
CHAPITRE II

STRUCTURE DU CRISTAL PARFAIT

Un cristal est formé d'un arrangement périodique d'atomes. Beaucoup d'éléments purs et certains composés ont une structure cristalline à température suffisamment basse mais la plupart des matériaux solides de notre vie quotidienne (bois, plastique, verre) ne sont pas cristallins. Malgré tout la plupart des ouvrages de physique de l'état solide commencent par une discussion de cristallographie. Il y'a deux raisons à cela : tout d'abord le traitement d'un grand nombre d'atomes est énormément simplifié par l'existence d'une périodicité, de plus de nombreux matériaux technologiques (multi-couches, puits quantiques etc..) sont fabriqués sous forme cristalline avec un degré d'ordre et de pureté remarquable.

1 Rappels de cristallographie

1.1 Motif et réseau

Un cristal se caractérise, d'une part par son réseau périodique (appelé réseau de Bravais) et d'autre part par le motif attaché à chaque noeud de ce réseau. Le réseau peut être décrit par une base formée de 3 vecteurs \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} (2 vecteurs en dimension 2 et 1 en dimension 1). Chaque noeud \mathbf{t} du réseau est alors repéré par 3 entiers relatifs p, q, r ($\in \mathbb{Z}$) :

$$\mathbf{t} = p\mathbf{a} + q\mathbf{b} + r\mathbf{c}$$

Il est à noter que la base \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} n'est pas définie de manière univoque. Tout triplet de vecteur définissant le même volume¹ convient comme illustré sur la figure II.1

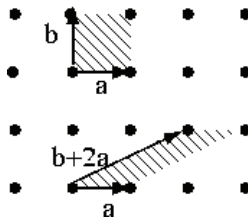


Figure II.1 – Différente définitions possibles de la base du réseau de Bravais carré à deux dimensions.

1.2 Symétries et Classification

En plus de la symétrie de translation les cristaux ont d'autres types de symétrie : rotation, inversion ou même plus compliquées comme la combinaison d'une rotation et d'une translation d'une fraction de vecteur du réseau de Bravais. La cristallographie consiste à classer les cristaux en fonction de leur symétrie. Si on considère toutes les symétries possibles d'un cristal formé de son réseau et de son motif on dénombre 230 groupes d'espace². En revanche si on ne considère que le réseau de Bravais (sans le motif, ou avec un motif sphérique) on distingue 14 réseaux de Bravais différents se classant en 7 systèmes cristallins 5figureII.2) : cubique (3 : simple, centré et faces centrées), tetragonal (2 : simple, centré), orthorombique (4 : simple, base centrée, centré, faces centrées), monoclinique (2 : simple, centré), triclinique (1), trigonal (1), hexagonal (1)³.

La maille primitive (ou élémentaire) du réseau de Bravais est le volume qui répété périodiquement remplit tout l'espace sans recouvrement. De même que les 3 vecteurs de base ne sont pas définis de manière univoque, il existe une infinité de mailles élémentaires possibles. Il en existe cependant une qui reflète la symétrie du réseau, c'est la cellule de Wigner Seitz que nous illustrons sur la figure II.3 pour deux réseaux bidimensionnels (carré et triangulaire).

La cellule de Wigner Seitz s'obtient aisément par un algorithme dit de Voronoï qui consiste à choisir un point du réseau et à tracer les plans bissecteurs des lignes reliant les différents voisins du point central. Cette procédure générale permet de découper l'espace en cellules de Voronoï même dans le cas d'une distribution irrégulière de points (Figure II.3). Dans le cas des réseaux cubiques faces centrées et cubiques centrés on obtient les objets géométriques illustrés sur la figure II.4.

