

# Résumé de cours M1 Microélectronique

## Module : Physique des composants semi-conducteurs 1

**Prof. Abdelhamid BENHAYA**

Directeur du Laboratoire d'Electronique Avancée  
Responsable Salle Blanche

Département d'Electronique  
Faculté de Technologie  
Université Batna 2

Domaines d'intérêt:

Technologie des semi-conducteurs  
(Matériaux et dispositifs photovoltaïques)

e-mail: [a.benhaya@univ-batna2.dz](mailto:a.benhaya@univ-batna2.dz)  
[benhaya\\_abdelhamid@yahoo.fr](mailto:benhaya_abdelhamid@yahoo.fr)

Tel: +213 (0)7 73 87 37 84



# BIBLIOGRAPHIE

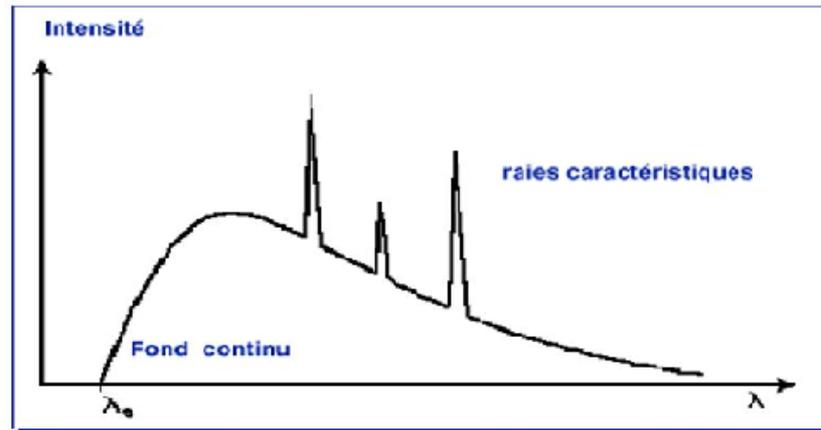
## **Langue Anglaise**

1. Neil W. Ashcroft and N. David Mermin, Solid state physics, Brooks Cole, 1976.
2. Laszlo Mihaly, Michael C. Martin, Solid state physics: problems and solutions, Wiley-Interscience, 1996.

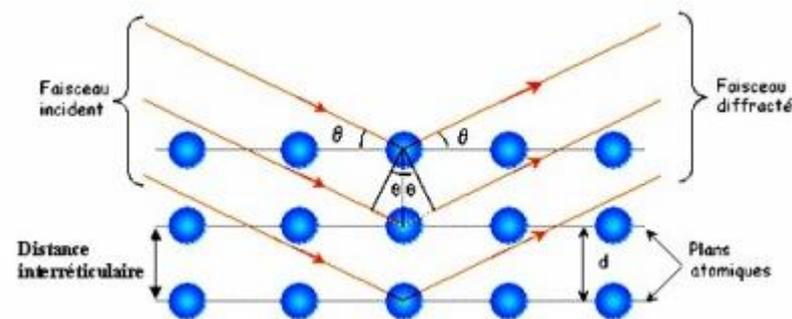
## **Langue Française**

1. Charles Kittel, 'Physique de l'état solide, Dunod, 2007
2. Hung T, Diep, Physique de la matière condensée, Dunod, 2003

**Lien: <https://youtu.be/a69UxSTBI1Q>**



# Introduction à la cristallographie



# PLAN DE L'EXPOSÉ

Propriétés des matériaux et structure cristalline

Du désordre complet à l'ordre parfait

Structure cristalline

Maille élémentaire

Maille élémentaire de Wigner-Seitz

Opérations de symétrie

Systèmes et réseaux cristallins

Repérage des directions et des plans

Densité des nœuds

Sites dans les réseaux cristallins

Taux de compacité

Assemblage ABAB... et ABCABC...

Réseau réciproque

Nœuds du réseau cristallin et nœuds du réseau réciproque

Diffraction cristalline

Rayonnements utilisés

- RX
- Electrons
- Neutrons

Loi de Bragg

Méthode de Laue

Méthode du cristal tournant

Méthode des poudres ou de Debye-Scherrer

Facteur de Structure



# STRUCTURE CRISTALLINE

## Propriétés des matériaux et structure cristalline

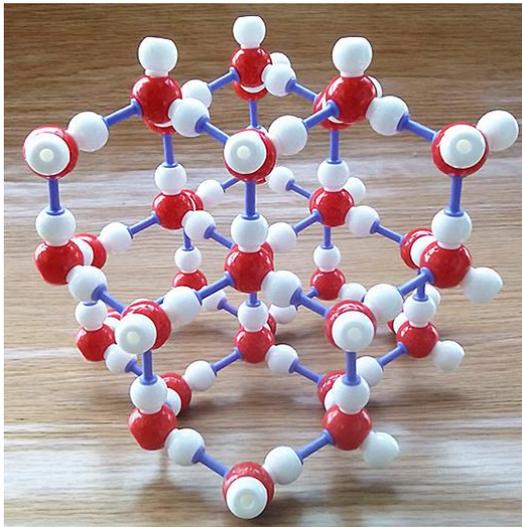
Les propriétés des matériaux (propriétés physiques, chimiques, mécaniques,...) et leur comportement en service dépendent en grande partie de leur structure cristalline.

## C'est quoi la structure cristalline?

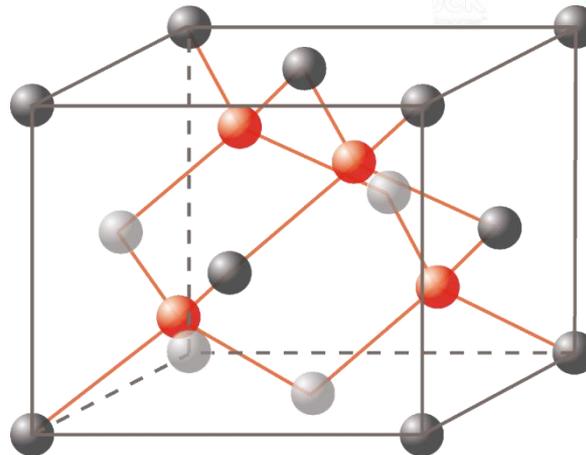
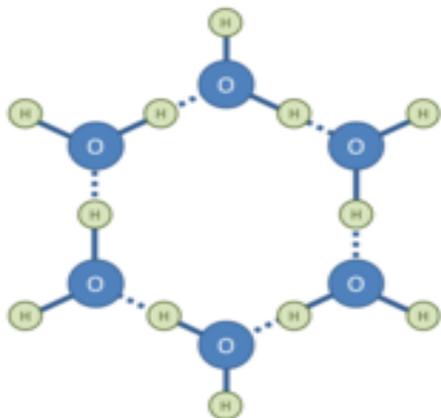
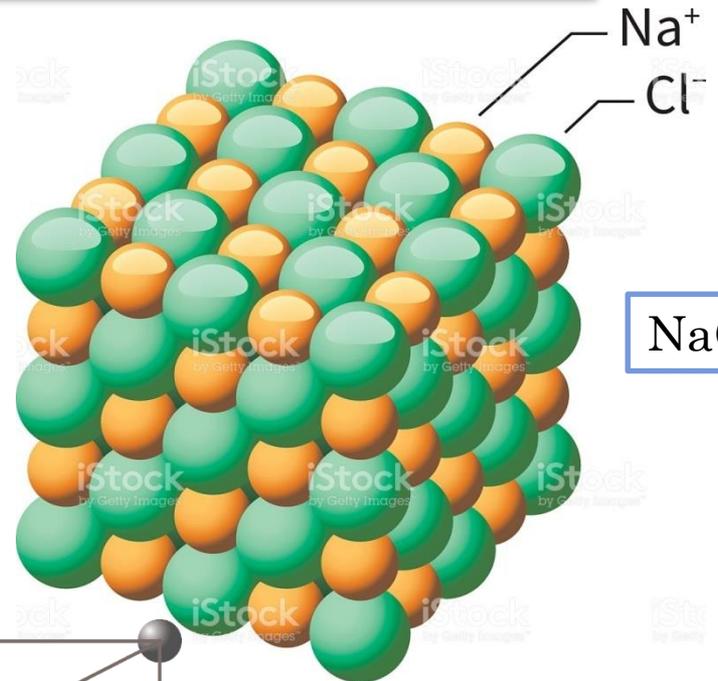
La structure cristalline ou l'architecture atomique est le mode de répartition des atomes ou des molécules dans les solides et les relations géométriques existant entre les positions de tous les atomes.



# QUELQUES STRUCTURES CRISTALLINES



Glace



Diamant  
(tous les atomes  
sont du carbone)



# STRUCTURE CRISTALLINE

## Du désordre complet à l'ordre parfait

### Désordre complet ou gaz

A cause de l'agitation thermique, la position de chaque particule (atome ou molécule) par rapport à une autre varie continuellement dans le temps. Donc, **pas d'ordre**.

### Ordre parfait ou solides cristallins

Chaque atome occupe une position bien définie par rapport à tous les autres atomes quelque soit la distance qui les sépare.

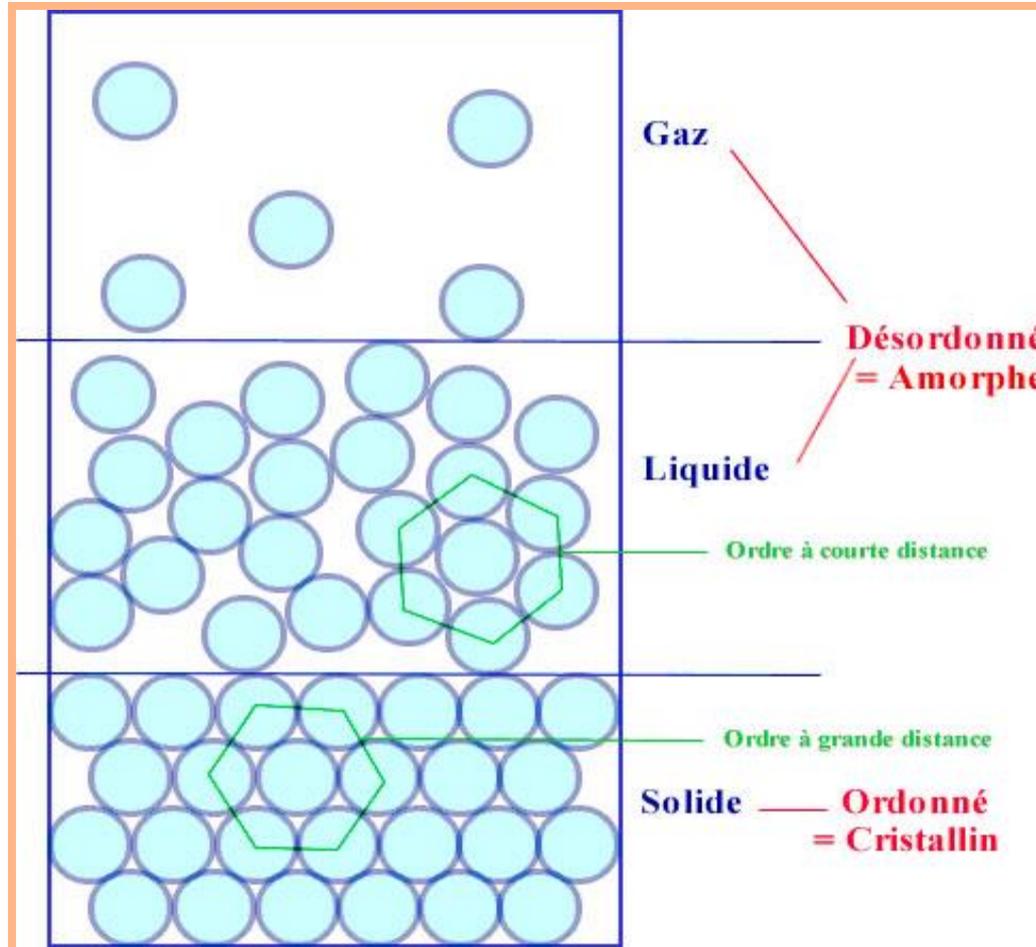
Donc, **ordre à courte et à longue distance**.

