

Physique des matériaux

Indice de miller

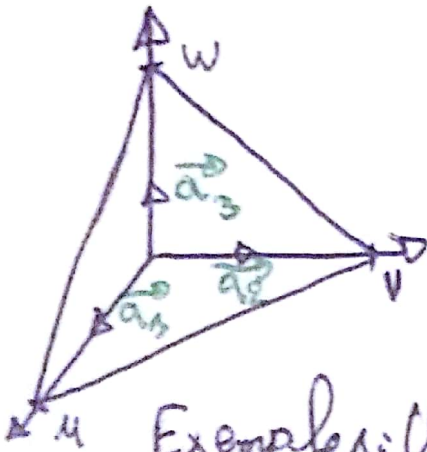
Une famille de plans parallèles entre eux sera représentée par trois entiers relatifs h, k, l appelés indices de Miller (hkl)

* Dans la base $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)$ l'équation du plan le plus proche de l'origine est: $hx + ky + lz = 1$

L'équation de plan $n^{\text{ème}}$: $hx + ky + lz = n$

* pour déterminer les indices de miller.

on cherche les points d'intersection u, v, w de ce plan
on calcule les inverses $\frac{1}{u}, \frac{1}{v}, \frac{1}{w} \Rightarrow (hkl)$



$$h = \frac{m}{u}, \quad k = \frac{m}{v}, \quad l = \frac{m}{w}$$

Exemple 1: $(u, v, w) \Rightarrow (2, 1, 1) \Rightarrow hkl \Rightarrow (\frac{1}{2}, 1, 1)$

Exemple 2: $(\frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$ alors $2(\frac{1}{2}, 1, 1) = (1, 2, 2) \Rightarrow (hkl)$

Exemple 3: $(3, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ alors $(\frac{1}{3}, -2, 2) \Rightarrow (\frac{1}{3}, -6, 6) \Rightarrow (\bar{3}66)$
(hkl)

Chapitre 28

Diffraction des rayons X

diffraction observée si: $a \leq \lambda$

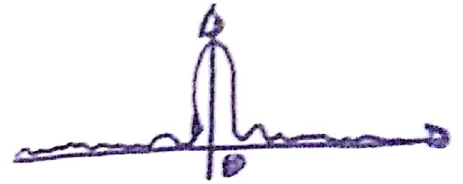


$$\theta = \frac{\lambda}{a} \quad L = \frac{2\lambda D}{a}$$

intensité:

$$I = I_0 \frac{\text{Sin}^2(\alpha x)}{x^2}$$

I_0, α cte



Etude de la diffraction cristalline

$d_i \rightarrow 1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$

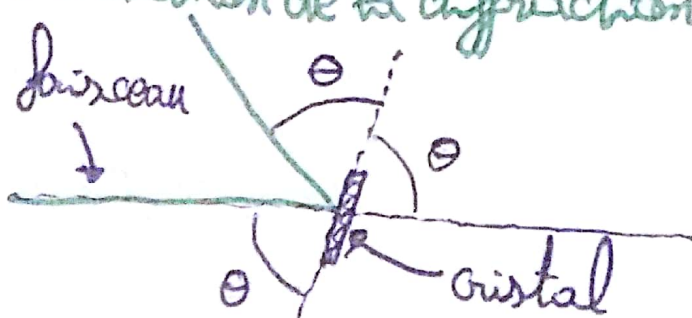
Energie d'une onde électromagnétique $E = h\nu = \frac{hc}{d_i} = 123,4 \frac{\text{Kev}}{d_i}$

* le faisceau incident:

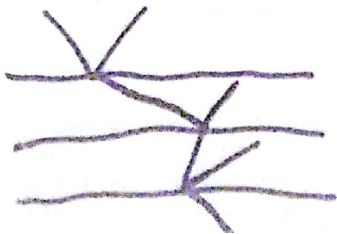
neutron: $E_n = \frac{h^2 \lambda_n^2}{2M_n} \Leftrightarrow \lambda_n (\text{Å}) \approx \frac{0,28}{\sqrt{E_n (\text{ev})}}$

électron: $E_e = \frac{h^2 \lambda_e^2}{2m_e} \Leftrightarrow \lambda_e (\text{Å}) \approx \frac{12}{\sqrt{E_e (\text{ev})}}$