1. Rappelons que le volume défini par le triplet $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ est égal à $V = \mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})$
 2. Remarquons qu'à deux dimensions on ne compte que 17 groupes d'espace
 3. Ce qui fait bien $3 + 2 + 4 + 2 + 1 + 1 + 1 = 14$ réseaux de Bravais

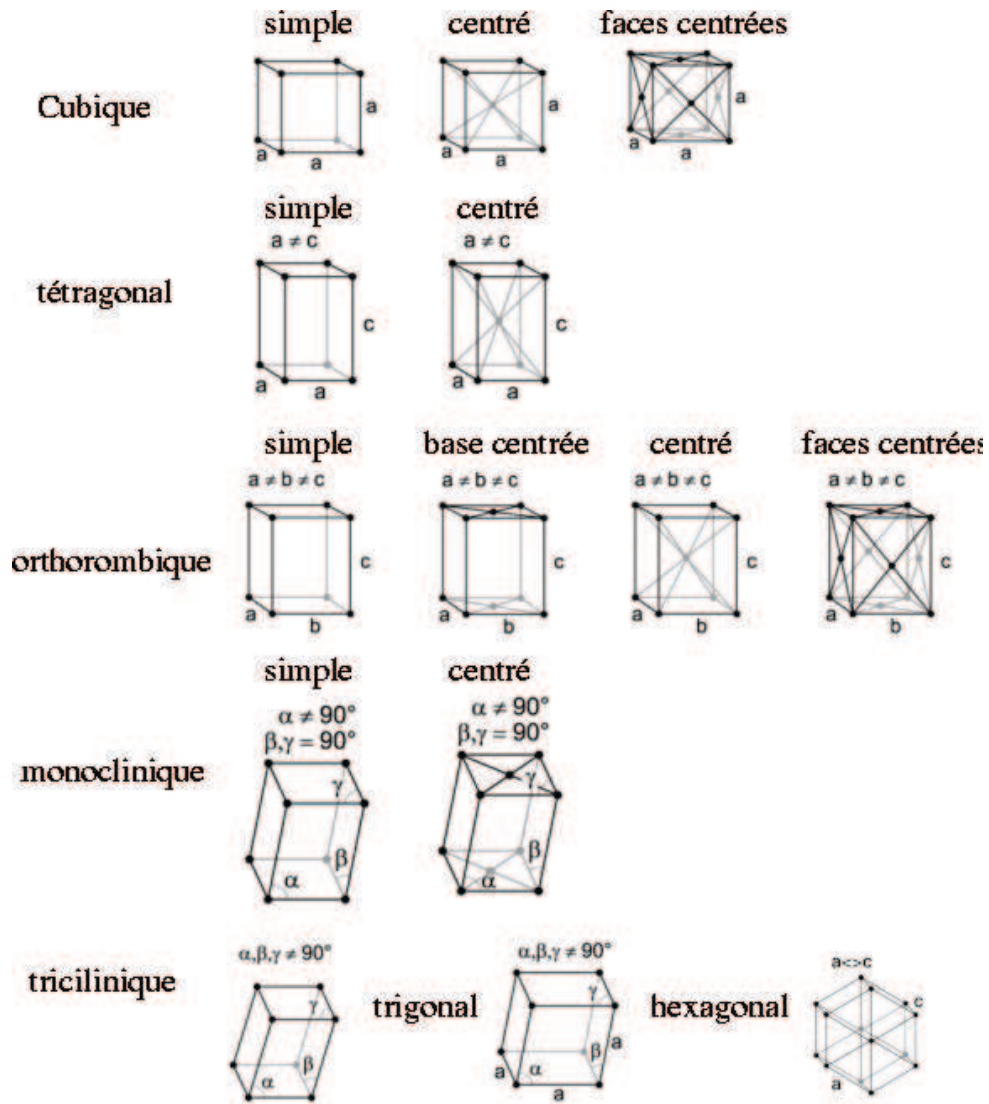


Figure II.2 – Les 7 systèmes cristallins.

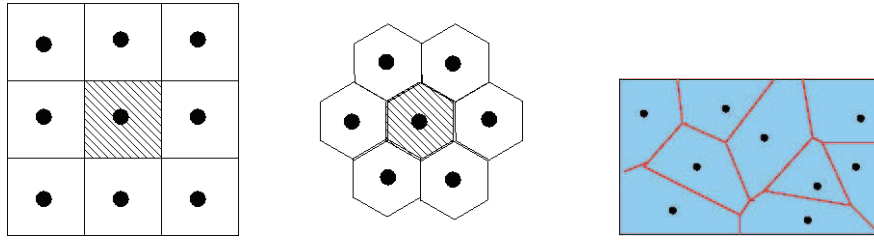


Figure II.3 – Cellule de Wigner Seitz (hachuré) des réseaux carré, hexagonaux et illustration d'un diagramme de Voronoï pour un réseau irrégulier de points.