### Cas intermédiaire ou solides amorphes (Verres)

Dans de telle situation, la structure du solide est tout à fait semblable à celle du liquide (ne diffère de l'état liquide que par le taux de viscosité). C'est une structure amorphe ou vitreuse qui est une structure isotrope, **ordre à courte distance**.



# STRUCTURE CRISTALLINE



# STRUCTURE CRISTALLINE

## Réseau périodique d'atomes ou cristal idéal

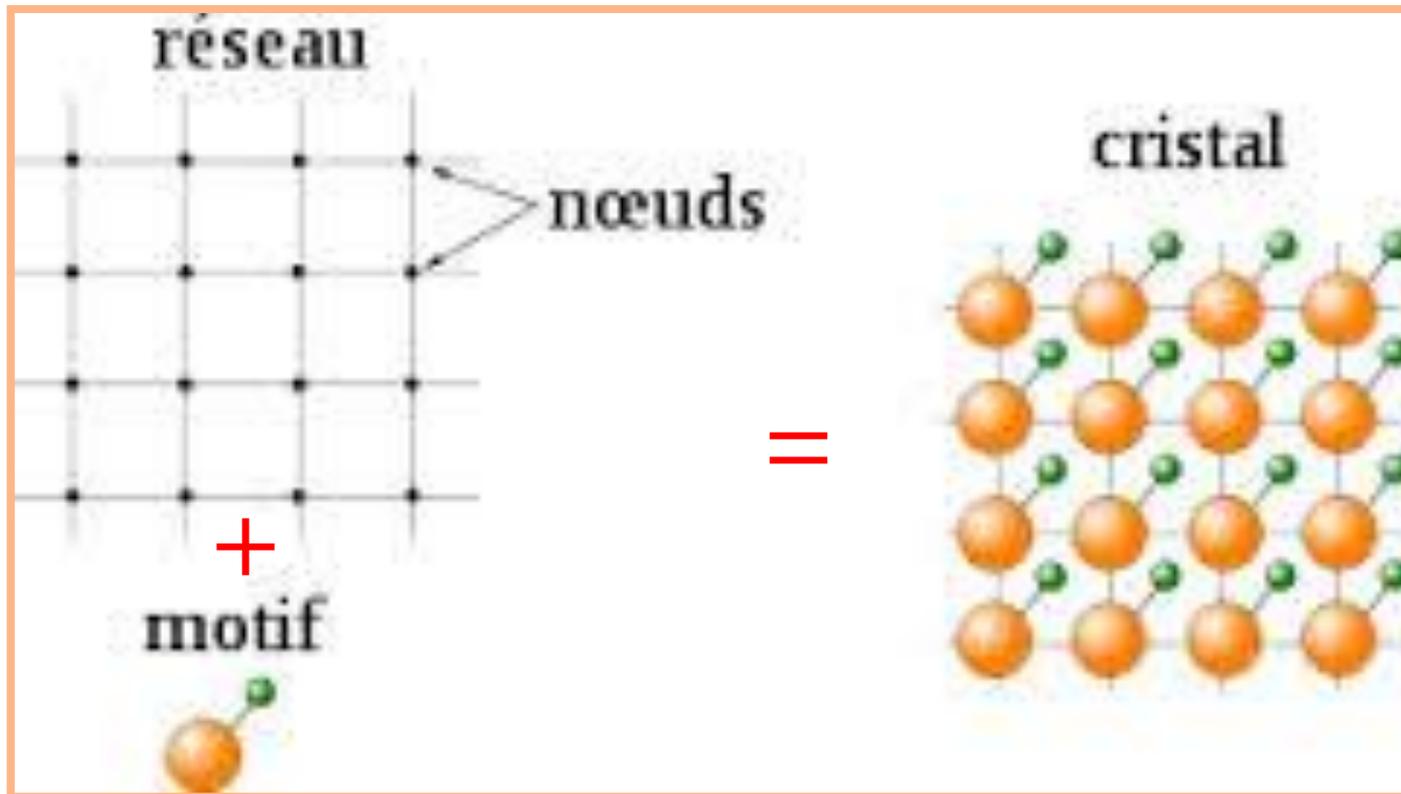
Un cristal idéal peut être construit par une répétition régulière d'unités structurales identiques : atomes ou molécules

Les positions de ces atomes dans l'espace constituent un ensemble de points appelés réseau.

Dans le langage des cristallographes, ces points sont appelés **nœuds** et l'unité structurale est appelée **base** ou **motif**.



# STRUCTURE CRISTALLINE

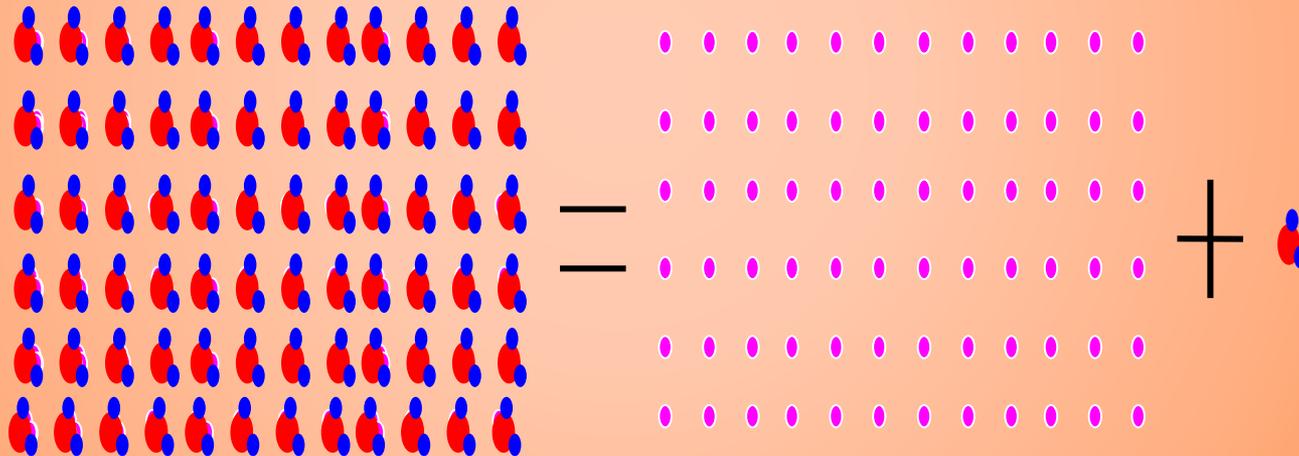


# STRUCTURE CRISTALLINE

## Structure cristalline

Il en découle de ce que nous venons de voir la relation logique suivante :

**Structure cristalline = Réseau + Base**

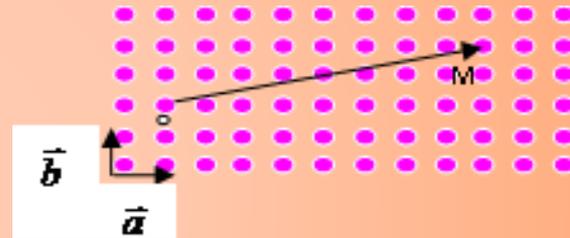


# STRUCTURE CRISTALLINE

## Vecteurs de translation

Dans le cas d'un cristal idéal, les nœuds du réseau sont définis, à partir d'une origine quelconque O, par l'équation :

$$O\vec{M} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$$



où  $n_1, n_2, n_3$ , sont des entiers arbitraires et  $\vec{a}, \vec{b}$  et  $\vec{c}$  sont **trois vecteurs non coplanaires** appelés **vecteurs de translation fondamentaux**.

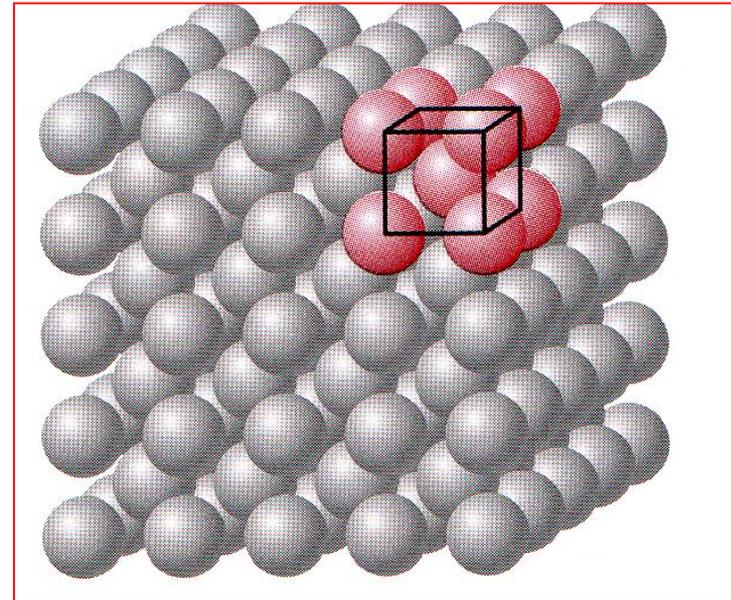


# STRUCTURE CRISTALLINE

## Maille élémentaire

Dans l'espace à trois dimensions, la **maille primitive** ou **maille élémentaire** est schématisée par **un parallélépipède**

La **répétition** de ce **parallélépipède** dans les **trois directions** conduit à la formation du **cristal**



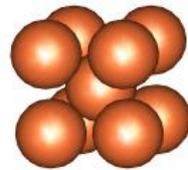
La maille cristalline est le Plus petit volume conservant toutes les propriétés géométriques, physiques et chimiques du cristal.



