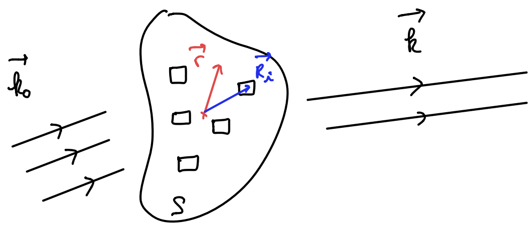
I) 1.



$$A(\vec{k}) = K \iint_S d^2\vec{r} \; t(\vec{r}) \; e^{-i\underbrace{(\vec{k}-\vec{k}_0)}_{\Delta\vec{k}}.\vec{r}} = K.\, TF[t](\Delta\vec{k})$$

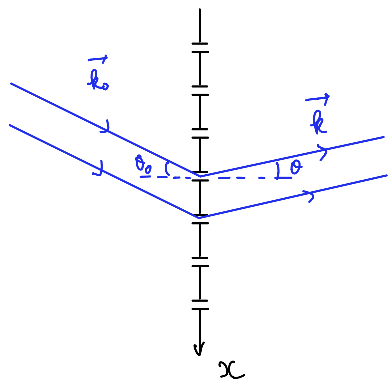
2.

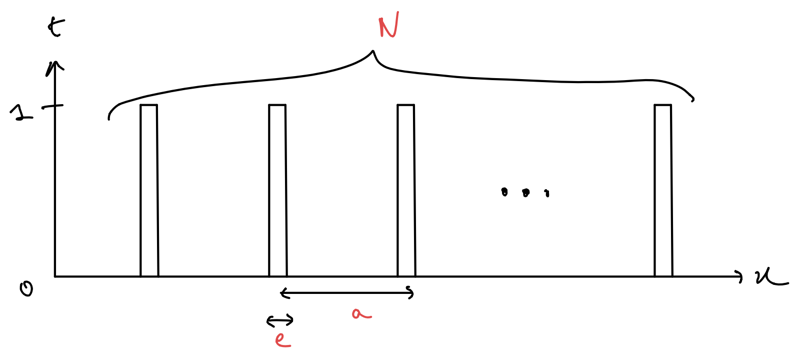
$$t(\vec{r}) = \sum_i \delta(\vec{r}-\vec{R}_i) \otimes t_{motif}(\vec{r})$$

$$\hookrightarrow \quad A(\vec{k}) = K \sum_j \underbrace{TF[\delta(\vec{r}-\vec{R}_j)](\Delta\vec{k})}_{e^{-i\Delta\vec{k}.\vec{R}_j}} \times TF[t_{motif}](\Delta\vec{k})$$

$$= \underbrace{K.\left(\sum_j e^{-i\Delta\vec{k}.\vec{R}_j}\right)}_{\text{facteur de structure}} . \underbrace{TF(t_{motif})(\Delta\vec{k})}_{\text{facteur de forme}}$$

II. 1.





facteur de structure

2.

$$S = \sum_{j=1}^{N} e^{-i\Delta\vec{k}.\vec{R}_j} = \sum_{j=1}^{N} e^{-i\underbrace{.\frac{2\pi}{\lambda}.ja.(\sin\theta-\sin\theta_0)}_{j.\varphi}} = \frac{(1-e^{iN\varphi})}{1-e^{i\varphi}}.e^{i\varphi}$$

$$S = e^{\frac{i\varphi(N+1)}{2}} . \frac{\sin\left(\frac{\varphi N}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\varphi}{2}\right)}$$

facteur de forme : diffraction par une fente (prérequis)

$$\mathcal{F}(\theta) = \mathcal{F}_0 . \operatorname{sinc}^2\left(k.(\sin\theta-\sin\theta_0).\frac{e}{2}\right)$$

$$\varphi = \frac{2\pi}{\lambda} a (\sin\theta - \sin\theta_0)$$

$$\hookrightarrow \quad \boxed{I = N^2 . I_0 . \operatorname{sinc}^2\left(\varphi.\frac{e}{2a}\right) . \left(\frac{\sin\left(\frac{\varphi N}{2}\right)}{N\sin\left(\frac{\varphi}{2}\right)}\right)^2}$$

