

Géométrie en dimension 3 (et 2)

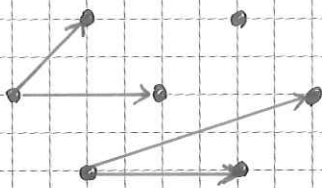
1. Définitions générales d'un réseau.

- On appelle réseau 1 ensemble infini de points de coordonnées

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad n_i \in \mathbb{Z}$$

$\vec{a}_i$: non colinéaires, vecteurs primitifs du réseau

NB: pour 1 réseau donné, le choix des $\vec{a}_i$ n'est pas unique



2 choix de $\{\vec{a}_1, \vec{a}_2\}$.

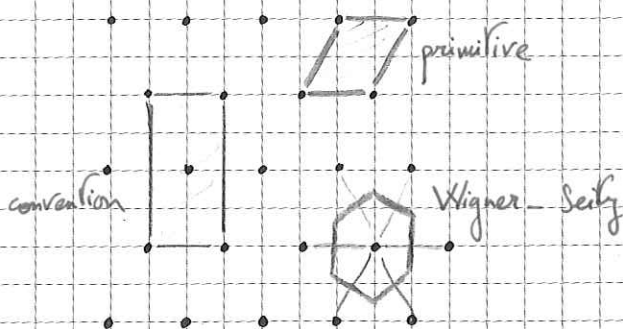
- 1 réseau tel que défini ci-dessus est le choix d'un premier point = origine + 1 ensemble translations par des vecteurs discrets $\vec{R}$
 $\Leftrightarrow$ somme de 2 vecteurs $\vec{R} + \vec{R}' \in$ réseau car composé de 2 translations.

- Cette dernière définition se généralise aisément à 1 situation où l'on translate 1 structure plus compliquée qu'un point = cellule unité
 cellule unité: motif répété par translation

" " primitive: ne contient qu'un seul point du réseau

cellule unité conventionnelle: + commode, avec axes $\perp$ (cf exemple)

cellule de Wigner-Seitz: contient les points de l'espace plus proches d'un point du réseau que de tout autre point du réseau



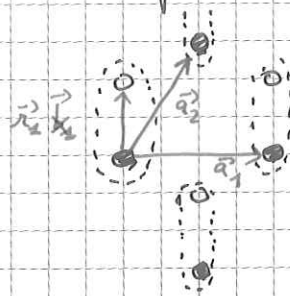
réseau triangulaire

- Combien de points du réseau attribuer par cellule
→ distribuer chaque point sur les cellules qui le contiennent.

ex. précédent: primitive: $4 \times \frac{1}{4} = 1$
convention: $1 + 4 \times \frac{1}{4} = 2$

- A l'intérieur de la cellule unité, les $\neq$ objets sont repérés par rapport au point du réseau par 1 base: vecteurs $\vec{R}_i$

ex pour graphène:



⇒ posn des atomes $\vec{R}_{n,m} + \vec{b}_i$

→ A. Bravais a montré qu'il existait 14 réseaux en dim 3, (5 en d=2)
→ à montrer sur ordinateur.

Notation: $[p, m, n]$ pour $\vec{R} = p\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 + n\vec{a}_3$

2. Réseau réciproque

Rappel: en 1d, réseau direct $R_n = n a$

→ réseau réciproque $G_m = m \cdot \frac{2\pi}{a}$ $\vec{r}_g$ si $\vec{h}' = \vec{h} + \vec{G}_m$
⇒ $\vec{h}$ et $\vec{h}'$ décrivent les mêmes ondes sur le réseau direct
⇒ $e^{i\vec{h} \cdot \vec{R}_n} = e^{i\vec{h}' \cdot \vec{R}_n} \quad \forall n$
⇒ $e^{i\vec{G}_m \cdot \vec{R}_n} = 1 \quad \forall n, \forall m$

Def: le réseau réciproque du réseau $\{\vec{R}_n\}$ est l'ensemble des points $\{\vec{G}\}$ $\vec{r}_g$ $e^{i\vec{G} \cdot \vec{R}} = 1 \quad \forall \vec{R} \in \text{réseau direct} (*)$

⇒ les vecteurs primitifs $\vec{b}_i$ du réseau réciproque sont définis par $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$ et $\vec{G} = m_i \vec{b}_i$ satisfait bien (*)