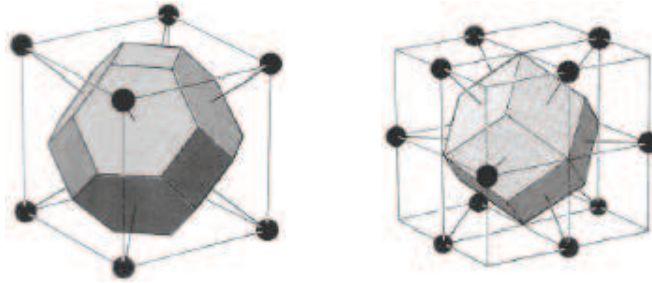


Figure II.4 – Cellules de Wigner Seitz du réseau cubique faces centrées (gauche : dodécaèdre rhombique) et cubique centré (droite : cuboctaèdre).

1.3 Quelques définitions utiles

Dans un réseau de Bravais on note rangée réticulaire $[p, q, r]$ la droite portée par le vecteur $\mathbf{t} = p\mathbf{a} + q\mathbf{b} + r\mathbf{c}$ et passant par les noeuds du réseau. On définit aussi les plans réticulaires (Figure II.5) d'équation $hx + ky + lz = C$. h, k, l sont les indices de Miller du plan réticulaire qui coupe l'axe des coordonnées x, y, z aux points $C/h, C/k$ et C/l .

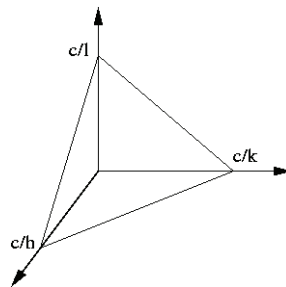


Figure II.5 – Plan réticulaire d'indices de Miller h, k, l

1.4 Symétries permises

Dans un cristal il existe en général des axes de rotation. On note axe d'ordre n un axe autour duquel une rotation d'un angle $2\pi/n$ laisse le cristal inchangé. Dans un cristal les seuls n possibles sont $n = 1, 2, 3, 4, 6$. On remarquera en particulier que la symétrie 5 est interdite. Ce résultat peut se démontrer par des arguments géométriques mais il existe une démonstration algébrique très élégante. Soit R_ϕ la rotation d'un angle ϕ autour de l'axe de rotation que nous noterons Oz . La matrice représentative de cette rotation dans une base orthonormée x, y, z prend la forme classique :

$$\begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Mais il est également possible de représenter R_ϕ dans la base du réseau de Bravais $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$. Dans cette base si la rotation laisse invariante le cristal les vecteurs se transforment en d'autres vecteurs du réseau de Bravais qui sont combinaisons linéaires de $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ avec des coefficients entiers. Par conséquent la matrice représentative de R_ϕ n'est formée que d'entiers (relatifs). Or un résultat fondamental de l'algèbre nous dit que la trace d'un opérateur est un invariant. Par conséquent $Tr(R_\phi) = 1 + 2\cos\phi$ est égal à la trace de la matrice obtenue dans la base $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$. Cette matrice n'étant constituée que d'entiers $1 + 2\cos\phi$ doit lui même être un entier. Il ressort donc que $\phi = 2\pi/5$ est impossible et que $\phi = 0, \pi, 2\pi/3, \pi/2, \pi/3$ sont les seules valeurs possibles.

1.5 Empilements compacts

Nombre de structures cristallines sont obtenues par empilement de sphères dures. Il est donc intéressant de connaître l'empilement le plus compact possible. A une dimension le problème est trivial, il suffit d'empiler les billes (ponctuelles) les unes par dessus les autres et le remplissage est maximum. A deux dimension on obtient un empilement dense en empilant successivement des rangées denses. On obtient un réseau triangulaire comme illustré sur la figure II.6.

