Physique des solides

Une introduction

Jean-michel.gillet@centralesupelec.fr

Diffraction par des cristaux

1. Diffusion par un électron
    1. Potentiel vecteur rayonné
    2. Champ lointain
2. Diffusion par un assemblée d'électrons
    1. Densité de diffuseurs
    2. Facteur de forme atomique
    3. Facteur de structure
    4. Condition de diffraction : Laue, Bragg et Brillouin
3. A quoi sert la diffraction ?
    1. Détermination d'une structure cristallographique
    2. Diffraction haute résolution

1. Diffusion par un électron

Onde incidente

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, t) = \boldsymbol{E}_0 e^{-i(\boldsymbol{k}_i \cdot \boldsymbol{r} - \omega t)}$$

$$\boldsymbol{E}_0 = E_0 \boldsymbol{e}_x \qquad \boldsymbol{k}_i = k_i \boldsymbol{e}_z$$

$$m \frac{d^2 \boldsymbol{r}}{dt^2} = -q \boldsymbol{E}_0 e^{-i(\boldsymbol{k}_i \cdot \boldsymbol{r} - \omega t)}$$

$$\approx -q \boldsymbol{E}_0 e^{-i(\boldsymbol{k}_i \cdot \boldsymbol{r}_0 - \omega t)}$$

1. Diffusion par un électron

Onde incidente

$$\frac{d\boldsymbol{r}}{dt} = -\frac{q}{im\omega}\boldsymbol{E}_0 e^{-i(\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}_0-\omega t)}$$

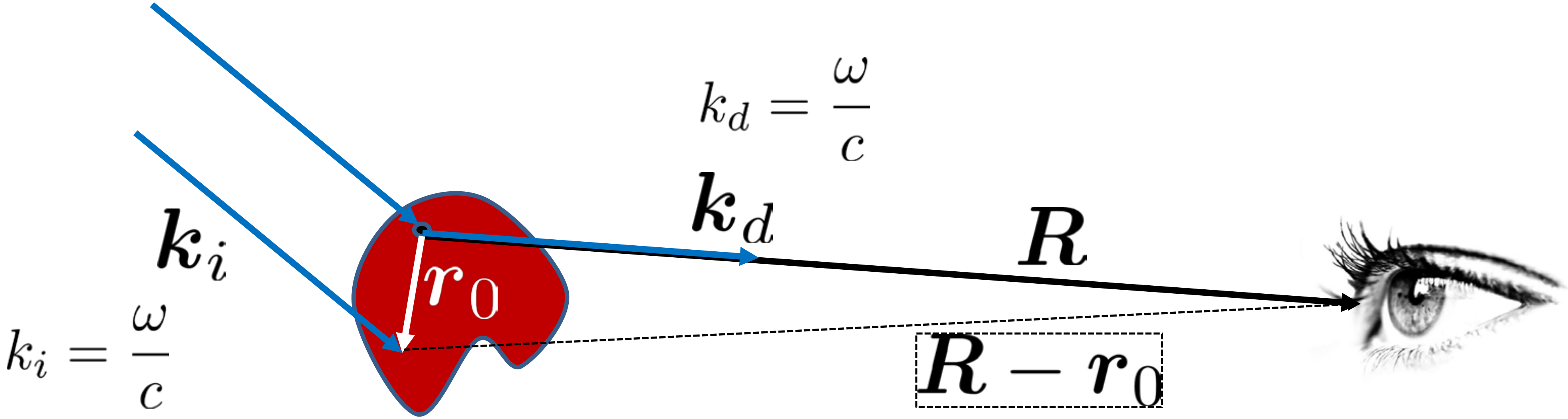
$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t) = \rho(\boldsymbol{r})\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r},t) = -\frac{q}{im\omega}\rho(\boldsymbol{r})\boldsymbol{E}_0 e^{-i(\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}_0-\omega t)}$$

$$m\frac{d^2\boldsymbol{r}}{dt^2} \approx -q\boldsymbol{E}_0 e^{-i(\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}_0-\omega t)}$$

1. Diffusion par un électron

Potentiel retardé

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R},t) = \frac{\mu_0}{4\pi}\int \frac{\boldsymbol{j}\left(\boldsymbol{r}, t - \frac{|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}|}{c}\right)}{|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}|} d^3r$$



1. Diffusion par un électron

Potentiel retardé

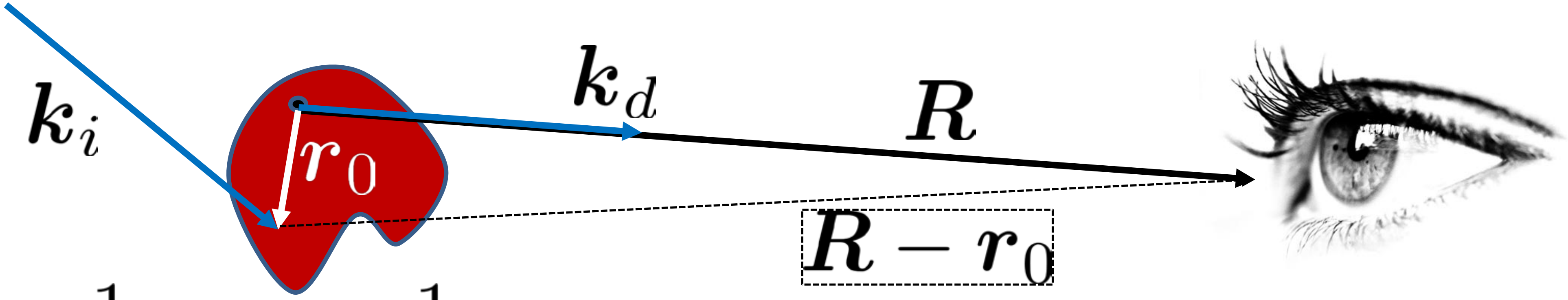
$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R},t) = \frac{\mu_0}{4\pi}\int \frac{\boldsymbol{j}\left(\boldsymbol{r}, t - \frac{|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}|}{c}\right)}{|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}|} d^3r$$

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t) = -\frac{q}{im\omega}\rho(\boldsymbol{r})\boldsymbol{E}_0 e^{-i(\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}_0-\omega t)}$$

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R},t) = -\frac{q\boldsymbol{E}_0\mu_0}{4\pi im\omega}\int \rho(\boldsymbol{r})\frac{e^{-i\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}_0}e^{i\omega\left(t-\frac{|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}|}{c}\right)}}{|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}|}d^3r$$