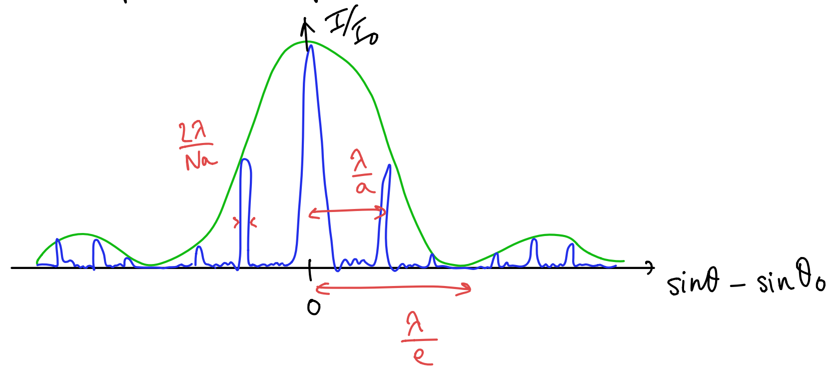
$$I = N^2 I_0 \operatorname{sinc}^2\left(\frac{\pi . l}{\lambda} . (\sin\theta - \sin\theta_0) \right) \left(\frac{\sin\left(\frac{\pi N a}{\lambda}(\sin\theta - \sin\theta_0)\right)}{N \sin\left(\frac{\pi a}{\lambda}(\sin\theta - \sin\theta_0)\right)} \right)^2$$

Commentaires : • I maximum lorsque $\sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) = 0$ ie $\varphi = 2p\pi$

formule des réseaux : $\sin\theta - \sin\theta_0 = p\frac{\lambda}{a}$

petits angles + incidence normale → $\theta = p\frac{\lambda}{a}$ linéaire

• le facteur de forme s'annule à $\varphi = \frac{2a\pi}{e}$



	espace réel			espace réciproque
$L = Na$	longueur de réseau éclairé	grand ↑	petit	largeur d'un pic
a	dimension intermédiaire entre les fentes			distance entre les pics ordres du réseau
e	épaisseur d'une fente	petit	↓ grand	largeur de l'enveloppe modulation globale

3. Pouvoir de résolution

• autour de $\varphi = 0$, l'annulation a lieu à $\sin\left(\frac{N\varphi}{2}\right) = 0$ ie $\delta\varphi = \frac{2\pi}{N}$

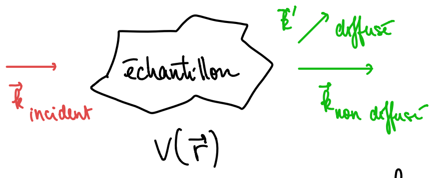
• c'est la même pour tous les pics de diffraction, par périodicité de $|S|^2$.

• pour le pic d'ordre p, $\varphi = 2\pi p$

$$PR = \frac{\lambda}{\delta\lambda} = \frac{\varphi}{\delta\varphi} = pN$$

$\varphi \propto \frac{1}{\lambda}$, le reste des paramètres étant fixés
→ les dérivées logarithmiques sont égales en module.

III 1.



rayons X . ← { PN 1901 Roentgen production rayons X
neutrons . ← | PN 1914 von Laue
| PN 1915 Bragg (père et fils)
PN 1994 Brockhouse, Shull

rayons X $\lambda = \dfrac{hc}{E}$

électrons accélérés $\lambda = \dfrac{h}{mv}$

neutrons $\lambda_{th} = \dfrac{h}{\sqrt{3mkT}}$

spallation
p + cible → cible' + n

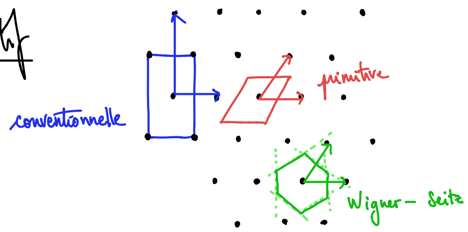
2.

facteur de structure $\sum e^{i\vec{k}\vec{r}_i}$

$$\boxed{\text{Structure périodique} = \text{réseau} \otimes \text{motif}}$$

facteur de forme $S(\vec{q})$

Motif



Réseau (de Bravais) : R réseau ⟺ $\exists\ \vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$, $R = \{ n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3,\ n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}\}$

Condition de Laue et Bragg

Approche avec la règle d'or de Fermi :

potentiel de l'échantillon

Taux de transition par unité de temps $\boxed{\Gamma(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle|^2 \, \delta(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}'})}$

$$\text{où } \langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle = \iiint d^3\vec{r}\, \frac{e^{-i\vec{k}'\vec{r}}}{\sqrt{V}} \cdot V(\vec{r}) \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{\sqrt{V}} = \frac{1}{V} \iiint d^3\vec{r}\, e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}}\, V(\vec{r}) = \frac{1}{V} \cdot TF[V](\vec{k}'-\vec{k})$$

or pour un cristal, on utilise la décomposition du I) :

$$TF[V](\Delta\vec{k}) = \underbrace{\left(\sum_j e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{R}_j} \right)}_{\text{facteur de structure } S(\Delta\vec{k})} \cdot \underbrace{TF(V_{motif})(\Delta\vec{k})}_{\text{facteur de forme}}$$

