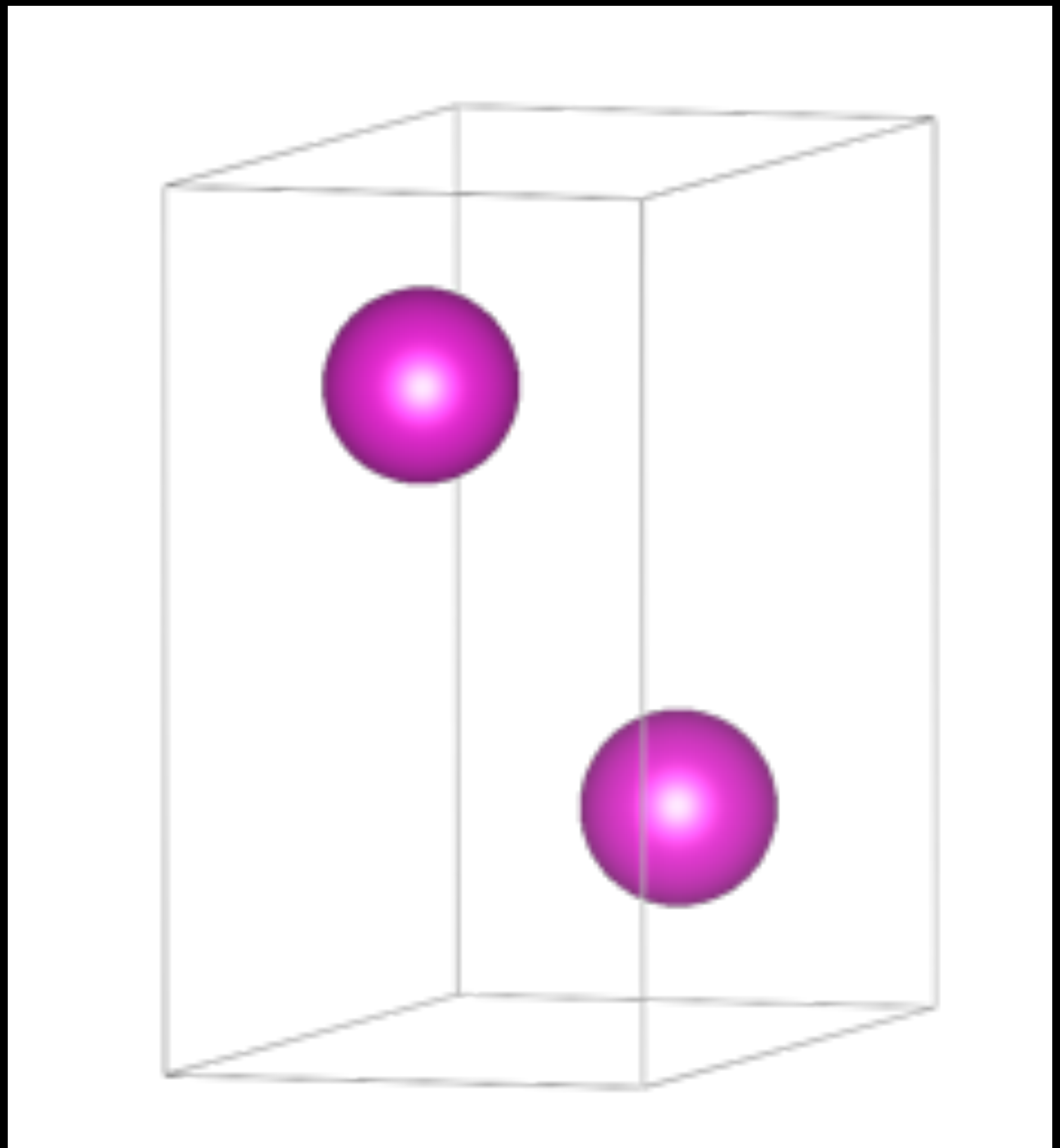


Vue de dessus



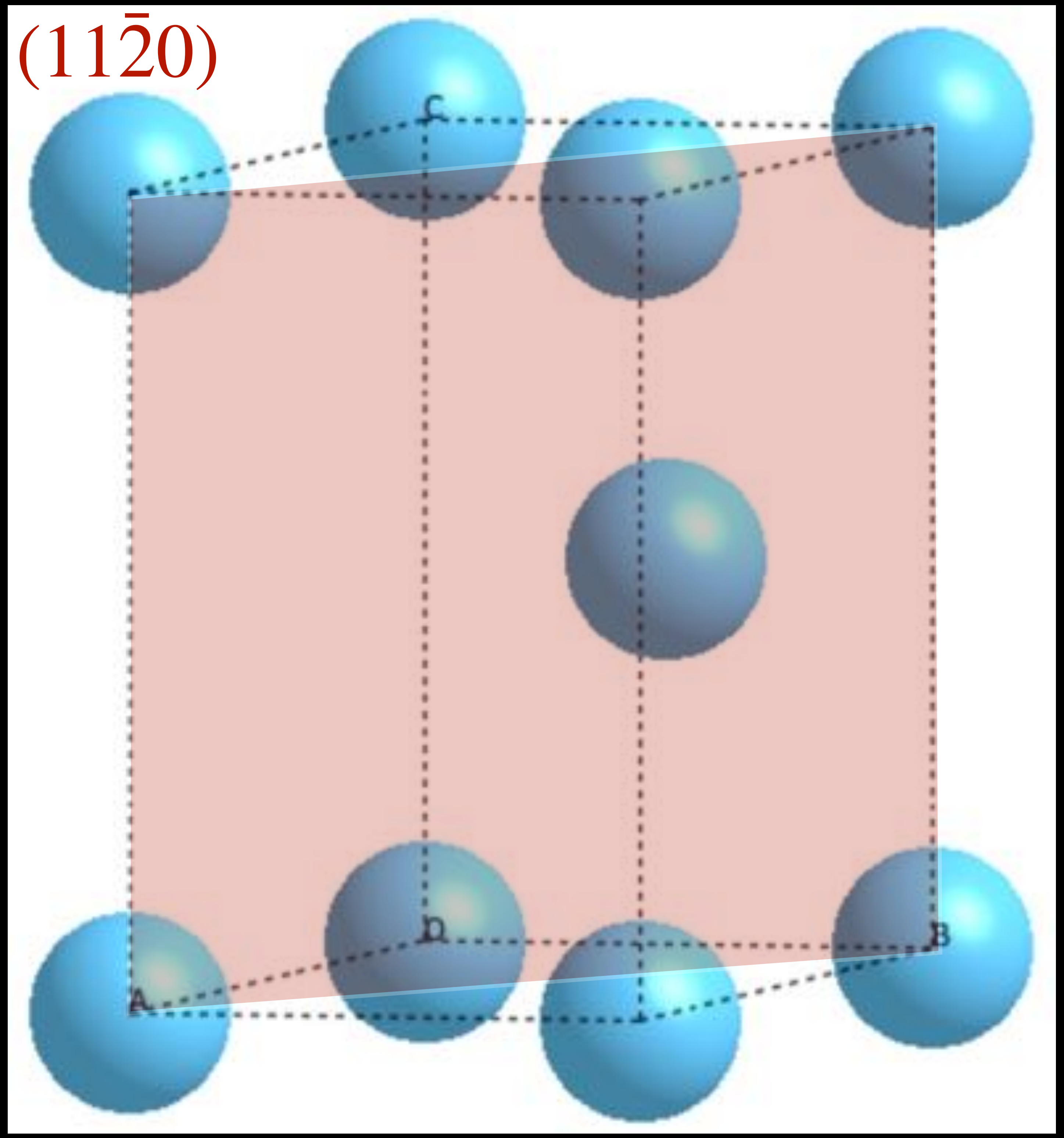
2 atomes par maille :
(0, 0, 0)
(1/3, 2/3, 1/2)

2 atomes par maille :
(1/3, 2/3, 1/4)
(2/3, 1/3, 3/4)

