b) Définition par la transformée de Fourier

RD $\quad S(\vec{r}) = \sum_{uvw} \delta(\vec{r} - \overrightarrow{R_{uvw}})$, $\quad \overrightarrow{R_{uvw}} = u\vec{a_1} + v\vec{a_2} + w\vec{a_3}$.

$$\mathcal{F}(S)(\vec{q}) = \int S(\vec{r})\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}\, d^3\vec{r}$$

$$= \sum_{uvw} e^{-i\vec{q}\cdot\overrightarrow{R_{uvw}}}$$

$$\vec{q} = q_1\vec{a_1}^* + q_2\vec{a_2}^* + q_3\vec{a_3}^*$$

$$S(\vec{q}) = \sum_{uvw} e^{-2i\pi(q_1 u + q_2 v + q_3 w)}$$

$$= \underbrace{\sum_u \left(e^{-2i\pi q_1}\right)^u}_{\lim_{n \to +\infty} 2\cos q\pi n \cdot \frac{\sin(q\pi(n-1))}{\sin q\pi}} \sum_v \left(e^{-2i\pi q_2}\right)^v \sum_w \left(e^{-2i\pi q_3}\right)^w$$

peigne. si $q_1 \in \mathbb{Z}$, ∞; si $q_1 \notin \mathbb{Z}$, 0 car on somme des $1_{\neq}$

peigne de Dirac

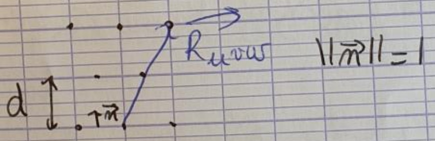
$$S(\vec{q}) = \sum_{h \in \mathbb{Z}} \delta(q_1 - h) \sum_{k \in \mathbb{Z}} \delta(q_2 - k) \sum_{l \in \mathbb{Z}} \delta(q_3 - l)$$

d) Lien avec les plans réticulaires

Plan réticulaire (3D) ou rangée (2D)
= famille de plans // entre eux et équidistants
tq tous les noeuds du réseau appartiennent à un plan.

À toute famille de plan réticulaire correspond un vecteur $\vec{G}_{hkl}$ du réseau réciproque $\perp$ à chaque plan de la famille et $\|\vec{G}_{hkl}\| = \frac{2\pi}{d}$, d distance interréticulaire.
Les indices $(h\,k\,l)$ sont les indices de Miller de la famille.

Preuve :



$$\vec{R}_{uvw} = m\,d\,\vec{n} + \vec{R_\perp} \quad , \quad \vec{R_\perp}\cdot\vec{n} = 0$$

Soit $\vec{G} = \frac{2\pi}{d}\vec{n} \Rightarrow \vec{G}\cdot\vec{R}_{uvw} = 2\pi m$

$\forall \vec{R}_{uvw} \in RD$

↳ $\vec{G} \in RR$.

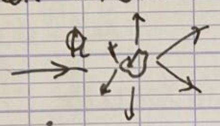
$\exists\, h,k,l \in \mathbb{Z}$, $\vec{G} = \vec{G}_{hkl} = h\vec{a_1^*} + k\vec{a_2^*} + l\vec{a_3^*}$

$\mathcal{P}$ le plan le plus proche d'une origine O.

Si $M \in \mathcal{P}$, $\vec{OM}\cdot\vec{G} = \frac{2\pi}{d}\vec{OM}\cdot\vec{n} = 2\pi$

Diffusion élastique : $k_i = k_f$

↳ diffusion Thomson



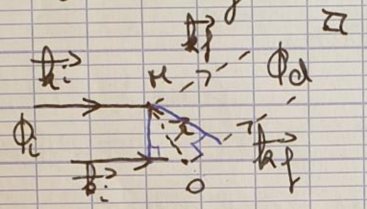
émission ds tt direc° onde sphérique

$\phi_d \sim \frac{e^{ik_f r}}{r}$

$I_{diffusée} \propto (\phi_d)^2$

b) Facteur de diffusion

Soient deux objets diffusant



$\delta = -\vec{r}\cdot\vec{k_i} + \vec{r}\cdot\vec{k_f} = \vec{r}\cdot\underbrace{(\vec{k_f}-\vec{k_i})}_{\vec{q}}$

$\phi_d \propto (1 + e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}})^2$

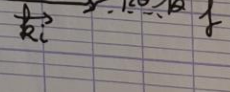
$\rho(\vec{r})$ densité d'objets diffusants

$\sqrt{\phi_d} \propto \int \rho(\vec{r})\,d\vec{r}\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} = A(\vec{q})$ amplitude diffusée

$= \mathcal{F}(\rho)(\vec{q})$

intensité diffusée $I(\vec{q}) \propto |A(\vec{q})|^2 = AA^*$

$\vec{q} = \vec{k_f} - \vec{k_i}$ vecteur de diffusion



diffusion élastique $k_f = k_i$

10MC1

Diffrac° sur un noeud unique^t pour l'instant

$q = 2k_i \sin\theta = \frac{4\pi}{\lambda} \sin\theta$

Cas des RX : $\rho(\vec{r})$ densité d'électrons d'un atome

$f(\vec{q})$ facteur de diffusion atomique

$f(q) = \int e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \rho(r) d\vec{r}$

$f(0) = Z$ nombre d'e^- diffusants dans l'atome

Extension de $\rho(\vec{r})$ sur a_0

$\Rightarrow$ extension de $f(q)$ sur $\frac{1}{a_0}$

Cas des neutrons : $\rho(\vec{r})$ densité de nucléons dans un noyau

$A(q) = b$ car très étendu (noyau petit).