1. Diffusion par un électron

Potentiel retardé



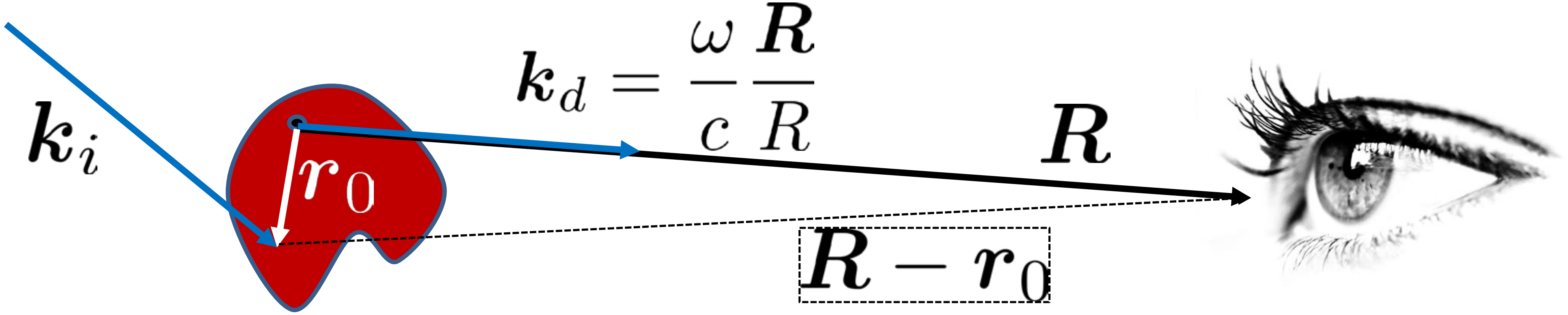
$$\frac{1}{|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}|} \approx \frac{1}{|\boldsymbol{R}|}$$

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R},t) = -\frac{q\boldsymbol{E}_0\mu_0}{im\omega}\frac{1}{4\pi|\boldsymbol{R}|}\int \rho(\boldsymbol{r})e^{-i\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}_0}e^{i\omega\left(t-\frac{|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}|}{c}\right)}d^3r$$

1. Diffusion par un électron

Potentiel retardé en champ lointain

$$k_i = \frac{\omega}{c}$$



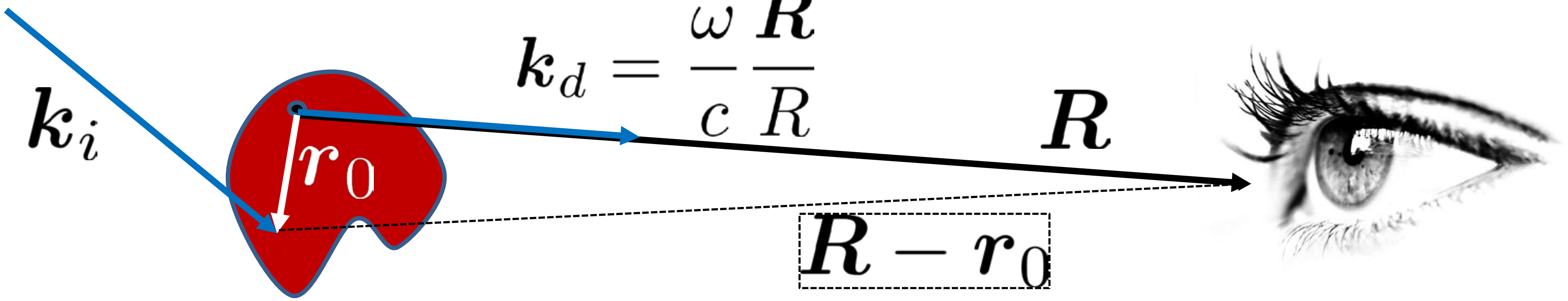
$$e^{-i\frac{\omega}{c}(|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}|)} = e^{-i\frac{\omega}{c}R\sqrt{1-2\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{R}/R^2+(r/R)^2}} \approx e^{-i\frac{\omega}{c}R(1-\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{R}/R^2)}$$

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R},t) = -\frac{q\boldsymbol{E}_0\mu_0}{im\omega}\frac{1}{4\pi|\boldsymbol{R}|}\int \rho(\boldsymbol{r})e^{-i\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}_0}e^{i\omega(t-\frac{|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}|}{c})}d^3r$$

1. Diffusion par un électron

Potentiel retardé en champ lointain

$$k_i = \frac{\omega}{c}$$

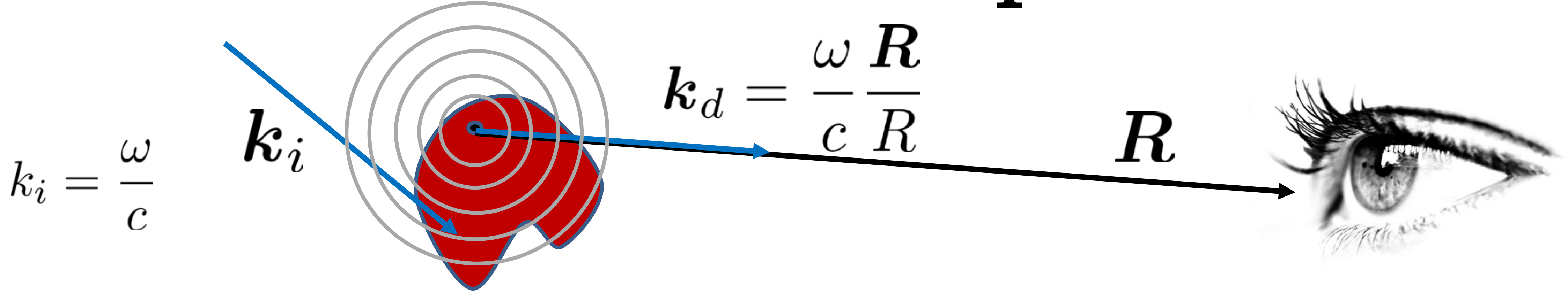


$$e^{-ik_dR}e^{i\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{k}_d}$$

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R}, t) = -\frac{q\boldsymbol{E}_0\mu_0}{im\omega}\frac{e^{-i(k_dR-\omega t)}}{4\pi R}\int \rho(\boldsymbol{r})e^{-i(\boldsymbol{k}_i-\boldsymbol{k}_d)\cdot\boldsymbol{r}}d^3r$$

2. Diffusion par une assemblée d'électrons

Potentiel retardé en champ lointain

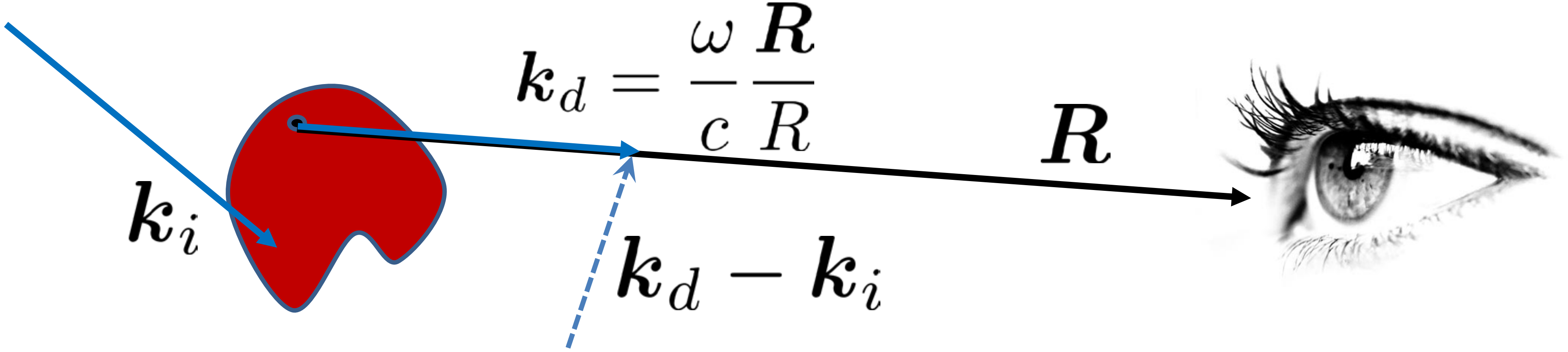


$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R},t) = -\frac{q\boldsymbol{E}_0\mu_0}{im\omega}\overbrace{\frac{e^{-i(k_dR-\omega t)}}{4\pi R}}^{\text{Onde sphérique}}\overbrace{\int \rho(\boldsymbol{r})e^{-i(\boldsymbol{k}_i-\boldsymbol{k}_d)\cdot\boldsymbol{r}}d^3r}^{\text{Information structurale}}$$