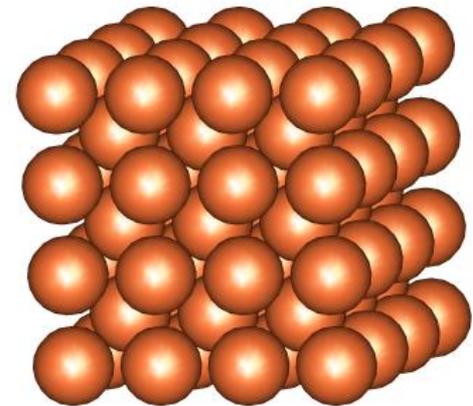
# STRUCTURE CRISTALLINE

## Exemple du Fer $\alpha$ (Cubique centré)

l'empilement de 27 cubes  
élémentaires



Donne



▼  
Maille  
élémentaire

Cristal

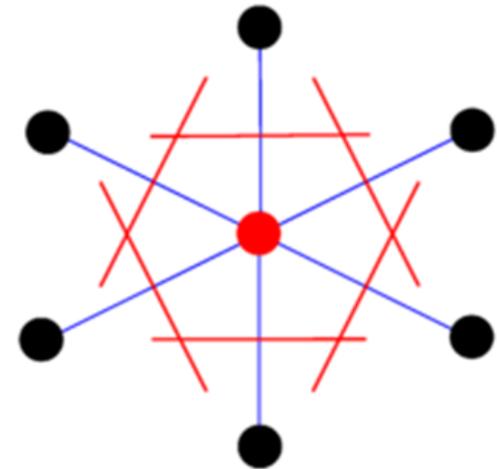


# STRUCTURE CRISTALLINE

## Maille élémentaire de Wigner-Seitz

Le plus petit volume (à trois dimensions) ou la plus petite surface (à deux dimensions) obtenu en joignant un nœud donné à tous ses voisins par des segments et en traçant les plans médiateurs dans un espace à trois ou à deux dimensions est appelé la maille élémentaire de Wigner-Seitz.

Tout l'espace (à trois dimensions) ou toute surface (à deux dimensions) peut être rempli par ces mailles.



# STRUCTURE CRISTALLINE

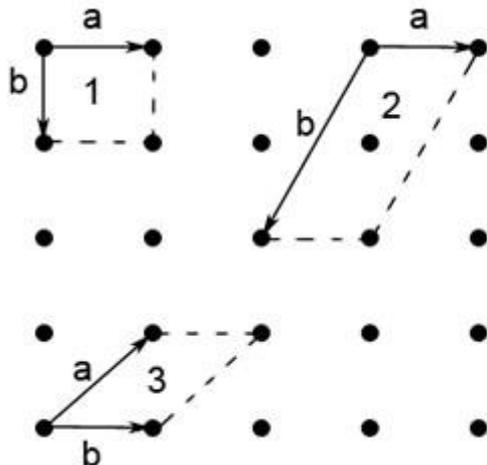
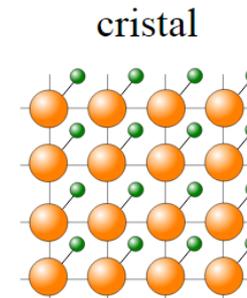
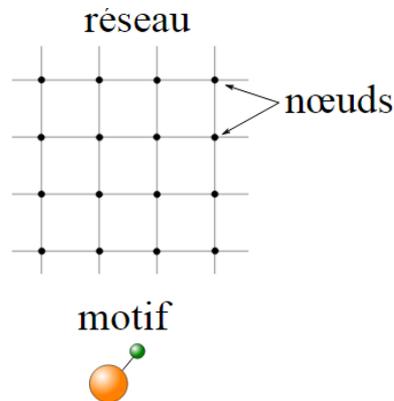
## Résumé des principales définitions

- **Cristal:** Un cristal idéal est constitué par la répétition régulière, dans tout l'espace, d'atomes ou de groupements d'atomes.
- **Réseau:** C'est l'ensemble des points (ou nœuds) à partir desquels l'environnement atomique (nature chimique des atomes et leur orientation) observé est le même qu'à l'origine.
- **Base (ou motif):** C'est l'atome ou le groupement d'atomes constituant l'unité structurale affectée à un nœud du réseau.



# STRUCTURE CRISTALLINE

## Exemples



La bonne maille :

- le plus petit parallélogramme
- les vecteurs de base doivent être parallèles aux symétries du réseau

La bonne maille est la 1, bien que cela soit discutable (entre 1 et 3)

Nous choisissons la maille où nous trouvons plus de symétrie

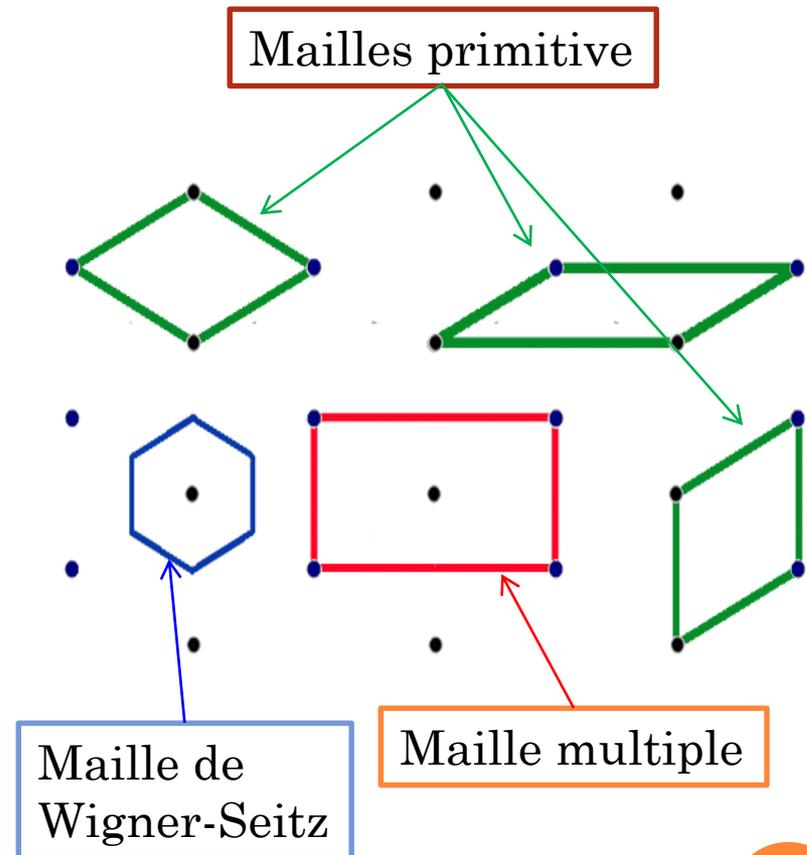
# STRUCTURE CRISTALLINE

## Maille simple

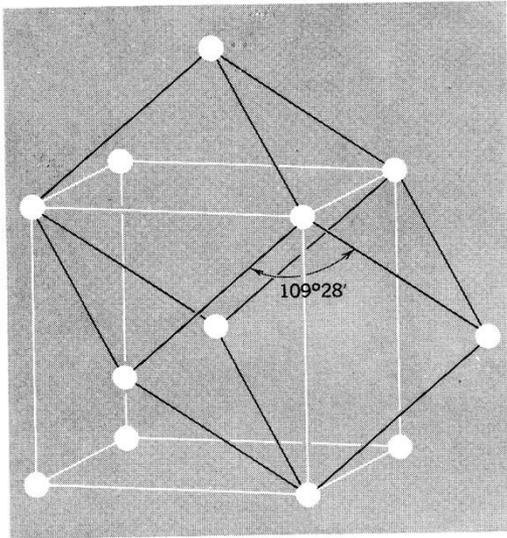
Les vecteurs  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  et  $\vec{c}$  seront fondamentaux si les translation permettent de décrire tous les nœuds du réseau cristallin, alors le parallélépipède correspondant constitue la **maille simple** ou **primitive**.

## Maille multiple

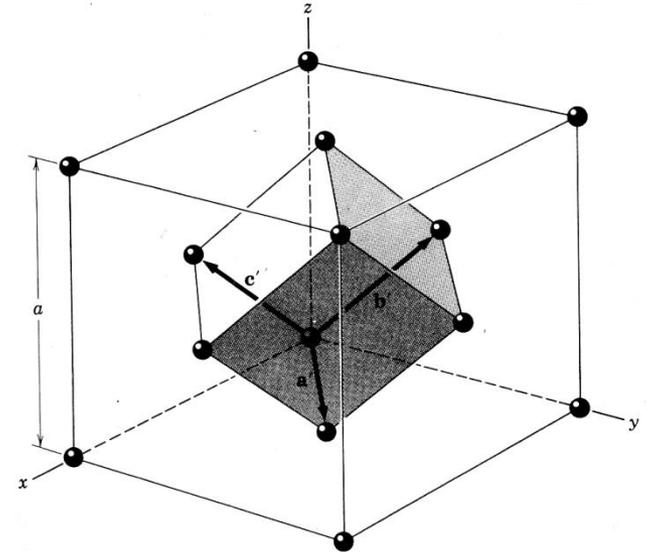
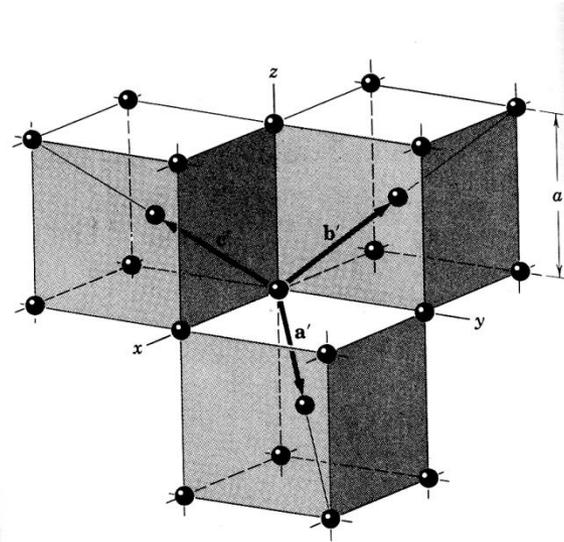
Une maille multiple sera constituée à partir de vecteurs  $\vec{a}'$ ,  $\vec{b}'$  et  $\vec{c}'$  non fondamentaux si le parallélépipède contient  $n$  points équivalents ( $n > 1$ ); le motif sera donc constitué par  $n$  motifs élémentaires et l'ordre sera  $n$



# STRUCTURE CRISTALLINE



Maille élémentaire du réseau cubique centré



Maille élémentaire du réseau cubique faces centrées

Comme la maille élémentaire ne mis pas à profit la symétrie du cristal, on utilise la maille multiple (cc, cfc,...)



# STRUCTURE CRISTALLINE

## Opérations de symétrie

L'ordre qui règne dans les cristaux est à l'origine des opérations de symétrie qui laissent la structure cristalline invariante.

Ces opérations sont les :

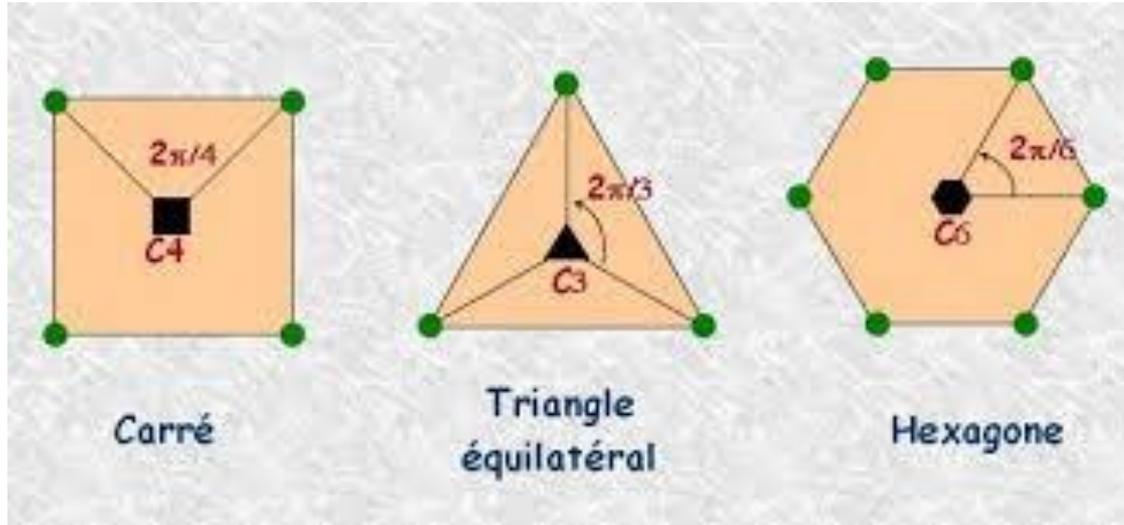
- Translation ;
- Rotation ;
- Symétrie (par rapport à un point, à un axe ou à un plan).