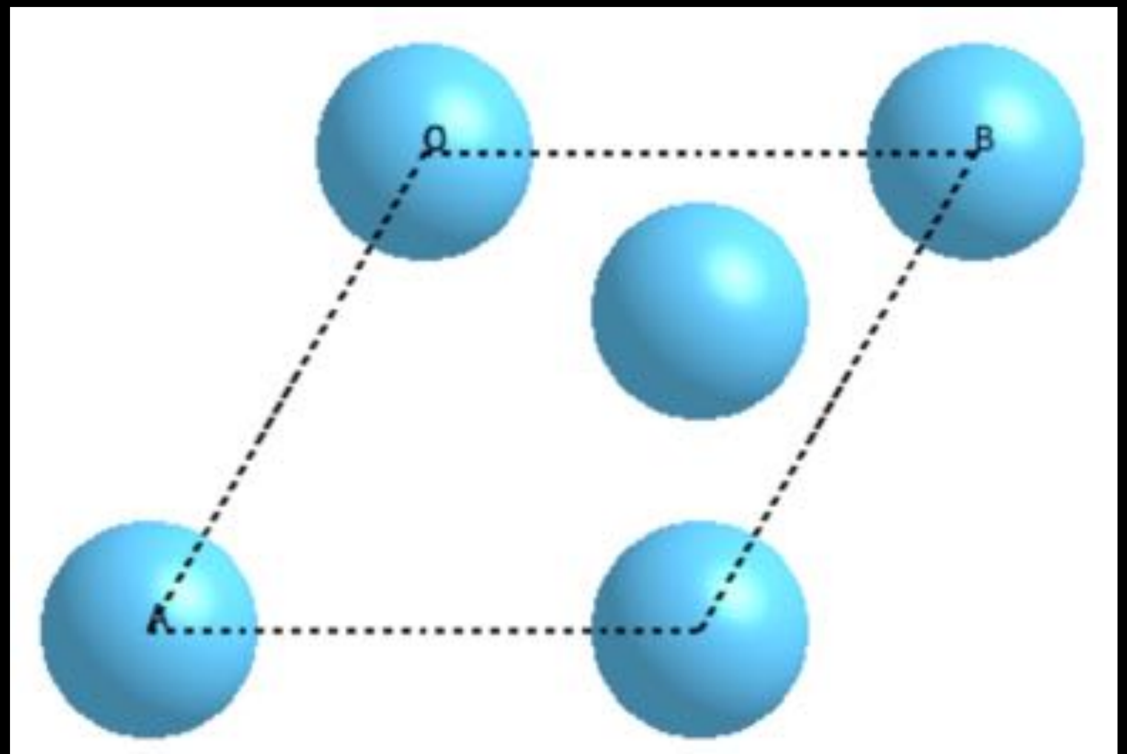


7. Calculer le rapport $\frac{c}{a}$ de la structure hexagonale compacte.

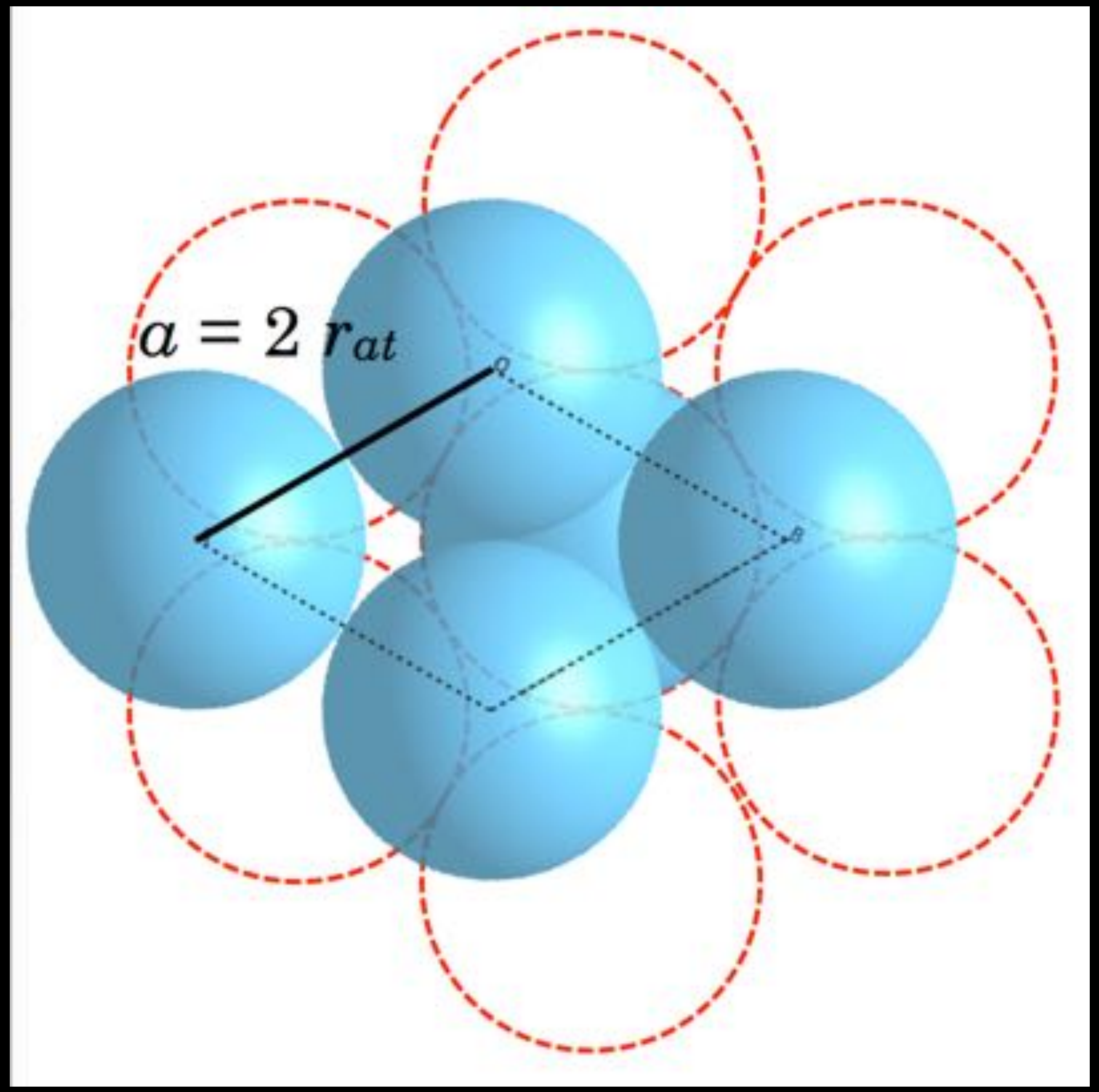
Vue de profil



Vue de dessus

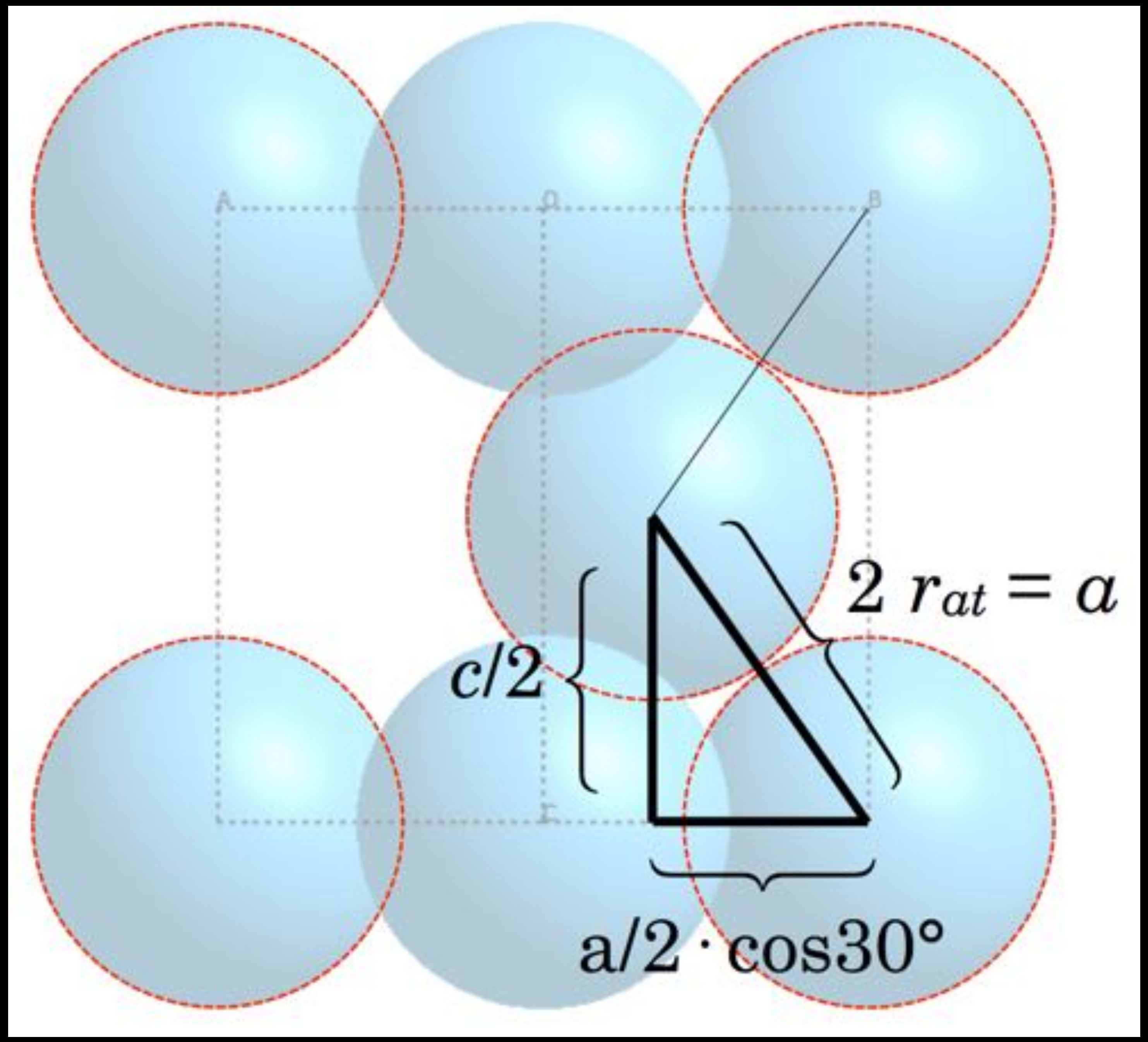


Vue de dessus, modèle de sphères pleines



Les cercles en pointillés
représentent les atomes en z = 1/2

Vue de latérale perpendiculaire au plan $(11\bar{2}0)$



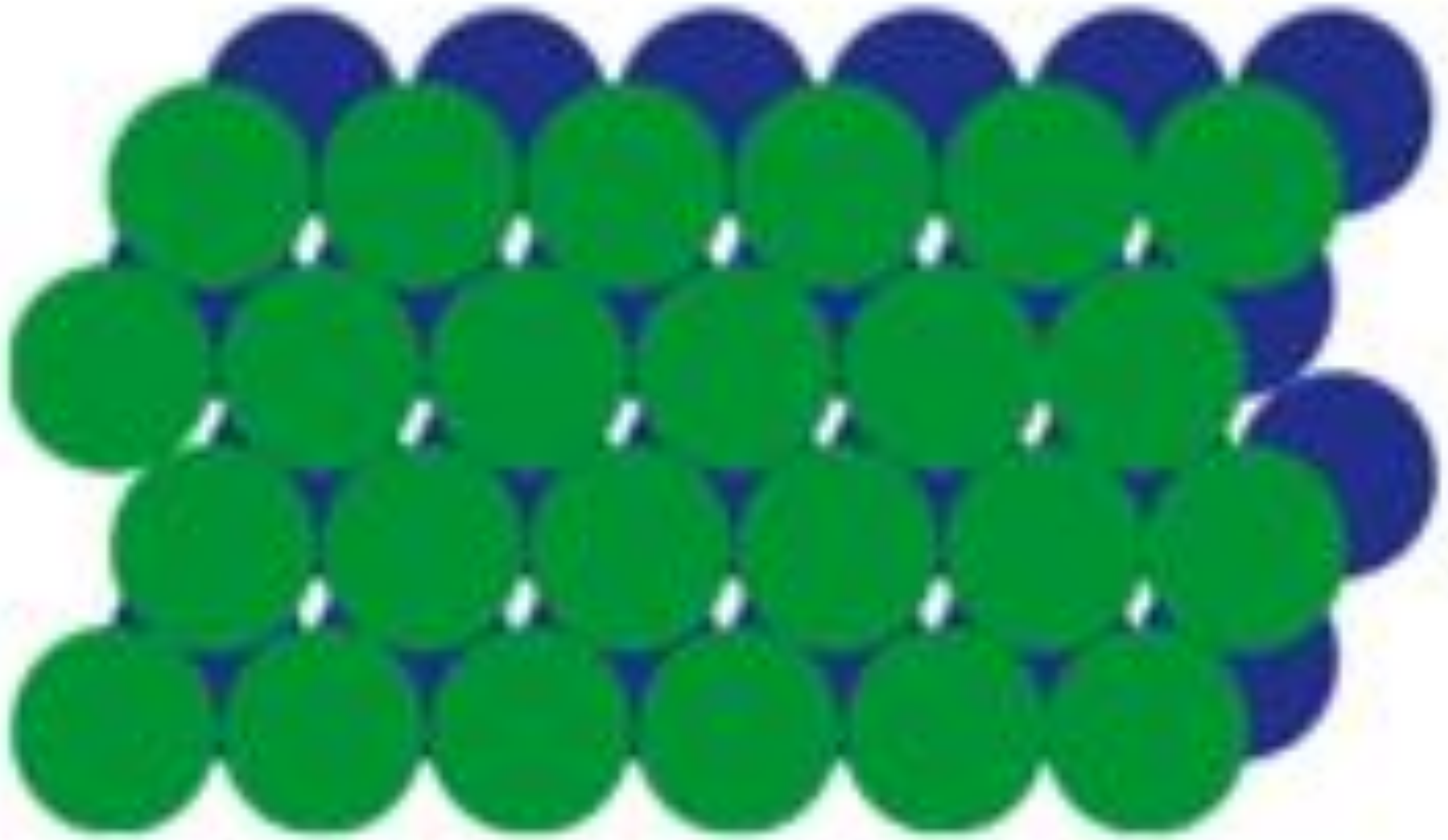
Les atomes cerclés en pointillés sont dans le même plan $(11\bar{2}0)$

Pythagore et on détermine le rapport c/a :

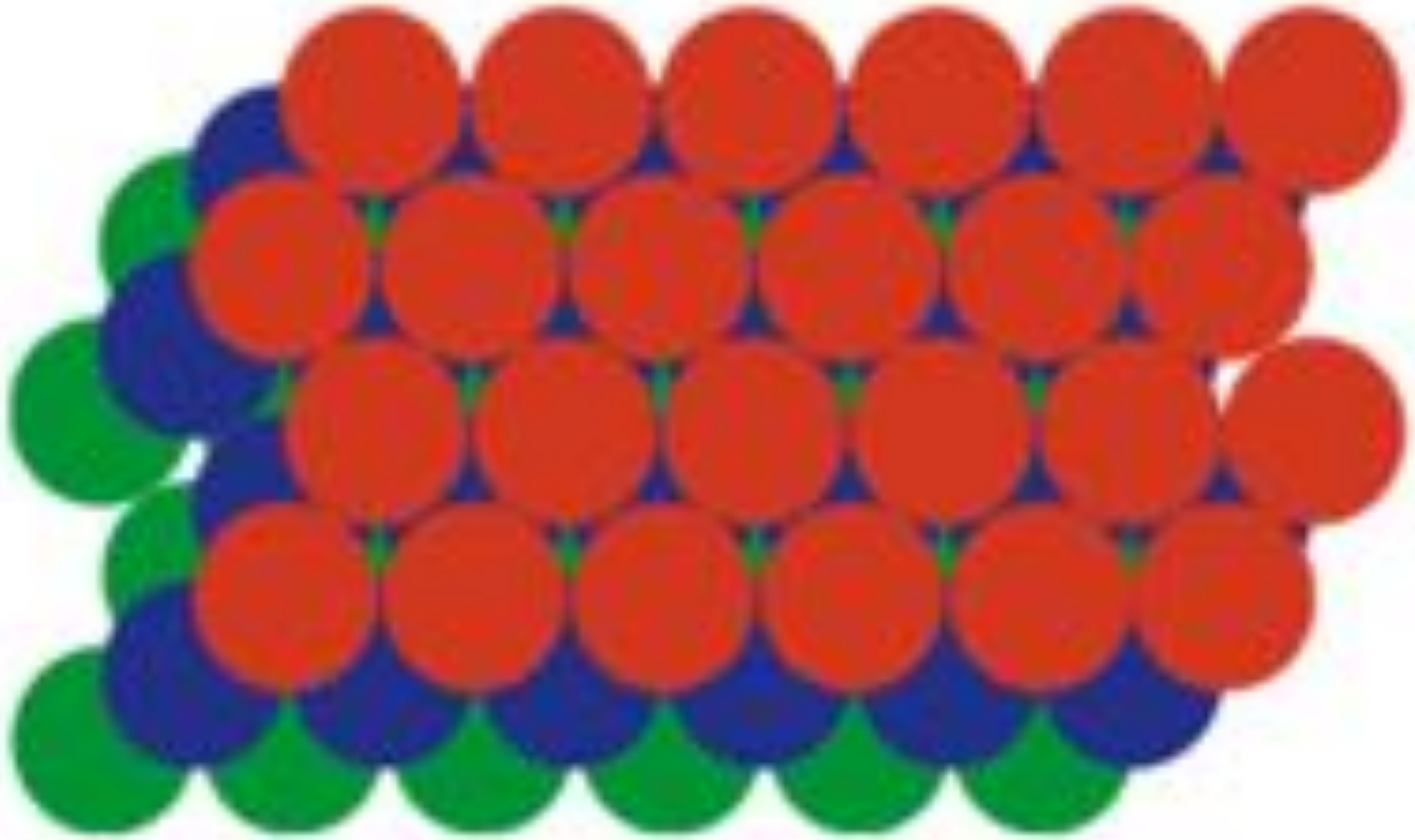
$$a^2 = (\frac{c}{2})^2 + \frac{a^2}{(2\frac{\sqrt{3}}{2})^2} = \frac{c^2}{4} + \frac{a^2}{3}$$

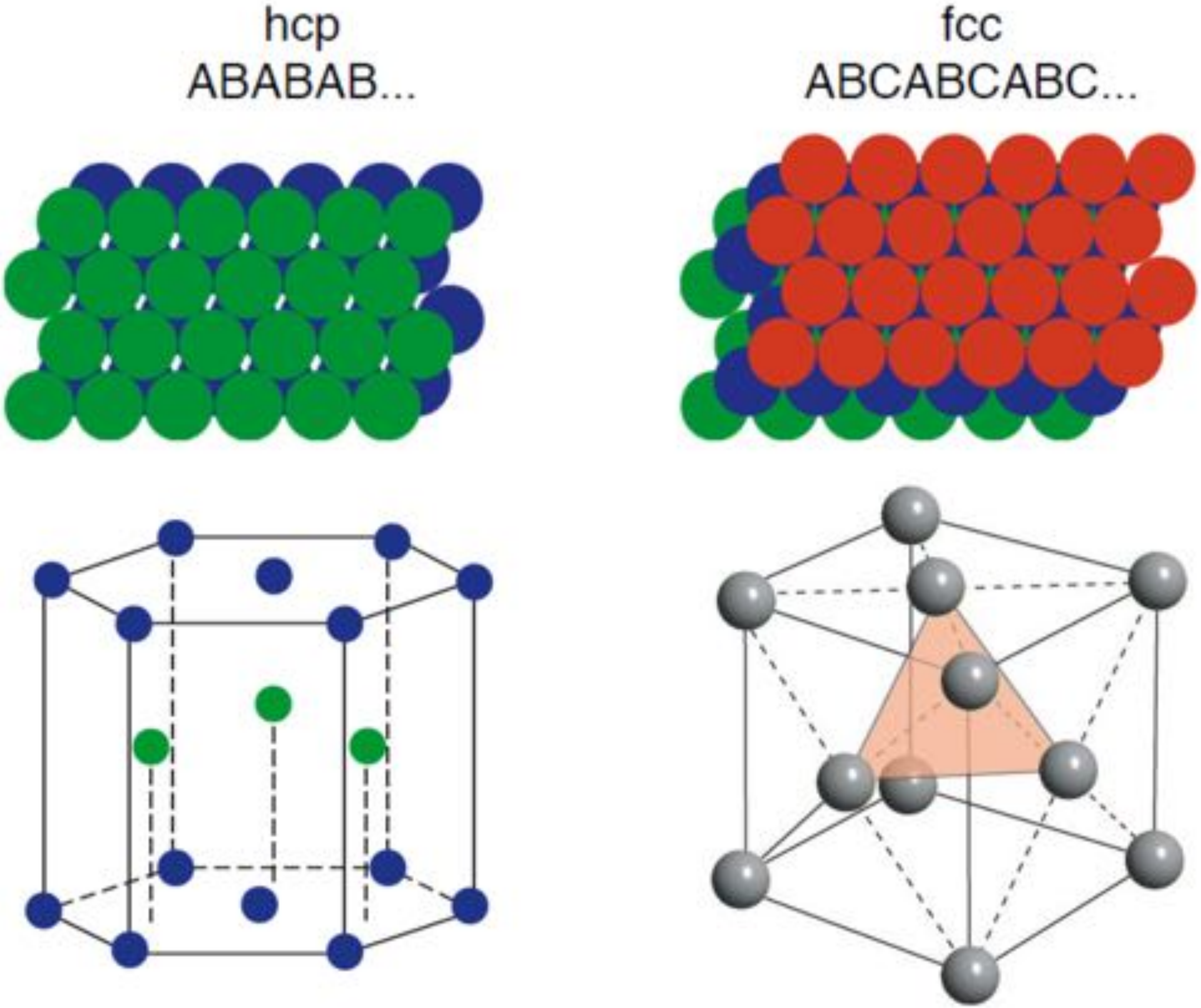
$$\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}}$$

hcp
ABABAB...



fcc
ABCABCABC...




hcp
ABABAB...
fcc
ABCABCABC...

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.

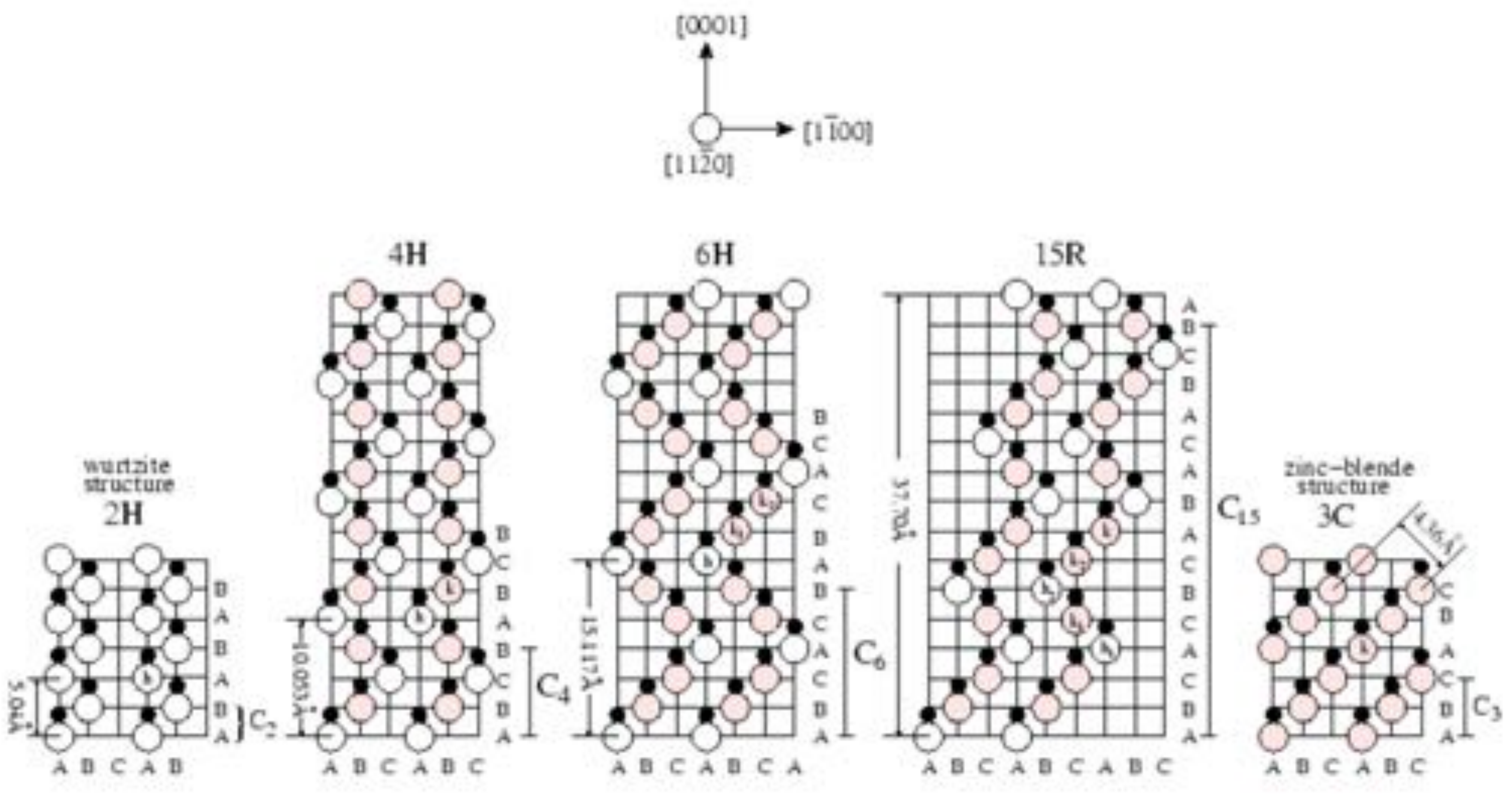


FIGURE 4 – Les polytypes principaux de SiC.

