CHAPITRE 1

LES RESEAUX DIRECT ET RECIPROQUE

Pr. A. Belayachi
Université Mohammed V – Agdal
Faculté des Sciences Rabat
Département de Physique - L.P.M
belayach@fsr.ac.ma

1. Le réseau direct

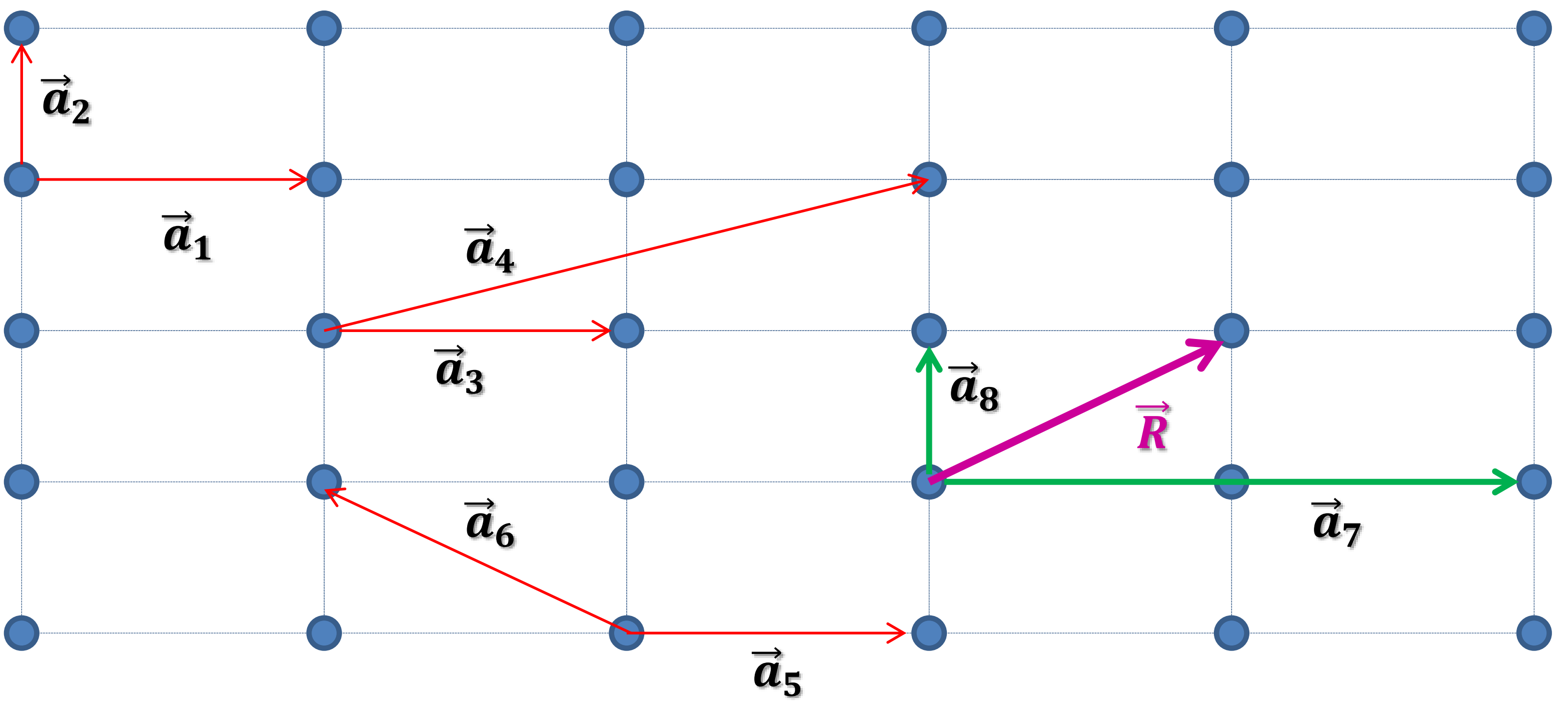
● Un **réseau de Bravais** est un ensemble infini de points discrets avec un arrangement et une orientation qui apparaît exactement la même lorsqu'il est vu d'un point quelconque. Les points sont appelés **«nœuds»** ou **«sites »**.

