
Partie 1 : La matière

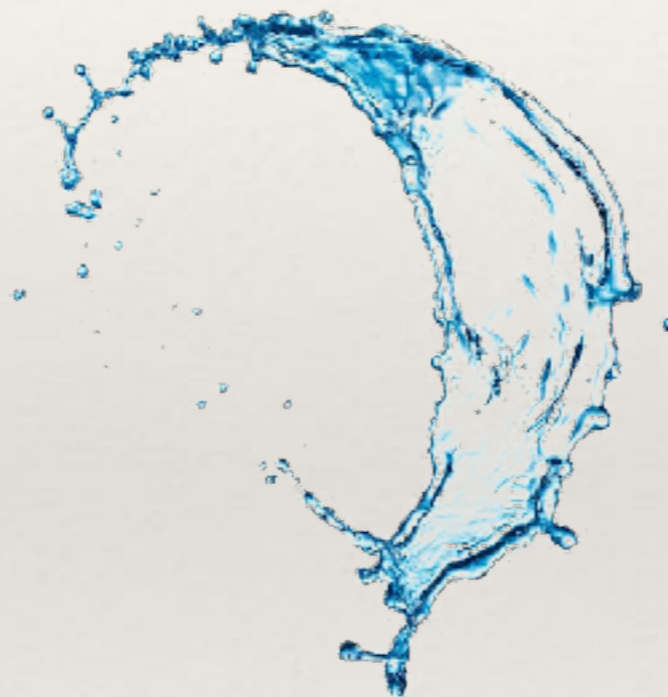
- ❖ États de la matière
- ❖ Interactions attractives
- ❖ Interactions répulsives
- ❖ Notion d'ordre
- ❖ Polymères
- ❖ Cristaux liquides
- ❖ Empilements compacts
- ❖ Cristaux



