

Annexe 1 : Complément Cristaux Pyroélectriques

Après des recherches, nous avons pu dresser le tableau suivant :

Système	Classe	Symétrie	Schönflies	Nom de la Classe	Exemples connus
Triclinic	1	non	C ₁	Pedial	Analcime, Zéolite, Hilgardite, Kaolin
Monoclinic	2	1A ₂	C ₂	Sphenoidal	Afwillite, Barytocalssite
Monoclinic	m	1m	C _s	Domatic	Chamosite, Dickit, Scolecite
Orthorhombic	mm2	1A ₂ , 2m	C _{2v}	Rhombic-pyramidal	Blossite, Chambersite, Natrolite
Tetragonal	4	1A ₄	C ₄	Tetragonal-pyramidal	Piypite
Tetragonal	4mm	1A ₄ , 4m	C _{4v}	Ditetragonal-pyramidal	Duabouleite, Wakefieldite
Hexagonal	3	1A ₃	C ₃	Trigonal-pyramidal	Gordaite, Jarosite, Zussmanite
Hexagonal	3m	1A ₃ , 3m	C _{3v}	Ditrigonal-pyramidal	Acetamide, Tourmaline
Hexagonal	6	1A ₆	C ₆	Hexagonal-pyramidal	Nepheline
Hexagonal	6mm	1A ₆ , 6m	C _{6v}	Dihexagonal-pyramidal	Brokenhilite, Greenockite, Moissani

Toutefois, pour que la pyroélectricité fonctionne parfaitement, il faut que le cristal ne présente pas d'impuretés (voir section III, A). De plus, la polarisation spontanée d'un cristal pyroélectrique n'est vraie que jusqu'à une certaine température : la température de Curie notée T_c . Pour cela, les cristaux nécessitent un polissage spécial que nous ne sommes pas en mesure d'effectuer. C'est pourquoi nous choisissons d'utiliser des cristaux synthétiques tels que LiNbO_3 ou le LiTaO_3 .

On peut définir le coefficient pyroélectrique primaire en première approximation par :

$$p = \frac{\Delta P}{\Delta T}$$

Où p le coefficient pyroélectrique en $\frac{\text{C}}{\text{m}^2\text{K}}$, ΔP la différence de polarisation en $\frac{\text{C}}{\text{m}^2}$ et ΔT la différence de température en Kelvins

On appelle ce coefficient le primaire car Zheng en 2008 a découvert qu'il existait deux coefficients pyroélectriques. En effet, le primaire décrit le modèle classique, et le secondaire décrit quand le changement de température est si important qu'il y a présence d'effet piézoélectrique. Nous ne nous intéressons qu'au primaire. De plus, la polarisation peut s'exprimer de cette manière :

$$\Delta P = \frac{Q}{A}$$

Où ΔP la différence de polarisation, Q la charge en Coulomb et A l'aire en m^2

$$pA\Delta T = Q$$

On peut alors considérer le tube à Rayons X comme un condensateur, ce qui nous permet d'utiliser la formule suivante :

$$Q = CU$$

Où Q la charge électrique, C la capacitance du condensateur et U la tension

Sachant que la Capacitance vaut :

$$C = \frac{\epsilon_0 \epsilon_r A}{t}$$

Où C la capacitance, $\epsilon_0 \epsilon_r$ la permittivité du matériau, A l'aire et t l'épaisseur

En combinant :

$$\frac{Qt}{\epsilon_0 \epsilon_r A} = U$$

On obtient alors notre formule finale :

$$\frac{p \Delta T t}{\epsilon_0 \epsilon_r} = U$$

Où U est la tension à atteindre, p le coefficient pyroélectrique du matériel, t l'épaisseur, ΔT la différence de température en Kelvins, $\epsilon_0 \epsilon_r$ la permittivité du matériel