● Dans un réseau de Bravais tridimensionnel, en choisissant un nœud du réseau comme **origine**, tout autre nœud du réseau est caractérisé par un vecteur position:

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \qquad (1)$$

$$n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}$$

$\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ et $\vec{a}_3$ sont appelés vecteurs de **translation fondamentaux (ou primitifs)** si pour tout site arbitraire d'un réseau donné on peut trouver trois entiers relatifs n_1, n_2, n_3 qui satisfont la relation **(1)**. Considérons le vecteur $\vec{R}$ ci-dessous:



$$\vec{R} = \vec{a}_1 + \vec{a}_2 = -\vec{a}_3 + \vec{a}_4 = 2\vec{a}_5 + \vec{a}_6$$

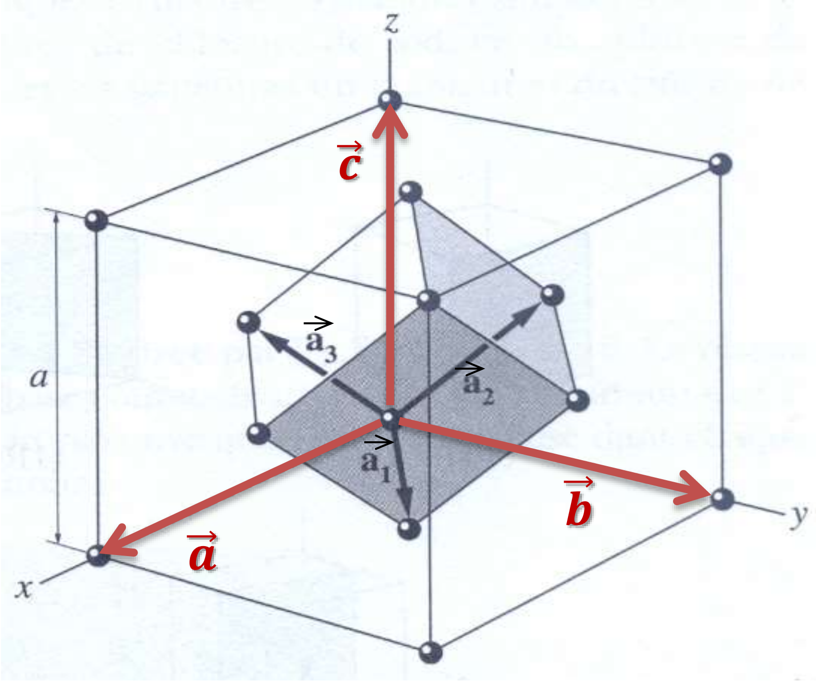
Alors que:

$$\vec{R} = \frac{1}{2}\vec{a}_7 + \vec{a}_8$$

Les couples des vecteurs $(\vec{a}_1, \vec{a}_2)$, $(\vec{a}_3, \vec{a}_4)$ et $(\vec{a}_5, \vec{a}_6)$ sont des vecteurs de translation fondamentaux alors que le couple $(\vec{a}_7, \vec{a}_8)$ ne constitue pas un ensemble de vecteurs de translation fondamentaux car le vecteur $\vec{R}$ ne peut être formé par une combinaison linéaire entière des vecteurs $(\vec{a}_7, \vec{a}_8)$.

Des vecteurs $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ et $\vec{a}_3$ non fondamentaux peuvent toute fois être utilisés s'ils sont plus pratiques ou plus simples.

$\vec{a}$, $\vec{b}$ et $\vec{c}$ sont des vecteurs de translation non fondamentaux alors que $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ et $\vec{a}_3$ sont fondamentaux ou primitifs.



● Le volume construit sur les 3 vecteurs primitifs est appelé **maille élémentaire**. C'est le volume minimal permettant de remplir l'espace.