États de la matière



Glace
 $3\text{\AA}^3 / H_2O$

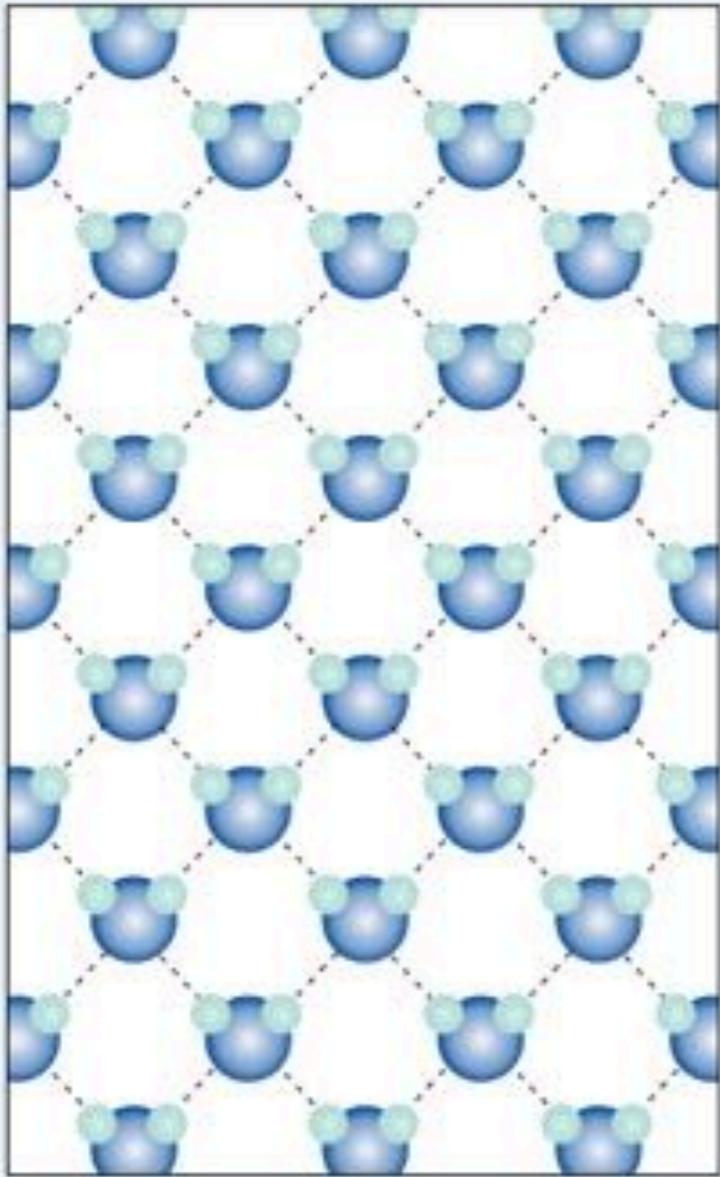


Liquide
 $2.7\text{\AA}^3 / H_2O$

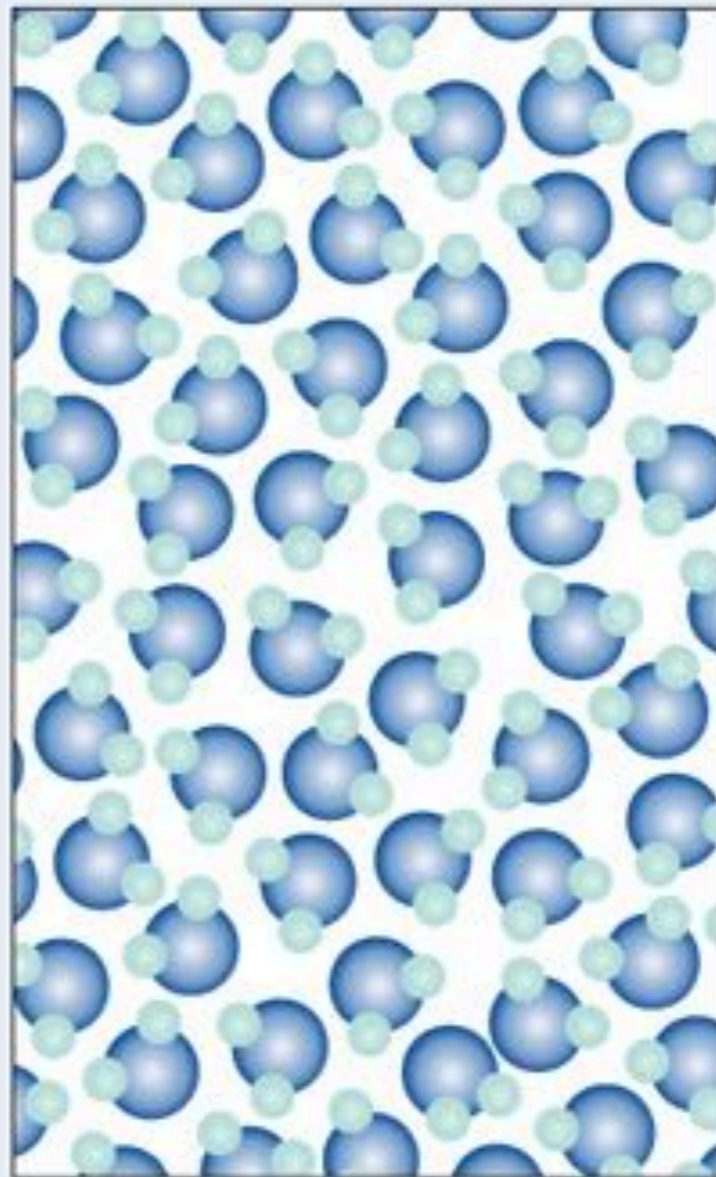


Gaz
 $30\text{\AA}^3 / H_2O$

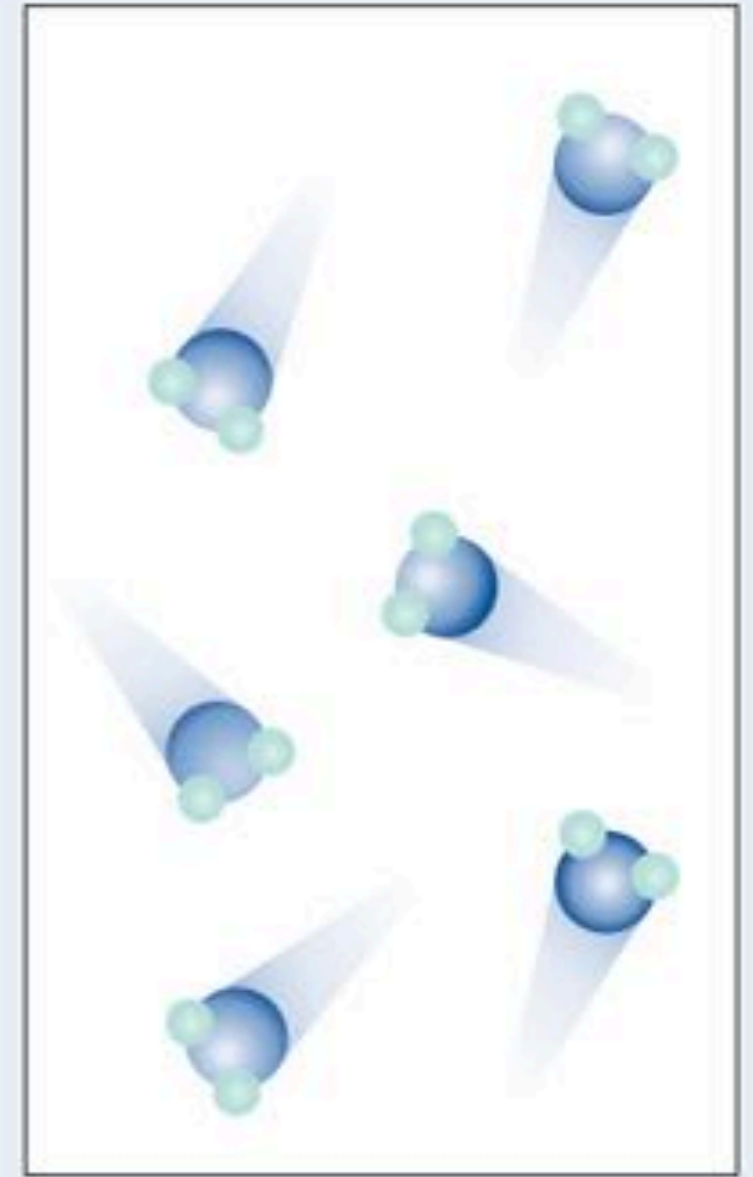