2. Diffusion par une assemblée d'électrons

Potentiel retardé en champ lointain

$$k_i = \frac{\omega}{c}$$



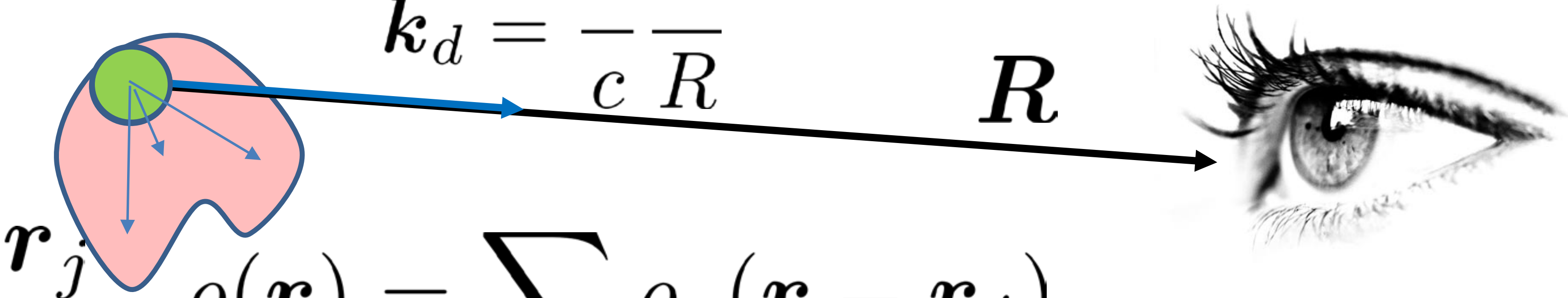
Information structurale

$$P(\boldsymbol{R}, t) \propto \left| \int \rho(\boldsymbol{r}) e^{-i(\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_d)\cdot\boldsymbol{r}} d^3r \right|^2$$

2. Diffusion par une assemblée d'électrons

Densité de diffuseurs

$$\boldsymbol{k}_d = \frac{\omega}{c}\frac{\boldsymbol{R}}{R}$$



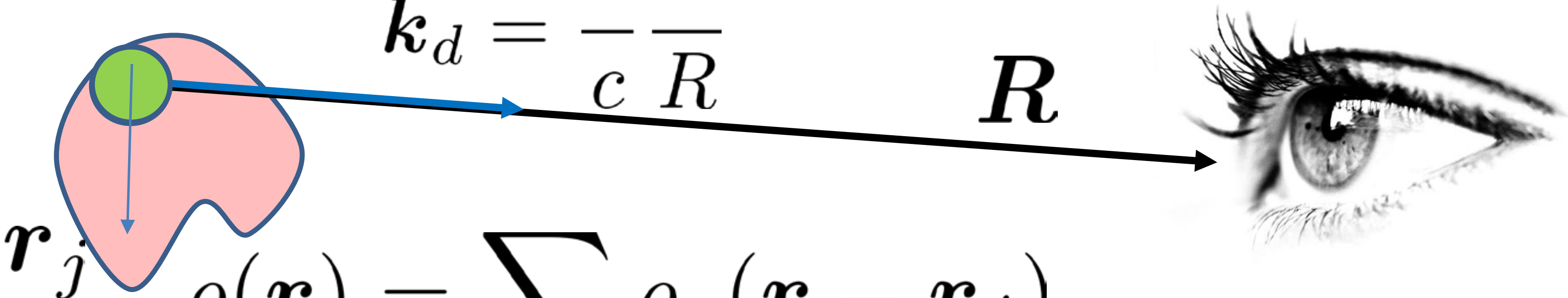
$$\rho(\boldsymbol{r}) = \sum_j \rho_a(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_j)$$

$$P(\boldsymbol{R}, t) \propto \left| \sum_j \int \rho(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_j) e^{-i(\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_d)\cdot \boldsymbol{r}} d^3 r \right|^2$$

2. Diffusion par une assemblée d'électrons

Densité de diffuseurs

$$\boldsymbol{k}_d = \frac{\omega}{c}\frac{\boldsymbol{R}}{R}$$

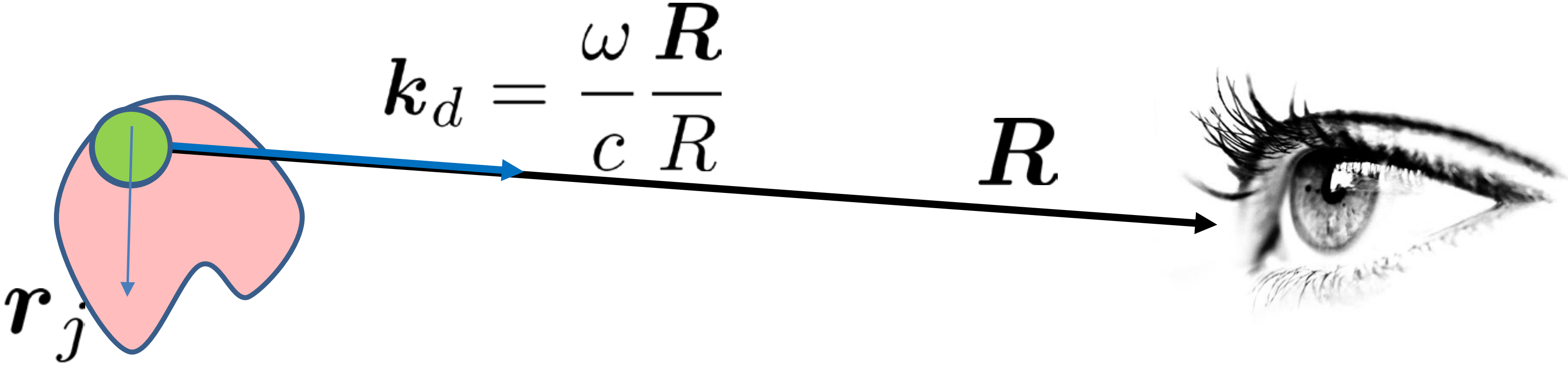


$$\rho(\boldsymbol{r}) = \sum_j \rho_a(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_j)$$

$$P(\boldsymbol{R}, t) \propto \left| \sum_j e^{-i(\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_d)\cdot\boldsymbol{r}_j} \int \rho_a(\boldsymbol{r}') e^{-i(\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_d)\cdot\boldsymbol{r}'} d^3 r' \right|^2$$

