

Diffraction des rayons X

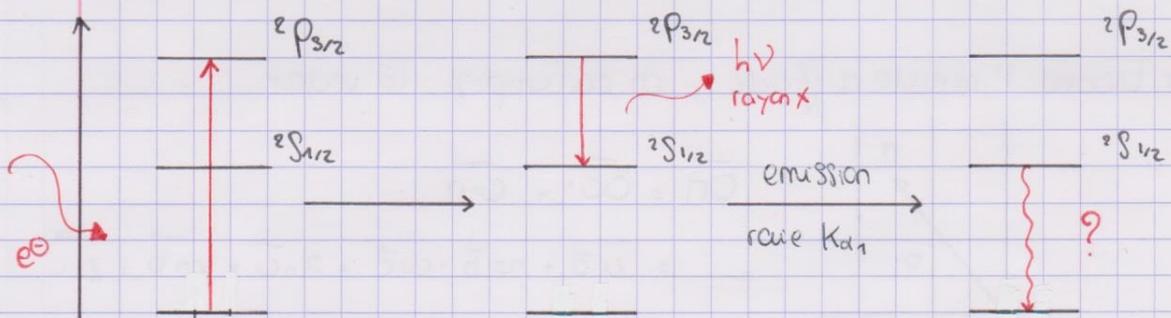
* C'est une méthode expérimentale très utilisée en cristallographie

Permettent de trouver la structure et les paramètres de maille

* On utilise des rayons X ($\lambda \approx 100 - 200 \text{ pm}$) car dans ces longueurs d'onde les plans d'atomes vont les diffracter

* Pour produire des rayons X on fait de la fluorescence X avec des atomes de cuivre (cf Guymont p 406)

- on bombarde le cuivre avec des e^- accélérés
 - le cuivre absorbe les e^- et réémet dans les rayons X, polychromatique
 - On filtre le rayonnement par ne garder que la bande $K\alpha_1$
- ↳ cf "Tube à rayon X" et "Emission rayon X"



• Une autre source possible est le Synchrotron.

* Quand on envoie un faisceau de rayons X sur un cristal, dans certaines directions le résultat des interférences n'est pas nul \Rightarrow diffraction

- En envoyant un faisceau incident de vecteur \vec{S}_0
- En notant \vec{S} une direction par un rayon diffracté

↳ cf "Sphere d'Ewald"

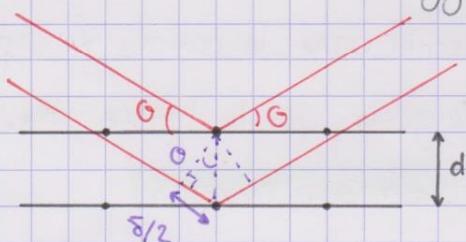
• On a un maximum de diffraction si on respecte les conditions de Laue, ce qui revient à: (cf "Réseau réciproque")

$$\frac{\|\vec{s} - \vec{s}_0\|}{\lambda} = \frac{2 \sin(\theta)}{\lambda} = \|\vec{H}\|^* = \frac{n}{d_{hkl}}$$

↳ Comme on a peut de chance de satisfaire cette condition dans une direction précise, on fait tourner le cristal.

⇒ Loi de Bragg $2 \cdot d \cdot \sin \theta = n \lambda$

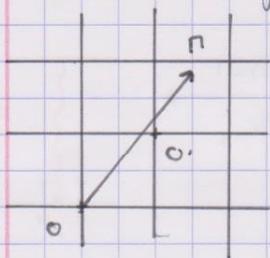
* On peut redémontrer la loi de Bragg en utilisant l'optique géométrique



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

constructif si $2d \sin \theta = n \lambda$

* Pour trouver l'intensité diffractée, on décompose le vecteur:



$$\vec{O'n} = \vec{O'O'} + \vec{O'n}$$

$$= u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} + x\vec{a} + y\vec{b} + z\vec{c}$$

L'amplitude diffractée est:

$$A = \sum_j f_j \left[e^{2i\pi \cdot \frac{\vec{s} - \vec{s}_0}{\lambda} \cdot \vec{O'n}} \right]$$

différence entre chaque atome

↳ Guymont p 409

avec f_j le facteur de force atomique: diffusion des rayons X

↳ cf "Valeurs facteur force atomique"

j les atomes de la maille,

* En developpant:

$$A = \left(\sum_{u=0}^{N_a-1} e^{2i\pi \cdot \vec{H}^* \cdot \vec{a} \cdot u} \right) \cdot \left(\sum_{v=0}^{N_b-1} e^{2i\pi \vec{H}^* \cdot \vec{b} \cdot v} \right) \cdot \left(\sum_{\omega=0}^{N_c} e^{2i\pi \vec{H}^* \cdot \vec{c} \cdot \omega} \right) \\ \times \sum_{j=1}^N f_j e^{2i\pi \vec{H}^* (x_n \vec{a} + y_n \vec{b} + z_n \vec{c})}$$

• Il faut A non nul car $I = N^2 \cdot I_0 \cdot A \cdot A^*$

$$\Rightarrow \begin{cases} \vec{H}^* \cdot \vec{a} = h \in \mathbb{Z} \\ \vec{H}^* \cdot \vec{b} = k \in \mathbb{Z} \\ \vec{H}^* \cdot \vec{c} = l \in \mathbb{Z} \end{cases} \Rightarrow \text{On retrouve les prop du reseau reciproque}$$

$$\hookrightarrow \vec{H}^* = h \cdot \vec{a}^* + k \vec{b}^* + l \vec{c}^* = \overline{N h k l}$$

• Il faut surtout:

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^N f_j e^{2i\pi (h x_n + k y_n + l z_n)} \neq 0$$

\hookrightarrow On l'appelle le facteur de structure

* Exemple: maille cubique centree: 2 atomes par maille (CCs)

• 1 atome en $(0, 0, 0)$, 1 atome en $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

$$\Rightarrow F_{hkl} = f_{cc} + f_{cc} e^{i\pi (h+k+l)} \neq 0$$

\hookrightarrow il faut $h+k+l = 2n$

\Rightarrow On trouve les pics qui nous donne des infos sur la structure

\hookrightarrow on regarde dans des tables

* On peut aussi retrouver les paramètres de maille

• KCl est en cfc $d_{200} = \frac{a}{2}$

• Par le pic (200) $2\theta \approx 29^\circ \Rightarrow \theta = 14,5^\circ$

$$\hookrightarrow d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = \frac{a}{2} = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} = 640 \text{ pm}$$