Auguste
(1850)
↓
raffine
par van Laue
1912 par
rayons X

en $d=3$, la construction des $\vec{b}_i$ est donnée par

$$b_1 = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)}$$

volume cellule élémentaire

$$b_2 = 2\pi \frac{a_3 \times a_1}{a_2 \cdot (a_2 \times a_3)}$$

$$b_i = 2\pi \varepsilon_{ij} \frac{a_j \times a_k}{a_i \cdot (a_2 \times a_3)}$$

$$b_3 = 2\pi \frac{a_1 \times a_2}{a_3 \cdot (a_2 \times a_3)}$$

NB: on a bien $b_1 \cdot a_1 = 2\pi$, $b_1 \cdot a_2 = b_1 \cdot a_3 = 0$, etc.

Lien avec la transformée de Fourier.

Le réseau réciproque apparaît naturellement lors de la TF d'une fonction définie sur le réseau direct.

l'exemple le + frappant: fonction densité qui rappelle repère la position des points du réseau: $\rho(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} \delta(\vec{r} - \vec{R})$ ~ peigne de Dirac

→ revenons d'abord en $d=1$: $\rho(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - a n)$

$$\mathcal{F}[\rho(x)] = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{ikx} \rho(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{ikna} = \frac{2\pi}{a} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \delta(k - \frac{2\pi m}{a})$$

où nous avons utilisé la formule de Poisson: $\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - n) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{2i\pi m x}$

en dimension 3, pour tout réseau, cette formule se généralise en

$$\mathcal{F}[\rho(\vec{r})] = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} = \frac{(2\pi)^3}{V} \sum_{\vec{G}} \delta(\vec{k} - \vec{G})$$

→ volume de cellule élémentaire, $V = a_1 \cdot a_2 \cdot a_3$

(si $\vec{k} \notin$ rés. réciproque, $e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}$ "oscille", et somme $\rightarrow 0$)

⇒ réseau réciproque = "transf. de Fourier" du réseau direct.

de même: si l'on considère une fonction $f(\vec{r})$ qui a la périodicité du réseau, c.à.d. $f(\vec{r} + \vec{R}) = f(\vec{r}) \quad \forall \vec{R} \in \text{réseau}$

$$\begin{aligned} \text{alors } \mathcal{F}[f(\vec{r})] &= \int d^3\vec{r} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} f(\vec{r}) \\ &= \sum_{\vec{R}} \int_{\text{cellule unité}} d^3\vec{r} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} + \vec{R})} f(\vec{r} + \vec{R}) \end{aligned}$$

$$= \underbrace{\left(\sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \right)}_{\frac{(2\pi)^3}{v} \sum_{\vec{G}} \delta(\vec{k} - \vec{G})} \underbrace{\int_{\text{cellule unité}} d^3\vec{x} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} f(\vec{x})}_{\text{facteur de structure } S(\vec{k})} \quad \text{I ④}$$

f. Comme précédemment, la cellule unit^{primitive} du réseau réciproque définit la 1^{ère} zone de Brillouin ^{Wigner-Seitz}

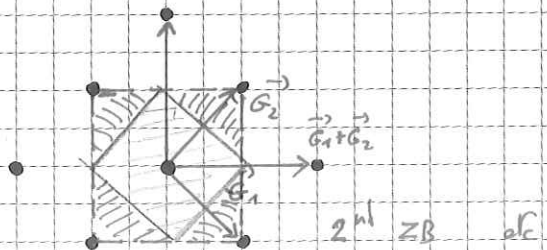
→ ensemble des points $\vec{k}$ + proche de $\vec{G} = \vec{0}$ que de tout autre point $\vec{G}$ du réseau réciproque.

→ contenu à l'intérieur des bissectrices de $[0, \vec{G}_i]$

2nd zone de Brillouin: $\vec{0}$ est le 2nd point le + proche du Rec. réc.

3^{ème} " " " " " " " "

ex:



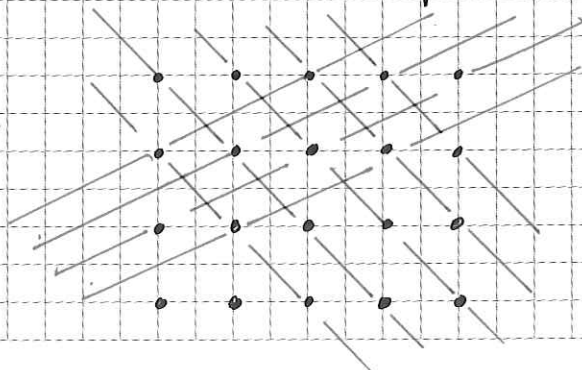
Toutes les zones de Brillouin ont la m^{ême} aire (prop. géom.)