2. Diffusion par une assemblée d'électrons

Densité de diffuseurs atomiques

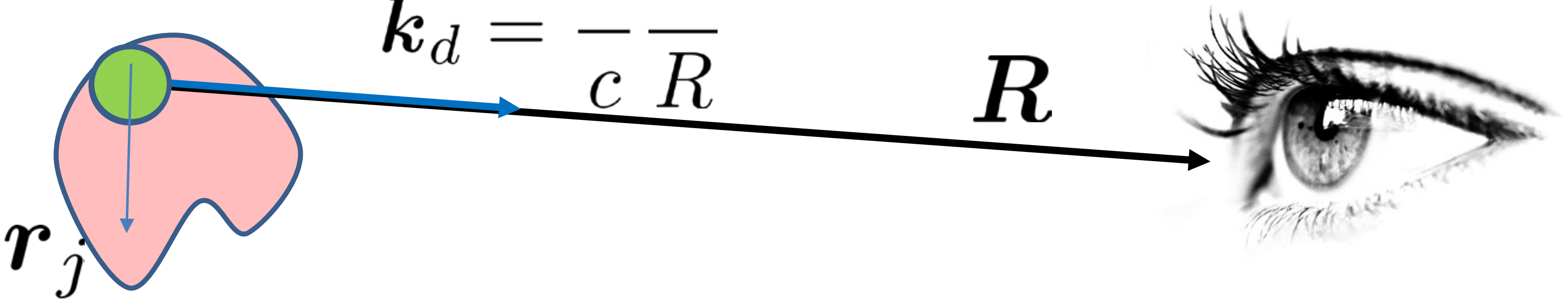


$$P(\boldsymbol{R},t) \propto \left| \sum_j e^{-i(\boldsymbol{k}_i-\boldsymbol{k}_d)\cdot\boldsymbol{r}_j} \overbrace{\int \rho_a(\boldsymbol{r}')e^{-i(\boldsymbol{k}_i-\boldsymbol{k}_d)\cdot\boldsymbol{r}'} d^3r'}^{\text{Facteur de forme atomique}} \right|^2$$

2. Diffusion par une assemblée d'électrons

Densité de diffuseurs atomiques

$$\boldsymbol{k}_d = \frac{\omega}{c}\frac{\boldsymbol{R}}{R}$$



$$f_a(\boldsymbol{Q}) = \int \rho_a(\boldsymbol{r}')e^{-i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}'}d^3r'$$

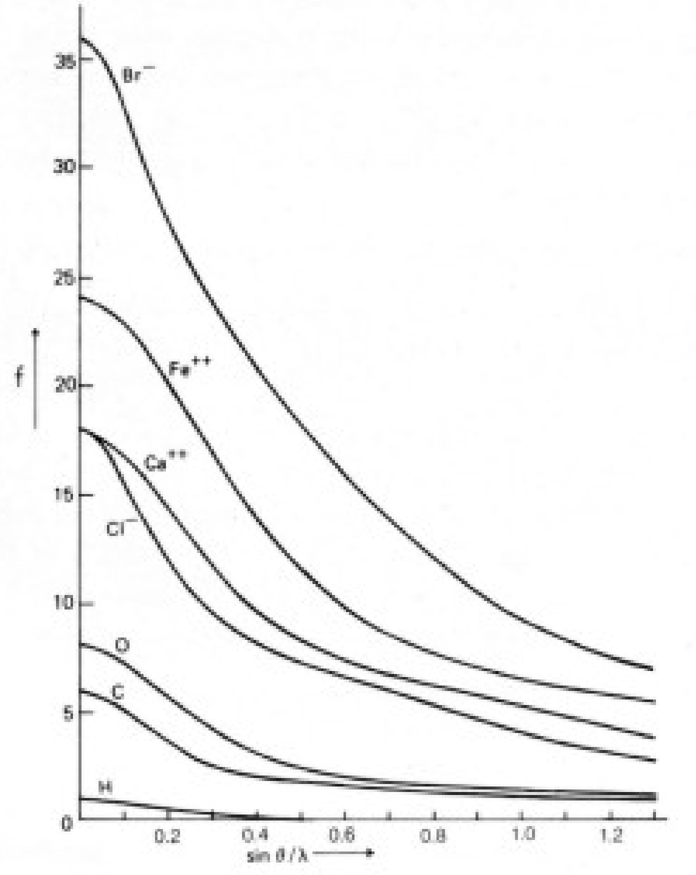
Facteur de forme atomique

$$P(\boldsymbol{R},t) \propto \left|\sum_j e^{-i(\boldsymbol{k}_i-\boldsymbol{k}_d)\cdot\boldsymbol{r}_j} f_j(\boldsymbol{k}_i-\boldsymbol{k}_d)\right|^2$$

2. Diffusion par une assemblée d’électrons

Densité de diffuseurs atomiques

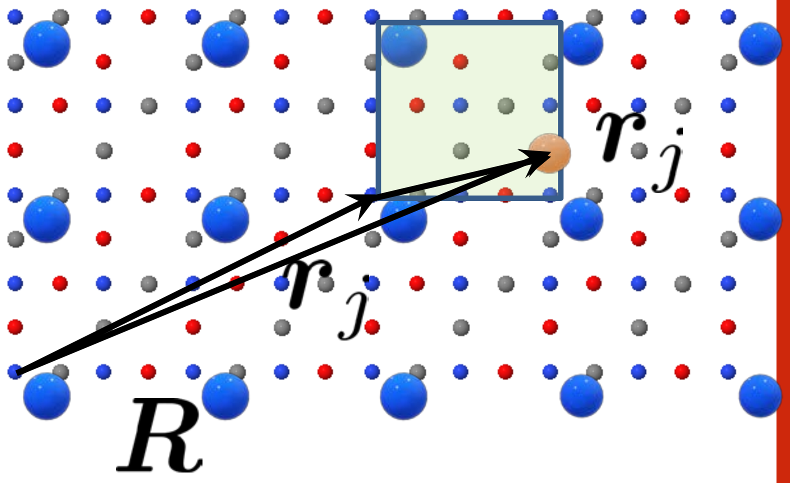
$$f_a(\boldsymbol{Q}) = \int \rho_a(\boldsymbol{r}')e^{-i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}'}d^3r'$$