## Remarque

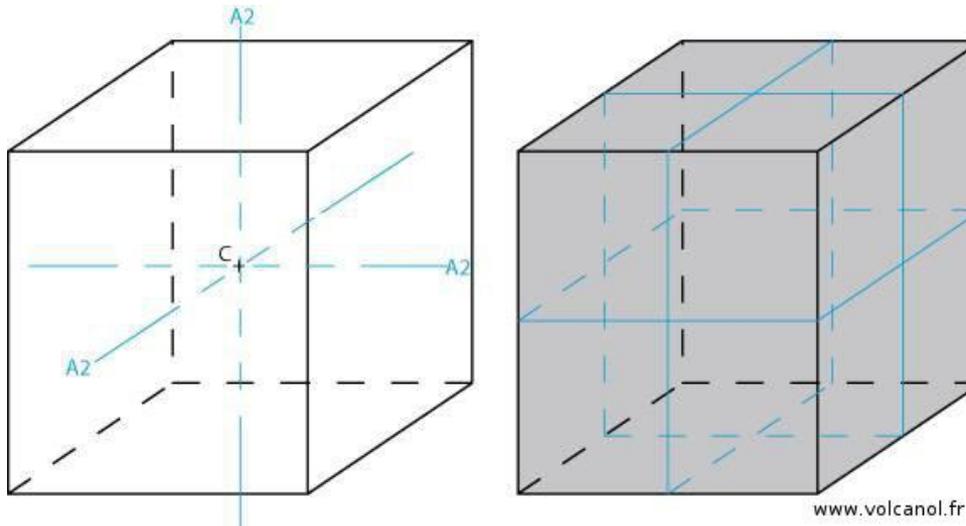
- Les deux dernières opérations (rotation et symétrie) sont appelées transformations ponctuelles.
- Notons aussi qu'on peut avoir d'autres opérations de symétrie, appelées transformations composées, formées du produit de transformations ponctuelles et de translations.



# STRUCTURE CRISTALLINE



Symétrie dans les cristaux

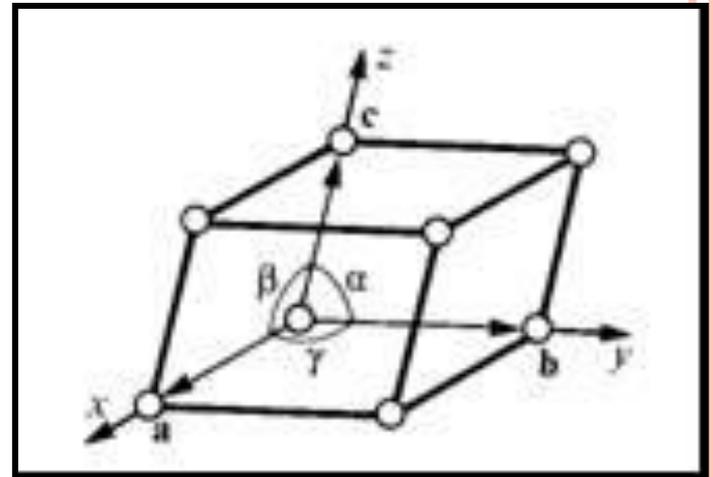


# STRUCTURE CRISTALLINE

## Systèmes et réseaux cristallins

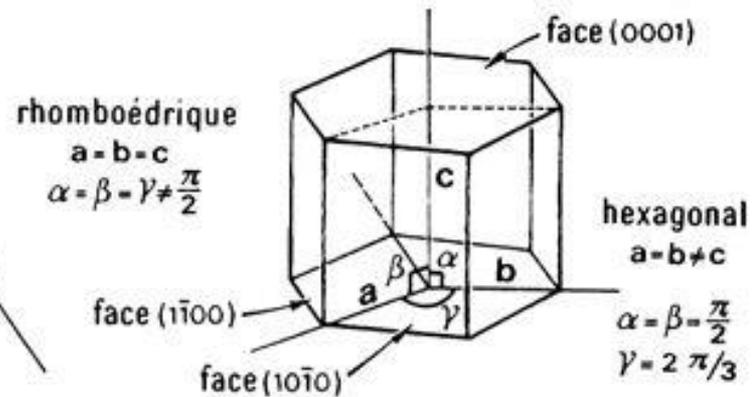
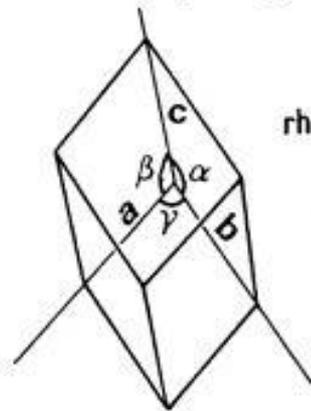
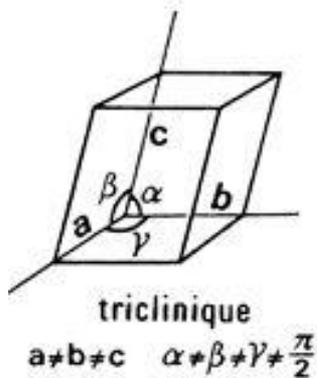
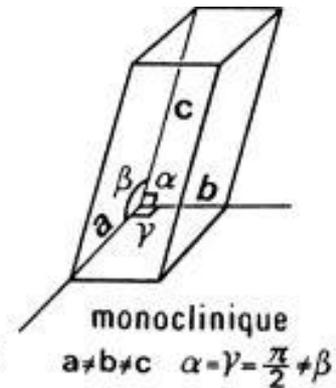
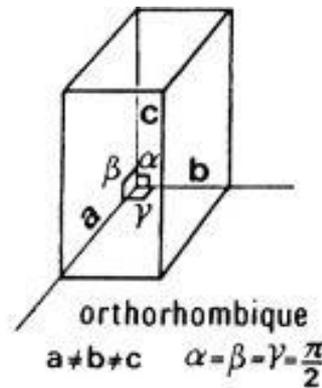
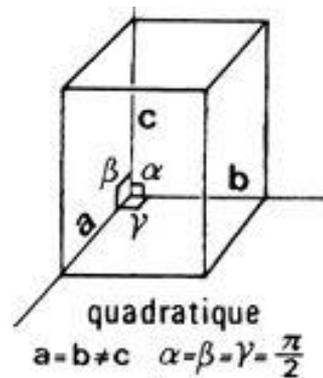
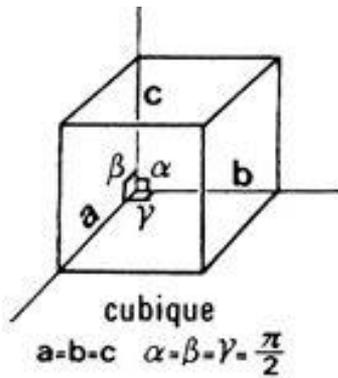
Selon les relations qui s'établissent entre les trois vecteurs de base et les trois angles  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$ , on peut distinguer sept systèmes à savoir :

- Triclinique ;
- Monoclinique ;
- Orthorhombique ;
- Rhomboédrique ;
- Hexagonal ;
- Quadratique ;
- Cubique.



# STRUCTURE CRISTALLINE

## Les 7 systèmes cristallins



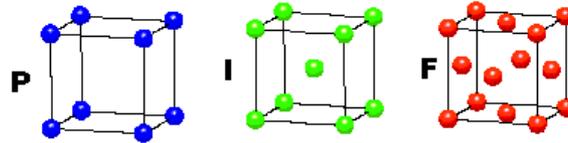
# STRUCTURE CRISTALLINE

## Les 14 Réseaux de Bravais

### Cubique

$$a = b = c$$

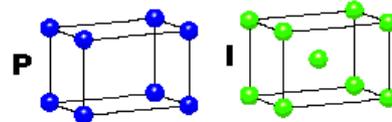
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



### Quadratique

$$a = b \neq c$$

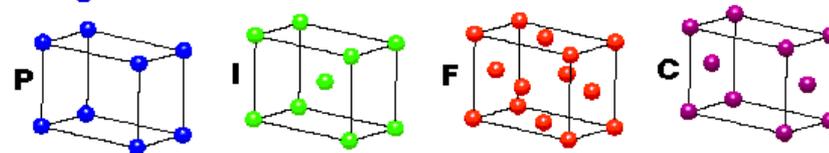
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



### Orthorhombique

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

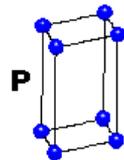


### Hexagonal

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ$$

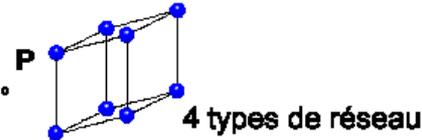
$$\gamma = 120^\circ$$



### Trigonal

$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$



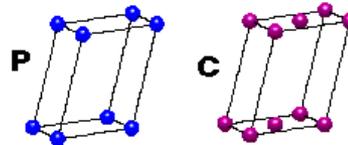
4 types de réseau

### Monoclinique

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \gamma = 90^\circ$$

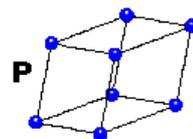
$$\beta \neq 120^\circ$$



### Triclinique

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



4 types de réseau

- P Primitif
- I centré
- F toutes faces centrées
- C 1 face centrée

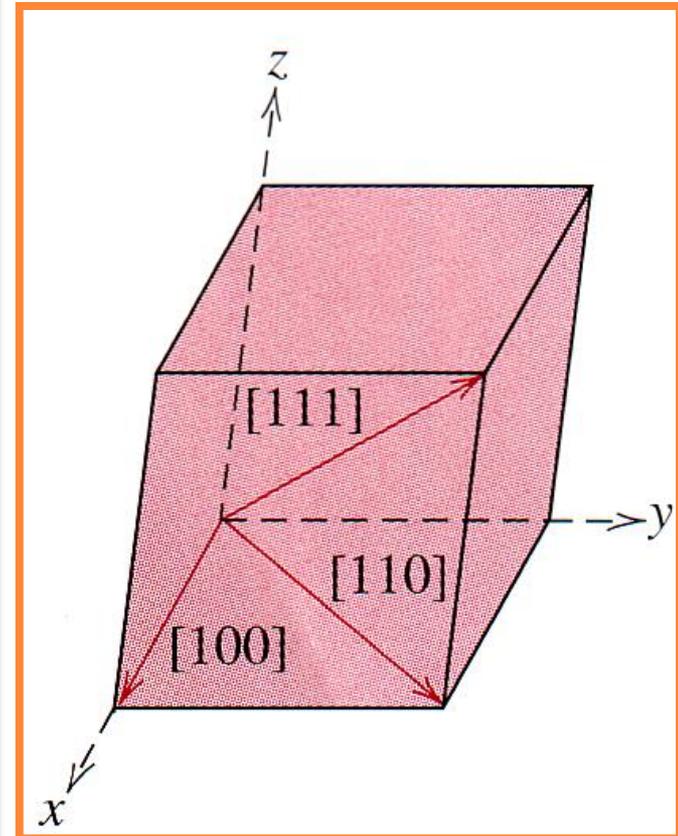
+ 7 systèmes cristallins  
= 14 réseaux de BRAVAIS