Réseau 3D de vecteurs de base ⊥ : $\vec{a}_j = a_j \vec{u}_j$ ← unitaire, $j = x, y, z$

$$S(\Delta\vec{k}) = \sum_{p,q,r} e^{-i\Delta\vec{k}\cdot(p\vec{a}_1 + q\vec{a}_2 + r\vec{a}_3)} = \prod_{j=1}^{3} \left(\sum_p e^{-ip\Delta\vec{k}\,\vec{a}_j} \right)$$

comme le réseau avec $N \to \infty$

Lorsque $N \to \infty$, les pics tendent vers des dirac en $\vec{\Delta k} \cdot \vec{a_j} = 2\pi . p$ (interférences constructives)

$$S(\vec{\Delta k}) = \underbrace{\sum_{h,k,l}}_{\text{indices de Miller}} \delta\left(\vec{\Delta k} - (h\vec{b_1} + k\vec{b_2} + l\vec{b_3})\right)$$

$\vec{b_j} = \frac{2\pi}{a_j} \vec{u_j}$ vecteurs du réseau récip.

$$\boxed{S(\vec{\Delta k}) = \sum_{\vec{G} \in R'} \delta(\vec{\Delta k} - \vec{G})}$$

Si le facteur de forme ne s'annule pas

↳ $\Gamma(\vec{k}, \vec{k}') \neq 0 \iff$ $\boxed{\begin{array}{l} \vec{k} - \vec{k}' \in \text{réseau réciproque} \\ |\vec{k}| = |\vec{k}'| \text{ car } E_{\vec{k}'} = E_{\vec{k}} \end{array}}$

condition de Laue

– conservation de l'impulsion cristalline

– conservation de l'énergie : hyp diffusion Thomson élastique

Facteur de forme

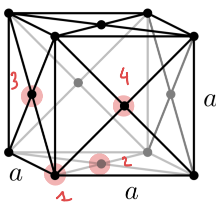
$$V(\vec{r}) = \sum_{\text{atomes } j} f_j\, \delta(\vec{r}-\vec{r}_j)$$
$$\downarrow$$
$$F(\vec{G}) \sim \sum_{\substack{\text{atomes } j \\ \text{cellule unité}}} b_j\, e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}_j}$$

neutrons : l'interaction nucléaire est de courte portée

$$\vec{G}_{(hkl)} \cdot \vec{r}_j = (h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3)(x_j\vec{a}_1 + y_j\vec{a}_2 + z_j\vec{a}_3) \overset{\downarrow}{=} 2\pi(h x_j + k y_j + l z_j)$$

$$\boxed{F_{(h,k,l)} = \sum_{\substack{\text{atomes } j \\ \text{cellule unité}}} f_j\, e^{i2\pi(h x_j + k y_j + l z_j)}}$$

Cuivre : cubique face centrée :



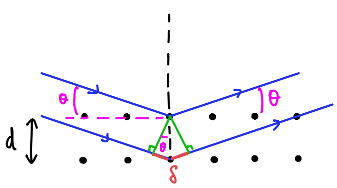
$\vec{r}_1 = (0,0,0)$
$\vec{r}_2 = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$
$\vec{r}_3 = (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
$\vec{r}_4 = (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$

$$\longrightarrow \boxed{F_{(hkl)} = f_{Cu}\left(1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)}\right)}$$

$S_{(hkl)} \neq 0 \iff h,k,l$ tous pairs ou tous impairs

extinctions

Approche interférentielle

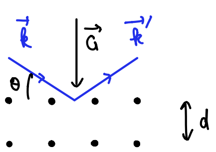


plans parallèles

- Un rayon arrive avec un angle θ et est dévié de $\boxed{2\theta}$
- La différence de marche entre les deux rayons est :
  $\delta = 2\, d \sin\theta$
- Condition de Bragg d'interférence constructive $\boxed{\delta = n\lambda = 2d\sin\theta}$

Equivalence des approches

$\boxed{\text{(condition de Laue)}.\vec{G} \longrightarrow \text{condition de Bragg}}$



À la famille de plans // correspond un vecteur $\vec{G}$ du réseau réciproque
La condition de Laue donne $.\vec{G}\ \Big(\vec{k} - \vec{k}' = \vec{G}$

$(\vec{k} - \vec{k}')\cdot\vec{G} = |\vec{G}|^2$ avec $|k| = |k'| = \frac{2\pi}{\lambda}$

$(|k|\sin\theta + |\vec{k}'|\sin\theta)|\vec{G}| = |\vec{G}|^2$ $\quad |G| = \frac{2\pi}{d}$

