

CONTROLE

Module : Physique 7 (S₄)

Elément de module : Propriétés de base des matériaux

I- Structure de BaTiO₃

Le titanate de Baryum BaTiO₃ cristallise à des températures supérieures à 120°C dans un système cubique. Les ions Ba²⁺ sont placés aux sommets du cube, les ions Ti⁴⁺ occupent le centre de la maille cubique et les ions O²⁻ se placent au milieu de chaque face du cube.

- 1- Construire la maille élémentaire. Quel est le type structural de BaTiO₃?
- 2- Enumérer et dessiner les éléments de symétrie de la maille cubique de BaTiO₃? (utilisez les figures données en annexe).

A température ambiante BaTiO₃ présente une variété tétragonale. La structure de cette variété ne diffère (en première approximation) de celle cubique de BaTiO₃ que par un faible déplacement (0,13Å) du titane Ti⁴⁺, au sein de son site octaédrique, le long de l'axe du cube. Il en résulte l'apparition d'un moment dipolaire permanent et un allongement de la maille cubique le long de son axe \vec{c} .

- 3- Donner les éléments de symétrie de cette nouvelle maille élémentaire.
- 4- A-t-on perdu ou gagné des éléments de symétrie en passant de la première à la deuxième variété de BaTiO₃. Enumérer les éléments de symétrie perdus ou gagnés par cette transformation.

II- Etude de diffraction des rayons x sur poudre

On réalise les diffractogrammes sur poudre des échantillons A, B et C. Ils cristallisent tous avec des mailles cubiques. La longueur d'onde utilisée est celle de l'anticathode de cuivre $\lambda_{\text{Cu}} = 1,5406\text{Å}$. Les positions des raies de diffraction pour chaque composé sont rassemblées au tableau suivant :

A		B		C
$\theta(^{\circ})$		$\theta(^{\circ})$		$\theta(^{\circ})$
12,532	32,065	10,776	27,238	21,96
17,85	34,999	15,312	31,92	37,652
22,06	37,82	18,884	34,099	45,749
25,704	40,536	21,936	36,208	59,763
28,977	43,279	24,691		70,297

1- Pour chaque matériau :

- a- Déterminer le mode de Bravais,
- b- Indexer toutes les raies,
- c- Calculer le paramètre de maille.

2-a- Quelles raies devrait-on normalement observer et sont éteintes pour le matériau C?

b- Montrer que le facteur de structure pour l'échantillon C peut s'écrire :

$$F_{hkl} = f_C \times (1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)}) \times (1 + e^{i\pi((h+k+l)/2)}),$$
 sachant que C cristallise dans le type structural diamant.

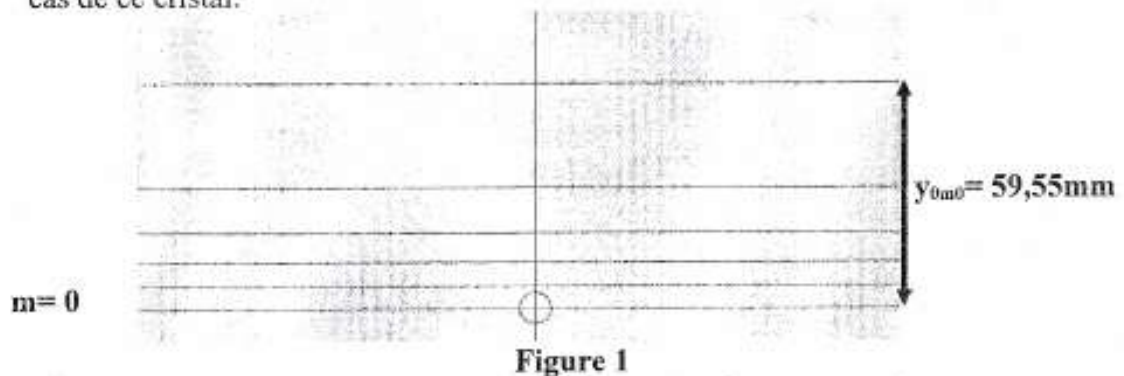
c- Quelles sont les conditions pour que le facteur de structure soit nul ? Justifier alors l'extinction des raies trouvées en 2-a.

d- Quels sont les trois indices de la raie correspondant à l'angle de Bragg θ_{maximum} pour les trois échantillons?

III- Etude structurale de $\text{AgV}_2(\text{PO}_4)(\text{P}_2\text{O}_7)$

1- Les taches de diffraction des rayons-X d'un monocristal de $\text{AgV}_2(\text{PO}_4)(\text{P}_2\text{O}_7)$, orienté suivant l'axe \vec{b} sont données sur la figure 1:

- a- Qu'appelle-t-on ce diagramme ?
- b- Démontrer la formule permettant de calculer le paramètre de la maille à partir de ce diagramme. Calculer ce paramètre.
- c- Calculer le nombre de strates enregistrées sur un film de largeur 100mm dans le cas de ce cristal.