c) Diffusion par un cristal (diffrac°)

$$\rho_{tot}(\vec{r}) = \rho_m(\vec{r}) \otimes \sum_{uvw} \delta(\vec{r} - \vec{R}_{uvw})$$

$\uparrow$ densité e^- ou nucl motif — vecteurs réseau

$$\rho_m(\vec{r}) = \sum_{i \text{ at du motif}} \rho_i(\vec{r}) \otimes \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$$

$\vec{r}_i$ position atome i dans la maille

$$A(\vec{q}) = \mathcal{F}(\rho_{tot})(\vec{q})$$

$$= S(\vec{q}) \cdot \sum_{h,k,l} \delta(\vec{q} - \vec{G}_{hkl})$$, $\vec{G}$ h,k,l vecteurs RR.

non nul $\Leftrightarrow \vec{q} \in RR$

$$A(\vec{q}) = \sum_{hkl} \delta(\vec{q} - \overrightarrow{G_{hkl}}) \underbrace{S_{hkl}}_{S(\overrightarrow{G_{hkl}})}$$

$S(\overrightarrow{G_{hkl}})$ facteur de structure

$$S_{hkl} = \mathcal{F}(\rho_m)(\overrightarrow{G_{hkl}})$$

$$= \sum_{i\ \text{motif}} \mathcal{F}(\rho_i)(\overrightarrow{G_{hkl}}) \times \mathcal{F}(\delta_i)(\overrightarrow{G_{hkl}})$$

$$= \sum_{i\ \text{motif}} \underbrace{f_i(\overrightarrow{G_{hkl}})}_{\text{facteur de diffusion}} e^{i \overrightarrow{G_{hkl}} \cdot \vec{r_i}}$$

← cte car at = + petit
↳ onde pl en TF
cte en k.

Si $\vec{r_i} = x_i \vec{a_1} + y_i \vec{a_2} + z_i \vec{a_3}$

$$\overrightarrow{G_{hkl}} = h \vec{a_1}^* + k \vec{a_2}^* + l \vec{a_3}^*$$

cf calculs $\vec{a_i}^* \cdot \vec{a_i}$

$$S_{hkl} = \sum_i f_i e^{i 2\pi (x_i h + y_i k + l z_i)}$$

① Condition de diffraction de Laue
diffrac° $\Leftrightarrow \vec{q} \in RR$

② Le cliché de diffraction est constitué de pics appelés pics de Bragg dont l'intensité est modulée par le facteur de structure

II MC1

. Position des pics ⇒ RR ⇒ RD ⇒ paramètre de maille
. Amplitude des pics → nature et position des atomes dans la maille

d) Relation de Bragg

diffraction si $\exists$ h,k,l tq $\vec{q} = \vec{G}_{hkl}$

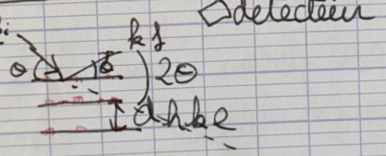
$$\|\vec{q}\| = \|\vec{G}_{hkl}\|$$

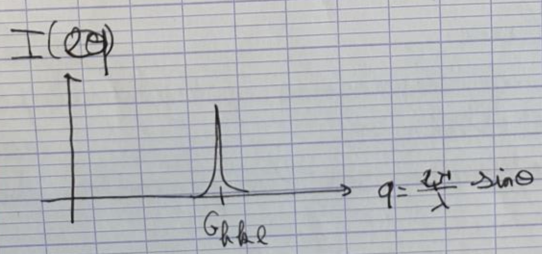
$$\frac{4\pi}{\lambda}\sin\theta = G_{hkl}$$

$$\boxed{2\sin\theta = \frac{\lambda}{2\pi}\|\vec{G}_{hkl}\|}$$ à retenir

$\|\vec{G}_{hkl}\| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$, d_{hkl} distance entre les plans interréticulaires h,k,l

$\boxed{2d_{hkl}\sin\theta = \lambda}$ diffrac° si θ vérifie cette condition

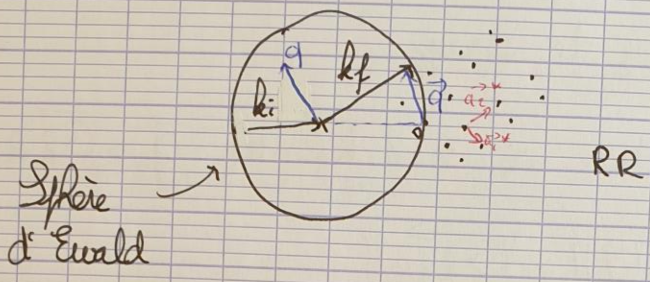




On obtient plein de pics correspondant à tous les Ghkl possibles

e) Expériences

. Construction d'Ewald



Diffrac° <=> noeud du RR tombent sur sphère
-> très difficile en pratique (Dirac en θ ...)

. Spectre de poudre (montage Bragg-Brentano)
échantillon : collection de petits cristaux "poudre cristalline" isotropes -> toutes les orientation du RD donc RR
chaque noeud RR forme une sphère (entourant) de centre O, rayon G_{hkl}

. Méthode de Laue
Sphère épaisse -> rayonnement polychromatique
et un cristal
pas d'information sur les paramètres de maille mais sur l'orientation