

Introduction à la Physique des Matériaux
Correction du devoir 3 : Diffraction des rayonnements par les solides

Problème : Diffraction de différents rayonnements par le silicium

1. Le facteur de structure d'un cristal constitué d'un seul atome et dont le réseau de Bravais est c.f.c :

$$F(h,k,l) = f[1 + \exp(-i\pi(k+l)) + \exp(-i\pi(h+l)) + \exp(-i\pi(h+k))]$$

On voit que $F(h,k,l)$ est nul sauf pour les indices de même parité.

2. La longueur d'onde utilisée est égale à 1,540 Å.

a.

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$2\theta_i$ °	28,40	47,30	55,90	68,80	76,00	87,60	94,50	106,0	113,0	127,0	136,0	156,0
θ_i °	14,20	23,65	27,95	34,40	38,00	43,80	47,25	53,00	56,50	63,50	68,00	78,00
$Q_i = \frac{4 \sin^2 \theta_i}{\lambda^2}$	0.1015	0.2725	0.3717	0.5284	0.6393	0.8080	0.9110	1.076	1.173	1.351	1.450	1.614
$h^2 + k^2 + \ell^2$	3	8	11	16	19	24	27	32	35	40	43	48
(hkl)	(111)	(220)	(311)	(400)	(331)	(422)	(333)	(440)	(531)	(620)	(533)	(444)
a (Å)	5.437	5.418	5.440	5.503	5.452	5.452	5.444	5.453	5.462	5.441	5.446	5.453

b. On suppose que le réseau est cubique, donc :

$$d_{(hkl)} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + \ell^2}}$$

Soit :

$$\frac{Q_i}{1/a^2} = h^2 + k^2 + \ell^2$$

On pose :

$$D = \frac{1}{a^2}$$

c. D divise tous les Q_i en particulier Q_1 ,

$$D = \frac{Q_1}{n}$$

n étant un entier naturel, aucune des deux valeurs $\frac{Q_1}{1}$ et $\frac{Q_1}{2}$ ne divisent les Q_i , par contre $\frac{Q_1}{3}$ divise tous les Q_i .

A.N.
$$D = \frac{Q_1}{3} = 0.03383$$

On déduit alors les valeurs de $h^2 + k^2 + \ell^2$ et (hkl) données dans le tableau.

d. Les valeurs des (hkl) vérifient les règles de sélection du réseau c.f.c. On calcule les différentes valeurs du paramètre du réseau à partir de la formule :

$$a_i = \sqrt{\frac{h^2 + k^2 + \ell^2}{Q_i}}$$

La valeur moyenne :
$$a_m = \frac{1}{12} \sum_{i=1}^{i=12} a_i = 5.450 \text{ Å.}$$

L'écart type :
$$\sigma_{n-1} = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{i=n} (a_i - a_m)^2} = \sqrt{\frac{1}{11} \sum_{i=1}^{i=12} (a_i - a_m)^2} = 1,2 \cdot 10^{-2}$$

L'intervalle de confiance à 95% : $a = a_m \pm t_{95} \frac{\sigma_{n-1}}{\sqrt{n}} = a_m \pm 2,20 \times \frac{\sigma_{n-1}}{\sqrt{n}}$

$$a = (5,450 \pm 0,008) \text{ \AA}.$$

3. On considère un faisceau de neutrons lents, dont la température est égale à 27 °C, à la sortie d'un réacteur nucléaire.

a. En supposant qu'il n'y a aucune interaction entre les neutrons ceux-ci possèdent une énergie cinétique :

$$E_c = \frac{3}{2} k_B T$$

A.N. :

$$E_c = 6,2 \cdot 10^{-21} \text{ J}$$

b. La vitesse quadratique moyenne des neutrons est donnée par :

$$v_{qm} = \sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{\frac{2E_c}{m_n}}$$