# STRUCTURE CRISTALLINE

## Repérage des directions et des plans

- Le **système d'axes** utilisé pour le repérage **des directions** et **des plans** est toujours celui qui correspond aux **trois vecteurs de translation** du réseau
- Le **choix de l'origine**, situé à un **nœud** du réseau, est **arbitraire** car tous les **nœuds** sont **géométriquement équivalents**.
- En outre, les **longueurs mesurées** selon les trois directions  $Ox$ ,  $Oy$ ,  $Oz$  qui portent les trois vecteurs le sont **en fonction de ces trois vecteurs** dont le module de chacun est pris **comme unité de mesure**.
- La **direction** d'une **droite passant par l'origine** et le point de **coordonnées  $u$ ,  $v$ , et  $w$**  est désignée par trois **indices  $u$ ,  $v$  et  $w$**  qu'on représente en pratique par le symbole  $[uvw]$ .
- Conséquence : *Les coordonnées d'un point au sommet d'une maille sont toujours des multiples entiers des vecteurs fondamentaux.*
- **Remarque:**
  - La **famille** des directions **équivalentes** est notée par le symbole  $\langle uvw \rangle$

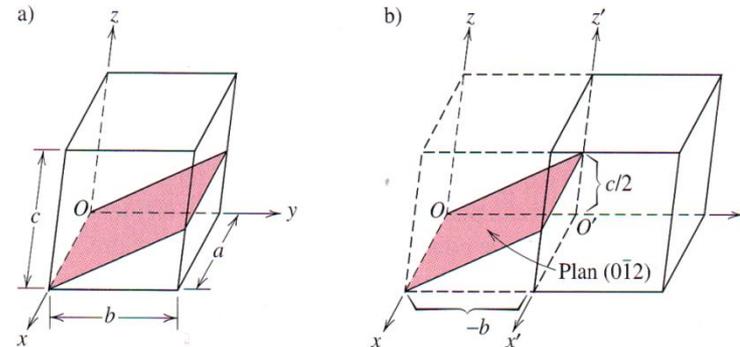
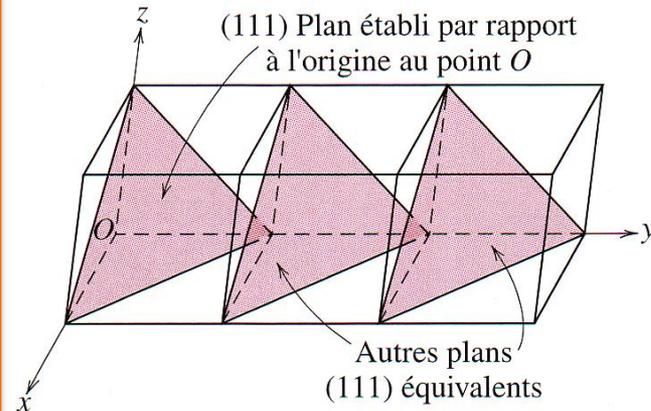


# STRUCTURE CRISTALLINE

## Repérage des directions et des plans

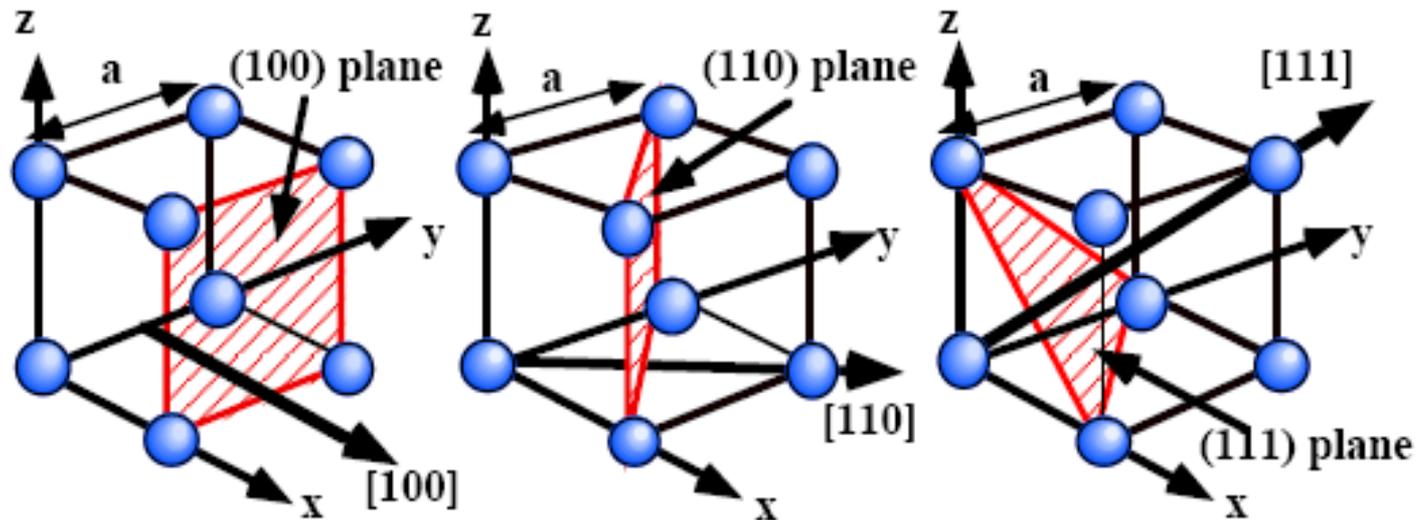
### Indices de Miller des plans

- Par définition, les indices de Miller, notés  $(hkl)$ , sont les inverses des intersections du plan avec les trois axes du cristal considéré mesurés en fonction des longueurs  $a$ ,  $b$  et  $c$  avec la condition : *l'origine des axes ne doit pas appartenir au plan à repérer.*
- En pratique, on procède de la façon suivante :
  - On détermine les coordonnées des intersections du plan avec les axes  $Ox$ ,  $Oy$  et  $Oz$  en fonction des longueurs  $a$ ,  $b$  et  $c$  ;
  - On prend les inverses de ces intersections ;
  - On réduit les trois fractions au plus petit commun dénominateur ;
  - On prend les trois numérateurs ainsi obtenus représentant les trois indices  $h$ ,  $k$  et  $l$  par rapport aux trois axes  $Ox$ ,  $Oy$  et  $Oz$ .
- **Remarque:** La famille des plans équivalentes est notée par le symbole  $\{hkl\}$

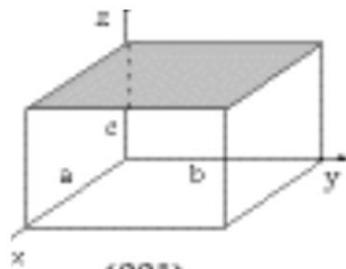


# STRUCTURE CRISTALLINE

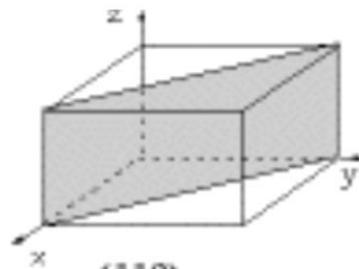
## Repérage des directions et des plans Exemple d'application



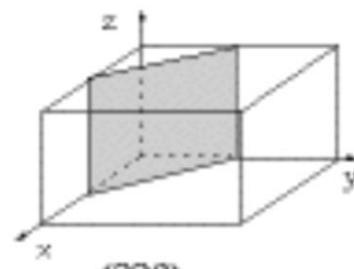
# STRUCTURE CRISTALLINE



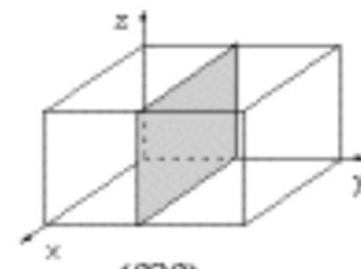
(001)



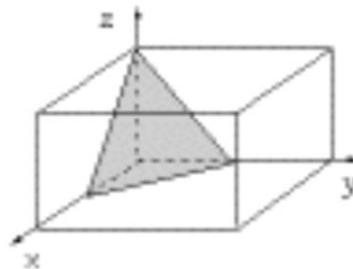
(110)



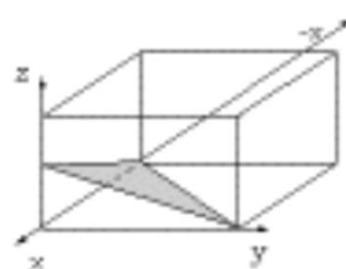
(220)



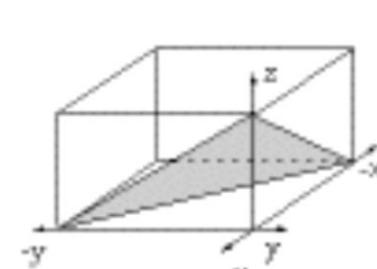
(020)



(221)



( $\bar{1}$ 12)



( $\bar{1}\bar{1}$ 1)

Divers plans remarquables, et leurs indices de Miller.



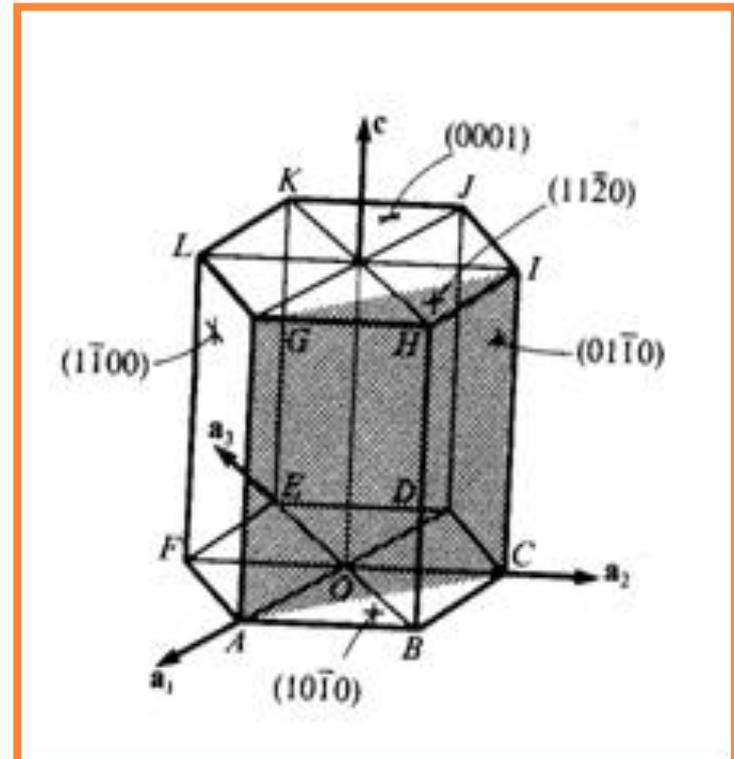
# STRUCTURE CRISTALLINE

## Structures hexagonales et indices de Miller-Bravais

Dans le cas de la structure hexagonale et dans le but de distinguer les familles de plans et la symétrie hexagonale, on utilise des indices appelés **indices de Miller-Bravais**.