* observation de la diffraction des rayons X par un réseau



formulation de LAUE comme les rayons de Bragg



$$2d \sin \theta = n \lambda$$

n l'ordre

loi de Bragg

* Facteur de Structure

$$F(\Delta \vec{K}) = \int \rho[\exp(2i\pi \Delta \vec{K} \cdot \vec{r}_j)] \cdot dV$$

$$F(h, k, l) = \sum_{j=1}^n f_j \exp[-2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j)]$$

$$F(h, k, l) = \sum f_i e^{-2\pi i (hx + ky + lz)}$$

$F(h, k, l)$ est appelé facteur de Structure, il représente la contribution d'une maille à l'amplitude diffusée

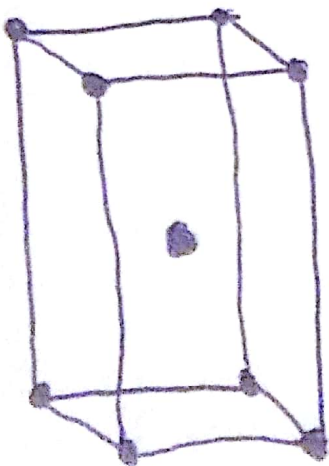
f_i : facteur forme atomique

n : nombre d'atomes de la base

Application à facteur de Structure.

calculer les facteurs de Structure de magnésium

En déduire les 10 premières réflexions permises de cette structure.



* le réseau est hexagonal simple
 $a = b \neq c$ et $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$

* le motif est formé de deux atomes.

* les coordonnées $(0,0,0)$ et $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2})$

Notation de densité d'états

① Par l'unité de volume

$$\text{Volume} = \frac{8\pi^3}{L_x L_y L_z} \quad \text{avec}$$

$$\text{Volume} = \frac{(2\pi)^3}{V} \quad \text{avec } V \text{ est le volume de cristale}$$

$$V^* = V = (2\pi)^3 \Rightarrow V^* = \frac{(2\pi)^3}{V} = \frac{(2\pi)^3}{L_x L_y L_z} \leftarrow \text{dimension de cristale}$$

la densité d'état dans l'espace des k

$$\frac{1}{\text{Volume}} = \frac{V}{(2\pi)^3} = \frac{1}{V^*} = f(k)$$

la densité d'état par l'unité de cristale

$$f = \frac{1}{(2\pi)^3}$$

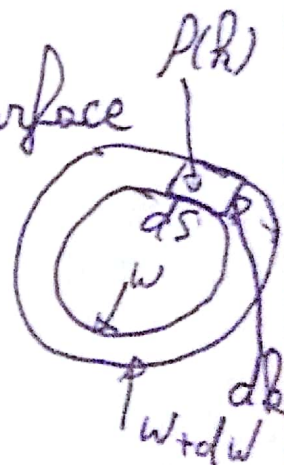
② Densité d'état des oscillation $g(\omega)$

$g(\omega)$ = densité d'état / unité de fréquence

$g(\omega)d\omega$ = nombre d'état qui se trouvent entre les surfaces

$$g(\omega)d\omega = \int f(k) d^3k \quad 4\pi k^2 dk$$

$$g(\omega)d\omega = \frac{V}{8\pi^3} \int d^3k =$$



dans la surface

$$S = \frac{(2\pi)^2}{L_x L_y}, \quad g(k)dk = \frac{1}{S} d^2k = \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} 2\pi k dk$$

$$\text{donc: } g(k)dk = \frac{L_x L_y}{2\pi} k dk \Rightarrow g(k) = \frac{L_x L_y}{2\pi}$$

Notation, modèle de drayze

(5)

$$U = \int_0^{W_0} g(W) \vec{E} dW \quad W(k) = v_s k$$

$$d^3k = d\left(\frac{4}{3}\pi k^3\right) = 3 \times \frac{4}{3}\pi k^2 dk = 4\pi k^2 dk$$

$$d^2k = d(\pi k^2) = 2\pi k dk ; dk = 2dK$$

Modèle d'électron libre

(1) Fonction de distribution de fermie-dirac

$$f(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1}$$

avec $\beta = \frac{1}{k_B T}$; μ est le potentiel chimique qui dépend de la température à 0K ; $\mu = E_F$ énergie Fermi

Pour des énergies supérieures à E_F tel que $E - \mu \gg k_B T \Rightarrow f(E) = e^{-\beta(E-\mu)}$

