CPC 1 : Réseau cristallin, réseau réciproque

1. Réseau direct

1) La figure 1 montre les deux vecteurs de translations les plus petits en norme (maille (1)). Le motif est composé d'atomes qui appartiennent à la maille. On choisit généralement les atomes dont les coordonnées réduites sont dans l'intervalle [0 , 1[(ou dans]-0,5 ; 0,5]). La maille contient 2 atomes X en positions (0 , 0) et (1/2 , 3/4) et 2 atomes Y en positions (0 , 1/4) et (1/2 , 1/2).

   La maille (2) est aussi une maille primitive, elle est obtenue par une translation par un vecteur quelconque. Les coordonnées réduites des atomes du motif sont alors différentes de celle de la maille (1).

   La maille (3) est aussi une maille primitive.

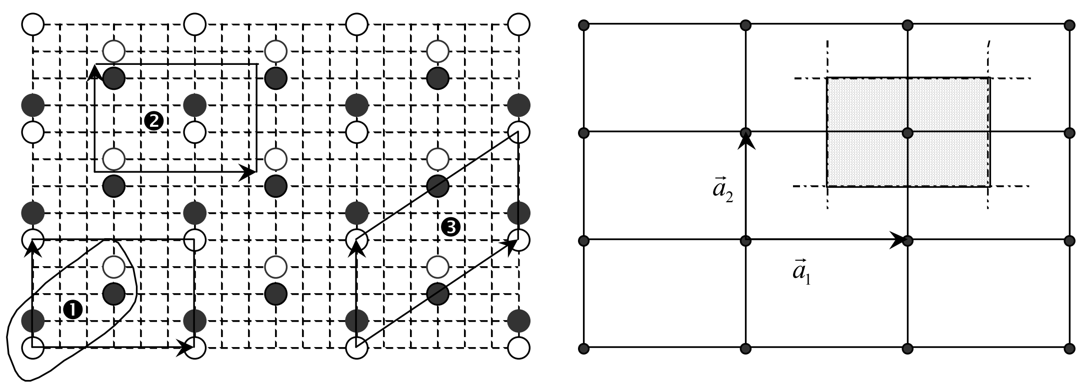

Figure 1 : α. Exemples de maille primitive. Réseau de Bravais rectangulaire simple

2) La figure 2 montre deux exemples de maille primitive. Le motif est constitué d'un atome X et d'un atome Y. La maille rectangulaire contient donc deux motifs, elle est multiple.

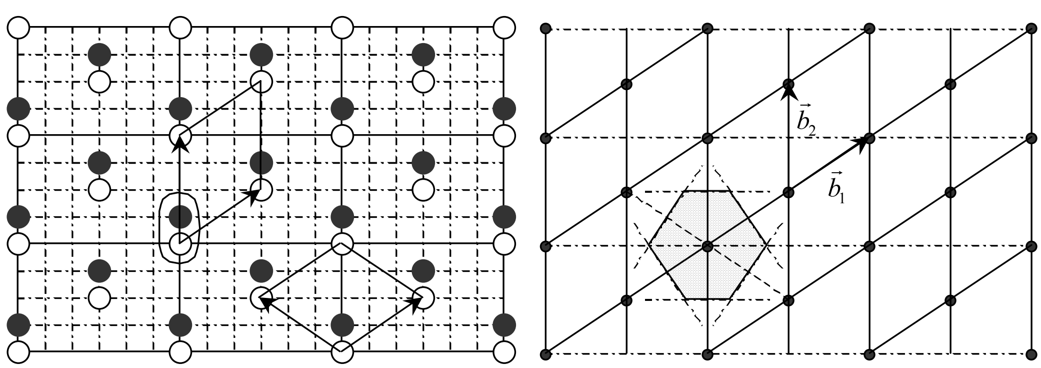

Figure 2 : β. Réseau de Bravais. La maille rectangulaire est représentée en trait discontinu.

3) Les figures 1 et 2 montrent les deux réseaux de Bravais. La cellule de Wigner-Seitz est la cellule unitaire de symétrie. Son volume est celui de la maille élémentaire, $V_\alpha = 2V_\beta = ab$.