Dans ce cas, on utilise **quatre axes** portant les vecteurs  **$a_1$ ,  $a_2$ ,  $a_3$ , et  $c$** . Les **trois premiers sont coplanaires** et forment entre eux **des angles de  $120^\circ$** ; le **quatrième est normal au plan** qui contient les trois premiers ( $a_1$ ,  $a_2$  et  $a_3$ ).

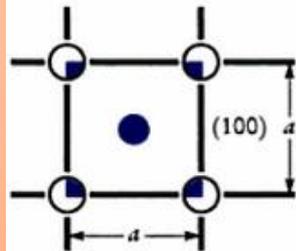
En pratique, les indices de Miller-Bravais sont notés  $(hkil)$  et on les obtient de la même façon que les indices de Miller.



# STRUCTURE CRISTALLINE

## Densité des nœuds

Par son importance en pratique (**déformation par cisaillement selon les plans et directions denses**), il est important de connaître comment déterminer la densité des nœuds soit par unité de longueur (**densité selon une direction**), soit par unité de surface (**densité sur un plan**), soit **par unité de volume**.



Densité des nœuds dans le plan (100) :

$$\left(4 \times \frac{1}{4} + 1\right) \frac{1}{a^2} = \frac{2}{a^2}$$

# STRUCTURE CRISTALLINE

## Sites dans les réseaux cristallins

Dans les réseaux cristallins, **les sites ou interstitiels** sont **les espaces libres** laissés **entre les atomes du réseau**.

Un **site** est un **polyèdre** dont **chacun des sommets** correspond **aux centres des atomes** qui l'entourent.

### Exemple: Cas du cubique simple.

Dans ce cas, on a un seul site cubique (au centre d'un cube) dont les sommets sont les nœuds de la maille élémentaire.

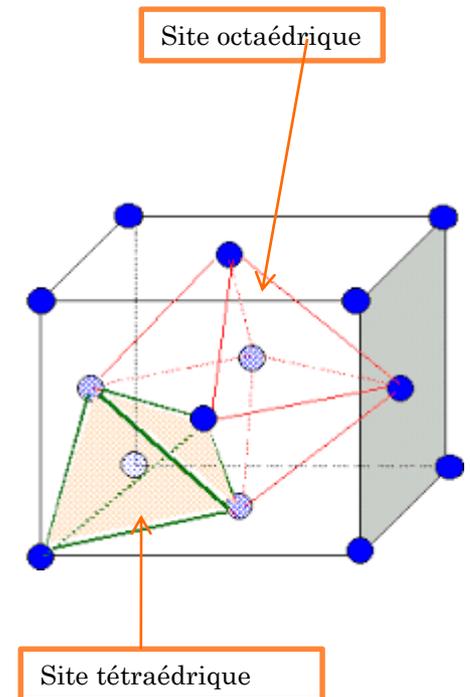


# STRUCTURE CRISTALLINE

Le type et le nombre de sites qu'on peut trouver dans les structures cfc, hc, cc, cs.

Structure cristalline	Type de Sites	Nombre de sites Par maille	Nombre de sites par atome
cfc	T	8	2
	O	4	1
hc	T	12	2
	O	6	1
cc	T	12	6
	O	6	3
cs	C	1	1

**cfc** : Cubique à faces centrées    **hc** : Hexagonal compact    **cc** : Cubique centré    **cs** : Cubique simple  
**T** : Sites tétraédriques    **O** : Sites octaédriques    **C** : Sites cubiques



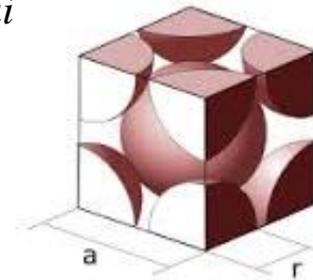
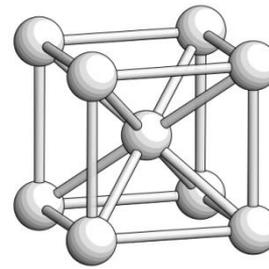
# STRUCTURE CRISTALLINE

## Taux de compacité

Il est donc clair, d'après ce qui précède, que le volume de la maille élémentaire n'est pas totalement rempli.

Pour quantifier cela, on introduit la notion du taux de compacité défini comme étant le rapport du volume occupé par les atomes au volume totale de la maille considérée.

$$\tau = \frac{V_{occupé}}{V_{mai}}$$



$$\frac{V_{ts}}{V_m} = \frac{2 \cdot \frac{4}{3}\pi R^3}{\left(\frac{4R}{\sqrt{3}}\right)^3} = \frac{2 \cdot \frac{4}{3}\pi \cdot R^3}{\frac{64}{3\sqrt{3}} \cdot R^3} = 68\%$$

$$\tau_{cc} = 68\%$$

$$\tau_{fcc} = 74\%$$

$$\tau_{hc} = 74\%$$

$$\tau_{Dia} = 34\%$$

$$\tau_{cs} = 52\%$$



# STRUCTURE CRISTALLINE

## Assemblage ABAB...

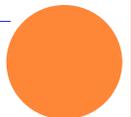
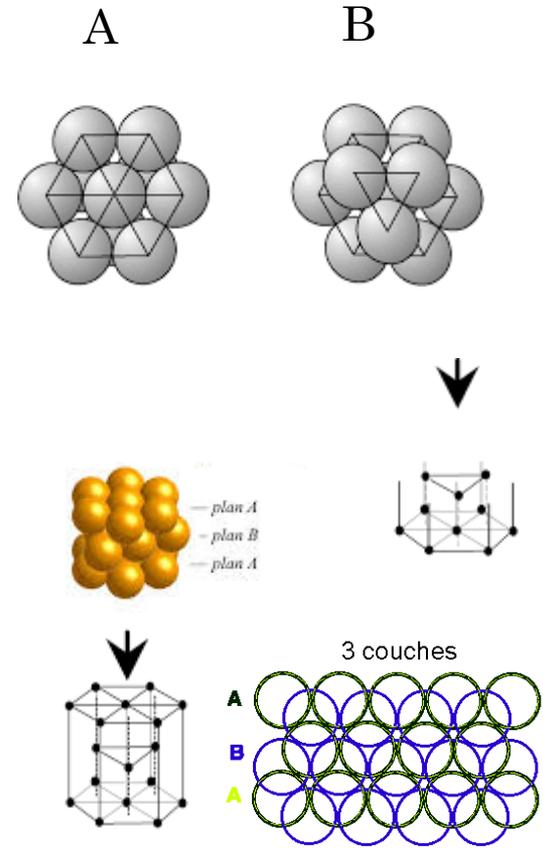
Dans **un plan**, on obtient **un assemblage compact** des **sphères rigides** quand **chacune d'elle** est **entourée de six proches voisines** formant un **réseau plan hexagonal**.

Ce premier plan est appelé **A**.

Pour avoir un empilement compact à **trois dimensions**, la **deuxième couche B** ne sera pas déposée directement au-dessus de la première, mais dans une position telle que **chaque sphère de la couche B** soit en contact **avec trois sphères de la couche A**.

Pour la **troisième couche**, on la place dans les **interstices de la deuxième** qui correspondent à la **position des sphères de la couche A**.

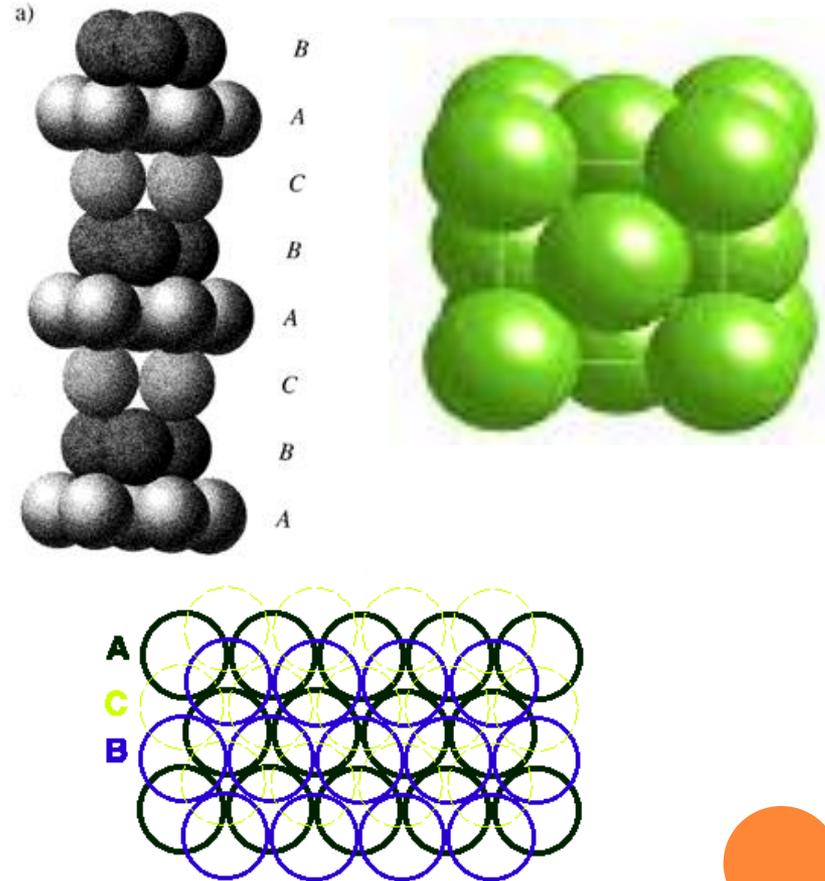
Nous obtenons ainsi un **empilement ABABAB....** qui correspond à **la structure hexagonale compacte**.



# STRUCTURE CRISTALLINE

## Assemblage ABCABCABC...

Si on place les sphères de la **troisième couche** dans des **interstices de la couche B** qui **ne correspondent** encore à aucune des couches précédentes, on obtient un empilement, **différent du premier**, du **type ABCABCABC...** ayant le **même taux de compacité** que l'empilement ABAB et qui correspond à **la structure cfc.**



# STRUCTURE CRISTALLINE

## Réseau réciproque

Ce réseau a été introduit pour simplifier les calculs notamment pour la théorie de la diffraction des rayonnements par les structures périodiques (les cristaux).

### Définition

Soit un réseau cristallin dont les vecteurs fondamentaux sont  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ . Le réseau réciproque de ce réseau est construit à partir des vecteurs  $\vec{A}, \vec{B}, \vec{C}$  tels que :

$$\vec{A} = \sigma^2 \frac{\vec{b} \wedge \vec{c}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \wedge \vec{c})} \quad \vec{B} = \sigma^2 \frac{\vec{c} \wedge \vec{a}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \wedge \vec{c})} \quad \vec{C} = \sigma^2 \frac{\vec{a} \wedge \vec{b}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \wedge \vec{c})}$$

### Remarque

Les valeurs retenues pour la constante  $\sigma^2$  sont  $\sigma^2=1$  ou  $2\pi$ . Dans **notre cas**, nous retenons la dernière valeur, i.e.  **$2\pi$**  ; ce qui nous permettra d'utiliser **la même métrique** pour représenter **l'espace réciproque** et **l'espace des vecteurs d'onde**.