D) Le cas diabolique 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.

Polytype 4H:

- 1 séquence ABC ou CBA: cubique

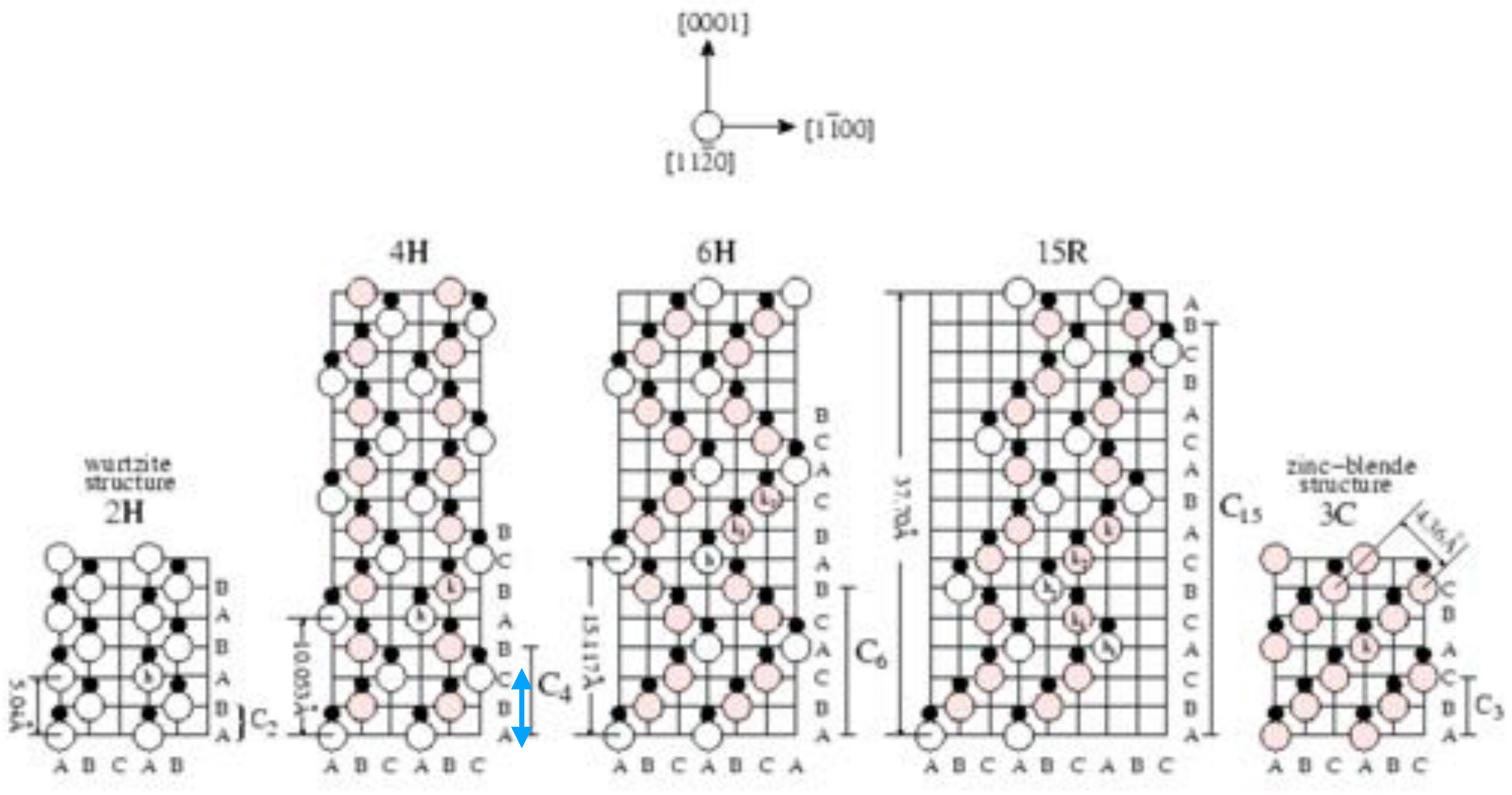


FIGURE 4 – Les polytypes principaux de SiC.

D) Le cas diabolique 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.

<u>Polytype 4H:</u>

- 1 séquence ABC ou CBA: cubique

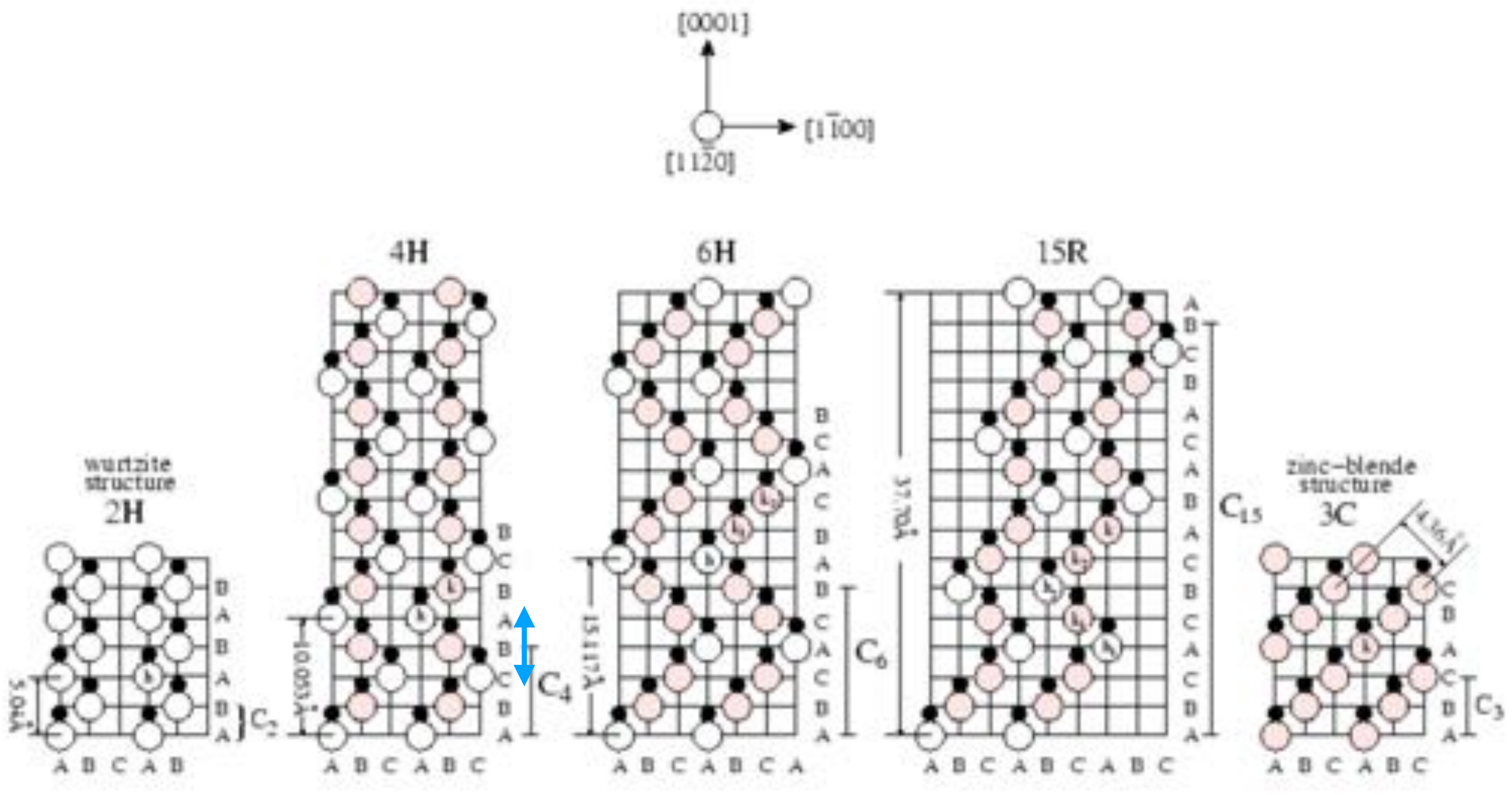


FIGURE 4 – Les polytypes principaux de SiC.

D) Le cas diabolique 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.

Polytype 4H:

- 1 séquence ABC ou CBA: cubique

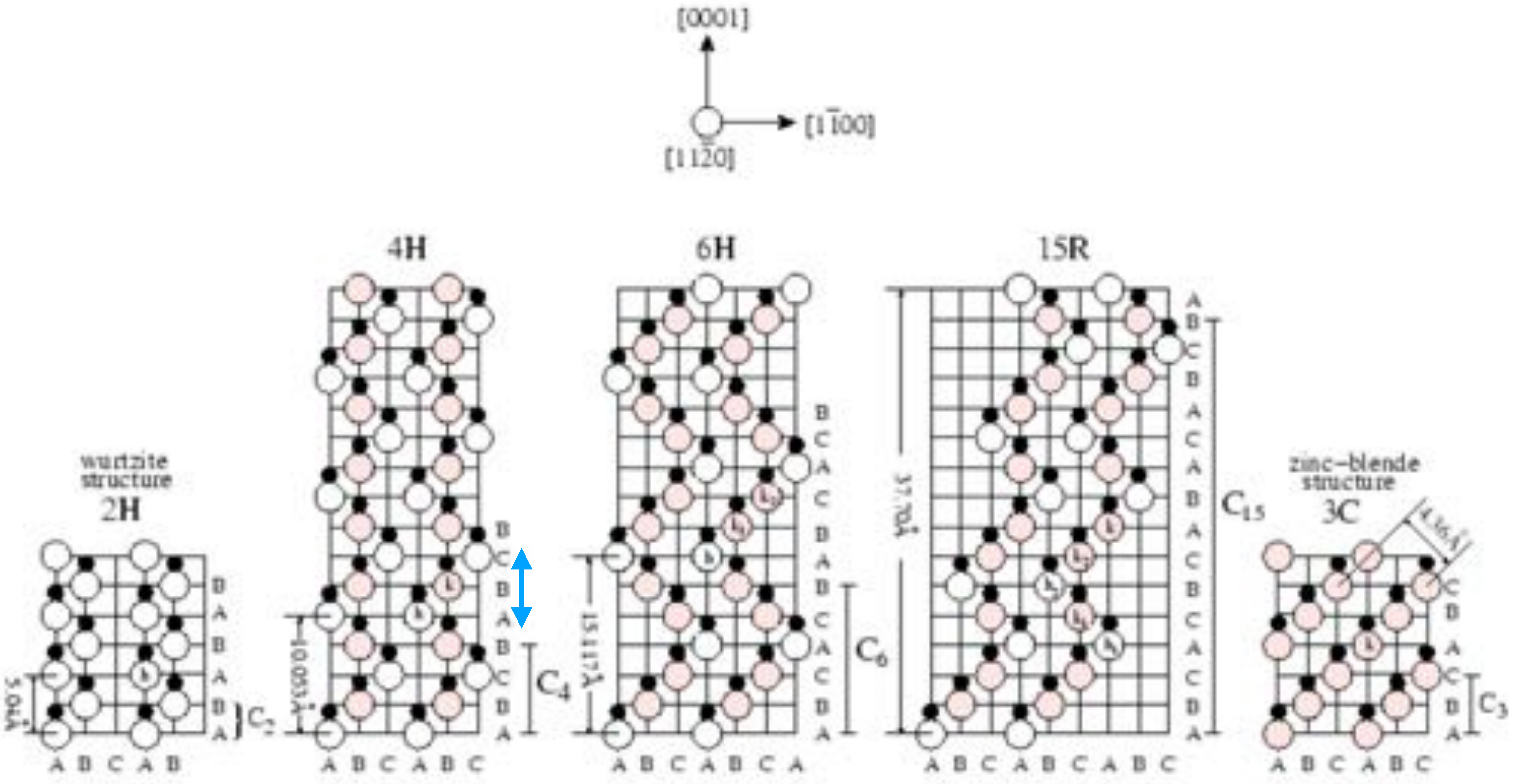


FIGURE 4 – Les polytypes principaux de SiC.

D) Le cas diabolique 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.

<u>Polytype 4H:</u>
- 1 séquence ABC ou CBA: cubique
- 1 séquence BCB ou BAB: hexagonal

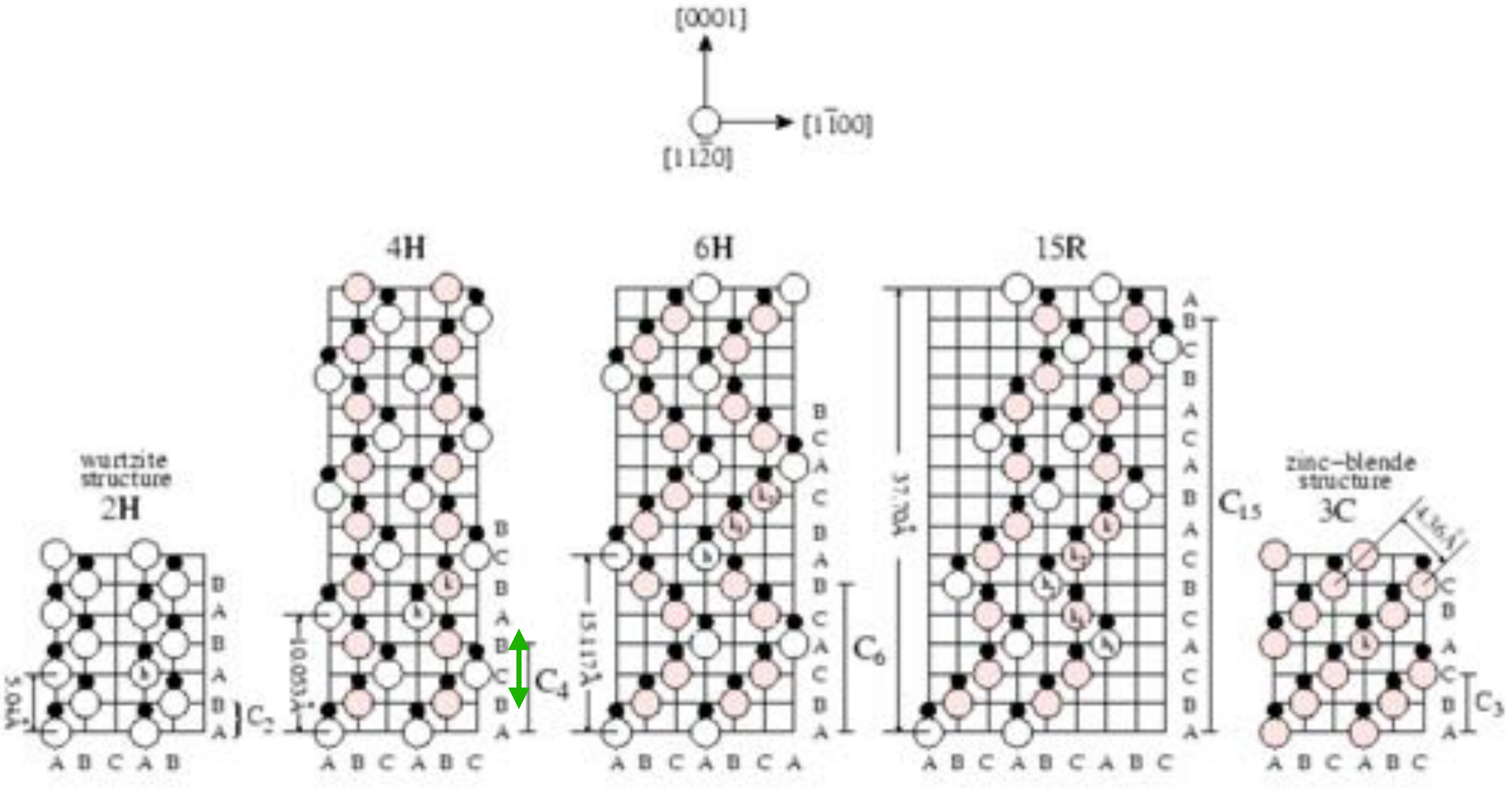


FIGURE 4 – Les polytypes principaux de SiC.

D) Le cas diabolique 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.