2. Réseau réciproque

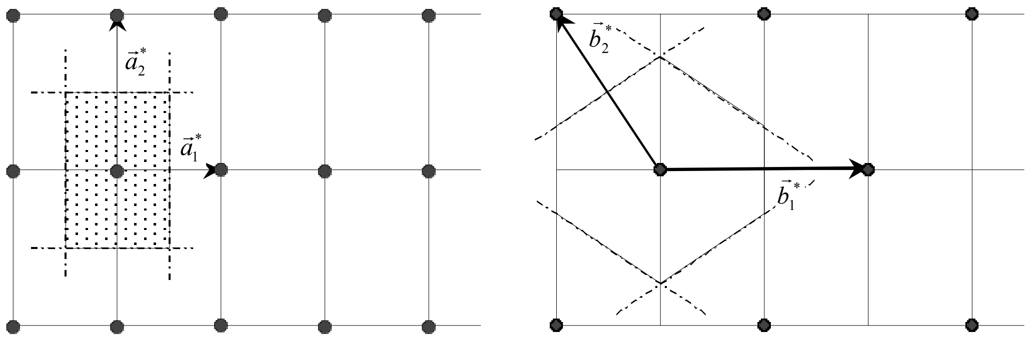

Figure 3 : réseaux réciproques et première zone de Brillouin

1) En appliquant les relations $\vec{a}_i \cdot \vec{a}_j^* = 2\pi\delta_{ij}$ on déduit facilement que le réseau réciproque du réseau rectangulaire simple est aussi un réseau rectangulaire simple de paramètres $2\pi/a_1$ et $2\pi/a_2$.

On utilise la même méthode, pour déterminer le réseau réciproque du réseau β. Il est utile d'exprimer d'abord les vecteurs $\vec{b}$ en termes des vecteurs $\vec{a}$:

$$\vec{b}_2 = \vec{a}_2 \quad ; \quad \vec{b}_1 = \frac{\vec{a}_1 + \vec{a}_2}{2}$$

On a ensuite :

$$\vec{b}_i \cdot \vec{b}_j^* = 2\pi\delta_{ij} \quad \Rightarrow \quad \vec{b}_1^* \perp \vec{b}_2 \quad \Rightarrow \quad \vec{b}_1^* = c_1\,\vec{a}_1$$

$$\vec{b}_1 \cdot \vec{b}_1^* = 2\pi \quad \Rightarrow \quad \vec{b}_1 \cdot c_1\vec{a}_1 = 2\pi \quad \Rightarrow \quad \frac{c_1}{2} a_1^2 = 2\pi \quad \Rightarrow \quad c_1 = \frac{4\pi}{a_1^2}$$

$$\boxed{\vec{b}_1^* = \frac{4\pi}{a_1}\hat{a}_1 = 2\vec{a}_1^*}$$

$$\vec{b}_2^* \perp \vec{b}_1 \quad \Rightarrow \quad \vec{b}_2^* = c_2 \frac{a_2\hat{a}_1 - a_1\hat{a}_2}{2}$$

$$\vec{b}_2 \cdot \vec{b}_2^* = 2\pi \quad \Rightarrow \quad \vec{a}_2 \cdot c_2 \frac{a_2\hat{a}_1 - a_1\hat{a}_2}{2} = 2\pi \quad \Rightarrow \quad -c_2 \frac{a_1 a_2}{2} = 2\pi \quad \Rightarrow \quad c_2 = -\frac{4\pi}{a_1 a_2}$$

$$\boxed{\vec{b}_2^* = -\frac{4\pi}{a_1 a_2} \frac{a_2\hat{a}_1 - a_1\hat{a}_2}{2} = \vec{a}_2^* - \vec{a}_1^*}$$

On obtient ce même résultat en partant de la relation vectorielle $\vec{b}_1^* = \frac{2\pi}{V_\beta}\vec{b}_2 \wedge \vec{c}$, où $\vec{c}$ est un vecteur unitaire perpendiculaire au plan. Sachant que $\vec{b}_2$ est égal à $\vec{a}_2$ on en déduit

$$\vec{b}_1^* = \frac{2\pi}{V_\beta}\vec{a}_2 \wedge \vec{c} = \frac{V_\alpha}{V_\beta}\vec{a}_1^* = 2\vec{a}_1^*$$

On obtient aussi par le même raisonnement

$$\vec{b}_2^* = \frac{2\pi}{V_\beta}\vec{c} \wedge \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_\beta}\vec{c} \wedge \frac{\vec{a}_1 + \vec{a}_2}{2} = \frac{1}{2}\frac{V_\alpha}{V_\beta}(\vec{a}_2^* - \vec{a}_1^*) = \vec{a}_2^* - \vec{a}_1^*$$

On remarque facilement que le réseau réciproque du réseau β est un réseau rectangulaire centré de paramètres $4\pi/a_1$ et $4\pi/a_2$.