États de la matière



Glace
 $3\text{\AA}^3 / H_2O$



Liquide
 $2.7\text{\AA}^3 / H_2O$

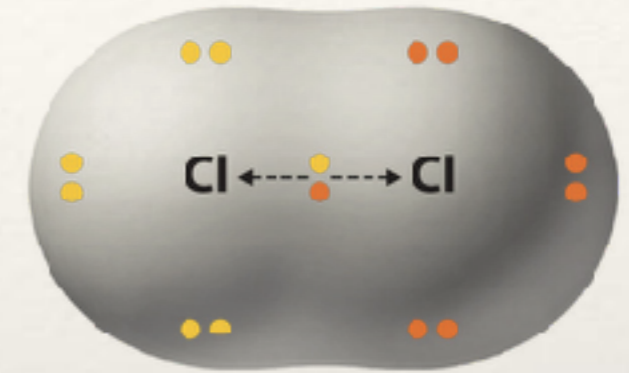


Gaz
 $30\text{\AA}^3 / H_2O$

Interaction attractives

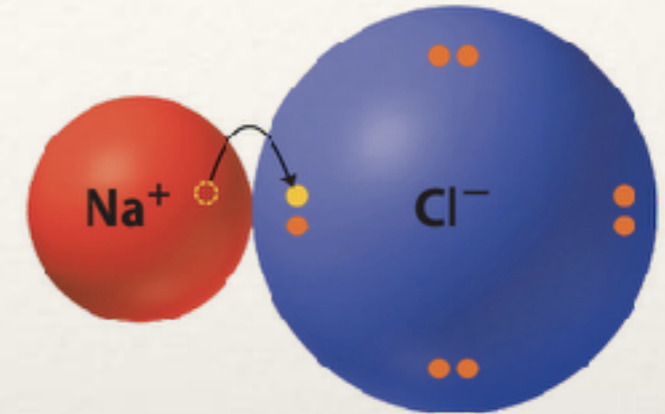
Liaison covalente

$$E_p \approx 7eV$$



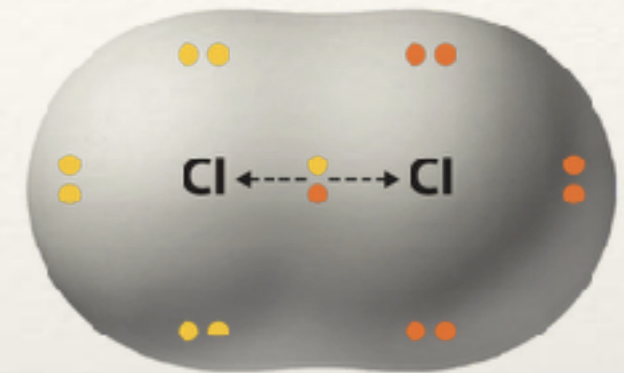
Interaction attractives

Liaison ionique $F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$
 $E_p \approx 5eV$