<u>Polytype 4H:</u>
- 1 séquence ABC ou CBA: cubique
- 1 séquence BCB ou BAB: hexagonal

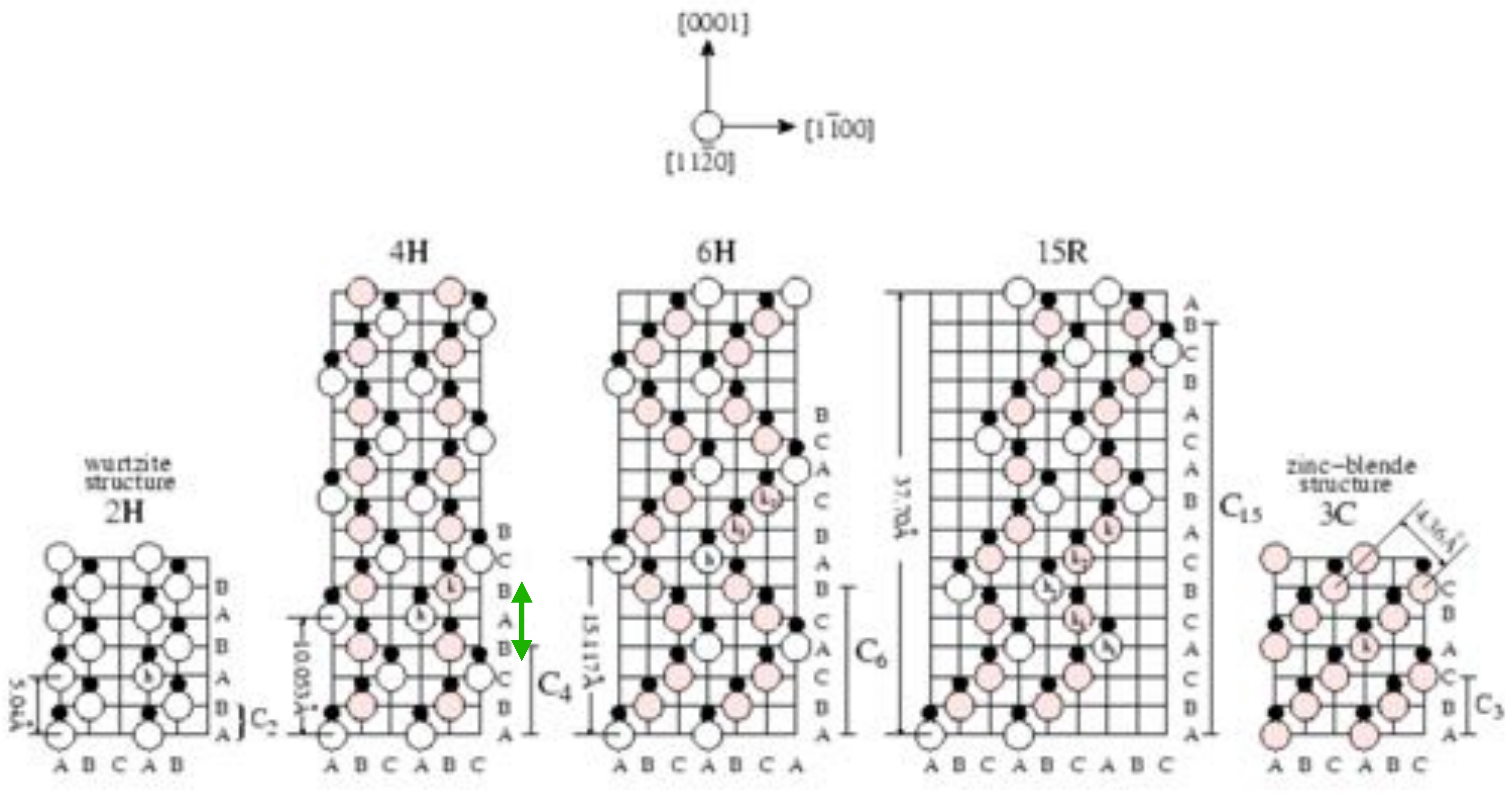


FIGURE 4 – Les polytypes principaux de SiC.

D) Le cas diabolique 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.

Polytype 4H:

- 1 séquence ABC ou CBA: cubique
- 1 séquence BCB ou BAB: hexagonal

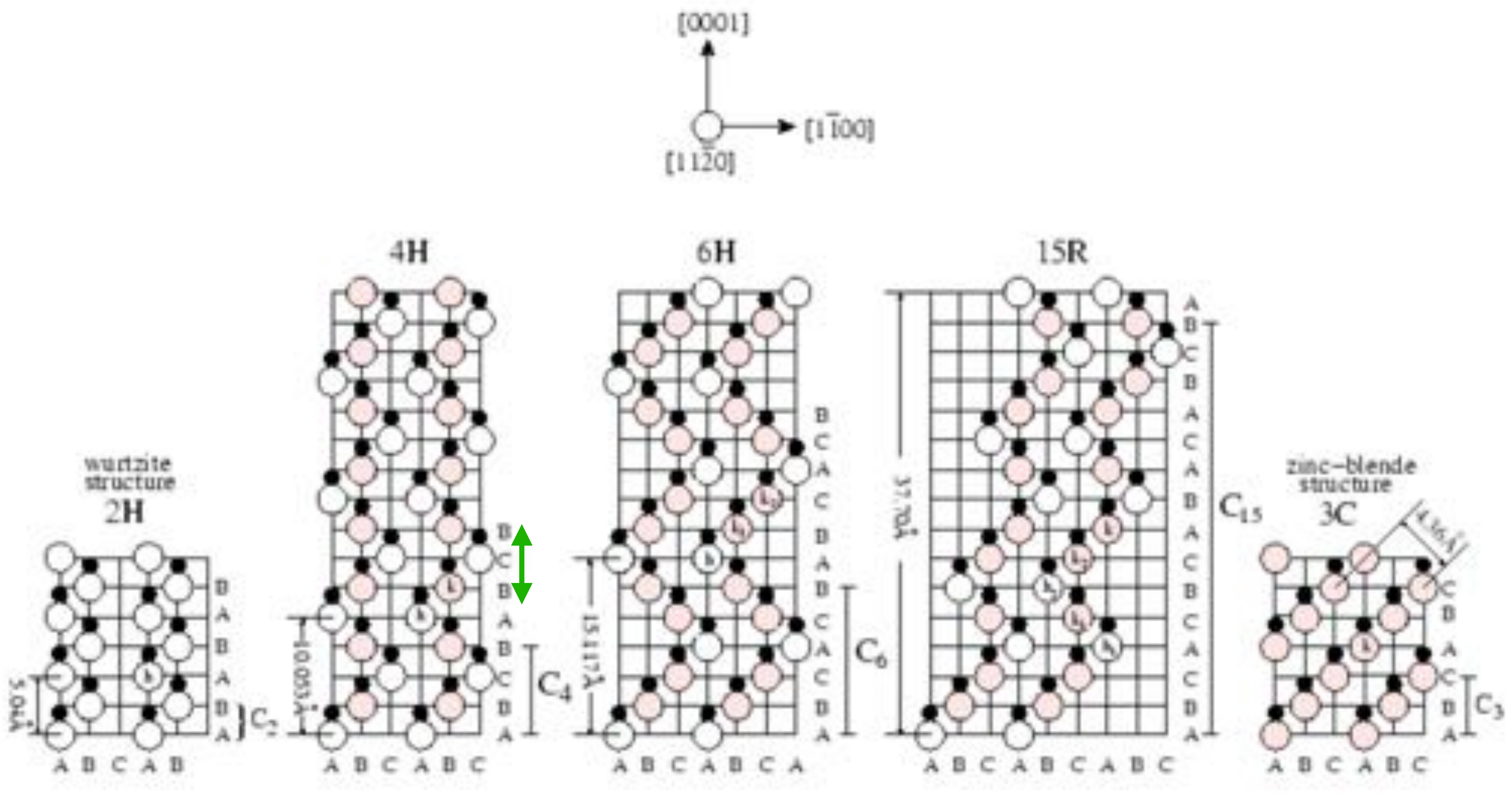


FIGURE 4 – Les polytypes principaux de SiC.

D) Le cas diabolique 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.

Polytype 4H:

- 1 séquence ABC ou CBA: cubique
- 1 séquence BCB ou BAB: hexagonal

Polytype 6H:

- 1 séquence ABCA ou ACBA: cubique

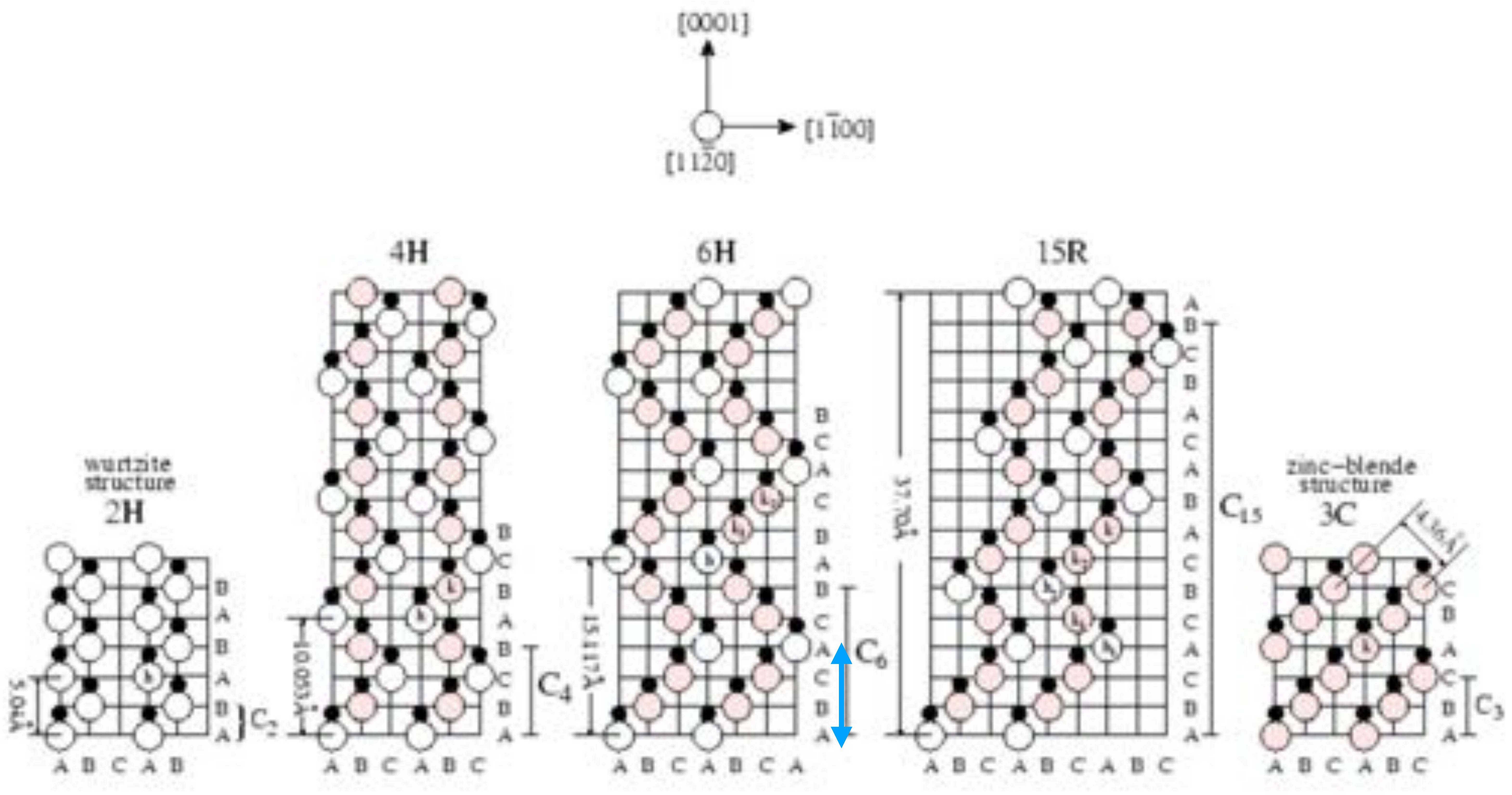


FIGURE 4 – Les polytypes principaux de SiC.

D) Le cas diabolique 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.

<u>Polytype 4H:</u>
- 1 séquence ABC ou CBA: cubique
- 1 séquence BCB ou BAB: hexagonal

<u>Polytype 6H:</u>
- 1 séquence ABCA ou ACBA: cubique

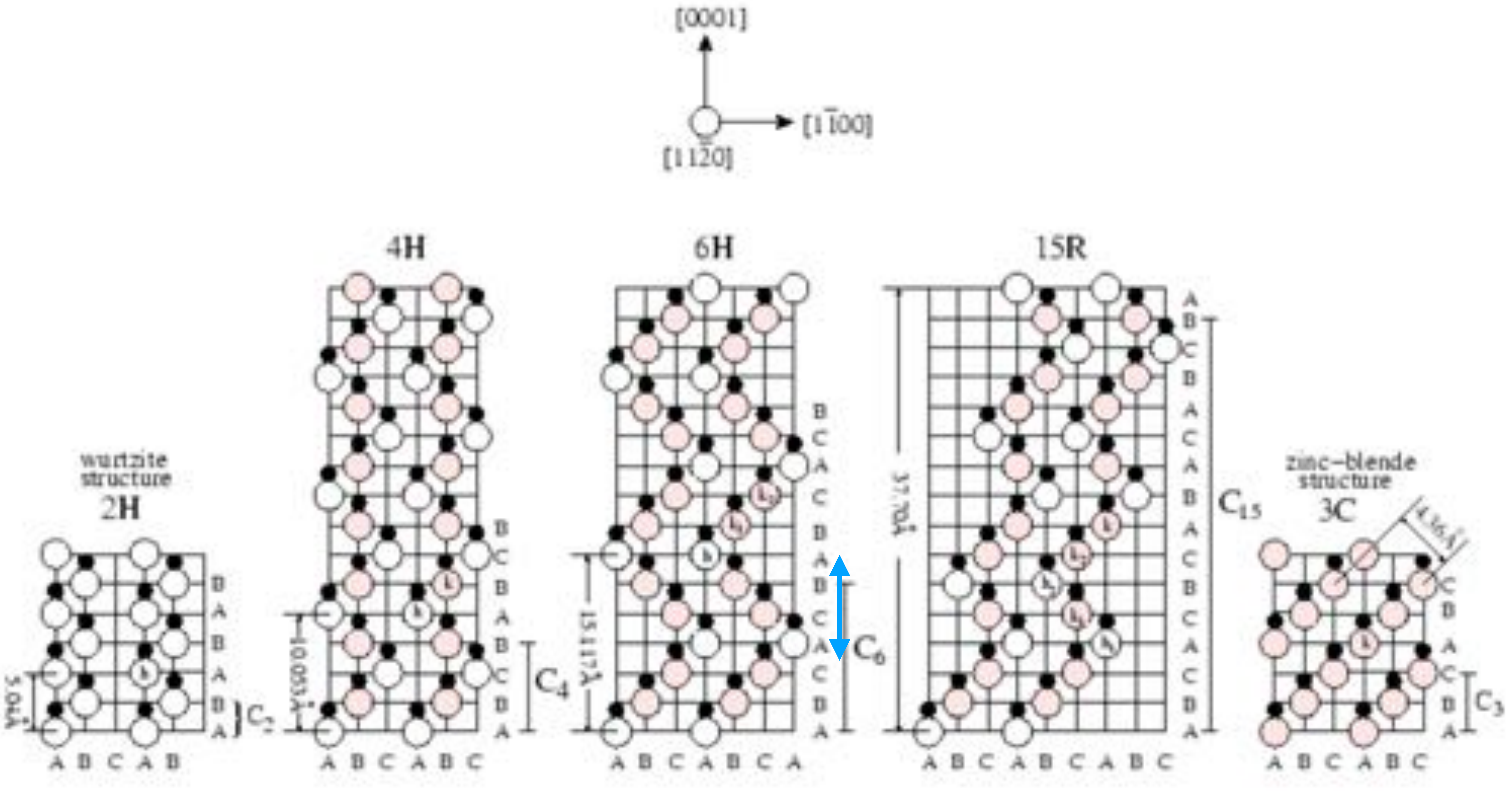


FIGURE 4 – Les polytypes principaux de SiC.

D) Le cas diabolique 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.

