

Cristallographie et DRX

- Biblio: - Chimie du solide, Parucce chap 2
- Solid state chemistry: an introduction, Smart chap 1
- Cristallographie géométrique et radiocristallo, Rousseau
→ - Structure de la matière, Guymont chap 11-13
- Tout-en-un PCSI, Fasset chap 11
- Tables, Hahn
- ~~autres~~ références

I) Cristaux et réseau cristallin

A) Définitions: Bases et maille élémentaire Fasset + Guymont chap 11

Cristal parfait: ens. de part. empilée régulièrement de l'espace, sans défaut et de dim ∞ et triperiodiq à la base du modèle

Réseau: ens. ∞ triperiodiq de points (nœuds)

Translat, combi linéaire de 3 vect bases: $\vec{T} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$

Maille: parallélépipède construit sur les 3 vect. de base (ou sur 3 long. a, b, c \oplus 3 angles α, β, γ)

↳ maille simple, multiple; primitive; conventionnelle (Fasset p 651-653)
Guymont p 359-360

Motif: contenu de la maille simple (= 1 at., Γ , grs d'at...)

⇒ **Cristal** = réseau + motif.

B) Rangées et plans réticulaires Guymont p 361-362

illustrat: Smart p 24

Rangées: droites joignant nœuds

Plans réticulaires: plans de nœuds.

C) Systèmes cristallins et réseaux de Bravais

Systèmes cristallins: \int Guymont p 363 + Smart p 18

* Opérations de sym: Smart p 8-13 + Guymont chap 9 + p 368-371

Réseaux de Bravais: Smart p 20 + Guymont p 373

D) Le réseau réciproque Rousseau chap 2.2. + Guymont p 365-367

$$\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \wedge \vec{c}}{V} \quad \vec{b}^* = \frac{\vec{c} \wedge \vec{a}}{V} \quad \vec{c}^* = \frac{\vec{a} \wedge \vec{b}}{V}$$

* Dist. entre plans (hkl):

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{(h/a)^2 + (k/b)^2 + (l/c)^2}}$$

$$en: d_{hkl, cub} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

$$= \frac{1}{\|\vec{m}_{hkl}^*\|}$$

II) Diffraction des rayons X Guymont chap 13; Rousseau chap 9-14 + culturesciencesA) Production et détection des rayons X

Production: Guymont p 406 + Rousseau chap 9 \rightarrow transfert entre niveaux int. des at. anode

ODG: raie K_{α} Cu $\rightarrow \lambda = 1,54 \text{ \AA}$.

Détection: Rousseau p 116-117

B) Interaction avec la matière Guymont p 408-409 + Rousseau chap 10

* Par part. chargée (e^- , p^+): \rightarrow émet rayons^{*} diffusé de façon élastiq

+ Diffusion par at.: at. = nuage d' e^- . \rightarrow émission \neq selon direct

\rightarrow amplitude f diffusée = fact. de diff atome.

c) Diffraction par un cristal Guymont chap 13.3 + Rousseau chap 10

* Intensité diffractée: $I(\vec{\delta}) = A_c^2 \underbrace{FF^*}_{\text{amplitude diff}} \underbrace{f(\vec{\delta})}_{\text{fact d'intensif}}$

Conditions de Laue: maxima d'intensité diffractée = ds direct $\vec{\delta}$ tq:

$$\frac{\vec{\delta} - \vec{\delta}_0}{\lambda} = \vec{h}^*$$

↳ vect. qqg du réseau réciproq

Sphère d'Ewald cf Guymont p 411

Relation de Bragg: $2 d_{hkl} \sin \theta = n \lambda$

demo: Guymont p 413

* Amplitude et intensité diffractées par cristal:

$$I(\vec{h}, \vec{k}, \vec{l}) = N^2 A_c^2 F(\vec{h}, \vec{k}, \vec{l}) F^*(\vec{h}, \vec{k}, \vec{l})$$

↳ nbre de mailles

Facteur de struct: $F(\vec{h}, \vec{k}, \vec{l}) = \sum_{j: \text{at. maille}} f_j e^{i2\pi \vec{H}^* \cdot \vec{r}_j} = \sum_j f_j e^{i2\pi (hx_j + ky_j + lz_j)}$

→ Condit de diffract: $F(\vec{h}, \vec{k}, \vec{l}) \neq 0$.

d) Différentes méthodes expérimentales chap 13.4 Guymont : 260

→ cristal tournant

→ méthode de Laue

→ techng de Debye-Scherrer