Le cas tridimensionnel est beaucoup plus compliqué et sa solution constitue la conjecture de Kepler qui n'a été démontrée que très récemment par Thomas Hales <http://www.math.pitt.edu/thales/kepler>

En revanche les marchands de fruits et légumes connaissent depuis longtemps la solution : l'empilement des oranges !! La solution n'est pas unique et s'obtient en empilant successivement des plans compacts. Une fois un premier plan formé (nous noterons par la lettre A, la position des centres des sphères de ce premier plan) il existe deux types de sites possibles (B ou C) pour

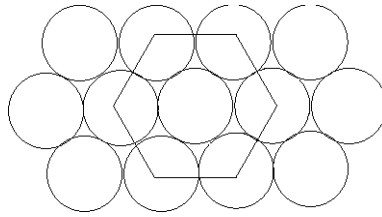


Figure II.6 – Empilement compact à deux dimensions.

"caler" le deuxième plan (Figure II.7)

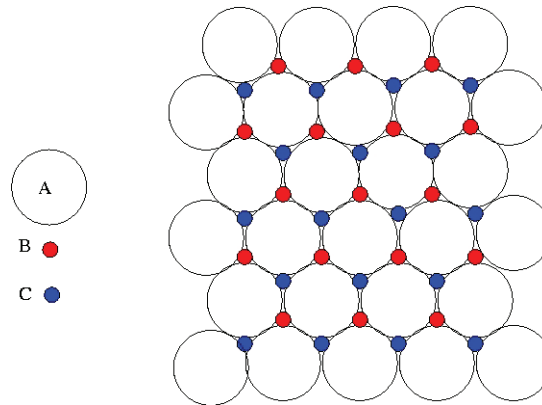


Figure II.7 – Empilement compact de sphères.

On peut ainsi former par empilement successifs un nombre infini de structures que l'on note par la séquence des site A, B ou C. Il existe deux types d'empilement particulièrement importants :

$$\underbrace{AB} \underbrace{AB} \underbrace{AB} \dots : \text{hexagonal compact}$$

et

$$\underbrace{ABC} \underbrace{ABC} \underbrace{ABC} \dots : \text{cubique faces centrées}$$

L'empilement cubique faces centrées est assez "diabolique" car il possède un très grand nombre de symétries et est un des plus répandus dans la nature.

La démonstration du fait que ces empilements tridimensionnels sont effectivement les plus compacts est extrêmement compliquée. A 2D il apparaît rapidement que l'empilement hexagonal est la solution la plus compacte car tous les cercles sont tangents entre eux et il ne reste pas de place disponible. Mais à 3D lorsque l'on essaye de mettre le plus de sphères possibles autour d'une sphère centrale il est impossible de rendre toutes les sphères tangentes. Il reste toujours un

peu de place et il est légitime de se poser la question : peut-on faire mieux ? C'est le problème de la treizième sphère <http://www.mathcurve.com/polyedres/icosaedre/icosaedre.shtml> On peut démontrer qu'il est effectivement impossible de mettre une treizième sphère (démontrée en 1874). Cependant localement on peut arranger les sphères de différentes manières (Figure II.8) et on peut montrer que l'arrangement icosaédrique est plus compact que celui obtenu dans l'empilement des oranges (arrangement cuboctaédrique pour le CFC). Le problème étant que l'icosaèdre a une symétrie cinq incompatible avec une solution périodique.

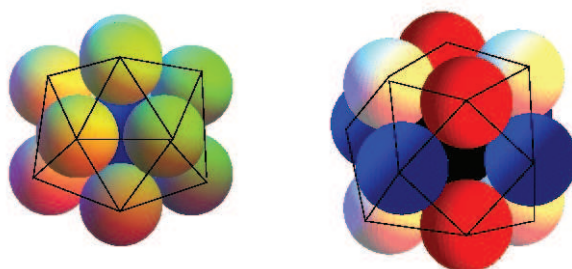


Figure II.8 – arrangement icosaédrique et cuboctaédrique de sphères.