Polytype 4H:

- 1 séquence ABC ou CBA: cubique
- 1 séquence BCB ou BAB: hexagonal

Polytype 6H:

- 1 séquence ABCA ou ACBA: cubique

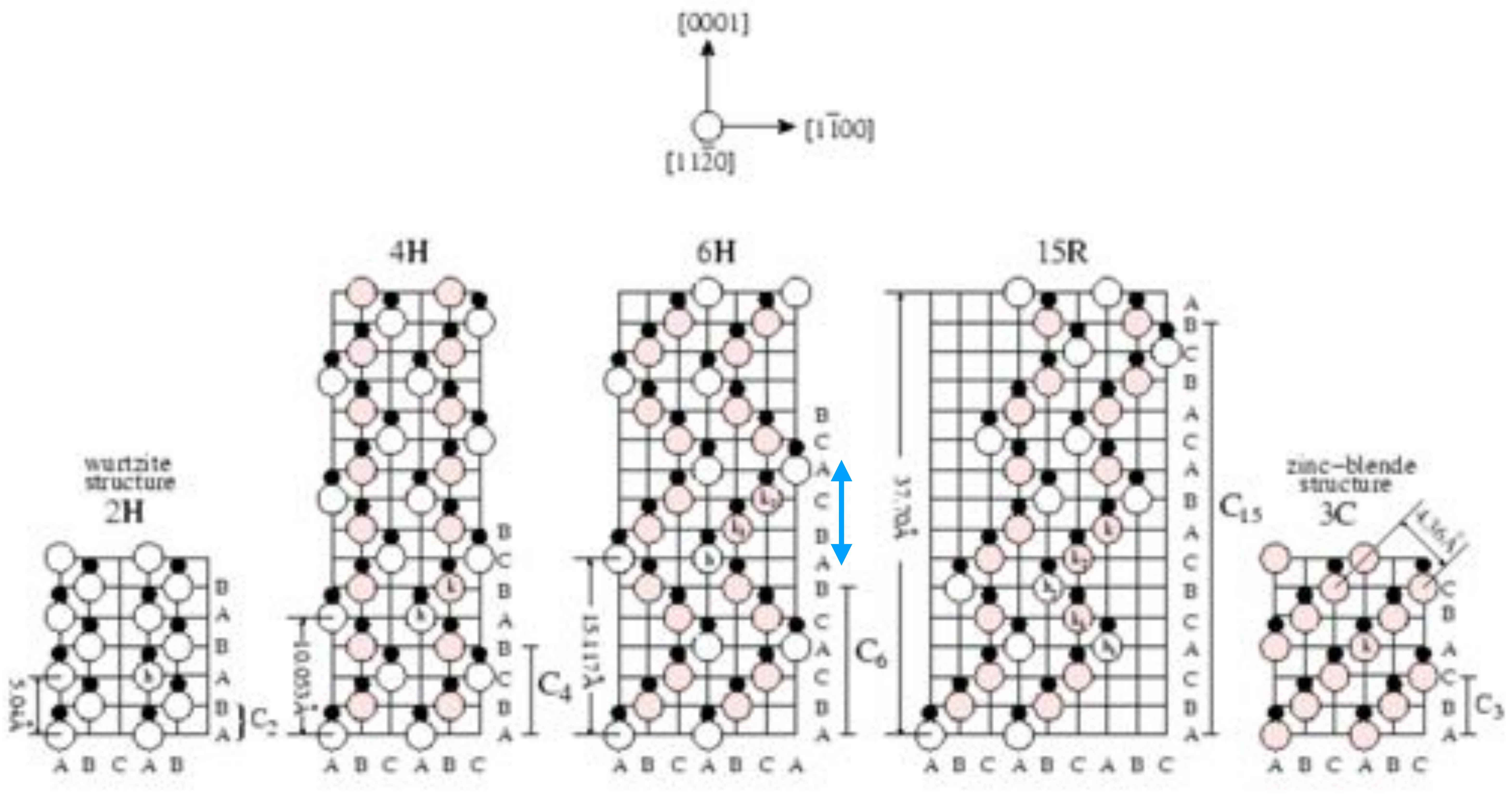


FIGURE 4 – Les polytypes principaux de SiC.

D) Le cas diabolique 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.

<u>Polytype 4H:</u>
- 1 séquence ABC ou CBA: cubique
- 1 séquence BCB ou BAB: hexagonal

<u>Polytype 6H:</u>
- 1 séquence ABCA ou ACBA: cubique
- 1 séquence BCB ou BAB: hexagonal

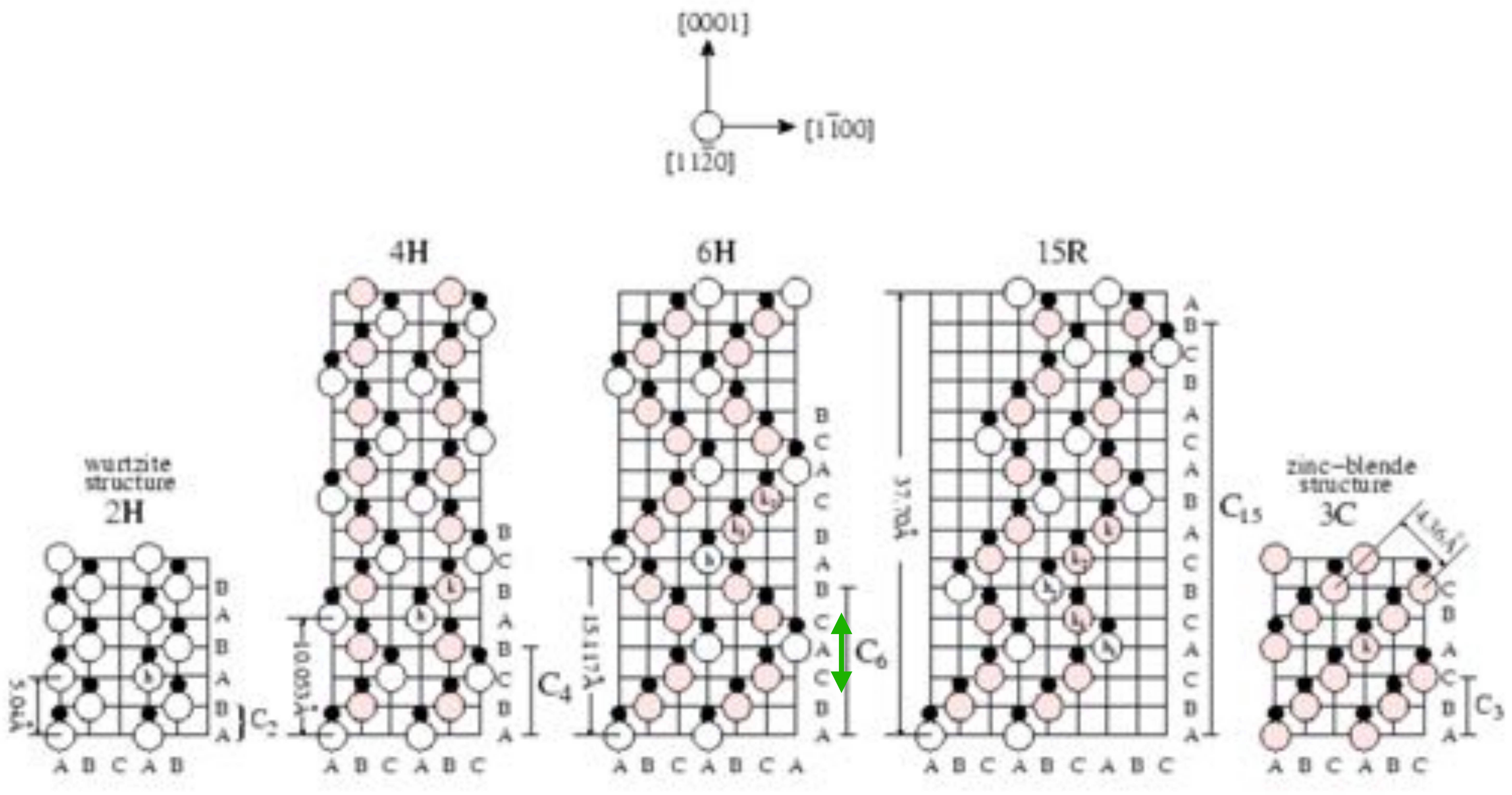


FIGURE 4 – Les polytypes principaux de SiC.

D) Le cas diabolique 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.

<u>Polytype 4H:</u>
- 1 séquence ABC ou CBA: cubique
- 1 séquence BCB ou BAB: hexagonal

<u>Polytype 6H:</u>
- 1 séquence ABCA ou ACBA: cubique
- 1 séquence BCB ou BAB: hexagonal

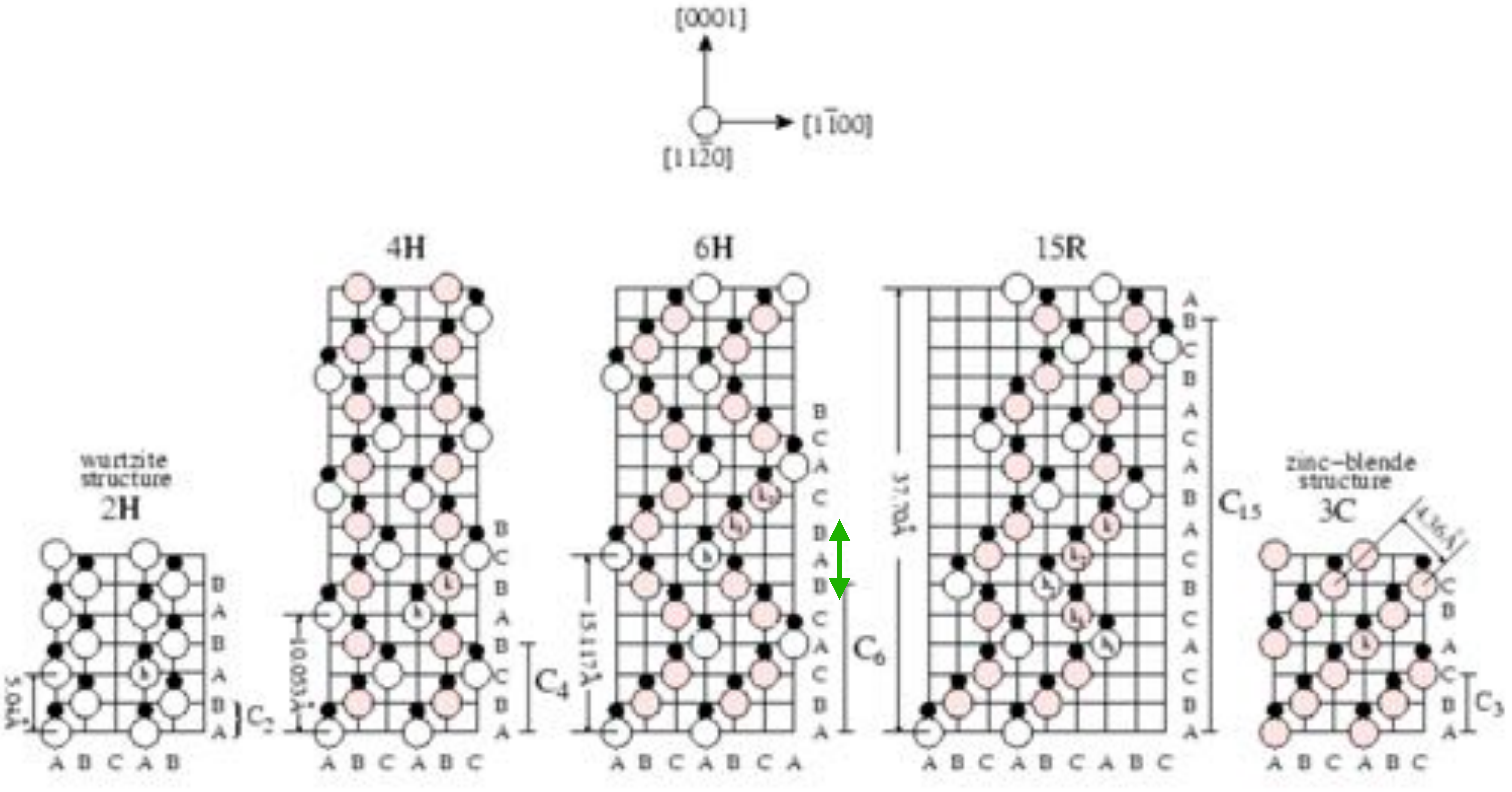


FIGURE 4 – Les polytypes principaux de SiC.

D) Le cas diabolique 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.

<u>Polytype 4H:</u>
- 1 séquence ABC ou CBA: cubique
- 1 séquence BCB ou BAB: hexagonal

<u>Polytype 6H:</u>
- 1 séquence ABCA ou ACBA: cubique
- 1 séquence BCB ou BAB: hexagonal

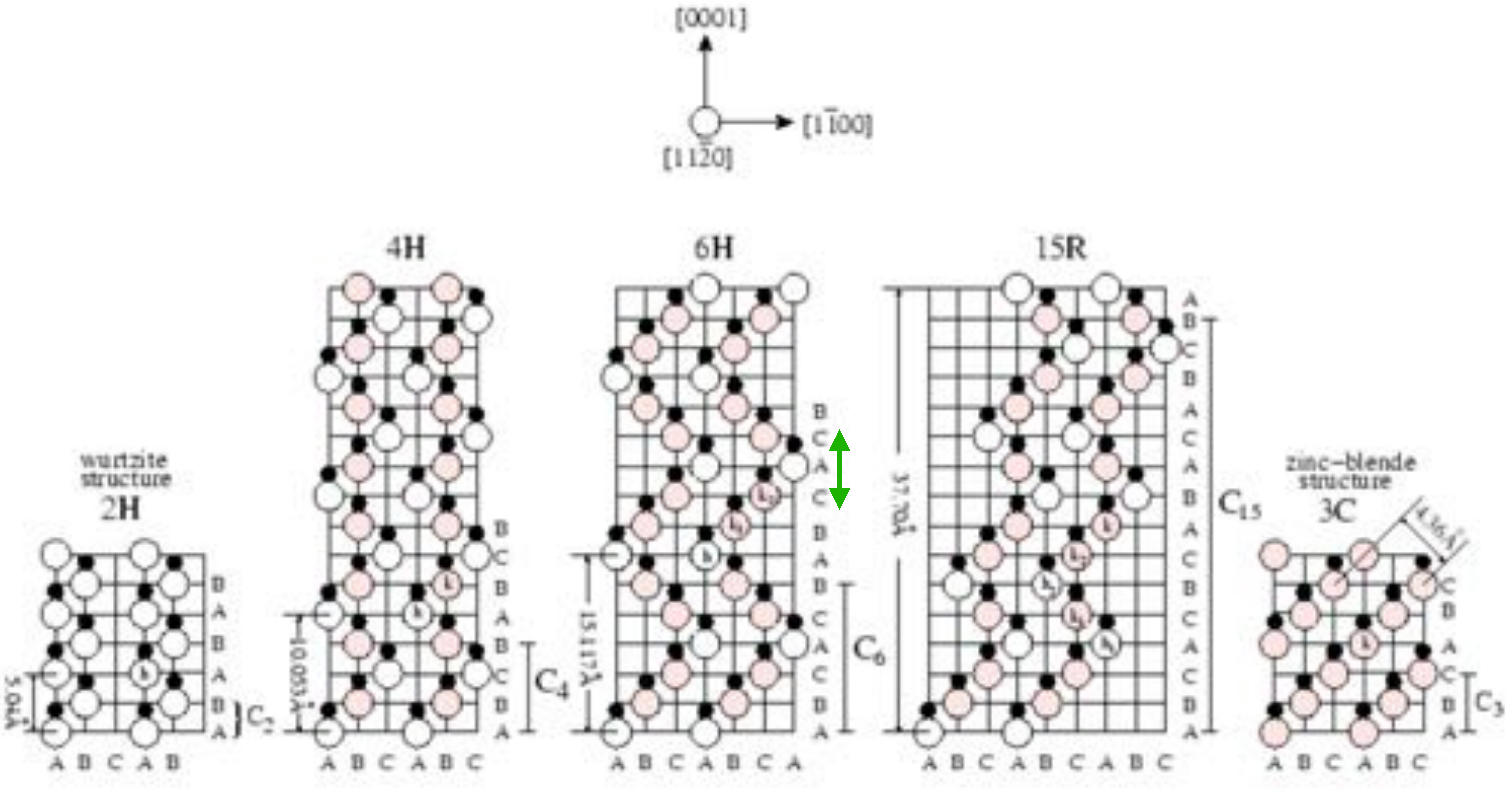


FIGURE 4 – Les polytypes principaux de SiC.

D) Le cas diabolique 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.