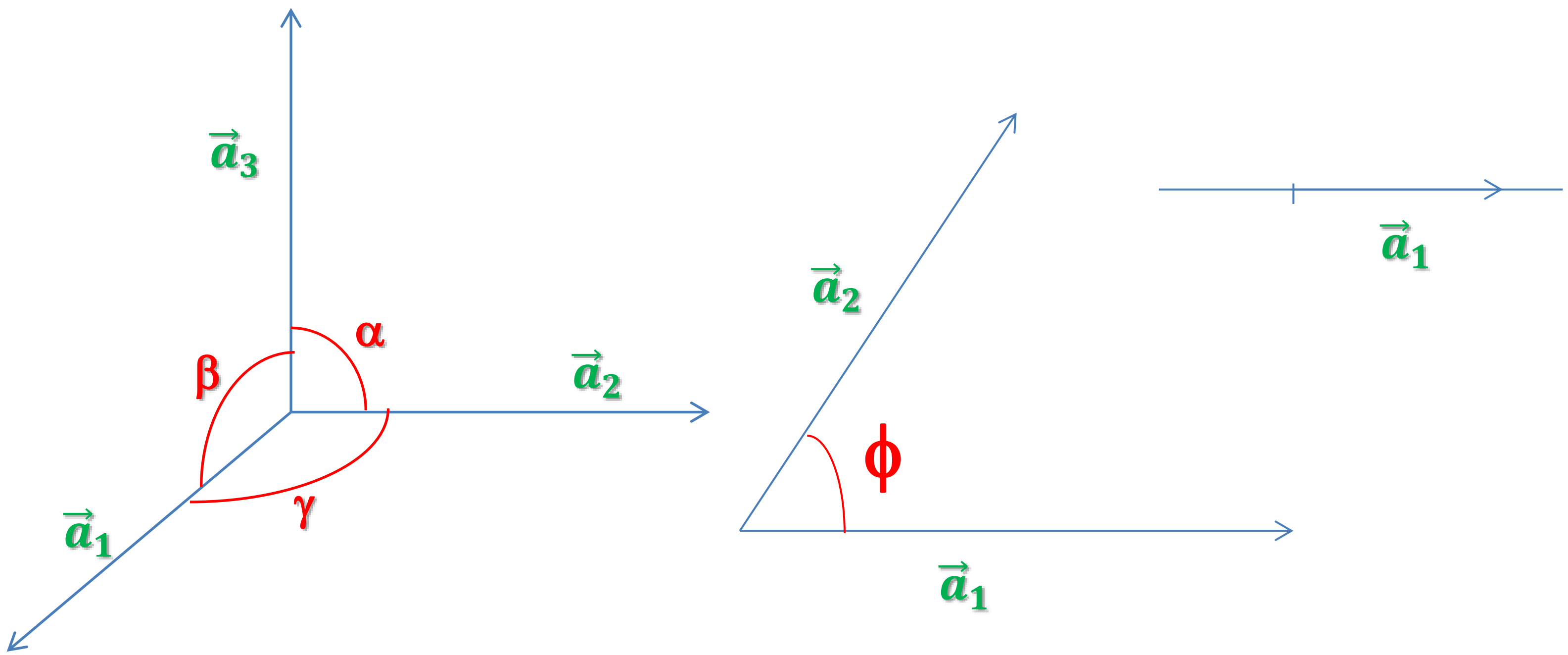
● La maille primitive possédant la symétrie complète du réseau est appelée maille primitive de **Weigner-Seitz.**

● On peut remplir l'espace avec des mailles non primitives appelées **mailles conventionnelles** (utilisées souvent pour des considérations de symétrie).

● Les points d'un réseau de Bravais qui sont les plus près d'un point sont appelés **plus proches voisins**. Chaque point possède le **même nombre** de plus proches voisins appelé **nombre de coordination** du réseau.

2. Classification des réseaux de Bravais

Mathématiquement, un réseau de Bravais est caractérisé par la donnée de trois vecteurs $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ et $\vec{a}_3$ et trois angles α, β et γ (3D), $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ et ϕ (2D) , et $\vec{a}_1$ (1D) tel que:



On appelle groupe ponctuel, l'ensemble des opérations de symétrie qui laissent le réseau invariant (Voir TP cours 1). Ces opérations de symétrie sont:

- **toutes les translations définies par la relation (1);**
- **toutes les rotations autour d'un axe d'ordre n (c'est-à-dire une rotation d'angle $\frac{2\pi}{n}$, n = 1, 2, 3, 4 et 6; 5 et 7 exclus);**
- **les symétries par rapport à un plan passant par un nœud;**
- **les symétries inverses qui sont le produit d'une rotation d'ordre 2 et d'une symétrie par rapport à un plan.**

L'ensemble de toutes les opérations de symétrie sera donné dans le manuel de correction des travaux pratiques.