2 Espace et réseau réciproques

2.1 Une dimension

Soit f une fonction périodique de période a : $f(x + a) = f(x)$. La décomposition en série de Fourier de f s'écrit :

$$f(x) = \sum_n A_n e^{2i\pi n \frac{x}{a}}$$

On peut donc écrire formellement :

$$f(x) = \sum_g A_g e^{igx} \quad ; \quad A_g = \frac{1}{a} \int_0^a e^{-igx} f(x) dx$$

Avec $g = n \frac{2\pi}{a}$. g est donc un multiple de $\frac{2\pi}{a}$ et est appelé "vecteur" du réseau réciproque.

2.2 Notion de densité atomique

On considère un ensemble d'atomes situés sur un réseau de période a et l'on définit la densité atomique $\sigma(x)$ par :

$$\sigma(x) = \sum_n \delta(x - na)$$

$\sigma(x)$ n'est pas une vraie fonction mais une distribution périodique de période a dont on peut calculer le développement en série de Fourier (c'est autorisé au sens des distributions) :

$$\sigma(x) = \sum_g A_g e^{igx} \quad ; \quad A_g = \int_0^a e^{-igx} \sigma(x) dx = \frac{1}{a}$$

Soit finalement la relation importante :

$$\sigma(x) = \frac{1}{a} \sum_g e^{igx}$$

Calculons à présent la transformée de Fourier⁴ de $\sigma(x)$:

$$\tilde{\sigma}(q) = \sum_n e^{-iqna} = \frac{1}{a} \sum_g \int e^{-i(q-g)x} dx$$

Or $\int e^{-i(q-g)x} dx = 2\pi\delta(q-g)$ donc on obtient finalement

$$\tilde{\sigma}(q) = \frac{2\pi}{a} \sum_g \delta(q-g)$$

Résultat bien connu de la théorie des distributions : la transformée de Fourier d'un peigne de Dirac est également un peigne de Dirac. Afin d'avoir une vision plus intuitive et physique de ce résultat nous allons le retrouver en effectuant des sommes finies sur $N_{\text{at}} = 2N + 1$ atomes :

$$\sum_{n=-N}^{+N} e^{-iqna} = \frac{\sin \frac{(2N+1)qa}{2}}{\sin \frac{qa}{2}}$$

La fonction $\frac{\sin \frac{(2N+1)qa}{2}}{\sin \frac{qa}{2}}$ possède des maxima pour tous les $q = g = n \frac{2\pi}{a}$. En utilisant le fait que

4. Dans ce cours nous utilisons la définition suivante de la transformée de Fourier d'une fonction $f(x)$:

$$\tilde{f}(q) = \int f(x) e^{-iqx} dx$$

La transformée inverse est

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int \tilde{f}(q) e^{iqx} dq$$

Définitions qui se généralisent en dimension n :

$$\tilde{f}(\mathbf{q}) = \int f(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} d^n x \quad \text{et} \quad f(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int \tilde{f}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{x}\cdot\mathbf{q}} d^n q$$

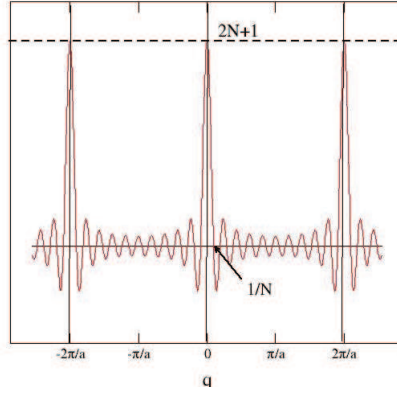


Figure II.9 – Représentation graphique de la fonction $\frac{\sin \frac{(2N+1)qa}{2}}{\sin \frac{qa}{2}}$

$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\sin nq}{\pi q} = \delta(q)$ et que le comportement de la fonction $\frac{\sin \frac{(2N+1)qa}{2}}{\sin \frac{qa}{2}}$ est proche de celui de $\frac{\sin 2n \frac{qa}{2}}{\pi \frac{qa}{2}}$ autour de chaque point du réseau réciproque on retrouve :

$$\tilde{\sigma}(q) = \sum_n e^{-iqna} = \frac{2\pi}{a} \sum_g \delta(q - g) \quad \text{avec} \quad g = n \frac{2\pi}{a}$$