Facteur de forme atomique

2. Diffusion par une assemblée d'électrons

Densité périodique de diffuseurs atomiques



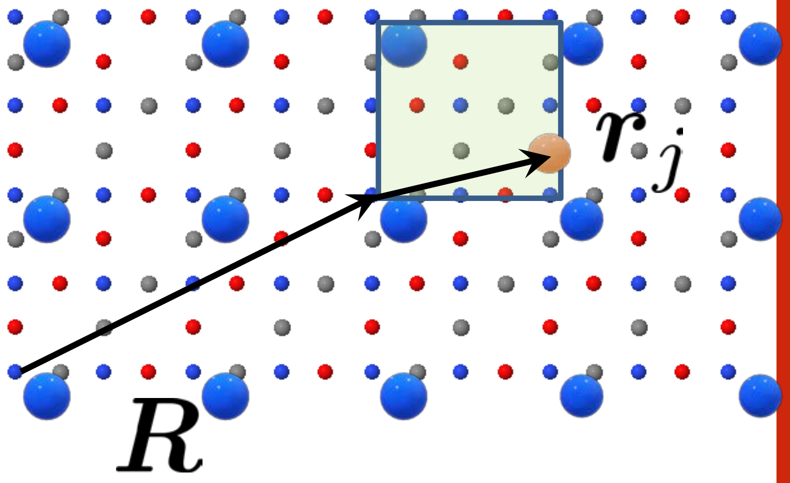
$$\rho(\boldsymbol{r}) = \sum_j \rho_j(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_j)$$

$$\rho(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{R}} \sum_{j \in 0} \rho_j(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{R})$$

$$P(\boldsymbol{R}, t) \propto \left| \sum_{\boldsymbol{R}} e^{-i(\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_d)\cdot\boldsymbol{R}} \overbrace{\sum_{j \in 0} e^{-i(\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_d)\cdot\boldsymbol{r}_j} f_j(\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_d)}^{F(\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_d)\ \textbf{Facteur de structure (motif)}} \right|^2$$

2. Diffusion par une assemblée d'électrons

Densité périodique de diffuseurs atomiques



$$\sum_n e^{-iQna}$$ **Série de Fourier**

$$\sum_{\boldsymbol{R}} e^{-i(\boldsymbol{k}_i-\boldsymbol{k}_d)\cdot\boldsymbol{R}}$$

$$P(\boldsymbol{R},t) \propto \left| \overbrace{\sum_{\boldsymbol{R}} e^{-i(\boldsymbol{k}_i-\boldsymbol{k}_d)\cdot\boldsymbol{R}}}^{\text{Interférence (réseau)}} \sum_{j\in 0} e^{-i(\boldsymbol{k}_i-\boldsymbol{k}_d)\cdot\boldsymbol{r}_j} f_j(\boldsymbol{k}_i-\boldsymbol{k}_d) \right|^2$$

2. Diffusion par une assemblée d'électrons

Densité périodique de diffuseurs atomiques

$$\sum_n e^{-iQna}$$ **Série de Fourier** $$f(Q) = \sum_n g(na) e^{-iQna}$$

$$f(Q) = \frac{2\pi}{a} \sum_n \delta\left(Q - \frac{2\pi}{a}\right)$$

$$\sum_{\boldsymbol{R}} e^{-i(\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_d)\cdot \boldsymbol{R}} = \frac{(2\pi)^3}{v} \sum_{\boldsymbol{G} \in \mathrm{R.R.}} \delta\left(\boldsymbol{k}_d - \boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{G}\right)$$

2. Diffusion par une assemblée d'électrons

Densité périodique de diffuseurs atomiques

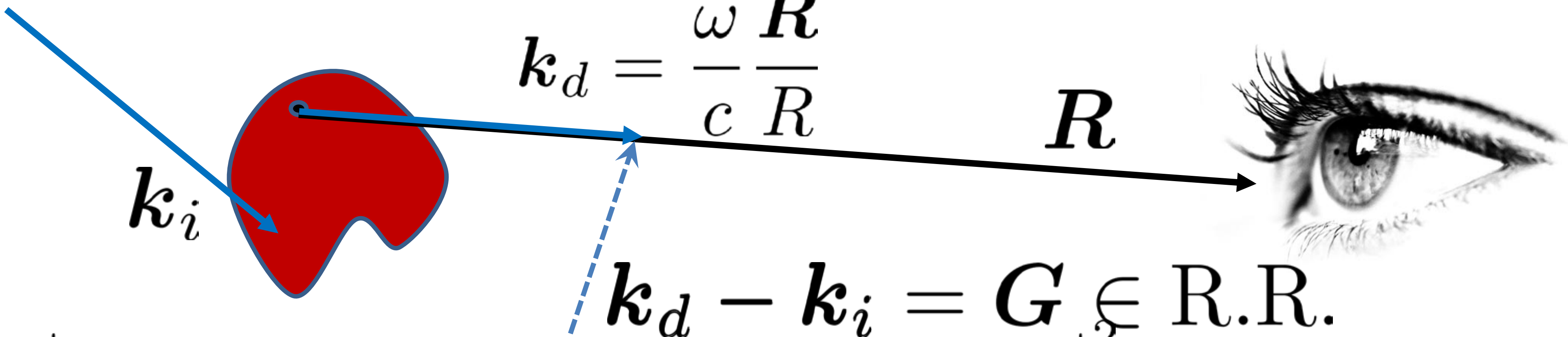
$$P(\boldsymbol{R}, t) \propto \left| \sum_{\boldsymbol{R}} e^{-i(\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_d)\cdot\boldsymbol{R}} \sum_{j\in 0} e^{-i(\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_d)\cdot\boldsymbol{r}_j} f_j(\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_d) \right|^2$$

$$P(\boldsymbol{R}, t) \propto \left| \sum_{\boldsymbol{G}\in\mathrm{R.R.}} \delta\left(\boldsymbol{k}_d - \boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{G}\right) \sum_{j\in 0} e^{-i(\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_d)\cdot\boldsymbol{r}_j} f_j(\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_d) \right|^2$$

$$\sum_{\boldsymbol{R}} e^{-i(\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_d)\cdot\boldsymbol{R}} = \frac{(2\pi)^3}{v} \sum_{\boldsymbol{G}\in\mathrm{R.R.}} \delta\left(\boldsymbol{k}_d - \boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{G}\right)$$

2. Diffusion par une assemblée d'électrons

Densité périodique de diffuseurs atomiques



$$\boldsymbol{k}_d - \boldsymbol{k}_i = \boldsymbol{G} \in \mathrm{R.R.}$$

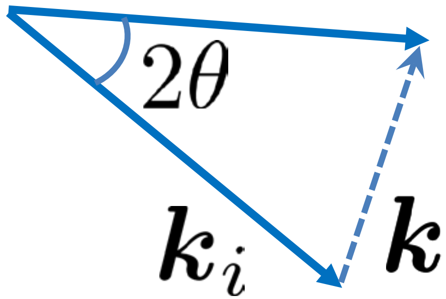
$$P(\boldsymbol{R}, t) \propto \left| \sum_{\boldsymbol{G} \in \mathrm{R.R.}} \delta\left(\boldsymbol{k}_d - \boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{G}\right) F(\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_d) \right|^2$$

$$P(\boldsymbol{R}, t) \propto \left| \sum_{\boldsymbol{G} \in \mathrm{R.R.}} \delta\left(\boldsymbol{k}_d - \boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{G}\right) \sum_{j \in 0} e^{-i(\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_d)\cdot \boldsymbol{r}_j} f_j(\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_d) \right|^2$$