On peut donc combiner cette dernière formule avec la formule du début (voir section II, B) pour trouver de combien faudrait-il augmenter en température pour obtenir des rayons X à la longueur d'onde voulue. On étudie pour des cristaux de Lithium Tantalate (LiTaO_3) et de Lithium Nobiote (LiNbO_3) avec une permittivité expérimentale jugée en matrice 11 et 33 donnée par l'Université de Stanford et des coefficients pyroélectriques donnés également par l'Université de Stanford :

$$\text{LiTaO}_3 : p = -175 \mu\text{C}/(\text{m}^2\text{K}), \epsilon_{11} = 51, \epsilon_{33} = 46,2$$

$$\text{LiNbO}_3 : p = -95,8 \mu\text{C}/(\text{m}^2\text{K}), \epsilon_{11} = 43, \epsilon_{33} = 28$$

Donc on obtient le tableau de valeurs et graphique suivant :

Cristal	p(300K)	t(m)	ϵ_{11}	ϵ_{33}	U(kV)	$\Delta T(11)(K)$	$\Delta T(33)(K)$
LiNbO₃	-0,0000988	0,005	43	28	57,6465116	-44,4076518	-28,9166105
					55,0844444	-42,4339784	-27,6314278
					52,7404255	-40,6282772	-26,4556224
					50,5877551	-38,9699802	-25,375801
					49,576	-38,1905806	-24,868285
					48,6039216	-37,4417457	-24,3806716
					47,6692308	-36,7217121	-23,9118125
					46,7698113	-36,0288496	-23,4606462
					45,0690909	-34,7187096	-22,6075318
					43,4877193	-33,5005093	-21,8142851
					42,0135593	-32,3648988	-21,0748178

Cristal	p(300K)	t(m)	ϵ_{11}	ϵ_{33}	U(kV)	$\Delta T(11)(K)$	$\Delta T(33)(K)$
LiTaO ₃	-0,000175	0,005	51	46	57,6465116	-29,7357177	-26,937062
					55,0844444	-28,4141303	-25,7398592
					52,7404255	-27,2050184	-24,644546
					50,5877551	-26,0946094	-23,6386462
					49,576	-25,5727173	-23,1658733
					48,6039216	-25,0712914	-22,7116405
					47,6692308	-24,5891512	-22,2748782
					46,7698113	-24,125205	-21,8545974
					45,0690909	-23,2479248	-21,0598848
					43,4877193	-22,4322081	-20,3209415
					42,0135593	-21,6717943	-19,632096

Annexe 2: code php

Dans le cadre de ce projet, nous avons constamment eu à faire des recherches. En particulier, quand nous recherchions des cristaux aillant la propriété d'être pyroélectrique. C'était une tâche immense, il y avait 10 classes à traiter et des tableaux sans fin de noms de cristaux dans ces classes. C'est pourquoi, je, (Baptiste), afin d'aider Léa, qui était alors en charge de cette tâche, décida de créer un algorithme accélérant ses recherches. Maîtrisant les bases du PHP, j'ai développé une page web à laquelle Léa pourra accéder aisément.

Notre critère de recherche de cristaux était simple : nous cherchions des cristaux accessibles, et nous cherchions à connaître une indication fondamentale pour la Pyroélectricité : la température de Curie. C'est pourquoi, nous avons fait le choix d'utiliser une base de données contenant les noms des cristaux de chaque classe et de chercher sur Wikipédia les informations correspondant à chaque cristal. Nous considérons par gain d'efficacité, que si le cristal ne possédait pas de page Wikipédia propre, il n'était pas assez accessible.