2.3 3D

On généralise les résultats précédents à trois dimension. Commençons par le cas cubique : on considère une fonction périodique de période a dans les 3 directions de l'espace (x, y, z) . $f(\mathbf{x})$ s'écrit :

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{n,m,p} A_{n,m,p} e^{2i\pi n \frac{x}{a}} e^{2i\pi m \frac{y}{a}} e^{2i\pi p \frac{z}{a}} = \sum_{\mathbf{g}} A_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}}$$

$\mathbf{g} = \frac{2\pi}{a}(n, m, p)$ étant un vecteur du réseau réciproque à trois dimension qui est lui aussi cubique (mais de période d'autant plus courte que la maille a est grande).

Remarquons que si \mathbf{t} est une translation du réseau direct on a $f(\mathbf{x} + \mathbf{t}) = f(\mathbf{x})$ et par conséquent étant donné que :

$$f(\mathbf{x} + \mathbf{t}) = \sum_{\mathbf{g}} A_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}} e^{i\mathbf{g} \cdot \mathbf{t}}$$

il ressort que $e^{i\mathbf{g} \cdot \mathbf{t}} = 1$. Que se passe-t-il lorsque le réseau n'est plus orthogonal? Le produit scalaire ne s'écrit plus de manière agréable par rapport à la base du réseau réel $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$. La solution est d'introduire une base duale $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$ telle que :

$$\mathbf{e}_i^* \cdot \mathbf{e}_j = 2\pi\delta_{ij} \quad \text{avec} \quad (\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}) = (\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3) \quad \text{et} \quad (\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*) = (\mathbf{e}_1^*, \mathbf{e}_2^*, \mathbf{e}_3^*)$$

L'utilisation de cette nouvelle base⁵ permêt d'écrire de manière simple le produit scalaire entre un vecteur du réseau réel $\mathbf{t} = p\mathbf{a} + q\mathbf{b} + r\mathbf{c}$ et un vecteur du réseau réciproque $\mathbf{g} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$:

$$\mathbf{g} \cdot \mathbf{t} = 2\pi(ph + qk + rl)$$

Le développement en série de Fourier d'une fonction périodique sur le réseau de Bravais défini par les vecteurs $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ s'écrit alors simplement :

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{g}} A_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}} \quad \text{avec} \quad A_{\mathbf{g}} = \frac{1}{\Omega_{\text{at}}} \int_{\text{WS}} f(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}} d^3x$$

La sommation ayant lieu sur les vecteurs du réseau réciproque de base $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$ et l'intégration sur la cellule de Wigner-Seitz (WS) de volume Ω_{at} . Il est important de noter que ce nouveau réseau (appelé réciproque) n'est pas nécessairement identique au réseau de Bravais. Par exemple on montre que le réseau réciproque du réseau CFC est le réseau CC. On peut également définir une cellule de Wigner-Seitz du réseau réciproque, on l'appelle alors Première zone de Brillouin. Généralisons enfin le résultat obtenu sur la densité électronique :

$$\sigma(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{t}} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{t}) \implies \tilde{\sigma}(\mathbf{q}) = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_{\text{at}}} \sum_{\mathbf{g}} \delta(\mathbf{q} - \mathbf{g})$$

3 Détermination expérimentale des structures cristallines

L'observation du réseau cristallin nécessite l'utilisation d'un rayonnement dont la longueur d'onde est de l'ordre de la distance interatomique, soit quelques Angström.