2) La première zone de Brillouin est représentée dans la figure 3.

3. Lignes réticulaires et indices de Miller

1) Soit la ligne réticulaire passant par les nœuds N_1 et N_2 de coordonnées réduites (u_1,v_1) et (u_2,v_2). On a :

$\vec{R}_{N_1} = u_1\vec{a}_1 + v_1\vec{a}_2 = u_1\vec{a} + v_1\vec{b}$; $\vec{R}_{N_2} = u_2\vec{a}_1 + v_2\vec{a}_2 = u_2\vec{a} + v_2\vec{b}$

où on a posé $\vec{a}_1 = \vec{a}$ et $\vec{a}_2 = \vec{b}$ pour simplifier les notations.

Équation de la droite passant par ces deux points :

$$(y - v_1 b) = \frac{(v_2 - v_1)b}{(u_2 - u_1)a}(x - u_1 a)$$

$$(y - v_1 b)(u_2 - u_1)\,a = (v_2 - v_1)\,b\,(x - u_1 a)$$

On divise par ab. On a :

$$(u_2 - u_1)\frac{y}{b} - (v_2 - v_1)\frac{x}{a} = v_1(u_2 - u_1) - u_1(v_2 - v_1)$$

$$\boxed{h\frac{x}{a} + k\frac{y}{b} = n}$$

où: $h = v_1 - v_2$, $k = u_2 - u_1$ et $n = v_1(u_2 - u_1) - u_1(v_2 - v_1)$.

On remarquera que si h et k ne sont pas premiers entre eux, le facteur commun est commun aussi à n. On peut alors le simplifier et se restraindre à des valeurs de h et k qui n'ont pas de facteurs communs. On appelle alors (h, k) les indices de Miller de la famille de droites réticulaires.

Une droite pour un indice n donné correspond à une translation de la droite passant par l'origine (n = 0). La droite réticulaire (n = 1) coupe les axes Ox et Oy aux points $A(a/h,0)$ et $B(0,b/k)$. La figure ci-dessous donne par exemple les lignes réticulaires (1, 2).

Il est important de noter que ce résultat est valable même si le repère n'est pas orthogonal.

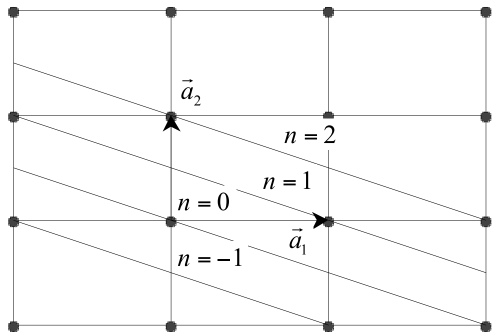

Figure 4 : Lignes réticulaires (1,2) dans le réseau rectangulaire simple

2) On a :

$$\overrightarrow{N_1N_2} = (u_2 - u_1)\vec{a}_1 + (v_2 - v_1)\vec{a}_2$$

$$\vec{G}_{hk} = h\,\vec{a}_1^* + k\,\vec{a}_2^*$$

$$\vec{G}_{hk} \cdot \overrightarrow{N_1N_2} = 2\pi\left[h(u_2 - u_1) + k(v_2 - v_1)\right] = 0$$

puisque : $h = v_1 - v_2$ et $k = u_2 - u_1$.

La distance réticulaire d_{hk} correspond, par exemple, à la distance entre les droites (n = 0) et (n = 1). Elle est donnée par la relation suivante

$$d_{hk} = \overrightarrow{OA} \cdot \frac{\vec{G}_{hk}}{\left|\vec{G}_{hk}\right|} = \frac{\vec{a}_1}{h} \cdot \frac{\left(h\,\vec{a}_1^* + k\,\vec{a}_2^*\right)}{\left|\vec{G}_{hk}\right|} = \frac{2\pi}{\left|\vec{G}_{hk}\right|}$$

Dans le cas du réseau rectangulaire

$$d_{hk} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a_1^2} + \frac{k^2}{a_2^2}}}$$

Ce résultat peut aisément être généralisé à trois dimensions : $\vec{G}_{hkl} = h\,\vec{a}_1^* + k\,\vec{a}_2^* + l\,\vec{a}_3^*$ est orthogonal aux plans réticulaires (h, k, l) et sa norme vaut $2\pi/d_{hkl}$, d_{hkl} étant la distance réticulaire séparant deux plans consécutifs.