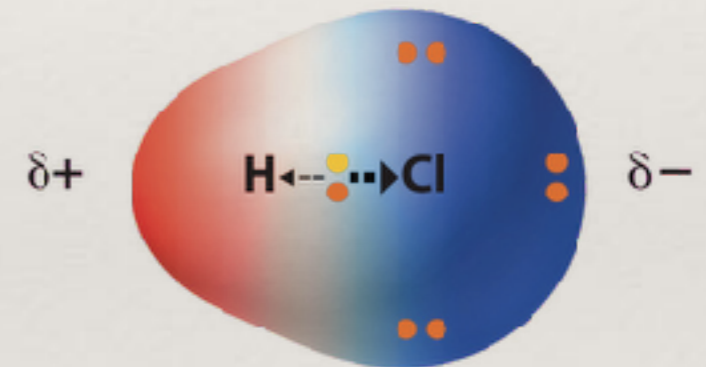


Interaction attractives

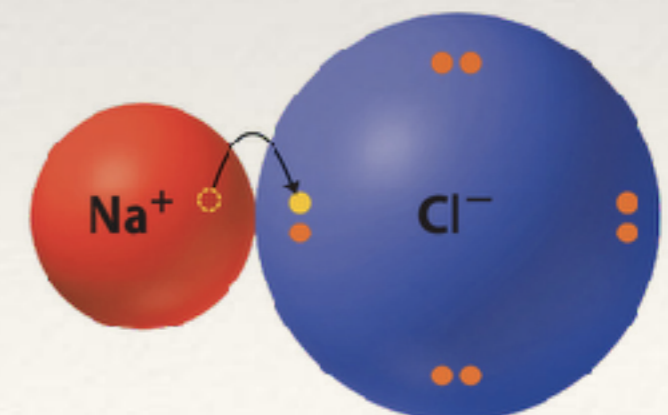
Liaison covalente non polaire



Liaison covalente polaire



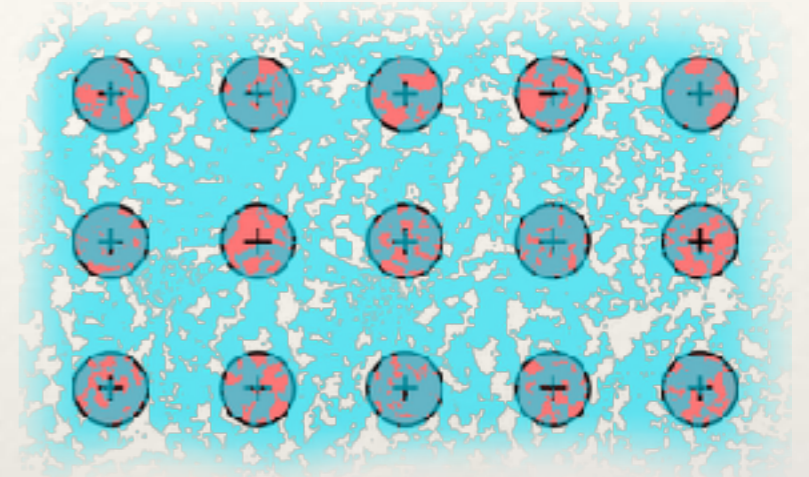
Liaison ionique



Interaction attractives

Liaison métallique

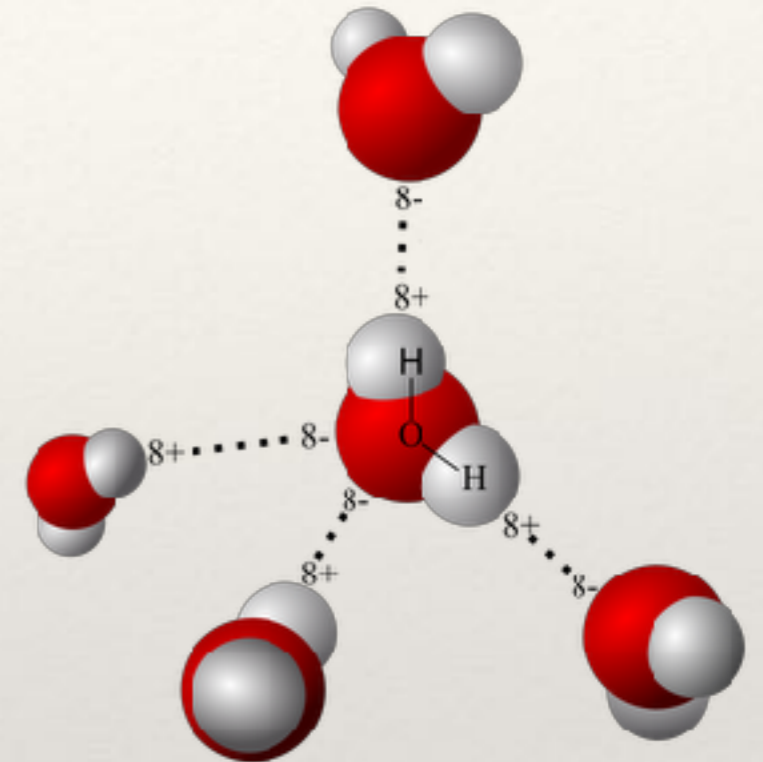
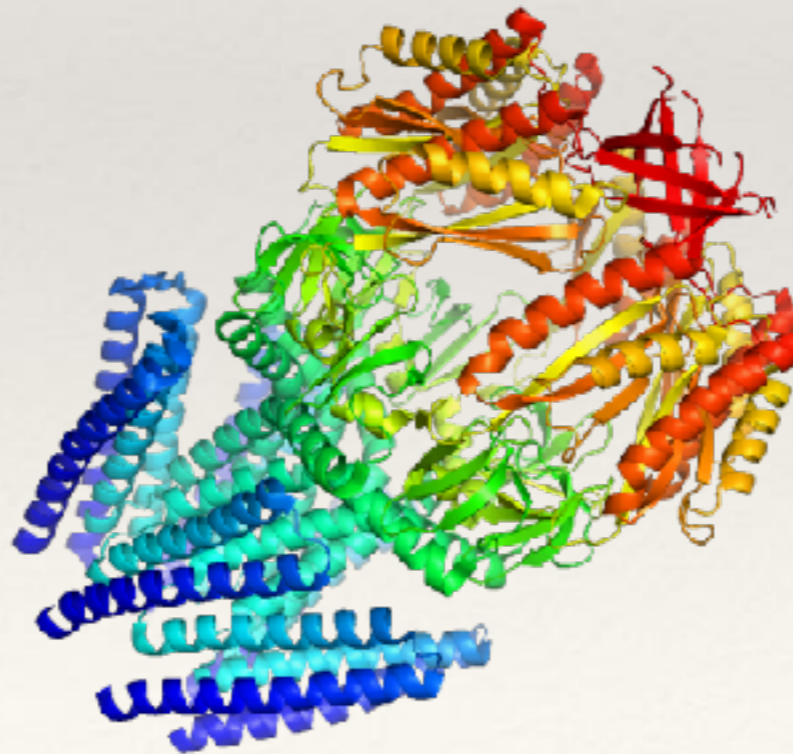
$$E_p \approx 1eV$$



