

**Introduction :**

Dans un solide, la plupart des atomes ont tendance à se lier entre eux pour former des groupements moléculaires stables quand leurs énergies totales sont minimales. Ce minimum est atteint lorsque tous les atomes sont dans un environnement identique, ce qui conduit à l'arrangement périodique tridimensionnel, c'est à dire à un état cristallin. L'existence de la périodicité simplifie considérablement la description théorique d'un solide.

**I-1-Structure cristalline :**

Il existe deux types d'état solide, l'état dans lequel l'arrangement des atomes est aléatoire et celui dans lequel les atomes sont arrangés régulièrement aux nœuds d'un réseau.

Le deuxième état, qui nous intéresse plus particulièrement ici, est l'état cristallisé par le fait que les atomes sont arrangés aux nœuds d'un réseau périodique. Le résultat est un ensemble ordonné de noyaux et d'électrons liés entre eux par des forces essentiellement coulombiennes [1].

**I-1-1- Réseau cristallin :**

Le Cristal est défini par un arrangement périodique d'atomes répondant à un certain nombre de symétries : l'inversion, la rotation et la réflexion dans un parallélépipède.

On peut décrire la structure d'un solide parfait par un ensemble de points appelés « sites » ou « nœuds » dans l'espace de trois dimensions. Le réseau est défini par trois vecteurs de translations fondamentaux appelés vecteurs de base  $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)$ , la position de chaque cellule du cristal est définie par un vecteur du réseau :

$$\vec{T} = \mu\vec{a}_1 + v\vec{a}_2 + w\vec{a}_3 \quad (\text{I, 1})$$

où :  $\mu, v, w$  sont des nombres entiers.

**I-1-2- Réseau de Bravais :**

Le réseau de Bravais est un réseau où tous les sites ont le même environnement [2]. Il spécifie l'ordre périodique dans lequel les unités élémentaires répétées du cristal sont disposées et aussi il représente seulement la géométrie de la structure périodique

sans considérer la nature des unités (atome unique, des groupes d'atomes ou des molécules ...). Le réseau de Bravais permet de distinguer les différents arrangements possibles des atomes pour former un cristal. Pour cela on introduit la notion de la maille cristalline telle que selon les paramètres de cette maille on compte sept systèmes cristallins et quatorze types de réseaux de Bravais [3].

### I-1-3- Maille primitive et maille conventionnelle :

La maille primitive est un volume de l'espace rempli complètement sans laisser des vides et translaté par tous les vecteurs d'un réseau de Bravais. La maille conventionnelle est en général choisie de manière à être plus grande que la maille primitive.

La figure (I-1) représente la maille primitive et la maille conventionnelle d'un réseau cubique à faces centrées.

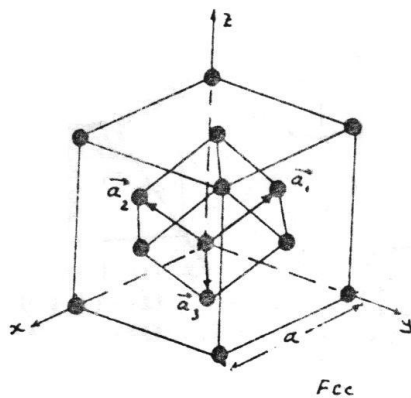


Figure : I-1 : maille primitive, à l'intérieur - maille conventionnelle, à l'extérieur- du réseau cubique à faces centrées

### I-1-4- Maille primitive de Wigner-Seitz :

La maille de Wigner-Seitz autour d'un point du réseau est la région de l'espace qui est la plus proche de ce point que tout autre point du réseau. Elle est maille primitive et possède la symétrie du réseau de Bravais. La figure (I-2) montre la maille de Wigner-Seitz du réseau de Bravais cubique à faces centrées.

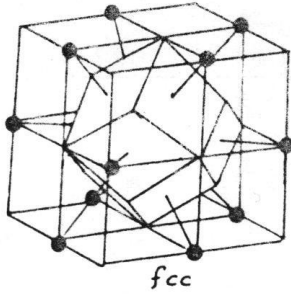


Figure I-2 : maille de Wigner Seitz du réseau cubique à faces centrées

### I-1-5-Réseau réciproque :

A partir de la définition du réseau de Bravais le réseau réciproque est lui-même un réseau de Bravais, et engendré par les trois vecteurs primitifs :

$$\begin{aligned}\vec{b}_1 &= 2\pi (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3) / \vec{a}_1 (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3) = 2\pi / \vec{a}_1 \\ \vec{b}_2 &= 2\pi (\vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1) / \vec{a}_2 (\vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1) = 2\pi / \vec{a}_2 \\ \vec{b}_3 &= 2\pi (\vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2) / \vec{a}_3 (\vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2) = 2\pi / \vec{a}_3\end{aligned}\quad (\text{I, 2})$$

$|\vec{v}| = |\vec{a}_1 (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)| = |\vec{a}_3 (\vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2)| = |\vec{a}_2 (\vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1)|$  est le volume.

Le réseau réciproque est formé par l'ensemble des vecteurs G tels que:

$$\exp(i\vec{G} \cdot \vec{R}) = 1 \quad (\text{I, 3})$$

où  $\vec{R}$  est un vecteur du réseau de Bravais .

Le vecteur G est la somme de trois vecteurs tels que :

$$\vec{G} = h \vec{b}_1 + k \vec{b}_2 + l \vec{b}_3 \quad (\text{I, 4})$$

où h, k, l sont des entiers et les vecteurs  $\vec{b}_1$ ,  $\vec{b}_2$  et  $\vec{b}_3$  forment la base de l'espace réciproque.

Le réseau réciproque joue un rôle fondamental dans la plupart des études analytiques des structures périodiques. Soit un réseau de Bravais et une onde plane  $\exp(i\vec{K} \cdot \vec{r})$ . Pour un  $\vec{K}$  quelconque, une telle onde ne possède pas la périodicité du réseau de Bravais, mais pour certains choix du vecteur d'onde, elle l'aura. L'ensemble de tous les

vecteurs d'onde  $\vec{K}$  donnant une onde plane de périodicité égale à celle d'un réseau de Bravais donné est appelé réseau de Bravais réciproque [4].

### I-7. Zone de Brillouin :

La Zone de Brillouin est nécessaire pour décrire les propriétés électroniques d'un cristal dans lequel la symétrie de translation joue un rôle essentiel [5] pour permettre de préciser la distribution des niveaux d'énergies. La maille primitive de Wigner-Seitz, représente la première zone de Brillouin. Elle est formée de l'ensemble des points de l'espace réciproque qui peuvent être atteints à partir de l'origine sans traverser un plan de Bragg. Le volume de la  $n^{\text{ème}}$  zone est égal à celui de la première zone.

Les grandeurs physiques d'un cristal sont périodiques dans l'espace direct de sorte qu'il suffit de les représenter dans la maille élémentaire pour les connaître dans tout le cristal. Il en est de même pour leurs images dans l'espace réciproque, il suffira de les représenter dans la première zone de Brillouin.

**Références :**

- [1] Henry Mathieu. Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques. DUNOD, Paris 2004.
- [2] Hung T.Deip, Physique de la matière condensée DUNOD, Paris (2003)
- [3] Charles Kittel, Physique de l'état solide DUNOD, Paris (2007)
- [4] I. Iakhtine, Métallographie et traitement thermiques des métaux. Edition MIR, Moscou (1986)
- [5] M. Brousseau, Physique de Solide, Masson