3.1 Choix du rayonnement

Les rayonnements les plus utilisés expérimentalement sont les photons, les électrons et les neutrons (on utilise aussi parfois des atomes d'Helium pour sonder les surfaces). La relation

5. Remarquons que cette base peut être déterminée par une expression simple :

$$\mathbf{a}^* = 2\pi \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} \quad ; \quad \mathbf{b}^* = 2\pi \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} \quad ; \quad \mathbf{c}^* = 2\pi \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}$$

$V = \mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})$ est le volume de la maille unité.

entre l'énergie de la particule incident et sa longueur d'onde est donnée dans le tableau ci-dessous :

photons	$\lambda = \frac{hc}{E}$	$\lambda(\text{\AA}) = \frac{12,4}{E(\text{keV})}$
neutrons	$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2M_n E}}$	$\lambda(\text{\AA}) = \frac{0,28}{\sqrt{E(\text{eV})}}$
électrons	$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e E}}$	$\lambda(\text{\AA}) = \frac{12}{\sqrt{E(\text{eV})}}$

Dans le cas des photons il faut qu'il aient une énergie de plusieurs keV (Rayons X) pour obtenir une longueur d'onde de l'ordre de l'Å. Pour les neutrons leur énergie est typiquement une énergie thermique (quelques $k_B T_{\text{amb}}$ soit environ 0,1eV) et la longueur toujours de l'ordre de l'Å. Enfin les électrons utilisés en microscopie électronique à transmission ont une énergie de l'ordre de 100keV (notons au passage qu'il faut en principe corriger la formule du tableau par un facteur relativiste au delà de 100keV) et les longueurs d'onde sont assez nettement plus petites que l'Angstrom (typiquement $10^{-1}, 10^{-2}\text{\AA}$).

Les rayons X possèdent le désavantage qu'il n'existe pas de lentilles pour faire de l'optique. L'avantage des neutrons (qui peut aussi être un désavantage) est sa faible interaction et l'analyse de la diffraction peut alors être très précise. Enfin les électrons possèdent le grand avantage d'offrir la possibilité de faire de l'optique (lentilles électromagnétiques), cependant leur très forte interaction avec la matière peut poser des problèmes pour extraire des informations vraiment quantitatives.

3.2 Loi de Bragg

La loi de Bragg s'obtient en considérant que le rayonnement incident est réfléchi par une succession de plans réticulaires (h, k, l) distants de d_{hkl} . La différence de chemin entre deux faisceaux réfléchis par deux plans adjacents est $\delta = 2d_{hkl} \sin \theta$. Il y'aura interférence constructive lorsque la différence de chemin est un multiple de la longueur d'onde, soit la loi de Bragg :

$$2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda$$

3.3 Méthode de Laue

Soit une onde plane incidente de vecteur d'onde \mathbf{k} qui diffuse sur un potentiel diffuseur $V(\mathbf{r})$. L'amplitude diffusée $A_{\text{diff}}(\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k})$ (après un évènement de diffusion) dans la direction donnée par le vecteur d'onde \mathbf{k}' est proportionnelle à la transformée de Fourier du potentiel

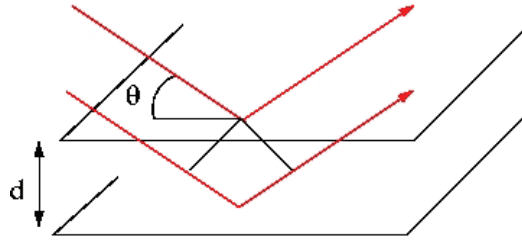


Figure II.10 – Loi de Bragg

$$A_{\text{diff}}(\mathbf{q}) = \int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d^3r$$

Si la diffusion s'effectue sur un cristal le potentiel est périodique et peut s'écrire comme une somme de potentiel "atomiques" centrés sur les noeuds du réseau de Bravais. Pour simplifier nous supposons qu'il n'y a qu'un seul type d'atomes.

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{t}} v_{\text{at}}(\mathbf{r} - \mathbf{t})$$

On a alors :

$$A_{\text{diff}}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{t}} \int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} v_{\text{at}}(\mathbf{r} - \mathbf{t}) d^3r$$

par changement de variable on obtient :

$$A_{\text{diff}}(\mathbf{q}) = \underbrace{\sum_{\mathbf{t}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{t}}}_{\text{facteur de structure}} \underbrace{\int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} v_{\text{at}}(\mathbf{r}) d^3r}_{\text{facteur de forme}}$$

Or on a vu que

$$\sum_{\mathbf{t}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{t}} = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_{\text{at}}} \sum_{\mathbf{g}} \delta(\mathbf{q} - \mathbf{g})$$