Polytype 4H:
- 1 séquence ABC ou CBA: cubique
- 1 séquence BCB ou BAB: hexagonal

Polytype 6H:
- 1 séquence ABCA ou ACBA: cubique
- 1 séquence BCB ou BAB: hexagonal

2. Quel est le type de sites dans le polytype 3C ?

Polytype 3C:

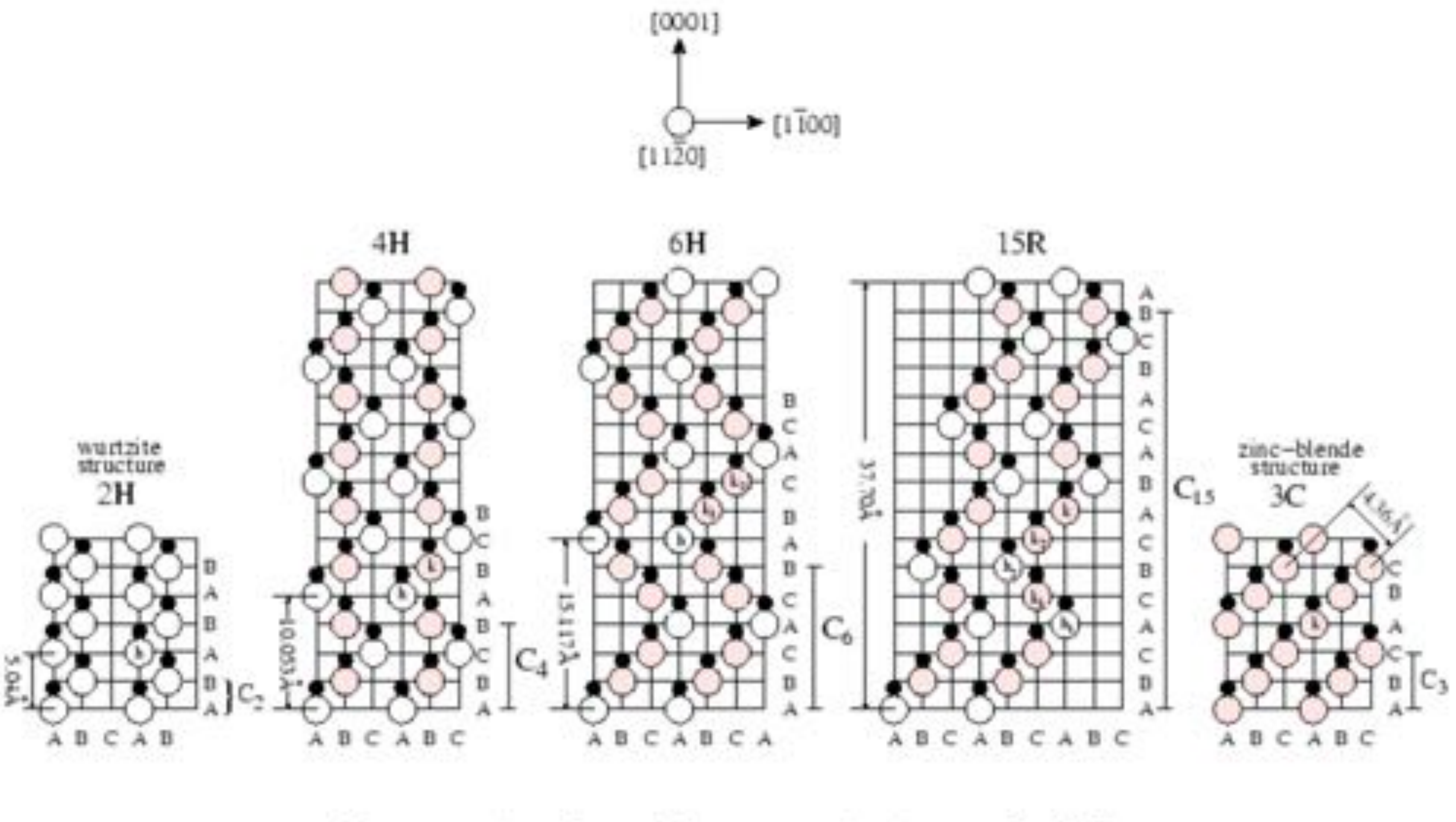


FIGURE 4 – Les polytypes principaux de SiC.

D) Le cas diabolique 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.

Polytype 4H:
- 1 séquence ABC ou CBA: cubique
- 1 séquence BCB ou BAB: hexagonal

Polytype 6H:
- 1 séquence ABCA ou ACBA: cubique
- 1 séquence BCB ou BAB: hexagonal

2. Quel est le type de sites dans le polytype 3C ?

Polytype 3C:
- 1 séquence ABCABC: cubique

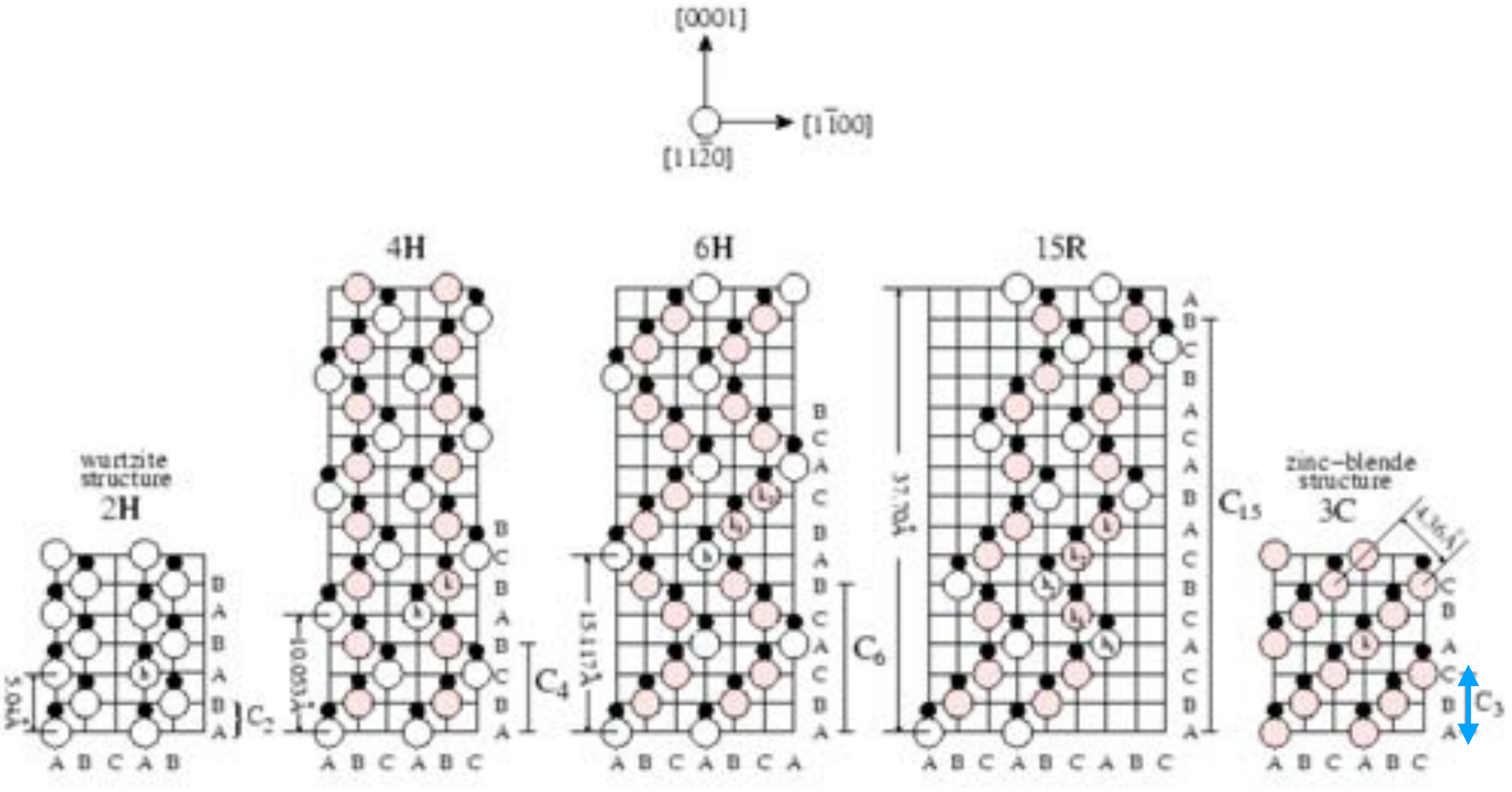


FIGURE 4 – Les polytypes principaux de SiC.

D) Le cas diabolique 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.

<u>Polytype 4H:</u>
- 1 séquence ABC ou CBA: cubique
- 1 séquence BCB ou BAB: hexagonal

<u>Polytype 6H:</u>
- 1 séquence ABCA ou ACBA: cubique
- 1 séquence BCB ou BAB: hexagonal

2. Quel est le type de sites dans le polytype 3C ?

<u>Polytype 3C:</u>
- 1 séquence ABCABC: cubique

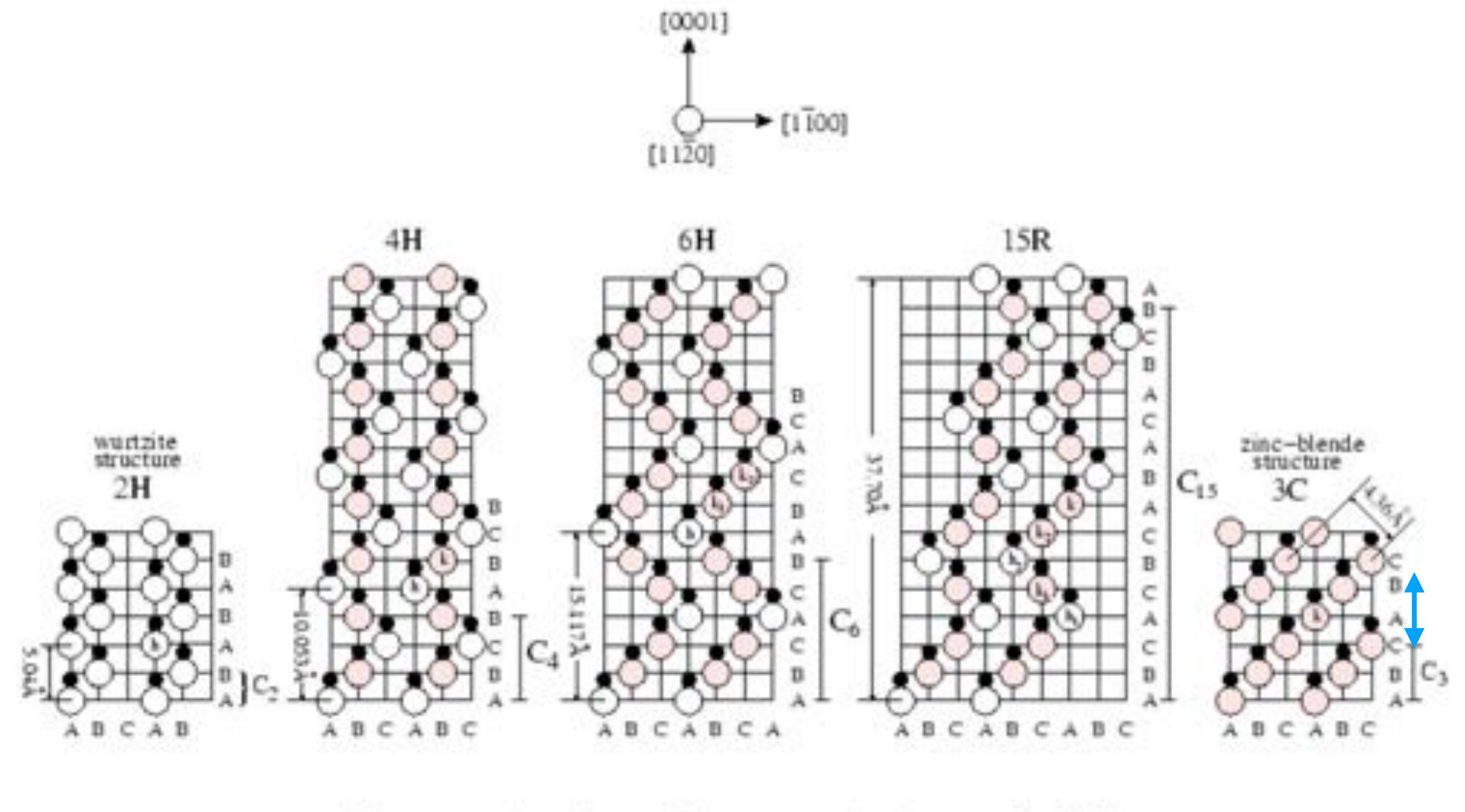
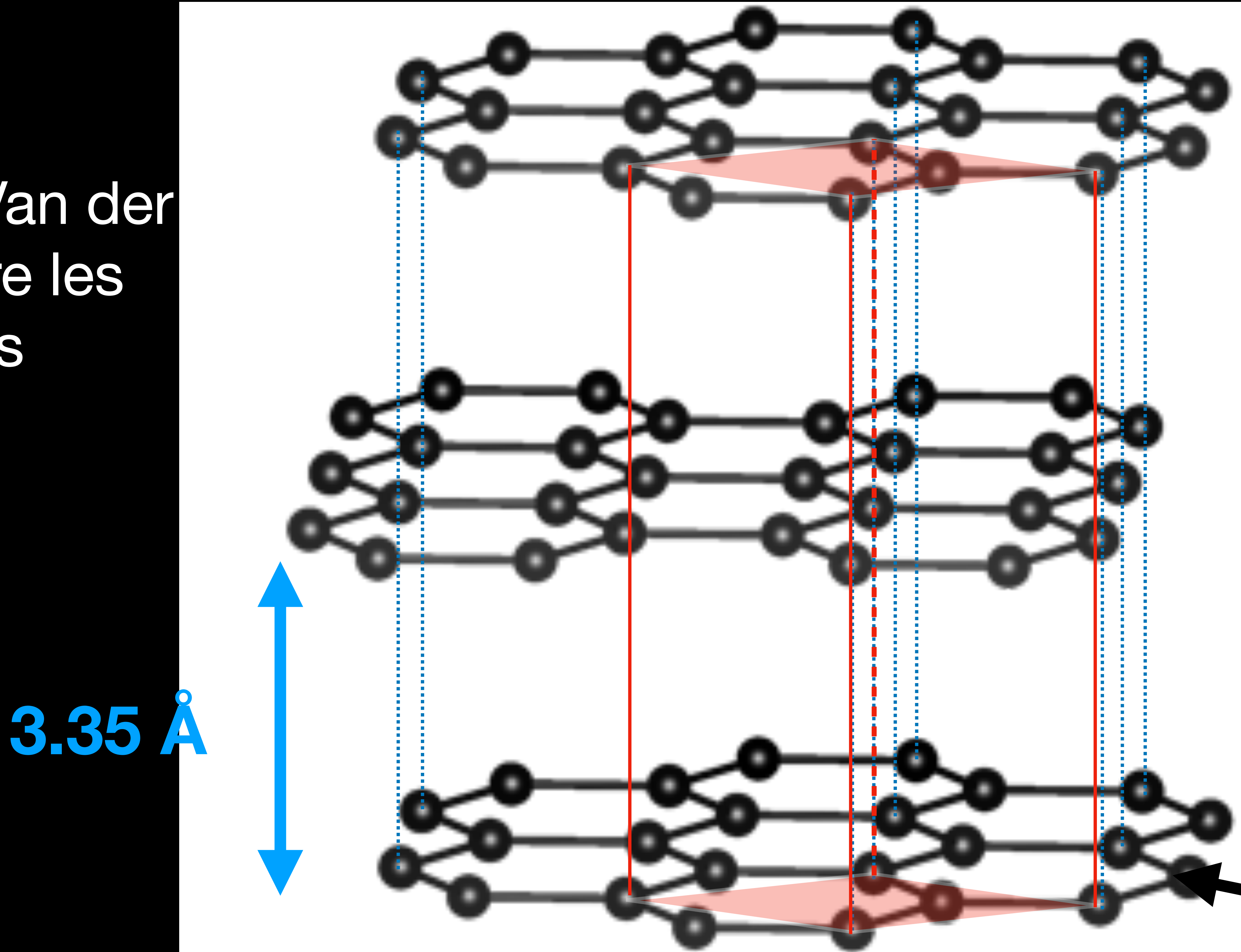


FIGURE 4 – Les polytypes principaux de SiC.