En considérant toutes les opérations de symétrie qui laissent le réseau invariant, on aboutit à l'existence de 7 systèmes englobant 14 réseaux (3D), 4 systèmes englobant 5 réseaux (2D) (Voir TP cours 1).

Système	Réseaux	Longueurs	Angles
Triclinique	1: P	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$
Monoclinique	2: P, C	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha = \gamma = 90° \neq \beta$
Orthorhombique	4: P, C, I, F	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$
Quadratique - Tetragonal	2: P, I	$a_1 = a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$
hexagonal	1: P	$a_1 = a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = 90°$; $\gamma = 120°$
Trigonal - Rhomboédrique	1: P	$a_1 = a_2 = a_3$	$\alpha = \beta = \gamma < 120°, \neq 90°$
Cubique	3: P, I, F	$a_1 = a_2 = a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$

P: primitif, C: bases centrées, I: corps centré, F: faces centrées

Système	Réseaux	Longueurs	Angles
Oblique	1: P	$a_1 \neq a_2$	$\phi \neq 90°$
Carré	1: P	$a_1 = a_2$	$\phi = 90°$
Hexagonal	1: P	$a_1 = a_2$	$\phi = 120°$
Rectangulaire	2: P, I	$a_1 \neq a_2$	$\phi = 90°$

3. Plans réticulaires et indices de Miller

3.1 Position dans la maille

La position d'un point dans un réseau est repérée par ses coordonnées *u*, *v* et *w* dans la base ($\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$, $\vec{a}_3$). Chaque coordonnée est une fonction des paramètres a_1 , a_2 , a_3 de la maille, l'origine étant prise en un des nœuds de la maille.

3.2 Rangée

La droite qui relie l'origine au nœud du réseau (*m*, *n*, *p*) est appelée rangée. Elle est notée:

[*m n p*]

3.3 Plans réticulaires

- **Tous les nœuds d'un réseau de Bravais tridimensionnel peuvent être regroupés en plans parallèles, appelés plans réticulaires, contenant chacun au mois trois points non alignés de ce réseau.**

- **Tout plan ainsi défini contiendra un nombre infini de points du réseau qui formeront un réseau de Bravais bidimensionnel dans le plan.**

- **Une famille de plans réticulaires est un ensemble de plans réticulaires parallèles et équidistants qui contiennent dans leur ensemble tous les points du réseau de Bravais tridimensionnel.**

3.4 Indices de Miller

● Une famille de plans parallèles entre eux sera représentée par trois entiers relatifs h, k, ℓ appelés indices de Miller du plan et notée:

$$(h\ k\ \ell)$$

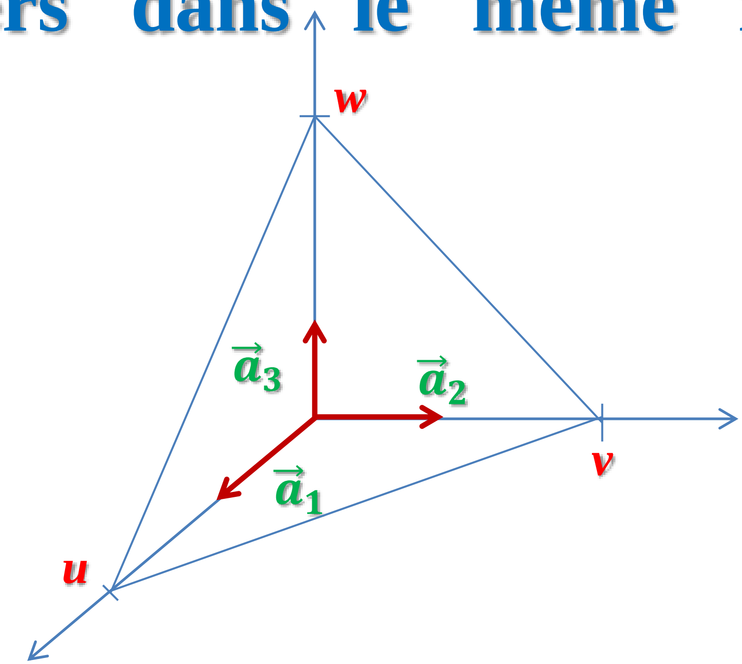
● Dans la base $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)$ l'équation du plan le plus proche de l'origine est:

$$hx + ky + \ell z = 1 \qquad (2)$$

● Pour déterminer les indices de Miller d'un plan on procède de la manière suivante:

- On cherche les points d'intersection u, v, w de ce plan avec les trois axes.