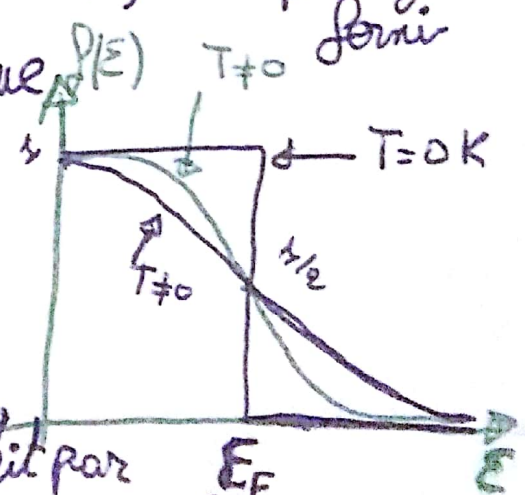
$$\Leftrightarrow f(E) = e^{\beta\mu} e^{-\beta E} = cte e^{-\beta E}$$

dans ce cas le gaz d'électron est décrit par une distribution de Boltzmann $f(E) = cte e^{-\beta E}$

Matériau semi-conducteur

(2) Spectre électromagnétique

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2E_{cm}}} = \frac{h}{\sqrt{2eU_n}}$$



$$\lambda(A^\circ) = \frac{12,26}{\sqrt{E_c(1 - 0,98 \times 10^{-6} E_c)}}$$

Particule relativité

Particule non relativité: $\lambda(A^\circ) = \frac{12,26}{\sqrt{E_c(\text{ev})}}$

$$E_c = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{3}{2} kT$$

Energie d'un électron: $E_c = e v = \frac{1}{2} m v^2$

Energie d'un photon: $E = h \nu = \frac{h c}{\lambda}$

dens gaz parfait: $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m v} = \frac{h}{\sqrt{m^3 kT}}$

Equation Schrödinger à une particule

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta Q_i = E_i Q_i$$

(6)

$$\Rightarrow \begin{cases} K_x = \frac{2\pi m x}{L_x} \\ K_y = \frac{2\pi m y}{L_y} \\ K_z = \frac{2\pi m z}{L_z} \end{cases}$$

Rayon de Fermi: $K_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$

Energie de Fermi: $E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$

Temperature de Fermi: $T_F = \frac{\hbar^2}{k_B} (3\pi^2 n)^{2/3}$

Vitesse de Fermi: $V_F = \frac{\hbar K_F}{m} = \sqrt{\frac{2m E_F}{m}} = \sqrt{2 E_F / m}$

$G(E)$: la densité d'état électronique

$$G(E) dE = 2G(k) d^3k$$

en 3D $n=3$

$$G(E) dE = 2G(k) d^3k = 2 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 d^3k$$

ona: $E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \Rightarrow k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} E^{1/2}$

donc: $d^3k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \cdot \frac{1}{2} E^{-1/2} dE$ (7)

$$G(E) dE = 2 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 4\pi k^2 dk$$

$$G(E) dE = \frac{2L^3}{8\pi^3} 4\pi \frac{2m}{\hbar^2} E \cdot \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \cdot \frac{1}{2} E^{-1/2} dE$$

$$G(E) dE = \frac{L^3 (2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} E^{1/2} dE$$

$$G(E) = \frac{L^3 (2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} E^{1/2} = \frac{L^3}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2}$$

$g(E)$ est le nombre de places disponible entre E et $E+dE$

$$g(E) = \frac{G(E)}{L^3} = \frac{L^3}{2\pi^2} \times \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2} \frac{1}{L^3}$$

$$g(E) = \frac{E^{1/2}}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2}$$

Même chose pour 1D

E_n 2D

$$d^2k = 2\pi k dk$$

$$G(k) d^2k = \frac{1}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} d^2k$$

$$G(k) = \frac{L^2}{(2\pi)^2}$$

(8)

$G(E)$: la densité d'état électronique

$$G(E) dE = 2G(k) d^2k = \frac{2L^2}{(2\pi)^2} \cdot 2\pi k dk$$

On a: $E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \Rightarrow k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \Rightarrow dk = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{1}{2} E^{-1/2} dE$

$$G(E) dE = \frac{2L^2}{(2\pi)^2} \cdot 2\pi \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \cdot \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{1}{2} E^{-1/2} dE$$

$$G(E) dE = \frac{L^2}{\pi} \times \frac{2m}{\hbar^2} E^{1/2} \cdot E^{-1/2} dE$$

$$G(E) = \frac{mL^2}{\pi \hbar^2}$$

$g(E)$.

$$g(E) = \frac{G(E)}{L^2} = \frac{\frac{L^2 m}{\pi \hbar^2}}{L^2} = \frac{m}{\pi \hbar^2} \Rightarrow g(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2}$$