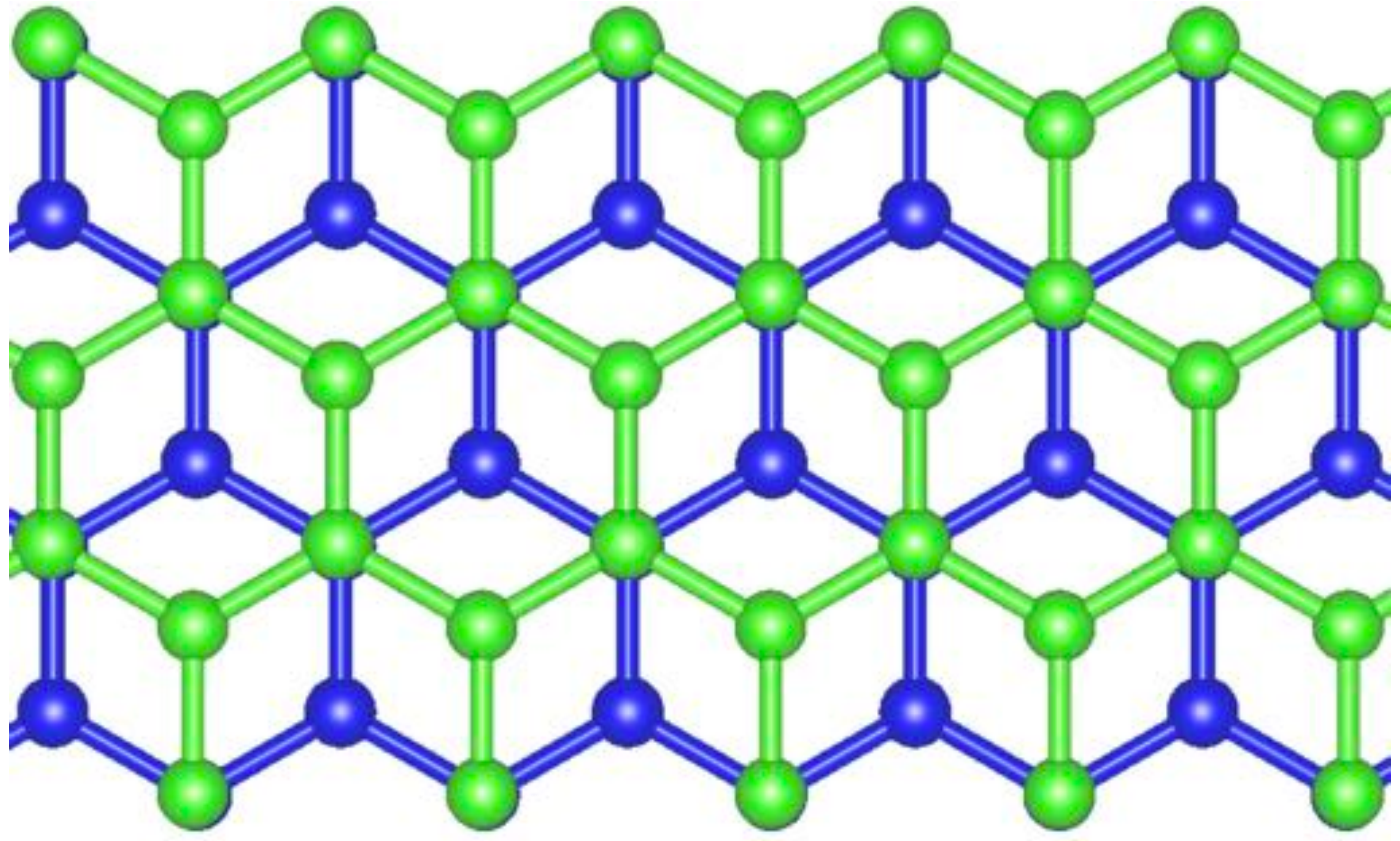
E) Microscopie STM du graphène sur 6H-SiC

1. Exprimer la structure cristalline du graphite dans la forme RB + atomes du motif

Interaction Van der Waals entre les feuillets



Vue latérale du graphite de structure hexagonale



Vue de dessus de deux feuillets de graphite

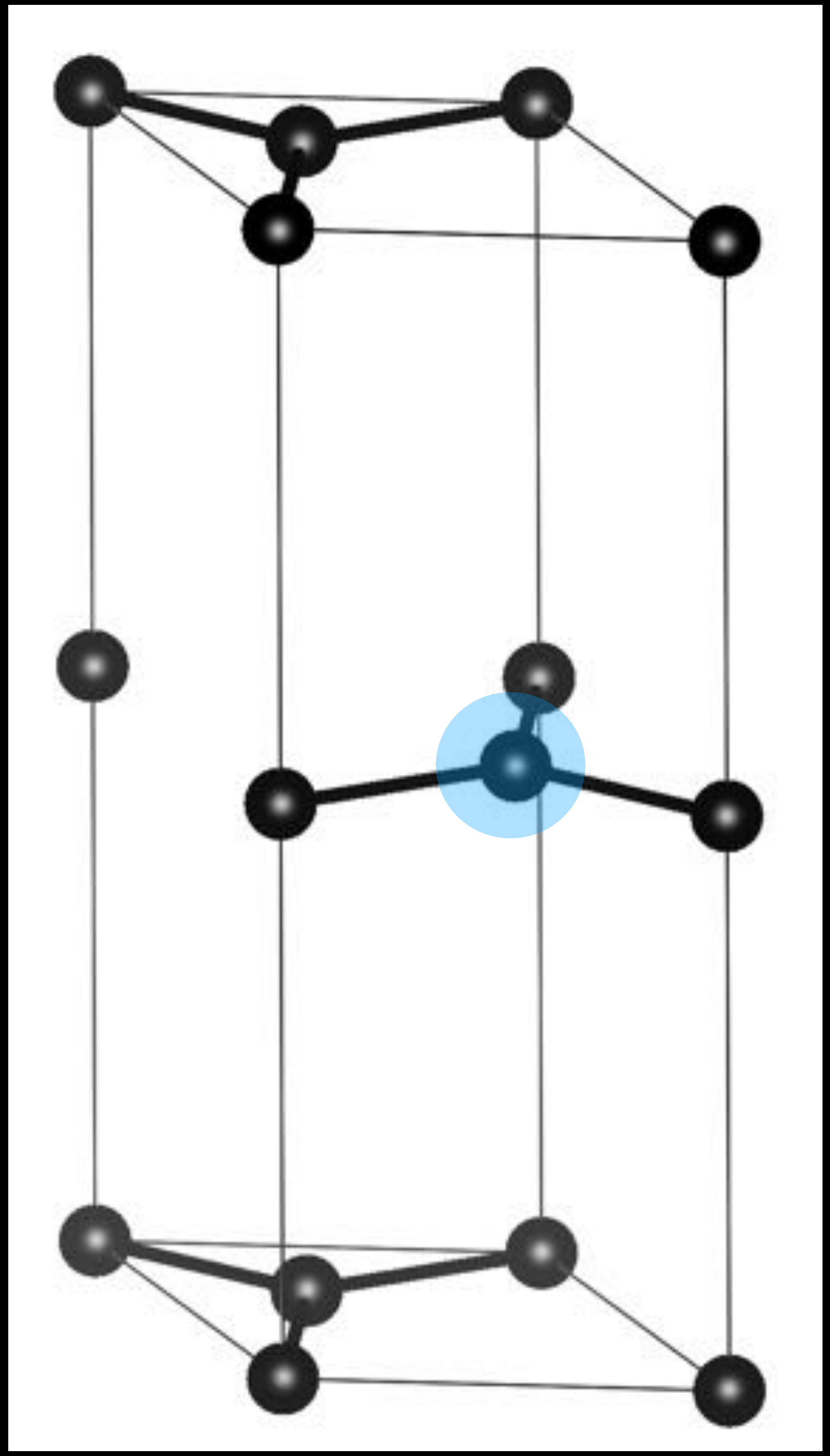
réseau « nid d'abeilles », liaisons covalentes

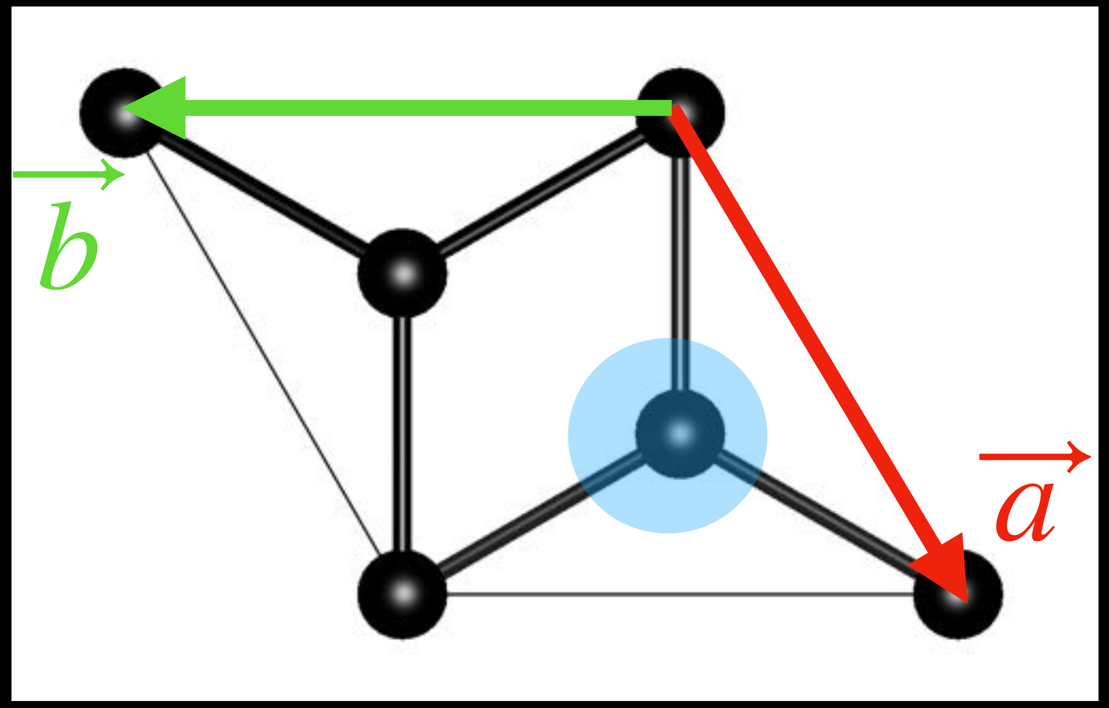
chaque atome très fortement lié à 3 voisins (distants de 1,42 Å)

Clivage dans le plan des feuillets (utilisation comme lubrifiant)

E) Microscopie STM du graphène sur 6H-SiC

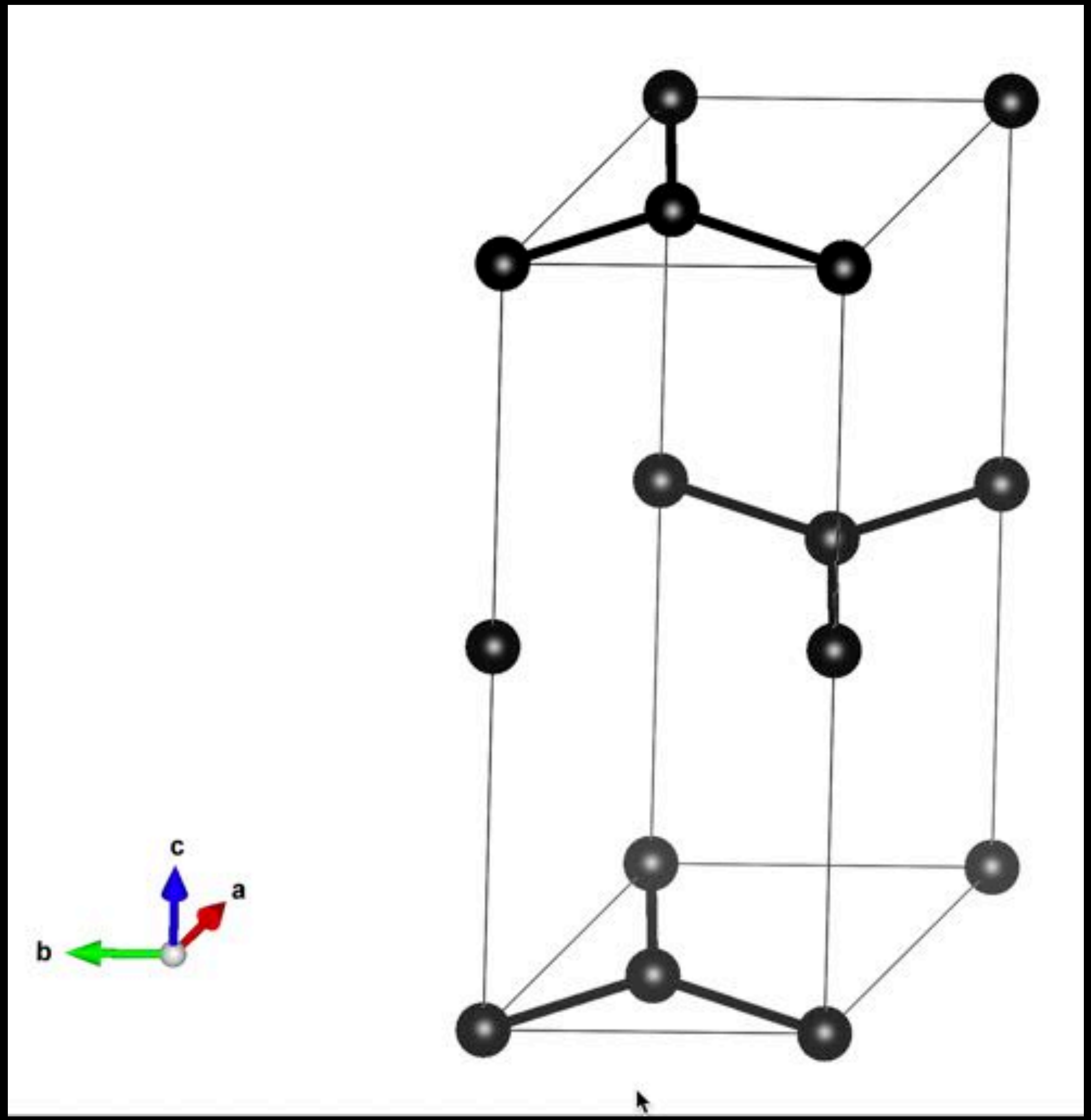
1. Exprimer la structure cristalline du graphite dans la forme RB + atomes du motif

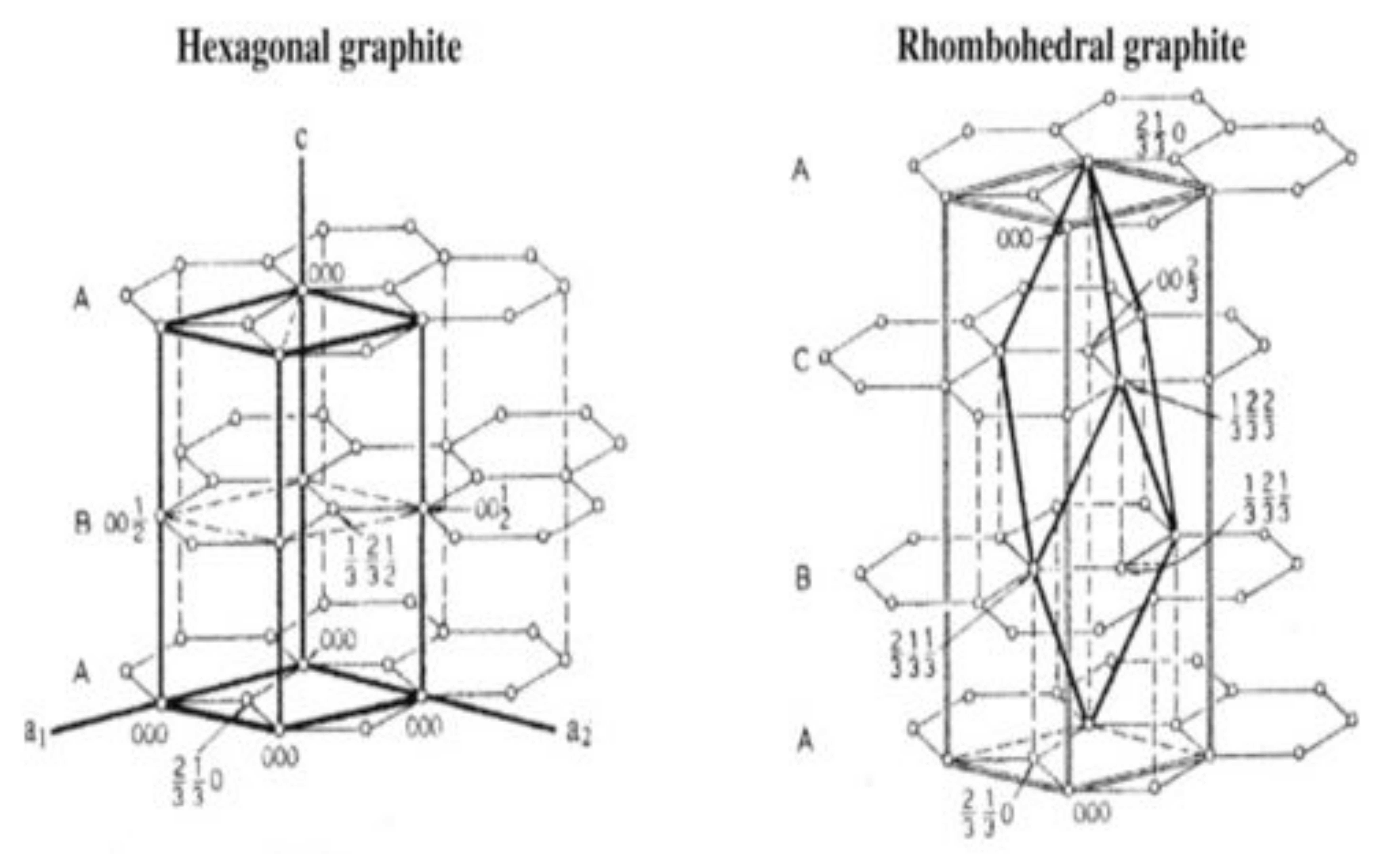




Motif:
(0,0,0)
(0,0,½)
(⅓,⅔,0)
(⅔,⅓,½)