- **On calcule les inverses** $\frac{1}{u}, \frac{1}{v}, \frac{1}{w}$.
- **Les indices de Miller** $(h\ k\ \ell)$ **du plan sont les plus petits entiers dans le même rapport que ces inverses.**



- **Par exemple si** u, v **et** w **sont des entiers et** m **le plus petit multiple commun de** u, v **et** w **alors:**

$$h = \frac{m}{u} \qquad k = \frac{m}{v} \qquad \ell = \frac{m}{w} \qquad (3)$$

● Quand le point d'intersection est à l'infini, l'indice de Miller correspondant est zéro.

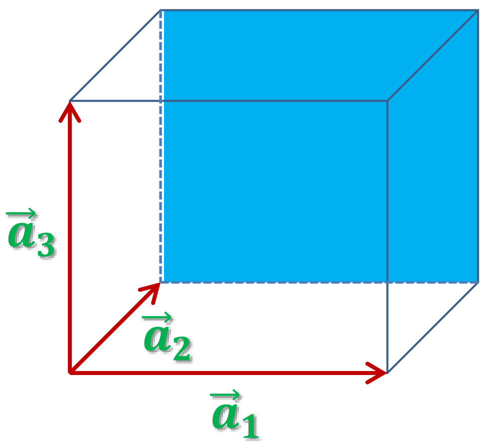
● Quand le point d'intersection est du côté négatif de l'axe, on écrit l'indice de Miller correspondant avec une barre au dessus. Par exemple si l'intersection avec l'axe vertical est négative les indices de Miller seront notés $(h\ k\ \bar{\ell})$.

3.5 Exemples

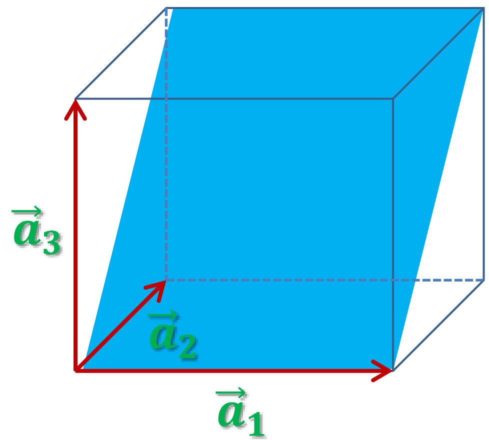
- Si $(u, v, w) = (2, 1, 1)$ alors $(hkl) = (122)$
- Si $(u, v, w) = \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}\right)$ alors $(hkl) = (324)$
- Si $(u, v, w) = \left(3, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ $alors(hkl) = (1\bar{6}6)$

▣ Les plans $\mathcal{P}$ et $\mathcal{P}'$ définis par les intersections $(u, v, w) = (1, 3, 2)$ et $(u', v', w') = \left(\frac{1}{6}, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}\right)$ ont pour indices de Miller $(hkl) = (623)$ et sont parallèles.

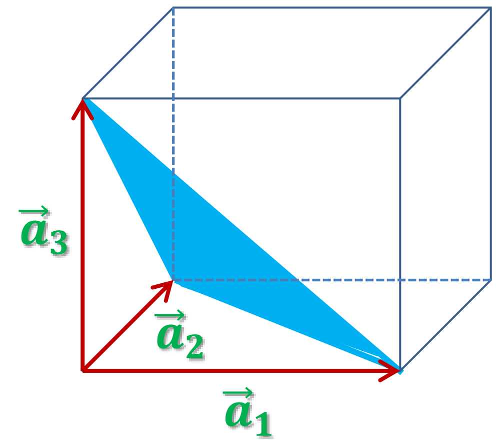
● Ci-dessous sont dessinés des plans d'un réseau cubique avec leurs indices de Miller:



(010)