Il vient donc que

$$A_{\text{diff}}(\mathbf{q}) = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_{\text{at}}} \sum_{\mathbf{g}} \delta(\mathbf{q} - \mathbf{g}) f_{\text{at}}(\mathbf{g})$$

Le facteur de forme $f_{\text{at}}(\mathbf{g})$ étant la transformée de Fourier du potentiel atomique diffuseur. Les vecteurs \mathbf{k} et \mathbf{k}' doivent donc différer par un vecteur du réseau réciproque $\mathbf{g}_{hkl} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$. Or on montre que le vecteur \mathbf{g}_{hkl} est perpendiculaire à une famille de plans réticulaires distants

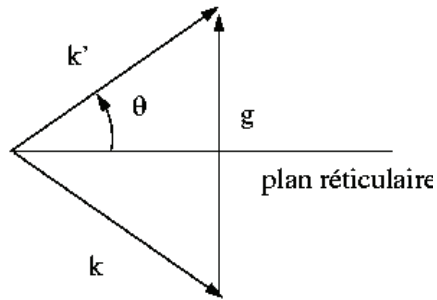


Figure II.11 – loi de Laue

d'une longueur d_{hkl} telle que $\|\mathbf{g}_{hkl}\| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$. Il vient donc d'après la figure II.11 que :

$$\|\mathbf{g}_{hkl}\| = \frac{2\pi}{d_{hkl}} = 2\|\mathbf{k}_{hkl}\| \sin \theta = 2\frac{2\pi}{\lambda}$$

Ce qui permet de retrouver la loi de Bragg. Notons enfin une construction géométrique très utile : la construction d'Ewald. La diffusion étant élastique la norme du vecteur de diffusion est conservée, soit $\|\mathbf{k}\| = \|\mathbf{k}'\|$. \mathbf{k} et \mathbf{k}' appartiennent donc à une même sphère, appelée sphère d'Ewald. Cette sphère passe par construction par un noeud du réseau réciproque. La diffusion n'étant possible que lorsque $\mathbf{k}' - \mathbf{k}$ est un vecteur du réseau réciproque, cette condition se traduit géométriquement par le fait que la sphère doit intercepter un noeud du réseau réciproque, comme indiqué sur la figure II.12

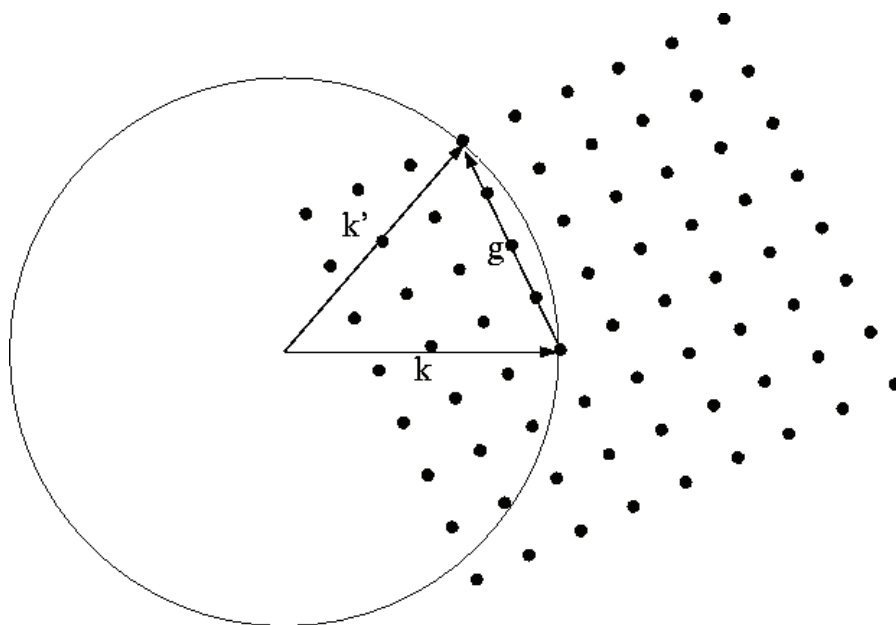


Figure II.12 – *Construction d'Ewald*