2. Diffusion par une assemblée d’électrons

Densité périodique de diffuseurs atomiques

$$\boldsymbol{k}_d = \frac{\omega}{c}\frac{\boldsymbol{R}}{R}$$



$$\boldsymbol{k}_d - \boldsymbol{k}_i = \boldsymbol{G} \in \text{R.R.}$$

$$k_i = k_d = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

EXO

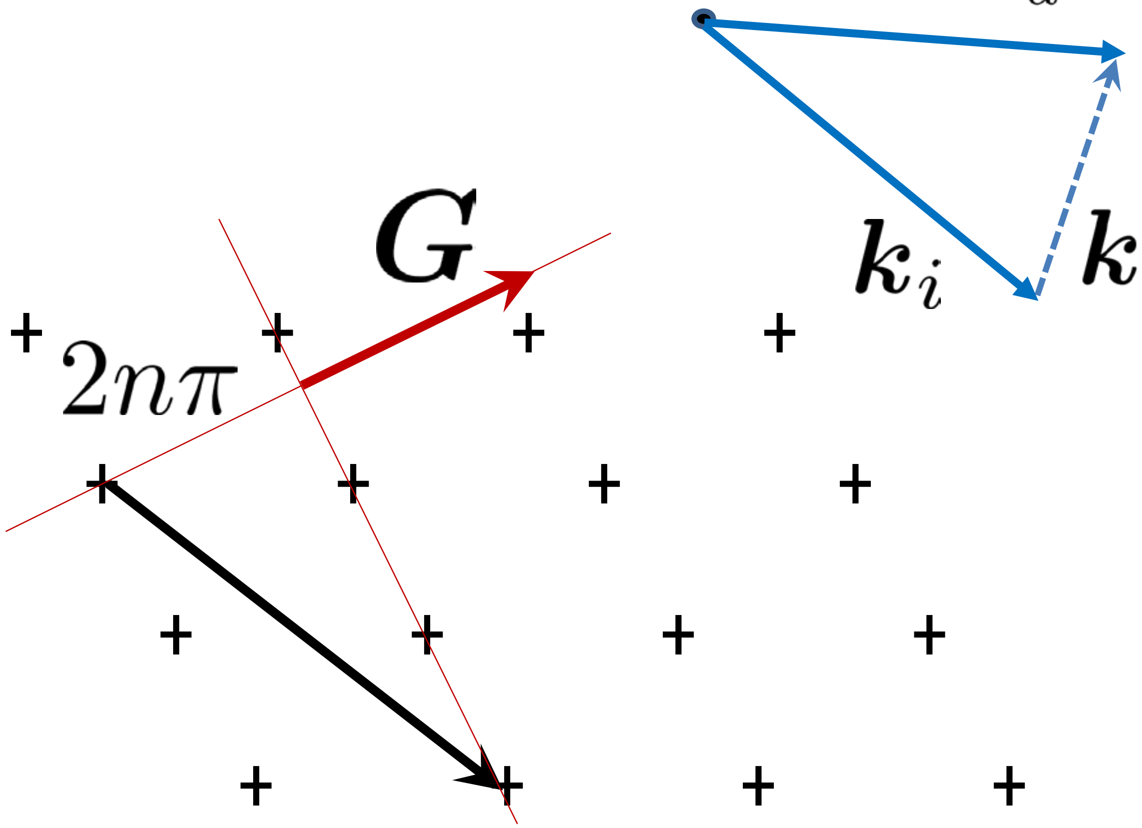
$$n\lambda = 2d_{h,k,\ell}\sin\theta$$

$$\frac{G_{h,k,\ell}}{n} = \frac{2\pi}{d_{h,k,\ell}}$$

2. Diffusion par une assemblée d'électrons

Densité périodique de diffuseurs atomiques

$$\boldsymbol{k}_d = \frac{\omega}{c}\frac{\boldsymbol{R}}{R}$$



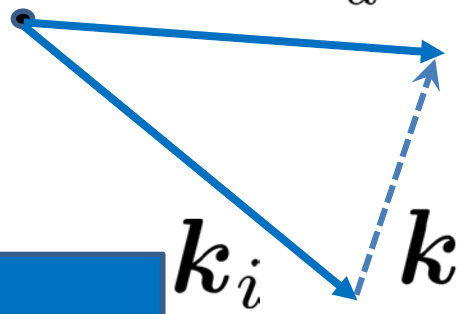
$$\boldsymbol{k}_d - \boldsymbol{k}_i = -\boldsymbol{G} \in \mathrm{R.R.}$$

$$\boldsymbol{k}_i \cdot \frac{\boldsymbol{G}}{G} = \frac{G}{2}$$

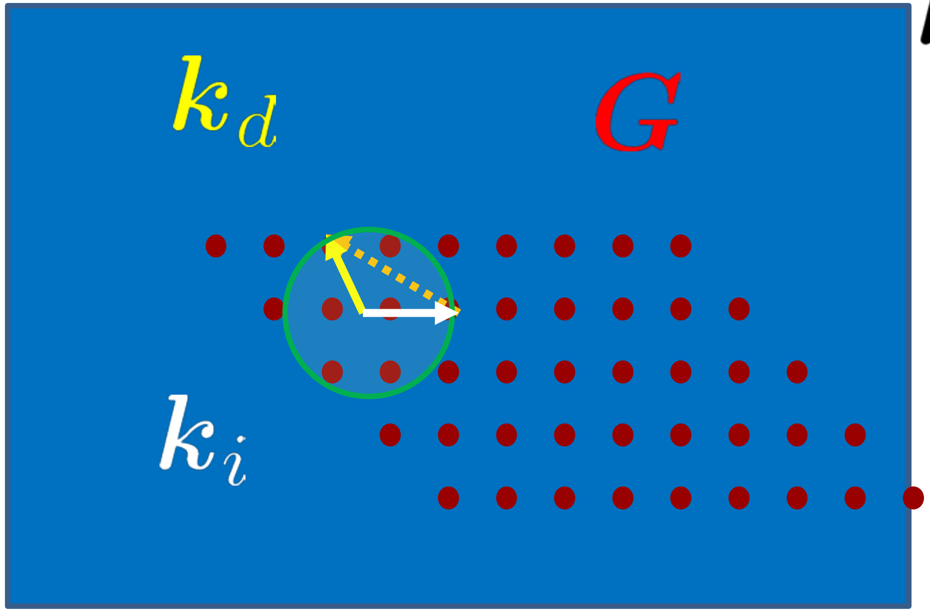
2. Diffusion par une assemblée d'électrons