$(0\bar{1}1)$



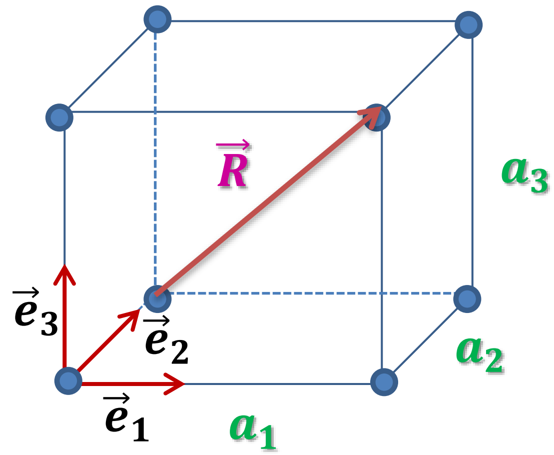
(111)

● Dans un réseau cubique, la rangée $[h\ k\ \ell]$ est perpendiculaire au plan $(h\ k\ \ell)$. Il n'en est pas de même pour les autres réseaux.

4. Le réseau réciproque

4.1 Construction

Considérons un réseau direct de dimensions a_1, a_2 et a_3. Soient deux nœuds du réseau liés par le vecteur translation $\vec{R}$.



L'état microscopique d'une particule libre se trouvant sur le premier nœud du réseau est décrit par une onde plane monochromatique de vecteur d'onde $\vec{k}$ et de fonction d'onde $\psi(\vec{k},\vec{r}) \propto e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$.

Les conditions aux limites périodiques d'un tel état s'écrivent:

$$e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}+\vec{R})} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

Ce qui donne:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = 1 \qquad (4)$$

Sachant que:

$$\vec{k} = k_x\vec{e}_1 + k_y\vec{e}_2 + k_z\vec{e}_3$$

$$\vec{R} = a_1\vec{e}_1 + a_2\vec{e}_2 + a_3\vec{e}_3$$

L'équation (4) n'est vérifiée que s'il existe 3 entiers relatifs n_1, n_2, n_3 appartenant à l'ensemble $\mathbb{Z}$ tel que:

$$\vec{k} = n_1 \frac{2\pi}{a_1}\vec{e}_1 + n_2 \frac{2\pi}{a_2}\vec{e}_2 + n_3 \frac{2\pi}{a_3}\vec{e}_3$$

$$\vec{k} = n_1 \vec{b}_1 + n_2 \vec{b}_2 + n_3 \vec{b}_3$$

$$\vec{b}_i = \frac{2\pi}{a_i}\vec{e}_i \qquad i = 1, 2, 3$$

Par comparaison avec l'équation (1) on voit que l'ensemble de tous les vecteurs d'onde $\vec{k}$ vérifiant (4) forment un réseau à trois dimensions, non pas dans l'espace réel, mais dans l'espace de Fourier. Ce réseau est appelé réseau réciproque. Le réseau réciproque joue un rôle fondamental dans les études analytiques des structures périodiques.

4.2 Généralisation

Considérons un réseau dans l'espace réel de vecteurs de translation $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ et $\vec{a}_3$. On appelle réseau réciproque associé à ce réseau le réseau dans l'espace de Fourier dont les vecteurs de translation sont définis par:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V}\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V}\vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V}\vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2$$

$V = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)$ étant le volume de la maille construite sur les vecteurs $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ et $\vec{a}_3$.

De cette définition on voit que le réseau réciproque du réseau réciproque n'est autre que le réseau direct original.

4.3 Propriétés

- Si les vecteurs $\vec{a}_i$ sont orthogonaux les vecteurs $\vec{b}_i$ le sont aussi.

- $\vec{a}_i . \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$, δ_{ij} est le symbole de Kronecker i.e. $\delta_{ij} = 1$ pour $i = j$ et $\delta_{ij} = 0$ pour $i \neq j$.

- La maille primitive de Weigner-Seitz dans le réseau réciproque est appelée la première zone de Brillouin. C'est le plus petit volume entièrement compris entre les plans médiateurs des vecteurs du réseau réciproque tracés à partir de l'origine (Voir TP cours 1).

● **Voici quelques réseaux directs importants et leurs réseaux réciproques.**

Réseau direct	Réseau réciproque
Cubique simple	Cubique simple
Cubique centré	Cubique à faces centrées
Cubique à faces centrées	Cubique centré
Orthorhombique	Orthorhombique
Hexagonal	Hexagonal

● **Tout vecteur $\vec{G}(h, k, \ell)$ du réseau réciproque est perpendiculaire au plan $(h\ k\ \ell)$ du réseau direct (Démonstration en TD).**