

Exercice 3 : Etude structurale de systèmes (1D) et (2D) (Devoir 4)

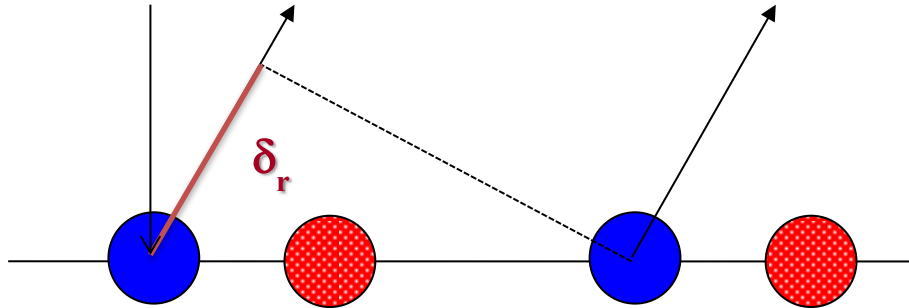
Partie 1 : Chaîne linéaire diatomique

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

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.



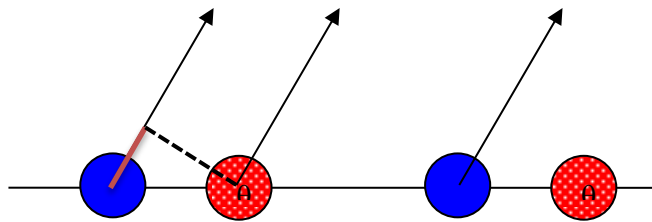
La condition de diffraction par le réseau est:

$$\begin{cases} a \cdot \sin\theta = n\lambda \\ \frac{n\lambda}{a} \leq 1 \end{cases}$$

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

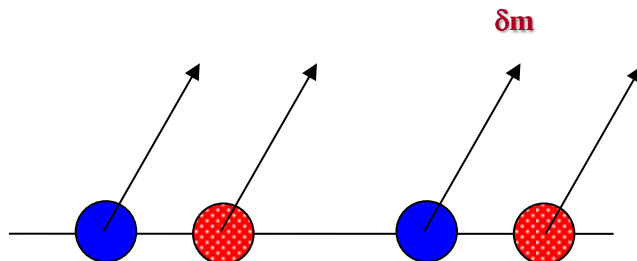
$$\theta = \sin^{-1}\left(\frac{n\lambda}{a}\right)$$

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



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

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



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

(1) et (3) interférence constructive

(1) et (2) interférence constructive

(2) et (4) $\equiv$ (1) et (3) interférence constructive

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

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

2^{ème} 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 $I_{\text{totale}} \neq 0$.

3^{ème} 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 $I_{\text{totale}} \neq 0$.

4^{ème} 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:

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

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

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

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

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

3.b L'intensité diffractée 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:

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

• $h = 4p$ 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 $-\text{C}=\text{C}$, 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:

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

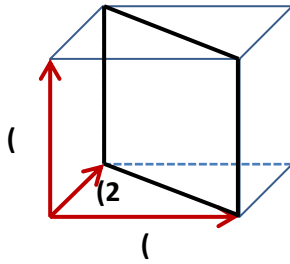
Comme $\sin \theta \leq 1$, on déduit que $n \leq 10$. D'où le tableau:

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$\sin \theta$	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

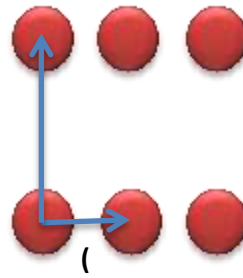
Partie 2 : Diffraction par un réseau plan d'atomes de nickel

1. Etude du réseau plan

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



b. La distribution des atomes :



Réseau rectangulaire primitif

$$a_1 = a \frac{\sqrt{2}}{2} = 2,49 \text{ \AA}$$

$$a_2 = a = 3,52 \text{ \AA}$$

$$\phi = 90^\circ$$

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

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

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

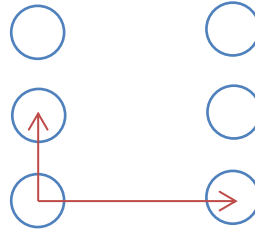
$$\vec{a}_3 = \vec{k}$$

On applique la définition du réseau réciproque :

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a_1} \vec{i} \quad b_1 = 2,52 \text{ \AA}^{-1}$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a_2} \vec{j} \quad b_2 = 1,78 \text{ \AA}^{-1}$$

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



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. $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ A.N. $k = 4,46 \text{ \AA}^{-1}$

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 :

$$2\vec{k} \cdot \vec{G} + G^2 = 0$$

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 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 $R = 4,46 \text{ \AA}^{-1}$.

e. L'intersection entre la sphère et le réseau réciproque est un cercle de centre C et de rayon $4,46 \text{ \AA}^{-1}$ 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 :

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

$$\theta = 69,5^\circ$$

Construction d'Ewald