# STRUCTURE CRISTALLINE

## Nœuds du réseau cristallin et nœuds du réseau réciproque

Les nœuds du réseau cristallin sont donnés par :

$$\vec{\rho}_{mnp} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}$$

où m, n et p sont des entiers.

Les nœuds du réseau réciproque sont, par analogie, définis dans l'espace de Fourier par :

$$\vec{G} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}$$

où h, k et l sont des entiers.

## Réseaux réciproques des réseaux cubiques

On peut facilement établir que:

- Le réseau réciproque d'un **réseau cubique simple** est un **réseau cubique simple** ;
- Le réseau réciproque d'un **réseau c.c** est un **réseau c.f.c**;
- Le réseau réciproque d'un **réseau c.f.c** est un **réseau c.c** .



# STRUCTURE CRISTALLINE

## Diffraction cristalline

Pour explorer la structure des cristaux, on étudie les figures de diffraction d'ondes qui interfèrent avec les atomes.

Cette diffraction ne peut avoir lieu que si la longueur d'onde est comparable à la distance intra-atomique dans le cristal ( $\approx \text{\AA}$ ).

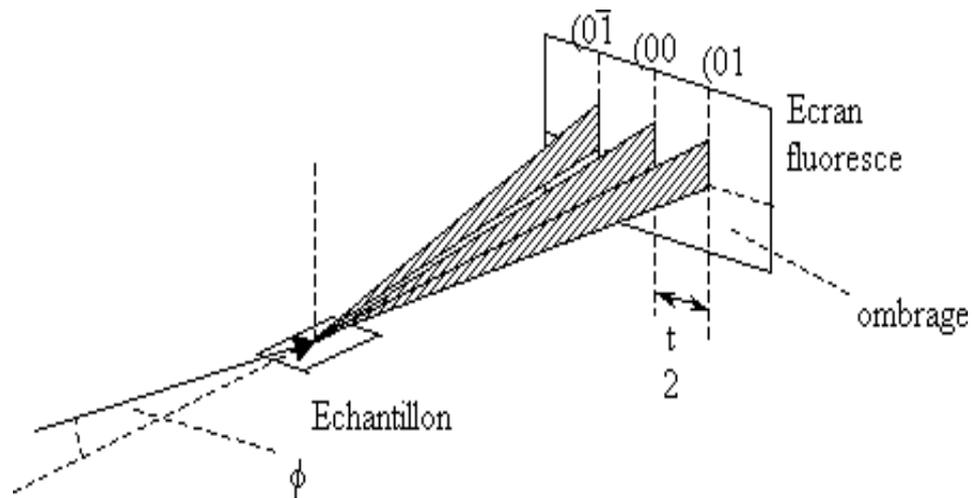
Si la longueur d'onde est supérieure à l'ordre de grandeur mentionné précédemment, on ne peut mettre en évidence les détails d'une structure cristalline à l'échelle atomique,

Avec des rayonnements de longueur d'onde plus courte la diffraction a lieu sous des angles trop faibles.



# STRUCTURE CRISTALLINE

## Diffraction Cristalline



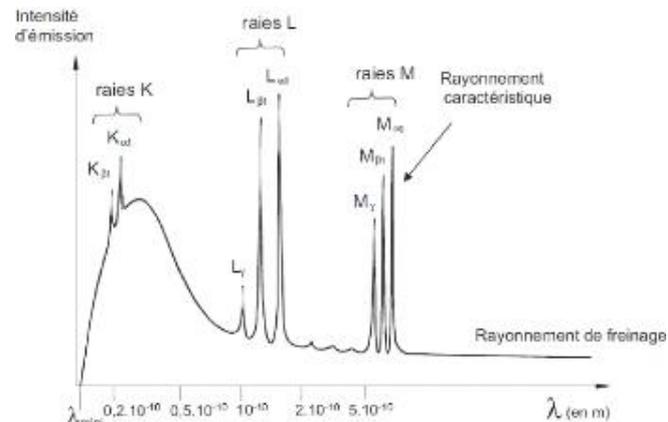
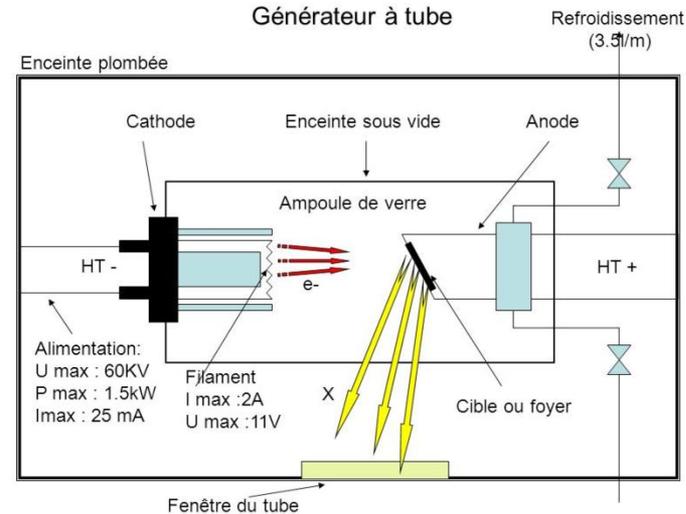
# STRUCTURE CRISTALLINE

## Rayonnements utilisés

### 1. Rayons X

Ces rayons sont produits par **décélération d'un faisceau d'électrons** par une **cible métallique** et par **excitation inélastique** des électrons internes des atomes de la cible.

Le premier mécanisme donne **un spectre continu** qui s'étend sur une large gamme d'ondes tandis que le deuxième mécanisme donne **des pics**.

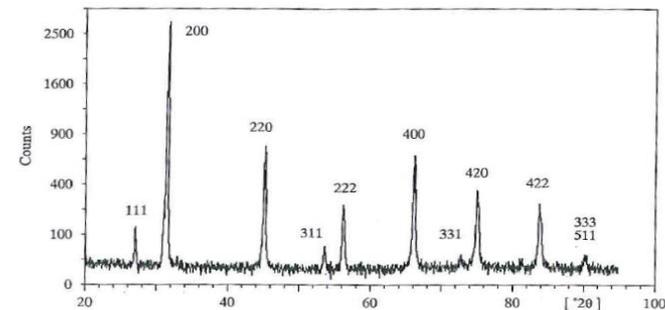
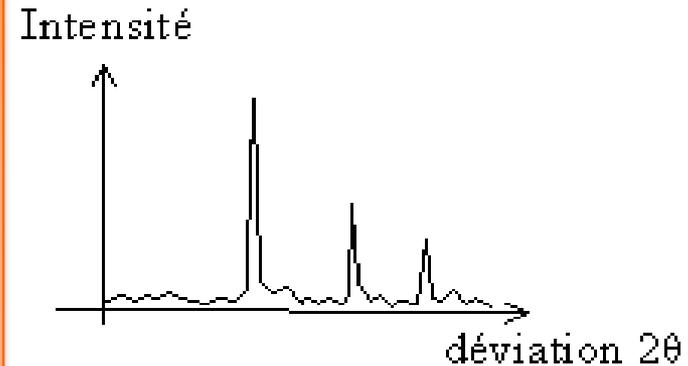


# STRUCTURE CRISTALLINE

## Rayonnements utilisés

### 1. Rayons X (suite)

Lorsque la longueur d'onde de la radiation incidente est comparable ou inférieure au paramètre du réseau, on peut trouver un ou plusieurs faisceaux diffractés dans des directions différentes de celle du faisceau incident



# STRUCTURE CRISTALLINE

## 2. Neutrons

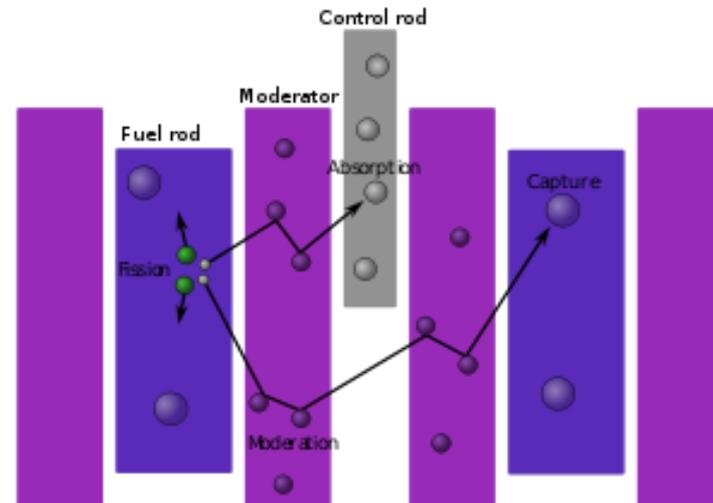
Les sources de neutrons sont :

- Sources radioactives ;
- Accélérateurs de particules ;
- Réacteurs nucléaires.

Toutes ces sources produisent des **neutrons rapides** ( $E \geq 1 \text{ MeV}$ ). On les ralentit pour obtenir **des neutrons thermiques**.

- Les neutrons **possèdent des moments magnétiques** ;
- C'est d'ailleurs la raison pour laquelle on les utilise pour **étudier les cristaux magnétiques**

Schéma de la thermalisation des neutrons



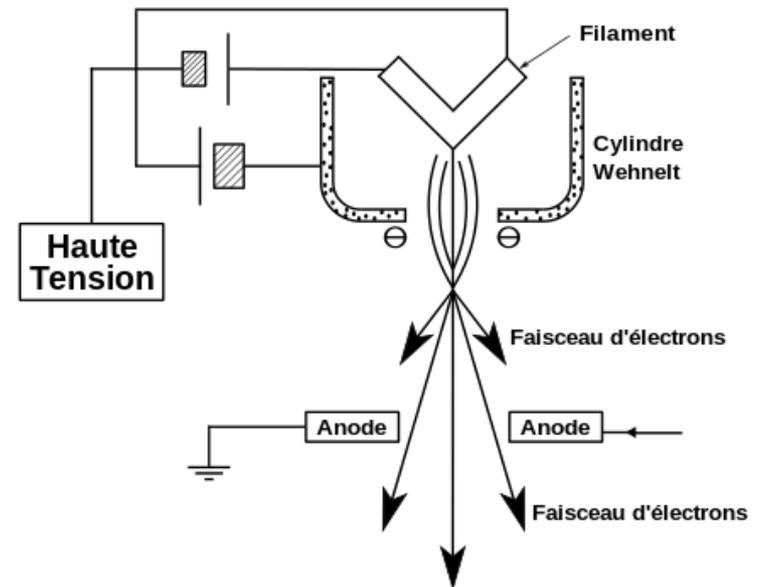
# STRUCTURE CRISTALLINE

## 3. Electrons

les électrons sont produits par un **canon d'électrons** (système de chauffage d'un filament).

Les électrons **interagissent beaucoup avec la matière** (ils déposent beaucoup d'énergie donc **ils perturbent le système**) ; ils **pénètrent** relativement **peu** dans le cristal.

Ils sont plus utilisés pour étudier les **couches minces**, les **surfaces**, les **cristaux très fins** et les **gaz**.



