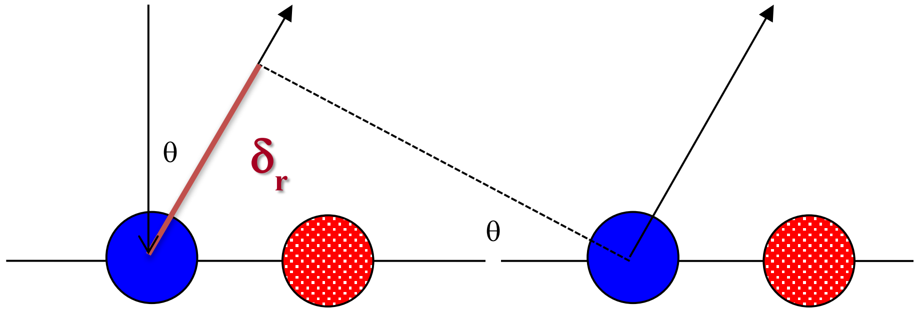
Exercice 2: Diffraction des rayons X par une chaîne linéaire

1.a On considère un repère $(O, \vec{\imath})$, le vecteur de base du réseau s'écrit: $\vec{a} = a\vec{\imath}$

1.b Le motif est constitué de deux atomes A et B.

1.c L'atome A a pour coordonnée: 0. L'atome B a pour coordonnée: $\frac{a}{4}$.

2.a On calcule la différence de marche entre les rayons diffractés par deux atomes A.



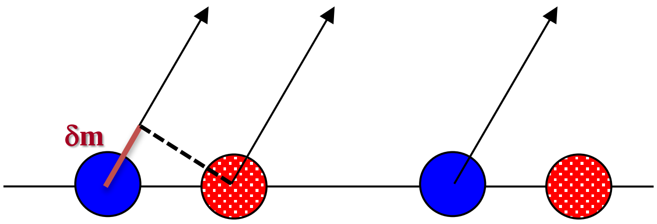
La condition de diffraction par le réseau est:

$$\begin{cases} a.\sin\theta = n\lambda \\ \dfrac{n\lambda}{a} \leq 1 \end{cases}$$

Les valeurs particulières de θ pour lesquelles on observerait des raies de diffraction par le réseau sont telles que:

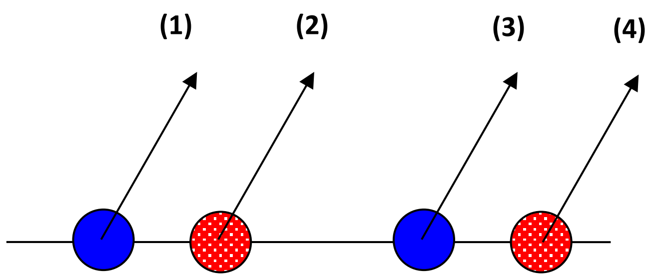
$$\theta = \sin^{-1}\left(\frac{n\lambda}{a}\right)$$

2.b On calcule la différence de marche entre les rayons diffractés par deux atomes A et B.



$$\delta_m = b.\sin\theta = \frac{a}{4}.\sin\theta$$

Le deuxième système d'interférence se combine avec le premier.
Considérons les quatre premiers rayons.



1er cas: $\delta_r = n\lambda$ et $\delta_m = n'\lambda$

(1) et (3) interférence constructive

(1) et (2) interférence constructive

(2) et (4) ≡ (1) et (3) interférence constructive

(1)+(2)+(3)+(4) donneront une interférence constructive $I_{totale} \neq 0$.

Les spots de diffraction du réseau sont renforcés, leur intensité augmente, par la diffraction du motif.

2eme cas: $\delta_r = n\lambda$ et $\delta_m = \frac{2n'+1}{2}\lambda$

(1) et (3) constructive
(1) et (2) destructive
(2) et (4) constructive
(1)+(2)+(3)+(4) donneront une interférence constructive $I_{totale} \neq 0$.

3ème cas: $\delta_r = \left(\frac{2n+1}{2}\right)\lambda$ et $\delta_m = n'\lambda$

(1) et (3) destructive
(1) et (4) destructive
(1) et (2) constructive
(1)+(2)+(3)+(4) sera constructive $I_{totale} \neq 0$.

4eme cas: $\delta_r = \left(\frac{2n+1}{2}\right)\lambda$ et $\delta_m = \left(\frac{2n'+1}{2}\right)\lambda$

Quand l' interférence des rayons (1) - (3) est destructive et l' interférence (1) - (2) est destructive le système de diffraction est détruit.

3.a On calcule le facteur de structure de la chaîne. Par définition:

$$F(h,k,l) = \sum_j f_j exp\left[-2i\pi\left(hx_j + ky_j + lz_j\right)\right]$$

Qui se réduit, dans le cas d'un réseau linéaire, à:

$$F(h) = \sum_j f_j exp\left[-2i\pi\left(hx_j\right)\right]$$

$$F(h) = f_A exp[-2i\pi(hx_A)] + f_B exp[-2i\pi(hx_B)]$$

$$F(h) = f + f exp\left[-ih\frac{\pi}{2}\right]$$

3.b L'intensité diffracté est proportionnelle à $\|F(h)\|^2$.