Interaction attractives

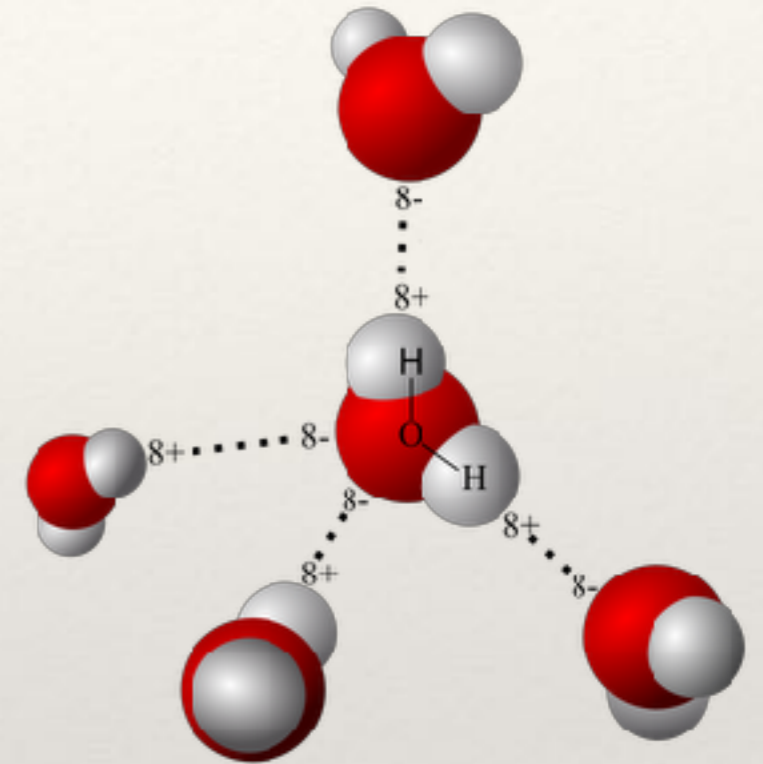
Liaison hydrogène

$$E_p \approx 0.1eV$$



Interaction attractives

Liaison de van der Waals $F \propto \frac{e^2}{r^7}$
 $E_p \approx 0.001eV$



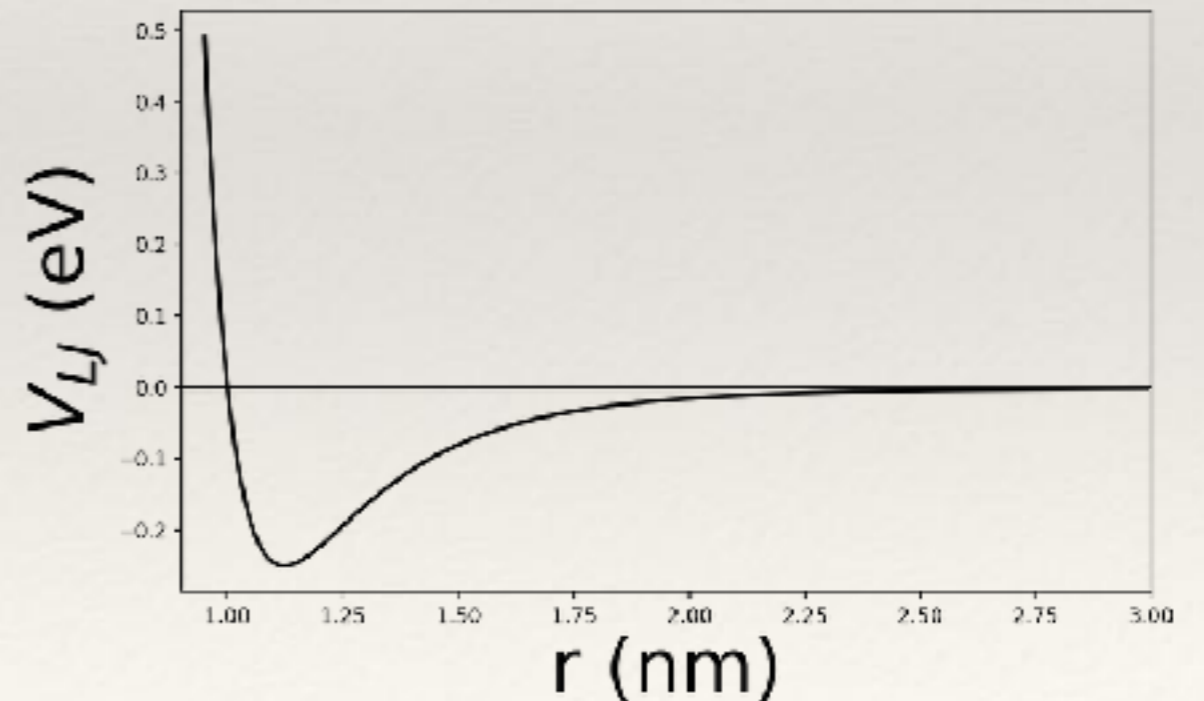
Interaction répulsives

Définition : principe de Pauli : deux électrons ne peuvent être dans le même état