Baptiste a donc divisé son algorithme en deux pages web par confort de développement et d'utilisation. La première page était uniquement pour que Léa choisisse quelle classe elle souhaitait traiter. Le code est le suivant et est commenté quand c'est nécessaire :

```
<!DOCTYPE html PUBLIC "-//W3C//DTD XHTML 1.0 Strict//EN" "http://www.w3.org/TR/xhtml1/DTD/xhtml1-strict.dtd">
<html xmlns="http://www.w3.org/1999/xhtml" lang="fr-fr">

<head>

<meta http-equiv="content-type" content="text/html; charset=ISO-8859-1" />
<link href="style.css" rel="stylesheet" type="text/css"/>
<title>Pyrocrystal Tool</title>

</head>
```

```

<?php
if(isset($_POST['selectbox']))
{
$select=$_POST['selectbox'];
echo "Redirection en cours..";
?>
<meta http-equiv="refresh" content="2;url=class.php?g=<?php echo $select;?>" />
<?php

}

?>

<body>
<form method="post" action="index.php" class="choosing">
<div class="styled-select">
<select name="selectbox">
<option value="Triclinic-Pedial">Triclinic-Pedial</option>
<option value="Monoclinic-Sphenoidal">Monoclinic-Sphenoidal</option>
<option value="Monoclinic-Domatic">Monoclinic-Domatic</option>
<option value="Orthorhombic-Pyramidal">Orthorhombic-Rhombic-Pyramidal</option>
<option value="Tetragonal-Pyramidal">Tetragonal-Pyramidal</option>
<option value="Tetragonal-DitetragonalPyramidal">Tetragonal-Ditetragonal-Pyramidal</option>
<option value="Trigonal-Pyramidal">Hexagonal-Trigonal-Pyramidal</option>
<option value="Trigonal-DitrigonalPyramidal">Hexagonal-Ditrigonal-Pyramidal</option>
<option value="Hexagonal-Pyramidal">Hexagonal-Pyramidal</option>
<option value="Hexagonal-DihexagonalPyramidal">Hexagonal-Dihexagonal-Pyramidal</option>
</select>
</div>
<input type="submit" class="button" name="Submit" value="Submit">
</form>
</body>
</html>

```

La deuxième page est plus complexe et plus longue à charger, son but était de générer un tableau de tous les cristaux de chaque classe et de donner les liens Wikipédia si existant correspondants. Le code est le suivant et est commenté quand c'est nécessaire :

```

<?php
$g = $_GET['g'];
$urlbeginning = "http://webmineral.com/crystal/";
$urlending = ".shtml#list";
$url = $urlbeginning . $g . $urlending;
$page = file_get_contents($url);
$matches = 0;
preg_match_all('#<tr[^>]*>\s*<td[^>]*>\s*<a\s+href="..\data/([^"]+)\.shtml "[^"]*">\s*\1\s*</a>#i', $page,
$matches, PREG_PATTERN_ORDER);
$nbrData = count($matches[1]);
$i = 0;
?>
<!DOCTYPE html PUBLIC "-//W3C//DTD XHTML 1.0 Strict//EN" "http://www.w3.org/TR/xhtml1/DTD/xhtml1-strict.dtd">
<html xmlns="http://www.w3.org/1999/xhtml" lang="fr-fr">

<head>

```

```

<meta http-equiv="content-type" content="text/html; charset=ISO-8859-1" />
<link href="style.css" rel="stylesheet" type="text/css"/>
<title>Pyrocrystal Tool</title>

</head>

<body>
<table>
<tr>
<th>Crystal name</th>
<th>Wikipedia link</th>
</tr>
<?php
while($nbrData > $i)
{
?>
<tr>
<td><?php echo $matches[1][$i]; ?></td>
<?php
$urlch1 = "https://en.wikipedia.org/w/index.php?search=";
$urlch = $urlch1 . $matches[1][$i];
$urltrial1 = "https://en.wikipedia.org/wiki/";
$urltrial = $urltrial1 . $matches[1][$i];
$ch = curl_init();
curl_setopt($ch, CURLOPT_URL, $urlch);
curl_setopt($ch, CURLOPT_HEADER, 1);
curl_setopt($ch, CURLOPT_NOBODY, 1);
curl_setopt($ch, CURLOPT_FOLLOWLOCATION, 1);
curl_setopt($ch, CURLOPT_RETURNTRANSFER, 1);
$res = curl_exec($ch);
if (curl_getinfo($ch)['url'] == $urltrial) {
?>
<td><a href="https://en.wikipedia.org/wiki/<?php echo $matches[1][$i];?>">Access</a></td>
<?php
}
else{
?> <td>Dead link</td>
<?php
}

?>
</tr>
<?php
$i++;
}
?>
</table>
</body>
</html>

```