3- Le monocristal de $\text{AgV}_2(\text{PO}_4)(\text{P}_2\text{O}_7)$, est monté sur une tête goniométrique selon la direction $[010]$ dans une chambre de diffraction. Le mouvement de va-et-vient de la chambre et la rotation du cristal sont couplés. Les figures 2 et 3 montrent les taches de diffraction qui étaient groupées sur les strates $m=0$ et $m=+1$ respectivement dans la méthode du cristal tournant.

a- Qu'appelle-t-on ces diagrammes ?

b- Calculer la distance S_1 qu'il faut appliquer au cache pour photographier le plan $m=+1$.

c- Tracer les hyperboles, reliant les différentes taches de diffraction pour les plans correspondant à $m=0$ et $m=+1$.

d- Calculer les autres paramètres de la maille sachant que l'axe \vec{b}^* est perpendiculaire aux axes \vec{a}^* et \vec{c}^* et la distance entre ces derniers dans le plan $h0l$ est égale à $32,805\text{mm}$.

e- Quel est le système cristallin de $\text{AgV}_2(\text{PO}_4)(\text{P}_2\text{O}_7)$?

f- Donner les conditions de diffraction sur : $h00$, $00l$, $h0l$, $h10$, $01l$ et $h1l$.

On donne : $\lambda_{\text{Cu}} = 1,5406\text{\AA}$; $r_c = 25\text{mm}$; $R = 28,65\text{mm}$.

$$y_{h00} = 41,848053\text{mm.}$$

$$y_{00l} = 44,583488\text{mm}$$

Examen de Physique 7 (Propriétés de base des matériaux)

Durée : 1h 30mn

Partie A :

On considère un semi-conducteur tridimensionnel intrinsèque dont la structure de bandes est modélisée par une relation de dispersion parabolique (figure 1).

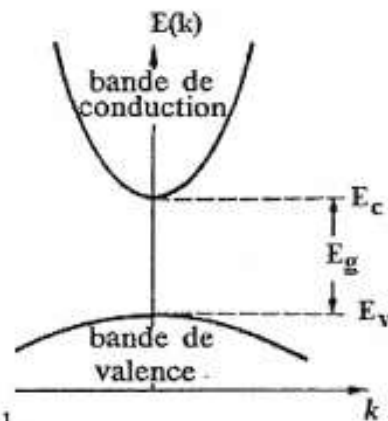


Figure 1

- 1) Donner les densités d'états par unité de volume $D_c(E)$ dans la bande de conduction et $D_v(E)$ dans la bande de valence.
- 2) Le niveau de Fermi des électrons est noté E_f . Donner la probabilité d'occupation d'un état de la bande de conduction et la probabilité d'occupation d'un état de la bande de valence.
- 3) Donner les expressions de $n(T)$ et $p(T)$ sous la forme d'une intégrale.
- 4) On suppose que le niveau de Fermi E_f est situé dans la bande interdite à une distance des extréma de bandes grande devant $k_B T$ (cas d'un semi-conducteur non-dégénéré). Montrer que $n(T)$ et $p(T)$ prennent alors les expressions: $n(T) = N_c(T) e^{-(E_c - E_f)/k_B T}$ et $p(T) = N_v(T) e^{(E_v - E_f)/k_B T}$ où $N_c(T)$ et $N_v(T)$ sont des fonctions lentement variables de la température dont on donnera les expressions.
- 5) Eliminer E_f pour trouver une relation simple entre $n(T)$ et $p(T)$.
- 6) Quelle est la valeur commune $n_i(T)$ de $n(T)$ et $p(T)$? Quelle est l'expression de niveau de Fermi $E_f(T)$.

Partie B :

On rajoute des atomes donneurs d'électrons (concentration N_D) ou accepteurs d'électrons (concentration N_A) dont les niveaux énergétiques sont situés dans la bande interdite, proche de la bande de conduction pour les donneurs et proche de la bande de valence pour les accepteurs (figure 2).

- 1) Combien y a-t-il d'électrons dans la bande de conduction (n), et de trous dans la bande de valence (p) à température nulle ?

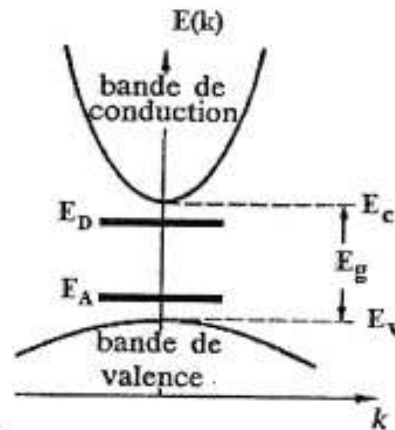


Figure 2

A température moyenne, lorsque l'énergie thermique $k_B T$ est plus grande que les potentiels d'ionisation $E_C - E_D$ et $E_A - E_V$, pratiquement tous les donneurs ont "vu s'échapper" leurs électrons vers la bande de conduction et portent donc une charge positive, pendant que tous les accepteurs ont capturé un électron en provenance de la bande de valence et portent une charge négative.

- 2) Donner le nombre total de charges négatives (électrons de conduction et accepteurs ionisés) et positives (trous et donneurs ionisés). Quelle relation est imposée par le fait que le matériau soit électriquement neutre ?
- 3) En utilisant la loi d'action de masse $n.p = n_i^2$, où n_i est le nombre de porteurs intrinsèques, déduire une équation quadratique pour n et p en fonction de n_i , N_D et N_A . L'une des solutions de ces deux équations décrit la réalité physique, laquelle et pourquoi ?
- 4) On se place dans le cas où le nombre de porteurs intrinsèques n_i est petit devant N_D et N_A . Calculer n et p , ainsi que la position du niveau de Fermi, pour un semi-conducteur dopé n ($N_D \gg N_A$), puis dopé p ($N_A \gg N_D$), en ne retenant que le premier terme significatif.