Densité périodique de diffuseurs atomiques

$$\boldsymbol{k}_d = \frac{\omega}{c}\frac{\boldsymbol{R}}{R}$$

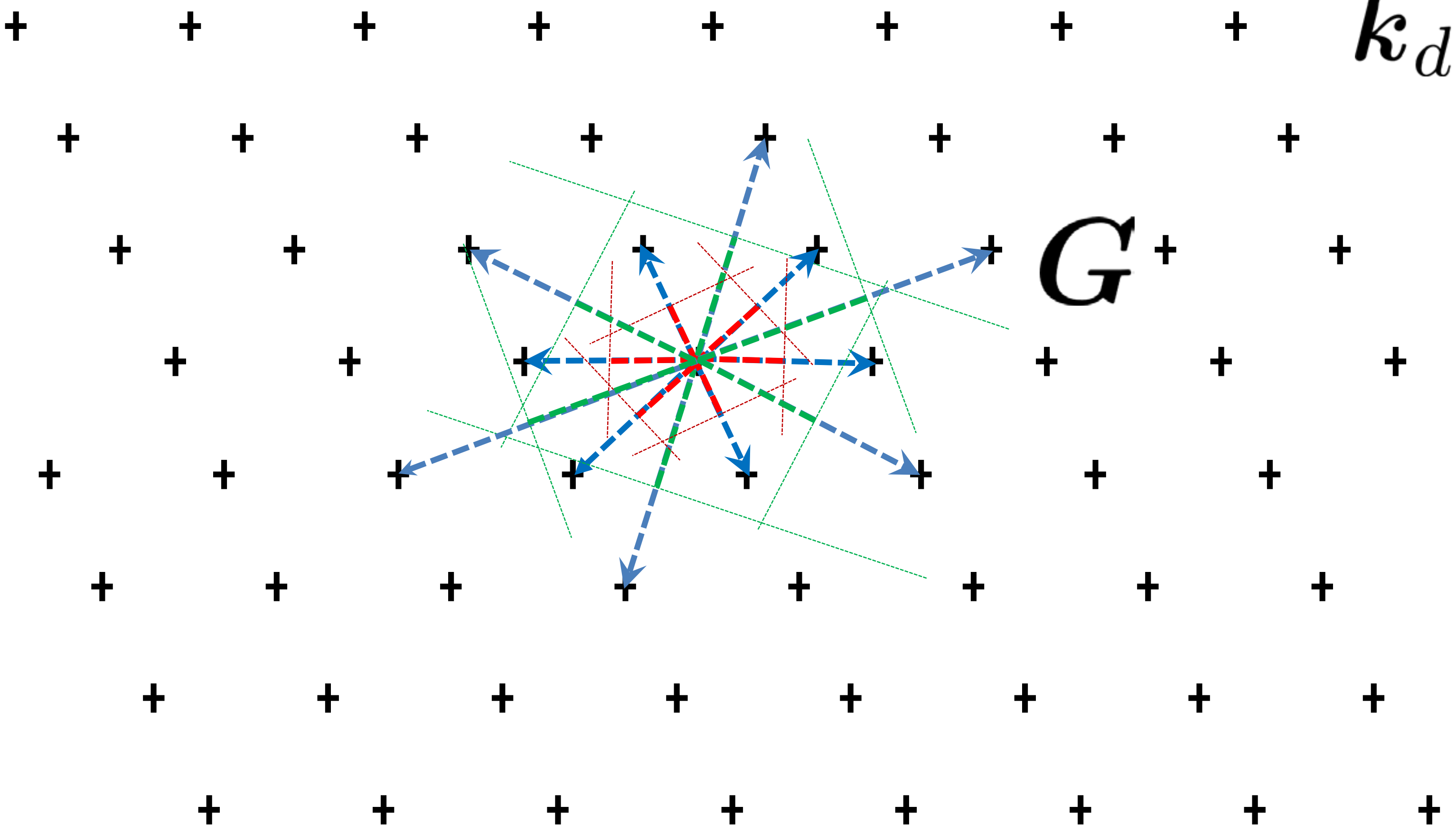


$$\boldsymbol{k}_d - \boldsymbol{k}_i = -\boldsymbol{G} \in \mathrm{R.R.}$$



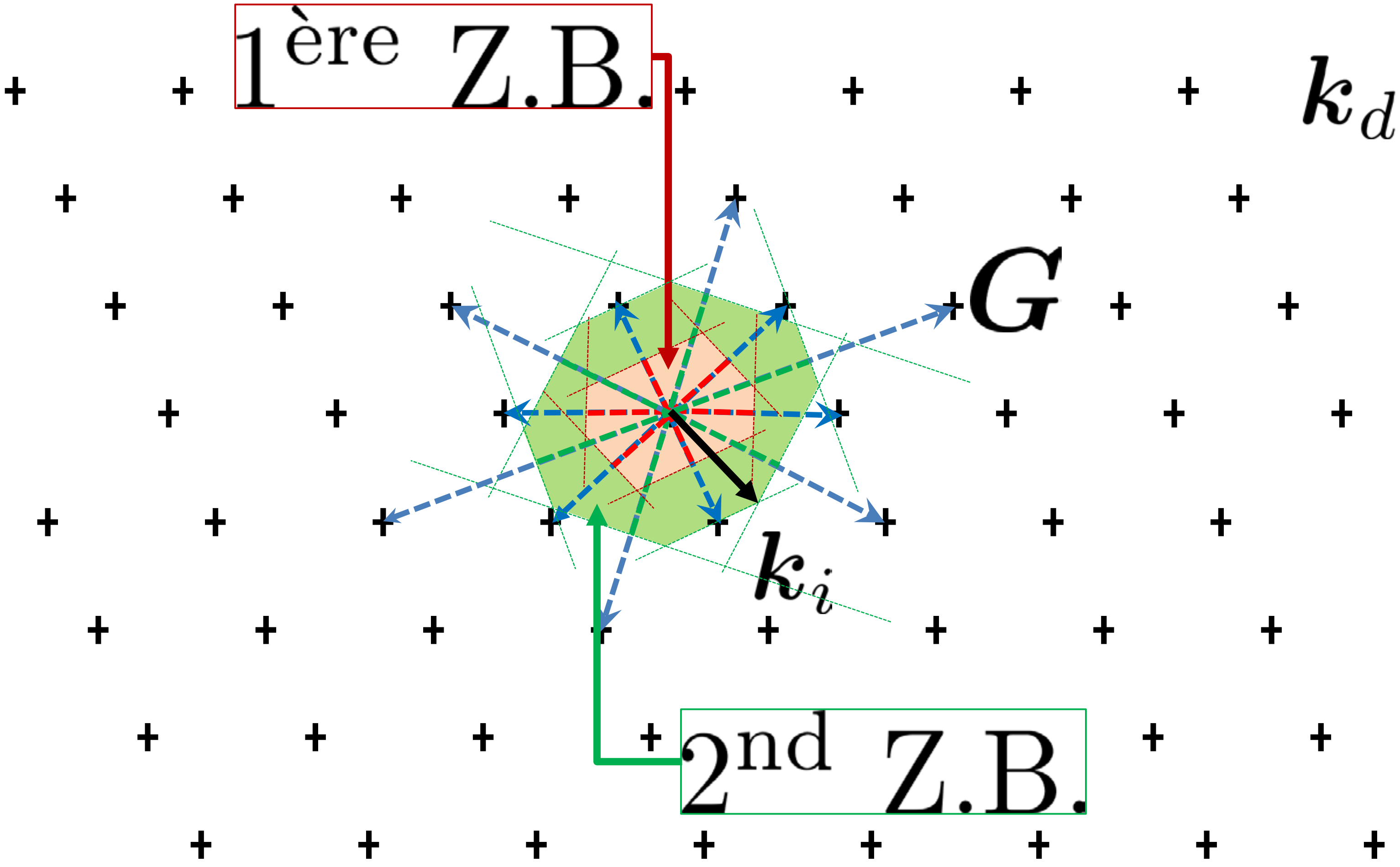
2. Diffusion par une assemblée d'électrons
Densité périodique de diffuseurs atomiques

$$\boldsymbol{k}_d - \boldsymbol{k}_i = -\boldsymbol{G} \in \text{R.R.}$$



$$\boldsymbol{k}_i \cdot \frac{\boldsymbol{G}}{G} = \frac{G}{2}$$

2. Diffusion par une assemblée d'électrons
Densité périodique de diffuseurs atomiques



$$\boldsymbol{k}_d - \boldsymbol{k}_i = -\boldsymbol{G} \in \text{R.R.}$$

La Z.B. est la maille de Wigner-Seitz du R.R.

