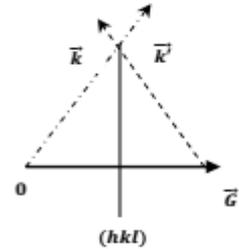


Zones de Brillouin :

Un énoncé simple est important à la condition de diffraction est donné par Brillouin. D'après la condition de diffraction $2\vec{k} \cdot \vec{G}' + G'^2 = 0$, en posant $\vec{G}' = -\vec{G}$, on aura, $2\vec{k} \cdot (-\vec{G}) + G^2 = 0 \Rightarrow 2\vec{k} \cdot \vec{G} + G^2 = 0$, que l'on peut exprimer sous la forme :

$$\vec{k} \cdot \left(\frac{\vec{G}}{2}\right) = -\left(\frac{G}{2}\right)^2$$



On construit le plan perpendiculaire au vecteur \vec{G} en son milieu, tout vecteur \vec{k} mené de l'origine à ce plan satisfera à la condition de diffraction. Le vecteur diffusé aura la direction $\vec{k} + \vec{G}' = \vec{k} - \vec{G}$, avec $\Delta\vec{k} = \vec{k} - \vec{k}'$.

Construction de la 1ère zone de Brillouin :

On choisit un nœud du réseau réciproque et on trace les segments qui le relient à tous ses voisins (voir figure). On trace ensuite les plans médiateurs de chaque segment, le plus petit volume se trouve à l'intérieur des plans est la 1^{ère} zone de Brillouin.

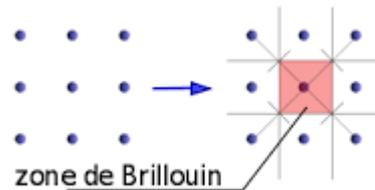


Figure. Zone de Brillouin

Analyse de Fourier de la base :

Quand la condition de diffraction $\Delta\vec{k} = \vec{G}$ est satisfaite, pour un cristal composé de N cellules, l'amplitude de l'onde diffusée est :

$$\mathcal{A} = N \int_{cellule} n(\vec{r}) e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} dV = N \cdot F_G$$

La quantité F_G est appelée **facteur de structure**.

La densité électronique $n(\vec{r})$ est la superposition des densités électroniques n_j associées à chaque atome j de la cellule. Si \vec{r}_j est le vecteur joignant l'origine au centre de l'atome j la fonction $n_j(\vec{r} - \vec{r}_j)$ définit la contribution de chaque atome à la densité électronique au point situé à l'extrémité du vecteur \vec{r} .

Le facteur de structure peut être maintenant écrit sous la forme :

$$F_G = \sum_j \int n_j(\vec{r} - \vec{r}_j) e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} dV$$

on pose, $\vec{\rho} = \vec{r} - \vec{r}_j \Rightarrow \vec{r} = \vec{\rho} + \vec{r}_j$,

on obtient,

$$F_G = \sum_j e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}_j} \int n_j(\vec{\rho}) e^{-i\vec{G} \cdot \vec{\rho}} dV$$

Nous définissons maintenant le facteur de **forme atomique** :

$$f_i = \int n_j(\vec{\rho}) e^{-i\vec{G} \cdot \vec{\rho}} dV$$

Le facteur de structure de la base devient ;

$$F_G = \sum_j f_j \cdot e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}_j}$$

avec, $r_j = x_i \vec{a} + y_i \vec{b} + z_i \vec{c}$, de plus : $\vec{G} \cdot \vec{r}_j = 2\pi(x_i h + y_i k + z_i l)$

d'où ;

$$F_{hkl} = \sum_j f_j \cdot e^{-i2\pi(x_i h + y_i k + z_i l)}$$

F_{hkl} : peut être réel ou complexe.

Si $F_{hkl} = 0$, l'intensité d'une réflexion permise par le réseau est nulle.

Facteur de structure du réseau cc :

La base de la structure cc contient deux atomes situés en (0,0,0) et (1/2,1/2,1/2) donc,

$F_{hkl} = f(1 + e^{-i\pi(h+k+l)})$, en considérons que f est le même,

Si $h + k + l = 2n \Rightarrow F_{hkl} = 2f$

Si $h + k + l = 2n + 1 \Rightarrow F_{hkl} = 0$

Facteur de structure du réseau cfc :

La base de la structure comprend 4 atomes situés en :

(0,0,0), (0,1/2,1/2), (1/2,0,1/2), (1/2,1/2,0), d'où ;

$$F_{hkl} = f[1 + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(k+l)}]$$

Si tous les indices sont de mêmes parités ; $F_{hkl} = 4f$, autre $F_{hkl} = 0$.

Facteur de diffusion atomique :

f_j dépend du nombre et la distribution des électrons du $j^{\text{ème}}$ atome de la maille, ainsi que l'angle de diffusion du rayonnement.

$$f_i = \int n_j(\vec{\rho}) e^{-i\vec{G}\cdot\vec{\rho}} dV$$

en coordonnées sphérique :

$$f_i = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^R n_j(\vec{\rho}) \cdot e^{-iG \cdot \rho \cos \alpha} \rho^2 \sin \alpha \cdot d\rho \cdot d\alpha \cdot d\varphi$$

d'où,

$$f_i = 2\pi \int_0^R \rho^2 n_j(\vec{\rho}) \left(\frac{e^{iG \cdot \rho} - e^{-iG \cdot \rho}}{iG \cdot \rho} \right) d\rho = 4\pi \int_0^R \rho^2 n_j(\vec{\rho}) \frac{\sin \rho \cdot G}{\rho \cdot G} d\rho$$

Les électrons de l'atome j sont confinés (centrés en $\rho = 0$), $\lim_{\rho \rightarrow 0} \frac{\sin \rho \cdot G}{\rho \cdot G} = 1$.

En suppose que $n_j(\vec{\rho})$ est constante (homogène),

$$f_i = 4\pi \cdot n_j \int_0^R \rho^2 \cdot d\rho,$$

Finalement, on aura :

$$f_j = \frac{4}{3} \pi R^3 n_j = Z$$

Z est le nombre total des électrons de l'atome j .