

Cours type Physique du solide 1 (SS)

QCS:

1/ Méthode de Scherrer: une méthode de diffraction qui utilise une radiation monochromatique. Elle est envoyée vers une poudre (préférentiellement finement broyée).

(1.5) les rayons diffractés sont détectés soit par un cliché "cylindrique" soit par un détecteur en 2D.

2/ Définitions (voir cours)

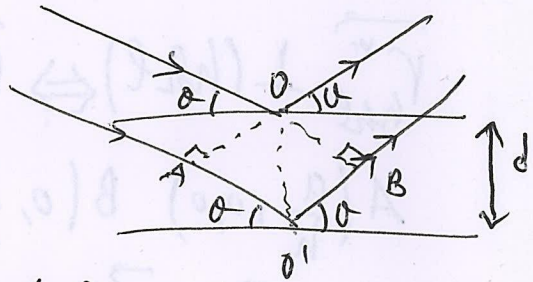
(0.5) x3

3/ Condition de diffraction

R.D: $OA + OB = n\lambda$ (0.5)

$d \sin \theta + d \sin \theta' = n\lambda$ (0.5)

$|2d \sin \theta = n\lambda|$ (0.5)



R.R: $AB + BC = n\lambda$

$d \cos \theta + d \cos \theta' = n\lambda$ (0.5)

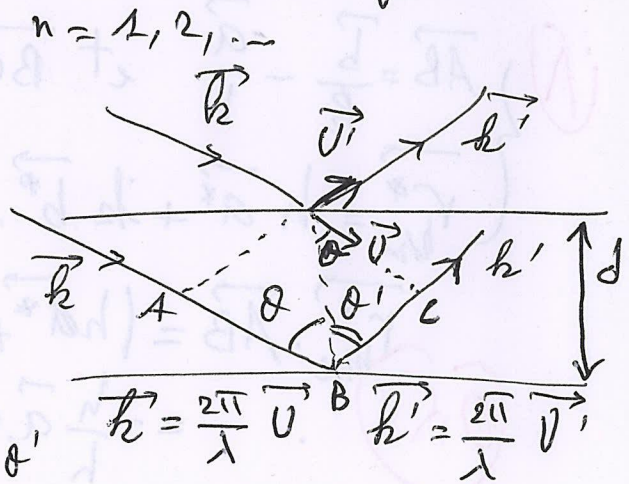
(0.5) $\vec{d} \cdot \vec{U} = d \cos \theta$

(0.5) $\vec{d} \cdot \vec{U}' = d \cos(\pi - \theta') = -d \cos \theta'$

alors: $\vec{d} \cdot \frac{2\pi}{\lambda} \vec{U} - \frac{2\pi}{\lambda} \vec{U}' = 2\pi n$

$\vec{d} \cdot (\vec{h} - \vec{h}') = 2\pi n$ (0.5)

$\boxed{R \cdot \Delta h = 2\pi n}$



4/ Densité de remplissage

$\rho = \frac{V_{occupé}}{V_{maille}}$

C.C	CFC	Alamant
68% (1)	74% (1)	34% (1)

Exo 1: $\lambda = 1,5418 \text{ \AA}$

$d (\text{\AA})$	3,633	2,225	1,284	1,112
(hkl)	111	220	422	440

$K_i = 1/d_i^2$

$L_i = K_i/K_1$

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

1/ Réseau cfc (OK)

2/ Paramètre de la maille $a = \sqrt{3} \cdot d_{111} = \sqrt{3} \times 3,633$

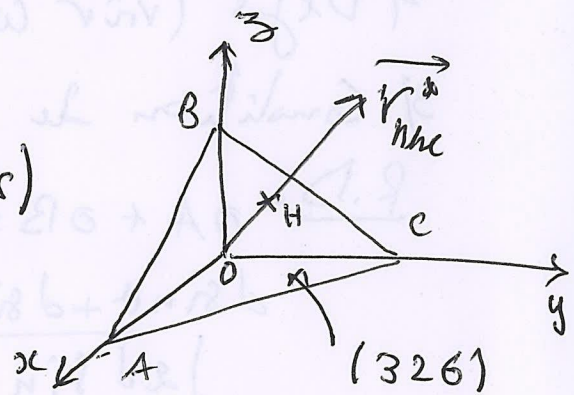
$a = 6,29 \text{ \AA}$

Exo 2:

$h=3, k=2, l=6$

$\vec{r}_{hkl}^* \perp (hkl) \Leftrightarrow \vec{r}_{hkl}^* \perp (2 \text{ vecteurs})$

$A(a/h, 0, 0) \quad B(0, b/k, 0) \quad C(0, 0, c/l)$



(N) $\vec{AB} = \vec{b} - \vec{a}$ et $\vec{BC} = \vec{c} - \vec{b}$

$\vec{r}_{hkl}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$

(OK) $\vec{r}_{hkl}^* \cdot \vec{AB} = (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \cdot (\vec{b} - \vec{a})$

$= -\frac{h}{h} \vec{a} \cdot \vec{a}^* + \frac{k}{k} \vec{b} \cdot \vec{b}^*$

$= 0 \quad (\vec{a} \cdot \vec{a}^* = 2\pi \text{ et } \vec{b} \cdot \vec{b}^* = 2\pi)$

Donc, $\vec{r}_{hkl}^* \perp \vec{AB}$

(OK) $\vec{r}_{hkl}^* \cdot \vec{BC} = (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \cdot (\vec{c} - \vec{b}) = 0$

Donc même $\vec{r}_{hkl}^* \perp \vec{BC}$

$$2) d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{r}_{hkl}^*|} \Rightarrow d_{hkl} = |\vec{O}H|$$

$$\textcircled{1} \vec{OA} \cdot \vec{r}_{hkl}^* = |\vec{OA}| \cdot |\vec{r}_{hkl}^*| \cos \alpha = |\vec{O}H| \cdot |\vec{r}_{hkl}^*|$$

$$|\vec{O}H| = \frac{\vec{OA} \cdot \vec{r}_{hkl}^*}{|\vec{r}_{hkl}^*|} = \frac{1/h \vec{a} \cdot (h \vec{a}^* + k \vec{b}^* + l \vec{c}^*)}{|\vec{r}_{hkl}^*|}$$

$\textcircled{0.5}$

$$= \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}_{hkl}^*}{|\vec{r}_{hkl}^*|} = \frac{2\pi}{|\vec{r}_{hkl}^*|}$$

$\textcircled{0.15}$

$$\text{Donc, } |\vec{O}H| = \frac{2\pi}{|\vec{r}_{hkl}^*|} = d_{hkl}$$

3/ Pour un cristal cubique:

$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$$

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{a} \vec{i}$$

$$\vec{b}^* = \frac{2\pi}{a} \vec{j}$$

$$\vec{c}^* = \frac{2\pi}{c} \vec{k}$$

$$D'au: \vec{r}_{hkl}^* = \frac{2\pi}{a} (h \vec{i} + k \vec{j} + l \vec{k})$$

$\textcircled{0.15}$

$$|\vec{r}_{hkl}^*| = \frac{2\pi}{a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$$

$\textcircled{0.15}$

$$\text{Donc, } d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