4 atomes par maille





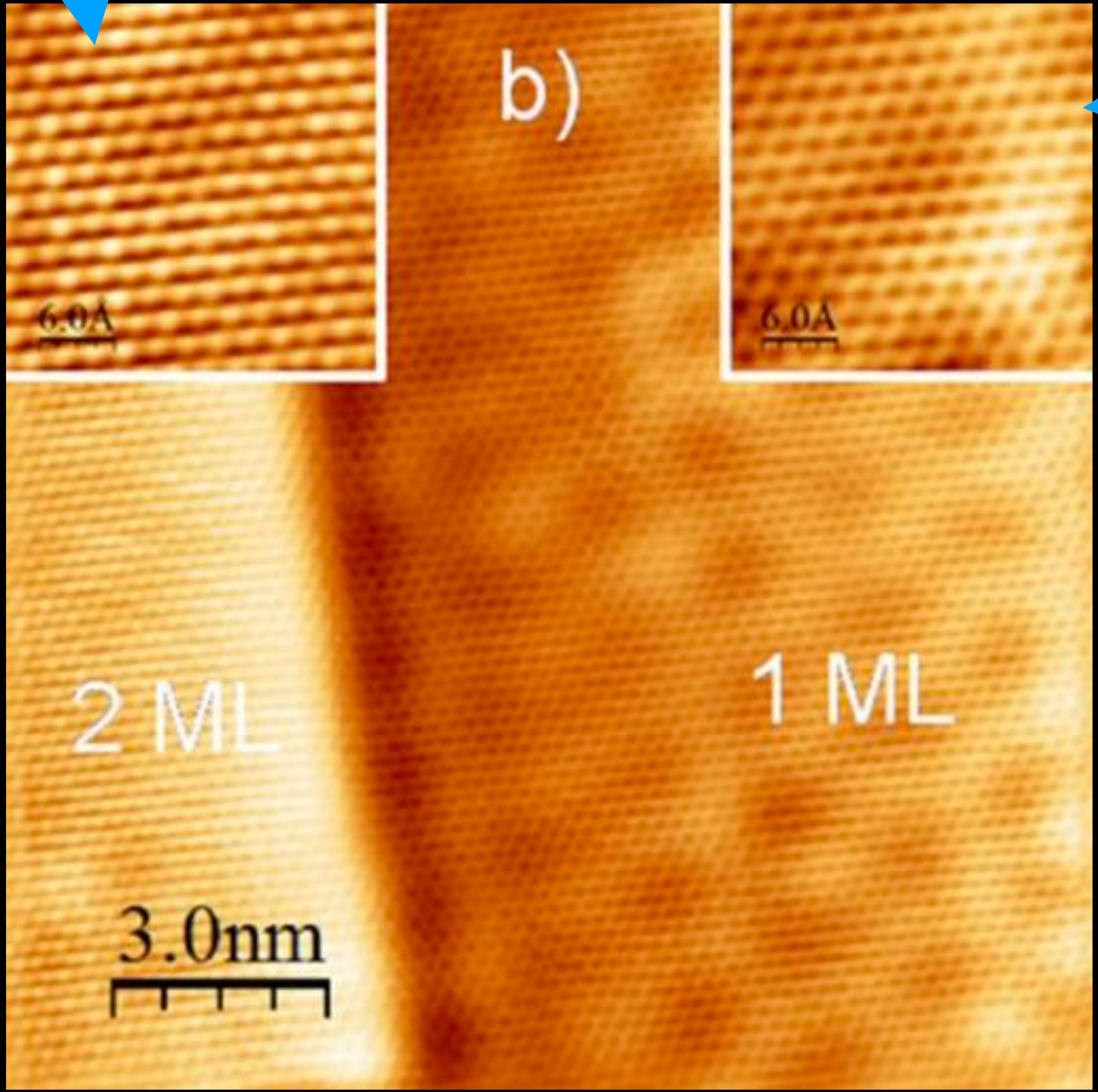
- Michio Inagaki, in Handbook of Advanced Ceramics (Second Edition), 2013

E) Microscopie STM du graphène sur 6H-SiC

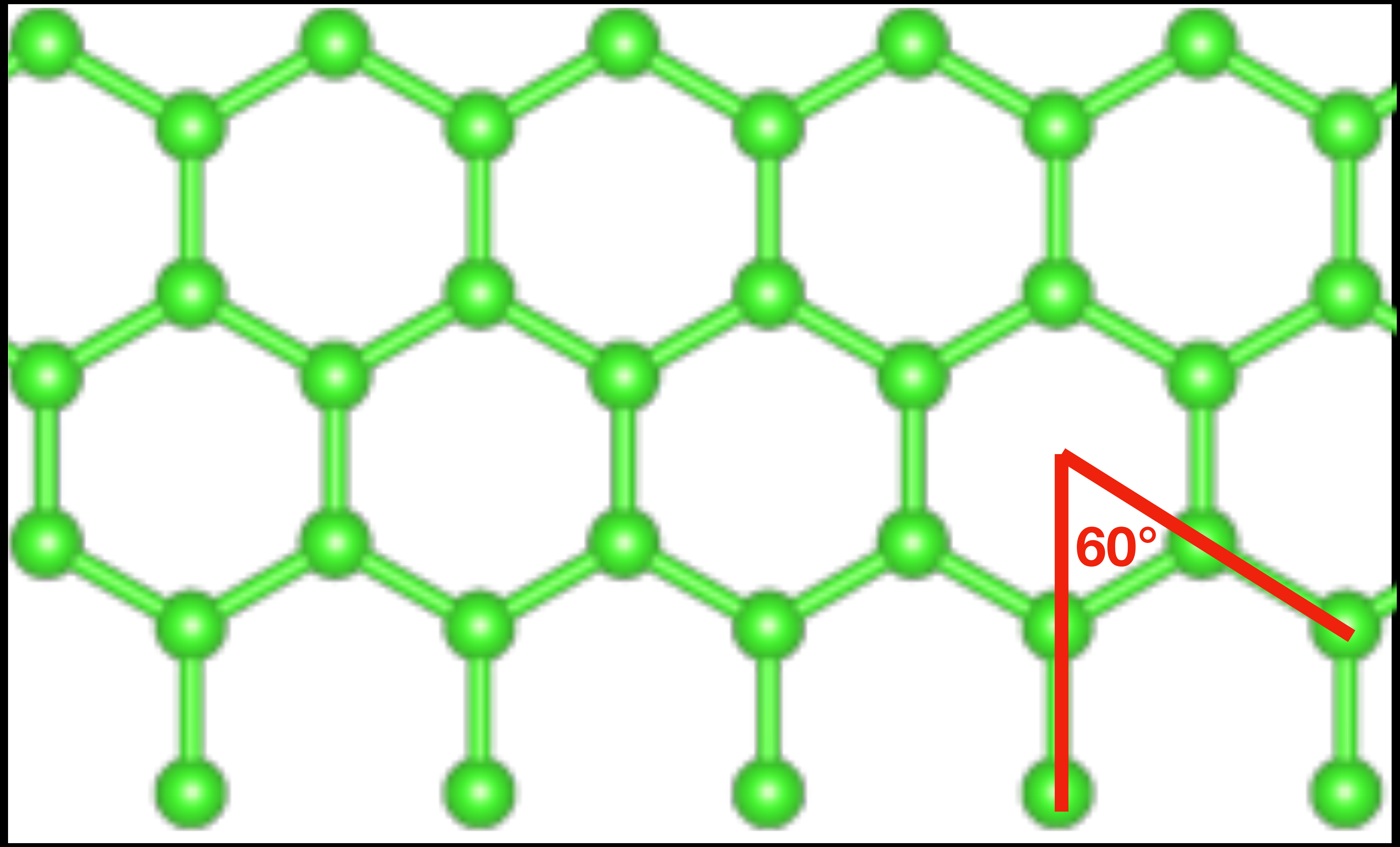
2 ML (2 feuillet)s : réseau triangulaire

2. Image STM (à l'échelle atomique!) d'un film de graphène sur 6H SiC. A partir de la figure de la structure cristalline du graphite donner une possible interprétation de l'image STM.

1 ML (1 monocouche = 1 feuillet) : réseau hexagonal



A. Ouerghi et al. ACS Nano 6 6075 (2012)



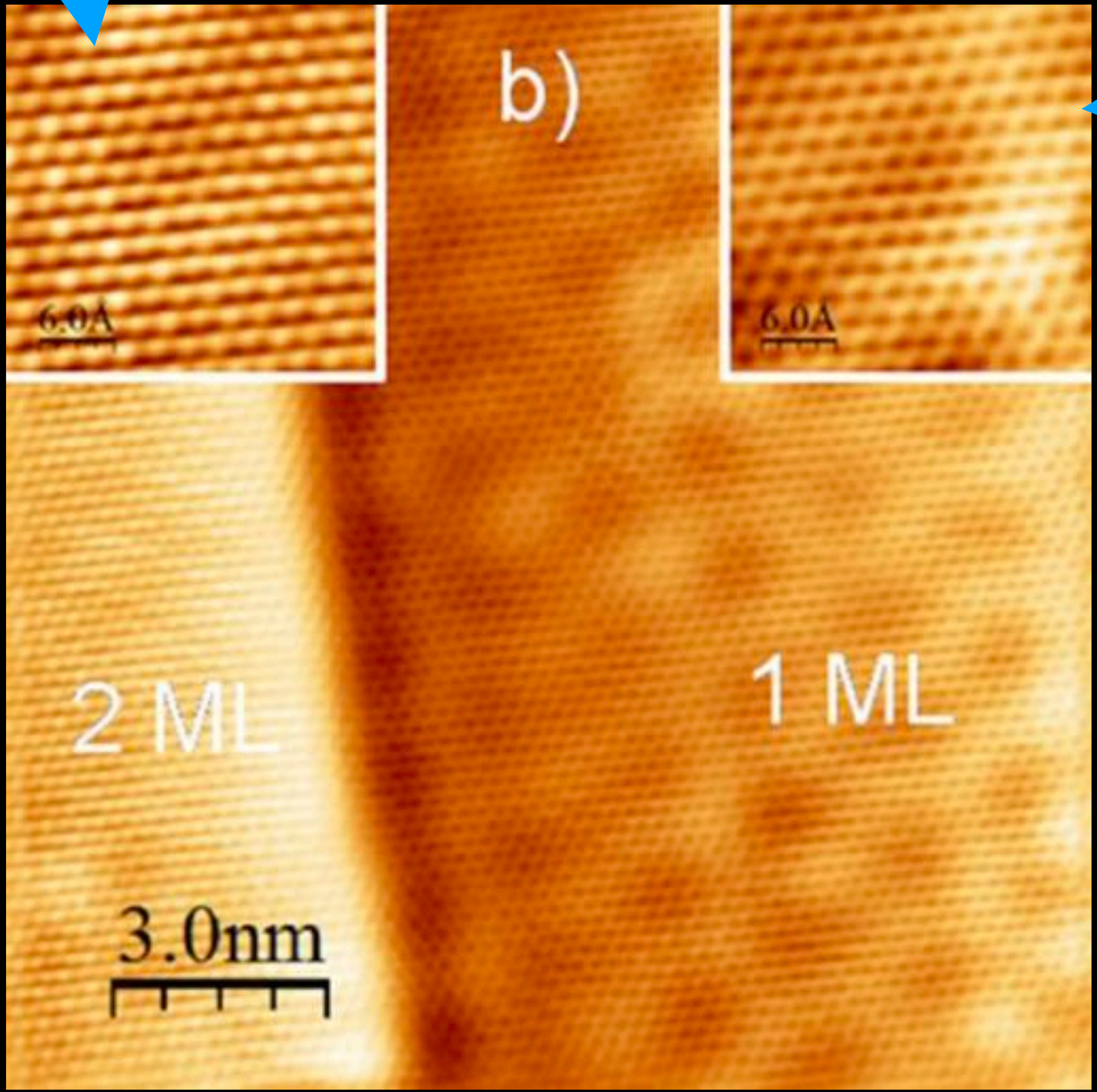
Vue de dessus de deux feuillets de graphite

E) Microscopie STM du graphène sur 6H-SiC

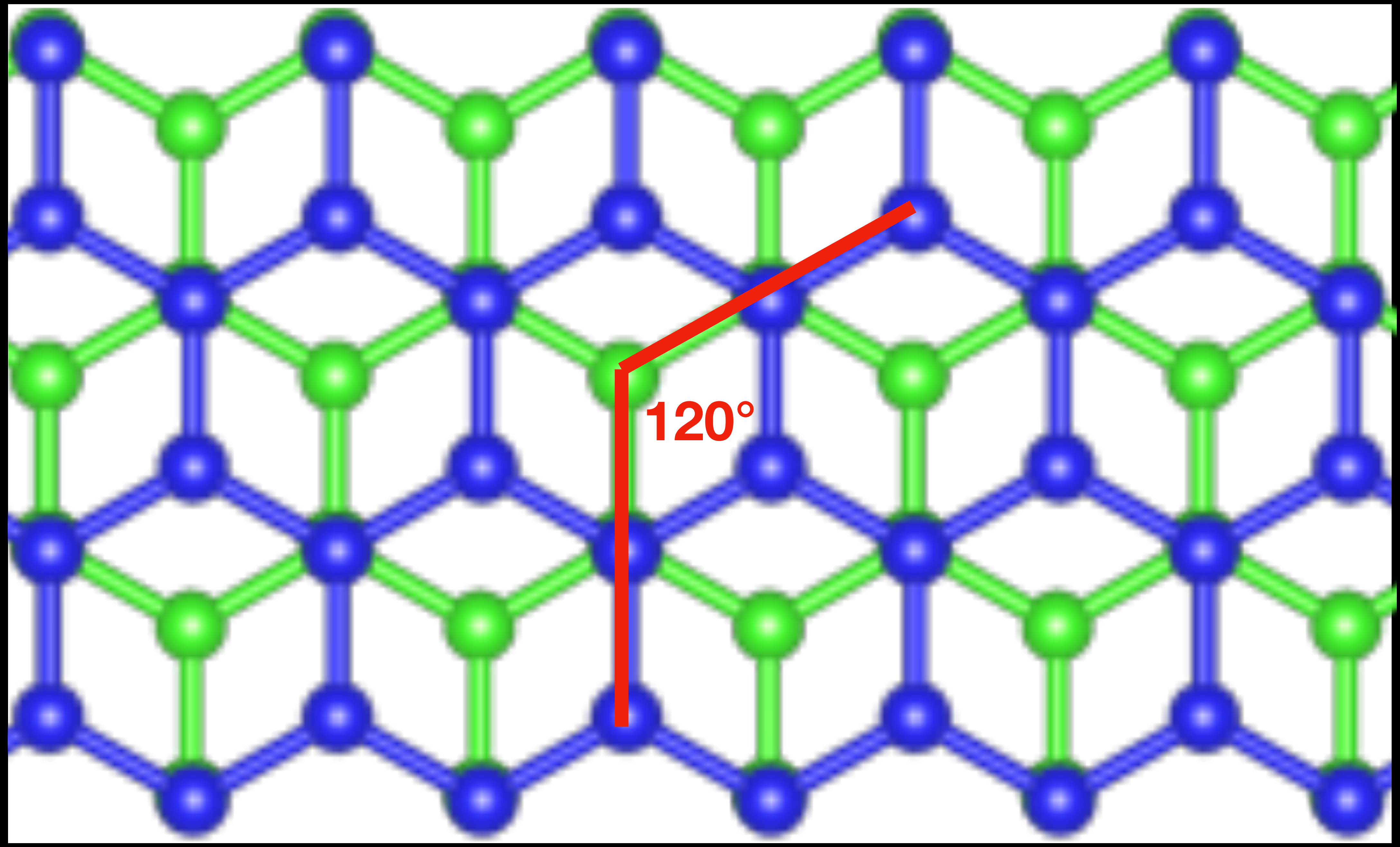
2 ML (2 feuillet)s :
réseau triangulaire

2. Image STM (à l'échelle atomique!) d'un film de graphène sur 6H SiC. A partir de la figure de la structure cristalline du graphite donner une possible interprétation de l'image STM.

1 ML (1 monocouche = 1 feuillet) : réseau hexagonal



A. Ouerghi et al. ACS Nano 6 6075 (2012)



Vue de dessus de deux feuillets de graphite

E) Microscopie STM du graphène sur 6H-SiC

2. 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.

Terminaison hexagonale du SiC: 3C-SiC(111)