A.N. :

$$v_{qm} = 2,7 \cdot 10^3 \text{ m.s}^{-1}$$

La vitesse moyenne des neutrons :

$$v_m = 0,921 v_{qm}$$

A.N. :

$$v_m = 2,5 \cdot 10^3 \text{ m.s}^{-1}$$

Cette vitesse est très inférieure à la vitesse de la lumière ce qui justifie le terme « neutrons lent ».

c. La longueur d'onde associée aux neutrons :

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{3k_B T m_n}}$$

A.N. :

$$\lambda = 1,45 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

d.:

– les raies sont déplacées vers les angles de Bragg θ_n plus faible, en effet :

$$\theta_n = \arcsin \frac{\lambda_n}{2d(hkl)}$$

$$\theta_x = \arcsin \frac{\lambda_x}{2d(hkl)}$$

La fonction \arcsin est croissante, puisque $\lambda_n < \lambda_x$ alors $\theta_n < \theta_x$.

– le spectre contient 13 raies.

Dans le spectre de diffraction des neutrons les raies se resserrent la raie (624) n'apparaît pas dans le spectre de rayons X mais apparaît dans le spectre de diffraction des neutrons car :

$$\sin(\theta_{(624)}) = 0,995 < 1 \text{ soit } \theta_{(624)} = 84,6^\circ < 90^\circ$$

4. On considère un faisceau d'électrons d'énergie cinétique $\varepsilon = 30,0 \text{ keV}$ traversant un film polycristallin de silicium d'épaisseur e .

a. La longueur d'onde λ des électrons incidents :

$$\lambda_{\text{électrons}} (\text{\AA}) = \frac{12,3}{\sqrt{\varepsilon(\text{eV})}}$$

A.N. :

$$\lambda = 7,10 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}$$

b. Le facteur de structure du silicium :

La structure peut être décrite par deux réseaux C.F.C décalés l'un par rapport à l'autre d'un quart de la diagonale. Cette structure est due à l'existence des liaisons covalentes. Les coordonnées des atomes :

$$(0,0,0) \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right), \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right) \left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}\right) \left(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right) \left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}\right)$$

$$\mathcal{F}(h,k,\ell) = f \left[1 + \exp\left(-i\frac{\pi}{2}(h+k+\ell)\right) \right] \times \left[1 + \exp(-i\pi(h+k)) + \exp(-i\pi(k+\ell)) + \exp(-i\pi(h+\ell)) \right]$$

c. La séquence des 6 premières réflexions permises pour le silicium :

(hkl)	(111)	(220)	(311)	(400)	(331)	(422)
---------	--------------	--------------	--------------	--------------	--------------	--------------

d. Les distances $d_{(hkl)}$ correspondantes :

$d_{(hkl)} \text{ \AA}$	3,14	1,92	1,64	1,36	1,25	1,11
-------------------------	-------------	-------------	-------------	-------------	-------------	-------------

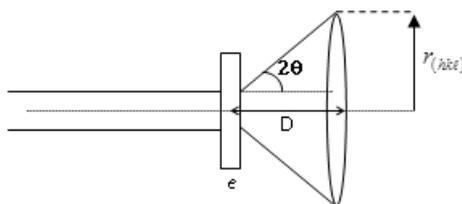
e. Les six premières valeurs angles de Bragg $\theta(hkl)$ sont données par la formule :

$$\theta(hkl) = \sin^{-1} \left(\frac{\lambda}{2d_{(hkl)}} \right)$$

θ°	0,636	1,04	1,22	1,47	1,60	1,80
----------------	--------------	-------------	-------------	-------------	-------------	-------------

f. Les rayons $r_{(hkl)}$ des six premiers anneaux de diffraction :

Puisque $e \ll D$, on a d'après la figure :



$$r_{(hkl)} = D \times \tan(2\theta)$$

$r_{(hkl)} \text{ (mm)}$	6,65	1,09	1,28	1,54	1,67	1,88
--------------------------	-------------	-------------	-------------	-------------	-------------	-------------