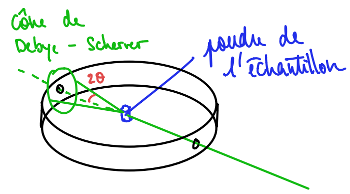
$\frac{2\pi}{\lambda} 2\sin\theta = |\vec{G}| = \frac{2\pi}{d}$

$\hookrightarrow\ 2d\sin\theta = \lambda$ condition de Bragg

NB : on aurait pu prendre $\vec{G}' = n\vec{G} \in R'$
pour trouver $n\lambda = 2d\sin\theta$

3. <u>Méthode des poudres ou Debye-Scherrer</u> :

* pas besoin de gros cristal
* beaucoup d'angles d'incidence



<u>Méthode</u> :

(i) mesurer 2θ

(ii) calculer $d_{(h,k,l)} = \dfrac{\lambda}{2\sin\theta}$ (λ donné, θ mesuré). Par ailleurs, $d_{(hkl)} = \dfrac{a}{\sqrt{h^2+k^2+\ell^2}}$

(iii) calculer les rapports $\dfrac{d_A^2}{d^2} = \dfrac{h^2+k^2+\ell^2}{h_A^2+k_A^2+\ell_A^2} \equiv \dfrac{N^2}{N_A^2}$ (d_A : premier pic)

(iv) multiplier les $\dfrac{d_A^2}{d^2}$ par le plus petit entier possible pour qu'ils soient tous ≃ entiers et obtenir les $N \equiv h^2+k^2+\ell^2$

(v) comparer les $N \equiv h^2+k^2+\ell^2$ à la table des règles de sélection

↳ en déduire la structure

cubique simple	si	$N = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 8$ ($7 \neq \sqrt{h^2+k^2+\ell^2}$)
CFC	si	$N = 3, 4, 8, 11, \ldots$
CC	si	$N = 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, \ldots$

↳ en déduire a

(vi) avec les multiplicité on peut calculer le rapport des f_j.

$d_{(hkl)} = \dfrac{a}{\sqrt{h^2+k^2+\ell^2}}$; × 3

Cuivre :	2θ	$d = \dfrac{\lambda}{2\sin\theta}$	$\dfrac{d_1^2}{d^2} = \dfrac{h^2+k^2+\ell^2}{h_1^2+k_1^2+\ell_1^2}$	$N = h^2+k^2+\ell^2$		(h,k,ℓ)
1	43.05°	2.099 Å	1	3	$\boxed{3}$	111
2	50.19°	1.816 Å	1.336	4.007	$\boxed{4}$	200
3	73.91°	1.281 Å	2.684	8.052	$\boxed{8}$	220

cubique simple	si	$N = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 8$
cubique face centrée	si	$N = \boxed{3, 4, 8}, 11, \ldots$
cubique simple	si	$N = 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, \ldots$

→ $\boxed{a = d_1 \cdot \sqrt{h_1^2+k_1^2+\ell_1^2} = 3.6 \pm 0.2 \text{ Å}}$

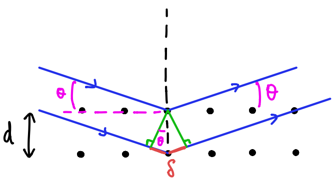
$a_{\text{tabulé}} = 3.6149$ Å

Approche interférentielle

- Un rayon arrive avec un angle θ et est dévié de $\boxed{2\theta}$
- La différence de marche entre les deux rayons est :

$$\delta = 2\, d \sin\theta$$

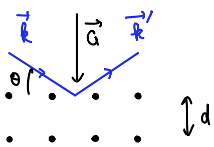
- Condition de Bragg d'interférence constructive $\boxed{\delta = n\lambda = 2d\sin\theta}$



plans parallèles

Equivalence des approches

$\boxed{\text{(condition de Laue)}.\vec{G} \longrightarrow \text{condition de Bragg}}$



À la famille de plans // correspond un vecteur $\vec{G}$ du réseau réciproque

La condition de Laue donne $\cdot\vec{G}$

$$\vec{k} - \vec{k}' = \vec{G}$$

$$(\vec{k} - \vec{k}').\vec{G} = |\vec{G}|^2$$

$$(|k|\sin\theta + |\vec{k}'|\sin\theta)\,|\vec{G}| = |\vec{G}|^2$$

$$\frac{2\pi}{\lambda}\, 2\sin\theta = |\vec{G}| = \frac{2\pi}{d}$$

avec $|k| = |k'| = \frac{2\pi}{\lambda}$, $|G| = \frac{2\pi}{d}$

$\hookrightarrow$ $2d\sin\theta = \lambda$ condition de Bragg

NB : on aurait pu prendre $\vec{G}' = n\vec{G} \in R'$ pour trouver $n\lambda = 2d\sin\theta$