# STRUCTURE CRISTALLINE

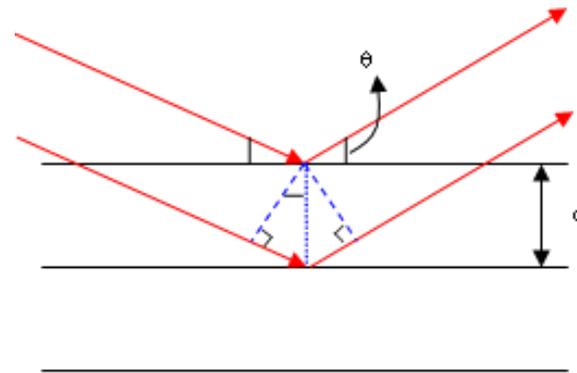
## Loi de Bragg

Pour une série de plans réticulaires parallèles et équidistants dont la distance inter-réticulaire est  $d$ , **une interférence additive** entre les rayons réfléchis apparaît lorsque **la différence de marche** entre des plans consécutifs est **un multiple entier de la longueur d'onde** du rayonnement réfléchi.

Par conséquent, **la condition d'interférence additive** pour un rayonnement incident de longueur d'onde  $\lambda$  **est donnée** par la **loi de Bragg** suivante :

Loi de Bragg

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

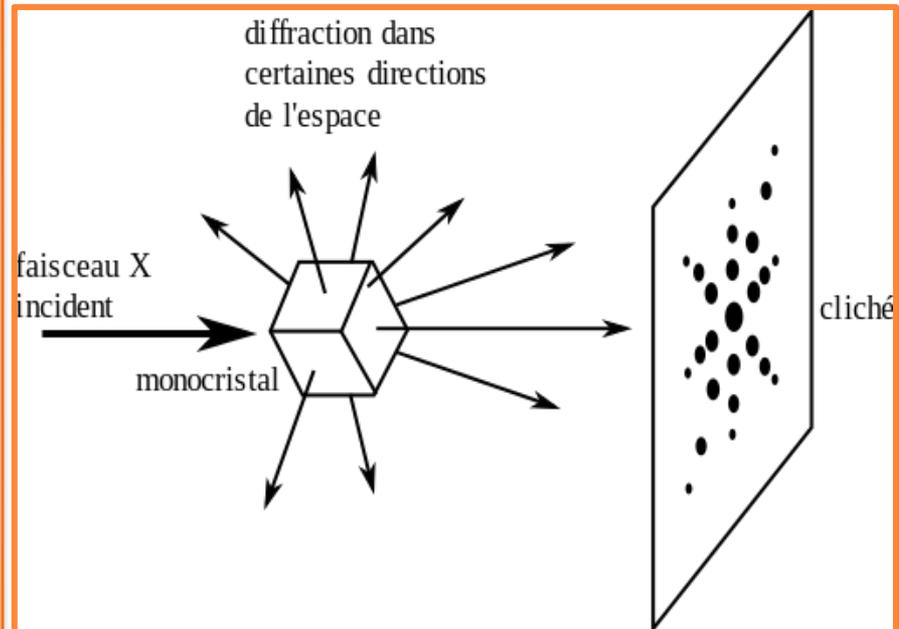


# STRUCTURE CRISTALLINE

## Méthode de Laue

Dans cette technique, on dirige un **faisceau polychromatique** de **RX** ou de **neutrons** sur un **monocristal**.

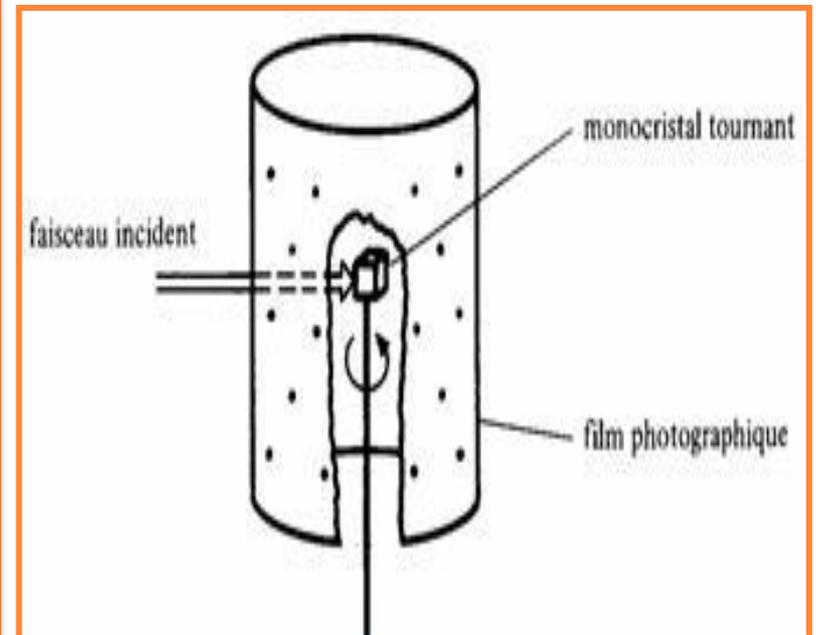
Le cristal ne diffracte que les ondes ayant des longueurs pour lesquelles les plans réticulaires distants de  $d$  et inclinés d'un angle  $\theta$  tels que la loi de Bragg soit satisfaite.



# STRUCTURE CRISTALLINE

**Méthode du cristal tournant**  
la technique du cristal tournant utilise **un faisceau monochromatique**.

La **satisfaction de la loi de Bragg** est assurée **par la rotation du cristal** autour d'un **axe vertical (perpendiculaire au trajet du faisceau)** pour amener des plans atomiques en position de réflexion.



# STRUCTURE CRISTALLINE

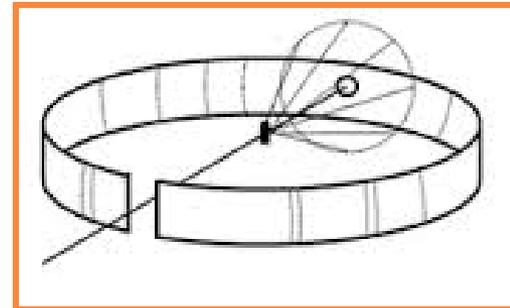
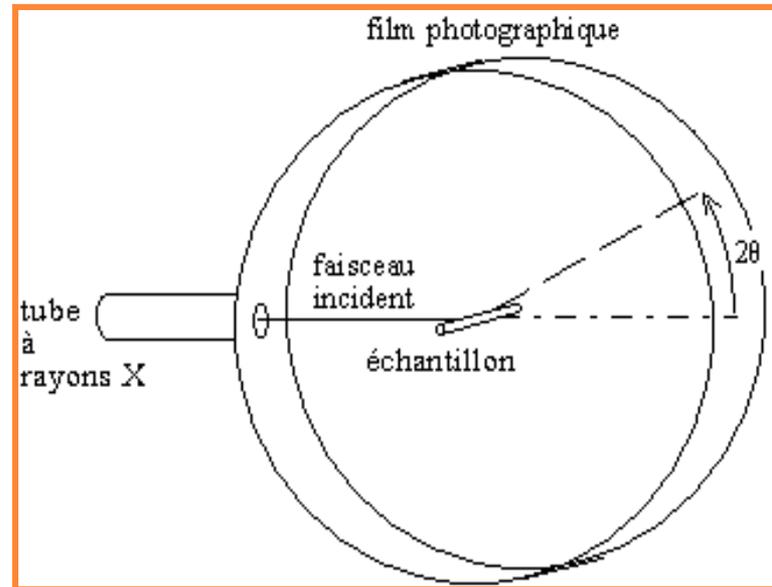
## Méthode des poudres ou de Debye-Scherrer

On dirige un faisceau **monochromatique** sur un **polycristal à grains très fins** ou un échantillon finement broyé contenu dans un fin tube capillaire.

Elle est donc **adaptée** à l'étude des diagrammes de phases **des alliages**.

Les diagrammes de diffraction sont collectés sur **un film disposé sur un cylindre** dont l'axe sert de support pour l'échantillon.

L'intersection des diagrammes et du film donne une **série d'anneaux concentriques**.



# STRUCTURE CRISTALLINE

## Facteur de Structure

Pour relier les intensités diffractées au contenu de la maille (nombre, position et distribution électronique des atomes de la maille), on a introduit une grandeur appelée **facteur de structure** défini par :

$$F_{\vec{G}} = \sum_j f_j \exp(-i\vec{\rho}_j \cdot \vec{G})$$

où  $f_j$  est le **facteur de forme** ou **coefficient de diffusion atomique** (le pouvoir diffusant d'un atome),  $j$  est un indice sommé sur les  $N$  atomes de la base,  $\vec{\rho}_j$  est le vecteur position du noyau de l'atome  $j$  et  $\vec{G}$  est un vecteur du réseau réciproque.

Pour une réflexion  $h, k, l$ , l'expression du facteur de structure devient :

$$F_{hkl} = \sum_j f_j \exp[-2\pi i(x_j h + y_j k + z_j l)]$$

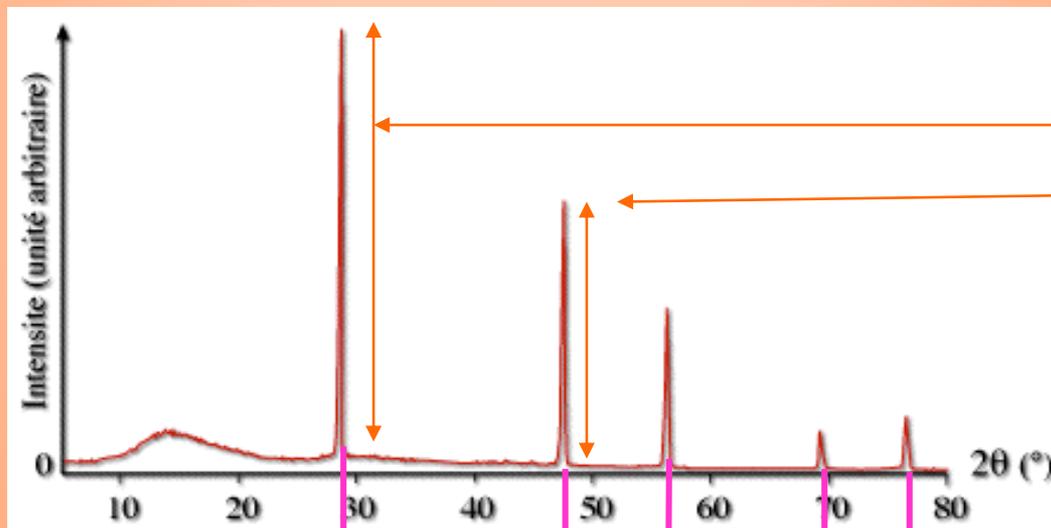
**Remarque :** Il est à noter que le facteur de structure n'est pas nécessairement réel. **L'intensité diffusée** est fonction de  $F \cdot F^*$  où  $F^*$  représente le complexe conjugué de  $F$ .



# DIFFRACTOGRAMMES

## Remarques importantes

- Les positions des raies (angles) dépendent des dimensions de la maille élémentaire.
- Les intensités des raies dépendent de l'arrangement des atomes dans le cristal.



Positions

Intensités