$$\boldsymbol{k}_i \cdot \frac{\boldsymbol{G}}{G} = \frac{G}{2}$$

3. A quoi sert la diffraction ?

Résolution des structures cristallogaphiques

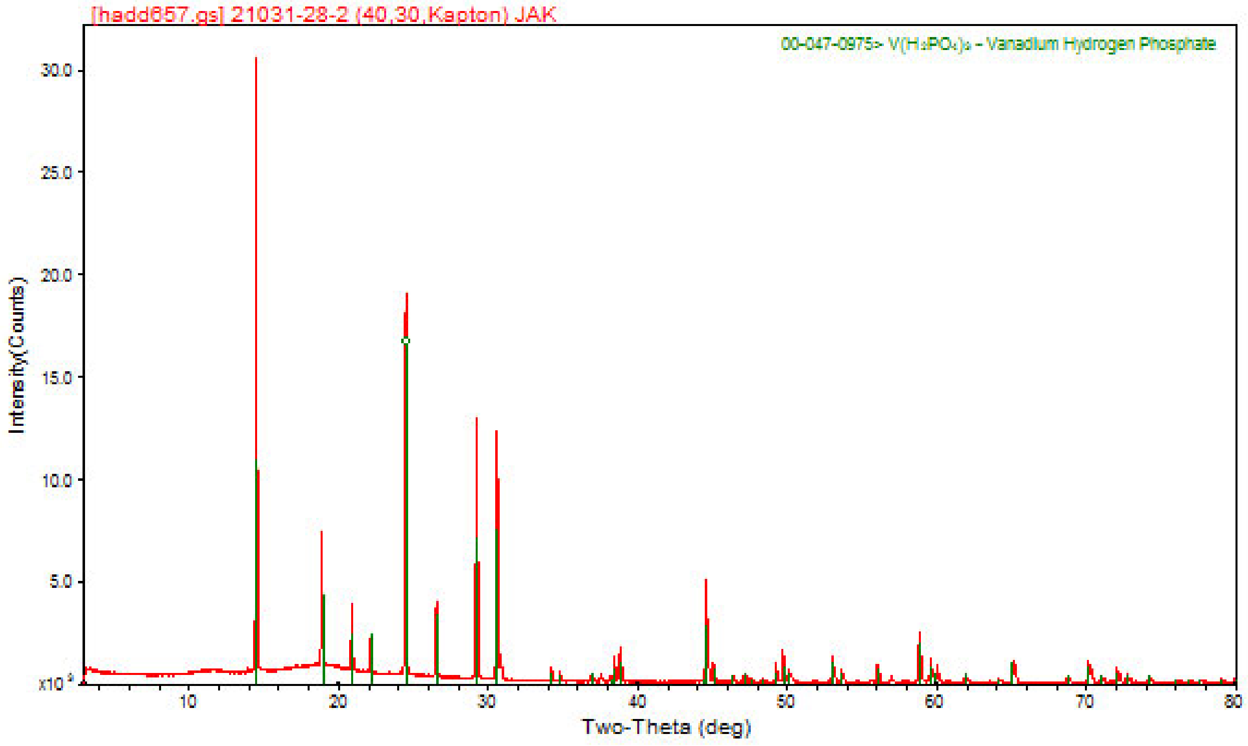


image 2

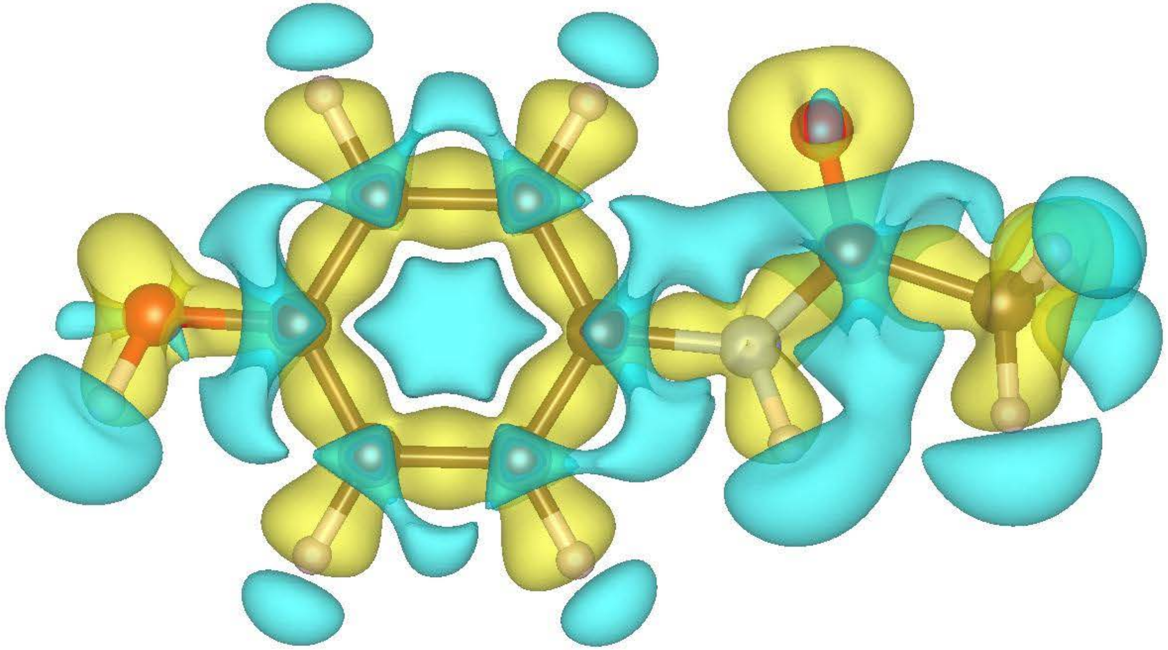
$$\boldsymbol{k}_d - \boldsymbol{k}_i = -\boldsymbol{G} \in \mathrm{R.R.}$$

Pression, température, champ électrique

3. A quoi sert la diffraction ?

Probabilité de présence des électrons

Electron deformation density in paracetamol.



N. Bouhmaida, F. Bonhomme, B. Guillot, C. Jelsch, and Nour Eddine Ghermani. Acta Cryst. B, 65(3):363{374 (2009).