→ exemple en d=3 sur ordinateur + exemple de rel. de dispersion de phonons / électrons -

Famille de plans de réseau

→ l'intersection de familles

• 1 réseau peut être vu comme 1 famille de plans // et équidistants, qui contiennent tous les points du réseau:



V (5)

Ces familles de plans sont en fait indexées de façon unique par les vecteurs $\vec{G}$ du RR : Les plans sont $\perp$ à $\vec{G}$, et distants de $d = \frac{2\pi}{G_{\min}}$ où $G_{\min}$ est le vecteur du RR $\parallel$ à $\vec{G}$ de + petite norme.

en effet: $\vec{G} \cdot \vec{r} = 2\pi \cdot m$ définit bien des plans // $\vec{G}$ (qd m varie), et qui contiennent tous les points $\vec{r}$ du réseau distants de $2\pi/|\vec{G}|$ $\Leftrightarrow$ déf. de $\vec{G}$!

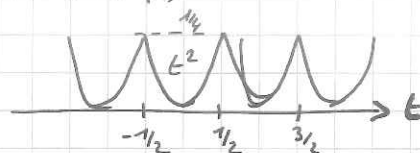
MAIS: certains plans peuvent ne contenir aucun point $\rightarrow$ pour cela, il faut augmenter la distance entre plans, donc diminuer $G \rightarrow G_{\min}$!

- Ces plans sont donc indexés par le vecteur $\vec{G}_{\min}$
 - $\rightarrow$ de façon équivalente, on le note (h, k, l) où $\vec{G}_m = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$
 - $\rightarrow$ indices de Miller, avec convention $(h, \bar{k}, l) = (h, -k, l)$
 - si les $\vec{b}_i$ sont les vecteurs primitifs du RR. Les combinaisons (h, k, l) d'entiers sont possibles.
 - ex: plans $(0,0,1)$, $(1,0)$, etc.

3 familles de plans minimales $\Leftrightarrow$ 3 $\vec{b}_i$.
 $\Rightarrow$ réseau = intense, D.

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{2i\pi n x} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x-n) = \text{III}(x)$$

on considère la fonction $f(t)$:



sk.

$$\Rightarrow f'(t) =$$

$$\Rightarrow f''(t) = 2 - 2 \cdot \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x-n-1/2) = 2 - 2 \text{III}(x-1/2)$$

$$\text{or } f(t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n e^{2i\pi \frac{t}{T} n} \quad (\text{série de Fourier})$$

$$\text{avec } c_n = \int_{-1/2}^{1/2} f(t) e^{-i2\pi n t} dt$$

$$= 2 \int_0^{1/2} t^2 \cos(2\pi n t) dt$$

$$= 2 \int_0^{1/2} t^2 \cos 2\pi n t dt$$

$$= 2 \cdot \left\{ \left[t^2 \cdot \frac{\sin 2\pi n t}{2\pi n} \right]_0^{1/2} - \int_0^{1/2} 2t \cdot \frac{\sin 2\pi n t}{2\pi n} dt \right\}$$

$$= 2 \cdot \left\{ \left[2t \cdot \frac{\cos(2\pi n t)}{(2\pi n)^2} \right]_0^{1/2} - \int_0^{1/2} 2 \cdot \frac{\cos(2\pi n t)}{(2\pi n)^2} dt \right\}$$

$$= 2 \cdot \frac{(-1)^n}{(2\pi n)^2}$$

$$\Rightarrow f(t) = \frac{1}{2\pi^2} \sum_{n \neq 0} \frac{(-1)^n}{n^2} e^{2i\pi n t}$$

$$f''(t) = \frac{1}{2\pi^2} \sum_{n \neq 0} \frac{(-1)^n}{n^2} (2i\pi n)^2 e^{2i\pi n t} = -2 \sum_n e^{i\pi n + 2i\pi n t}$$

$$\Rightarrow \text{III}(x) = 1 - \frac{1}{2} f''\left(x + \frac{1}{2}\right)$$

$$= 1 + \sum_{n \neq 0} e^{i\pi n + i2\pi n(x + 1/2)}$$

$$= 1 + \sum_{n \neq 0} e^{2i\pi n x} = \sum_n e^{2i\pi n x}$$