On remarque que dans le cas où la chaîne est formée d'un seul atome le facteur de structure et l'intensité du rayon diffracté s'écrit:

$$F(h) = f \text{ et } I_0(h) \propto f2$$

- $h = 4p$ avec $p \in \mathbb{N}$

$$F(h) = 2f \text{ et } I(h) \propto 4f^2 \propto 4I_0(h)$$

- $h = 4p + 1$ avec $p \in \mathbb{N}$

$$F(h) = \sqrt{2}f \text{ et } I(h) \propto 2I_0(h)$$

- $h = 4p + 2$ avec $p \in \mathbb{N}$

$$F(h) = 0 \text{ et } I(h) = 0$$

- $h = 4p + 3$ avec $p \in \mathbb{N}$

$$F(h) = \sqrt{2}f \text{ et } I(h) \propto 2I_0(h)$$

On retrouve ainsi les résultats de la question précédente.

4.a Le réseau est linéaire.

Le motif est —C═C, il est formé par deux atomes de carbone, qui ont le même facteur de forme.

4.b On calcule

$$\frac{\lambda}{a} = 0{,}1$$

les angles vérifiant la condition de diffraction sont donnés par:

$$sin\,\theta = n\frac{\lambda}{a}$$

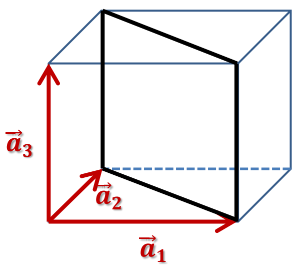
Comme $sin\,\theta \leq 1$, on déduit que $n \leq 10$. D'où le tableau:

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
sin θ	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1
θ (°)	5,74	11,53	17,45	25,50	30	36,86	44,42	53,13	64,16	90
F	$\sqrt{2}\,f$	0	$\sqrt{2}\,f$	$2f$	$\sqrt{2}\,f$	0	$\sqrt{2}\,f$	$2f$	$\sqrt{2}\,f$	$\sqrt{2}\,f$
I/I_0	2	0	2	4	2	0	2	4	2	0

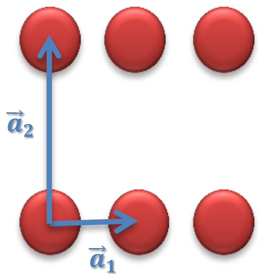
Exercice 3 : Diffraction par un réseau plan d'atomes de nickel

1. Etude du réseau plan

a. Le plan d'indices (110) est représenté en trait noir.



b. La distribution des atomes :



Réseau rectangulaire primitif

$\boldsymbol{a_1 = a\frac{\sqrt{2}}{2} = 2,49}$ Å

$\boldsymbol{a_2 = a = 3,52}$ Å

$\boldsymbol{\phi = 90°}$

c. On choisit une base orthonormée $(\vec{\imath}, \vec{\jmath}, \vec{k})$.

$\vec{a}_1 = a_1\vec{\imath}$

$\vec{a}_2 = a_2\vec{\jmath}$

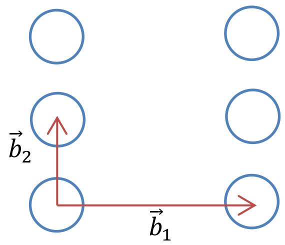
$\vec{a}_3 = \vec{k}$

On applique la définition du réseau réciproque :

$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a_1}\vec{\imath}$ $\qquad b_1 = 2{,}52$ Å^{-1}

$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a_2}\vec{\jmath}$ $\qquad b_2 = 1{,}78$ Å^{-1}

$\vec{b}_3 = \vec{k}$



En fait le réseau réciproque est un faisceau de droites parallèles et normales au plan $(\vec{b}_1, \vec{b}_2)$. Dans ce plan la trace de ces droites sont des points que l'on déduira de l'origine par des translations $\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2$.

2. Diffraction d'un rayonnement par ce réseau plan

a. $\qquad k = \frac{2\pi}{\lambda}$ $\qquad$ A.N. $k = 4{,}46$ Å^{-1}

b. La condition de diffraction de Laue :

le vecteur $\vec{k'} - \vec{k}$ est un vecteur du réseau réciproque, Il existe un vecteur $\vec{G}$ du réseau réciproque tel que:

$$\Delta\vec{k} = \vec{G}$$

Ce qui équivaut à écrire : $\qquad 2\vec{k}.\vec{G} + \vec{G}^2 = 0$

c. Construction d'Ewald

- On trace le vecteur $\vec{k}$ parallèlement au faisceau incident.
- Son extrémité est placée sur un nœud du réseau réciproque.
- On trace une de sphère dont le rayon $R = \|\vec{k}\|$.
- Les nœuds du réseau réciproque, interceptés par la sphère d'Ewald, donneront les indices des réflexions susceptibles d'être observées.

d. D'après les questions **a.** et **c.** le rayon de la sphère est $R = 4{,}46$ Å^{-1}.

e. L'intersection entre la sphère et le réseau réciproque est un cercle de centre C et de rayon $4{,}46$ Å^{-1} représenté sur la figure ci-dessous.

f. Les nœuds interceptés par la sphère d'Ewald sont les nœuds relatifs aux réflexions (3,2) et $(3,\bar{2})$.

g. L'angle $(\vec{k}',\vec{k})$ est égale au double de l'angle de diffraction de Bragg.

On déduit l'angle de diffraction de Bragg :

$$\theta = \sin^{-1}\left(\frac{\|\vec{G}\|}{2\|\vec{k}\|}\right)$$

$$\theta = 69{,}5°$$

Construction d'Ewald