Entre atomes / molécules électriquement neutres : $E_p \propto \frac{1}{r^{12}}$

Potentiel de Lennard-Jones :

$$E_{LJ} = C \left[\left(\frac{A}{r} \right)^{12} - \left(\frac{A}{r} \right)^6 \right]$$



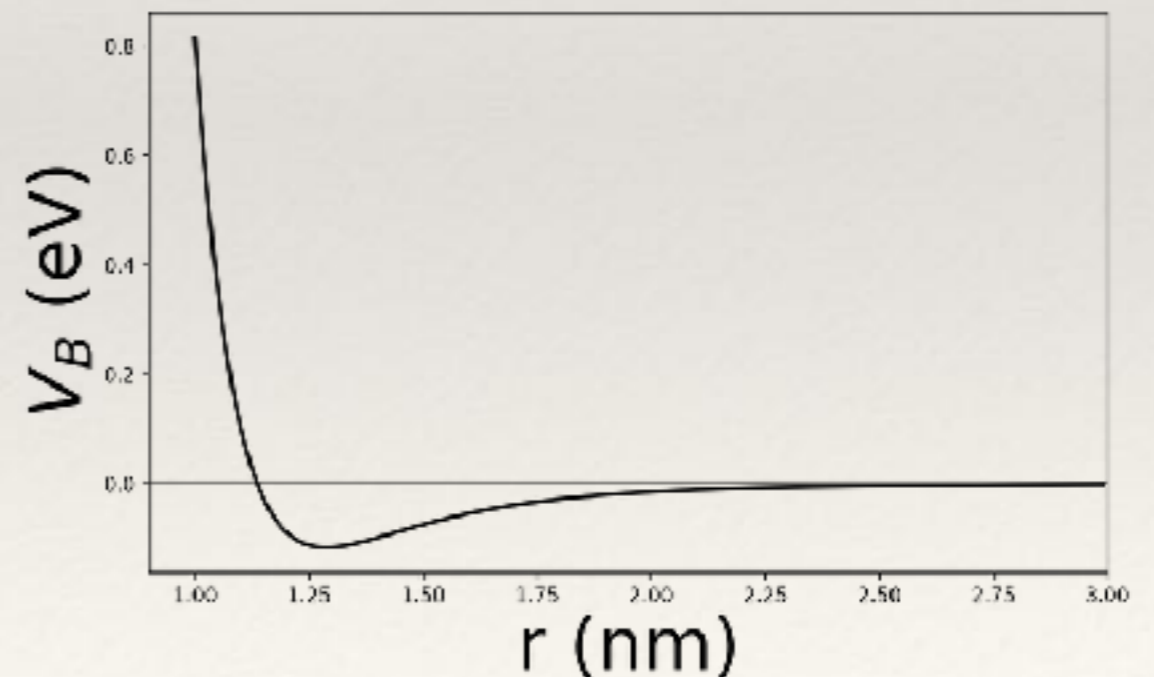
Interaction répulsives

Définition : principe de Pauli : deux électrons ne peuvent être dans le même état

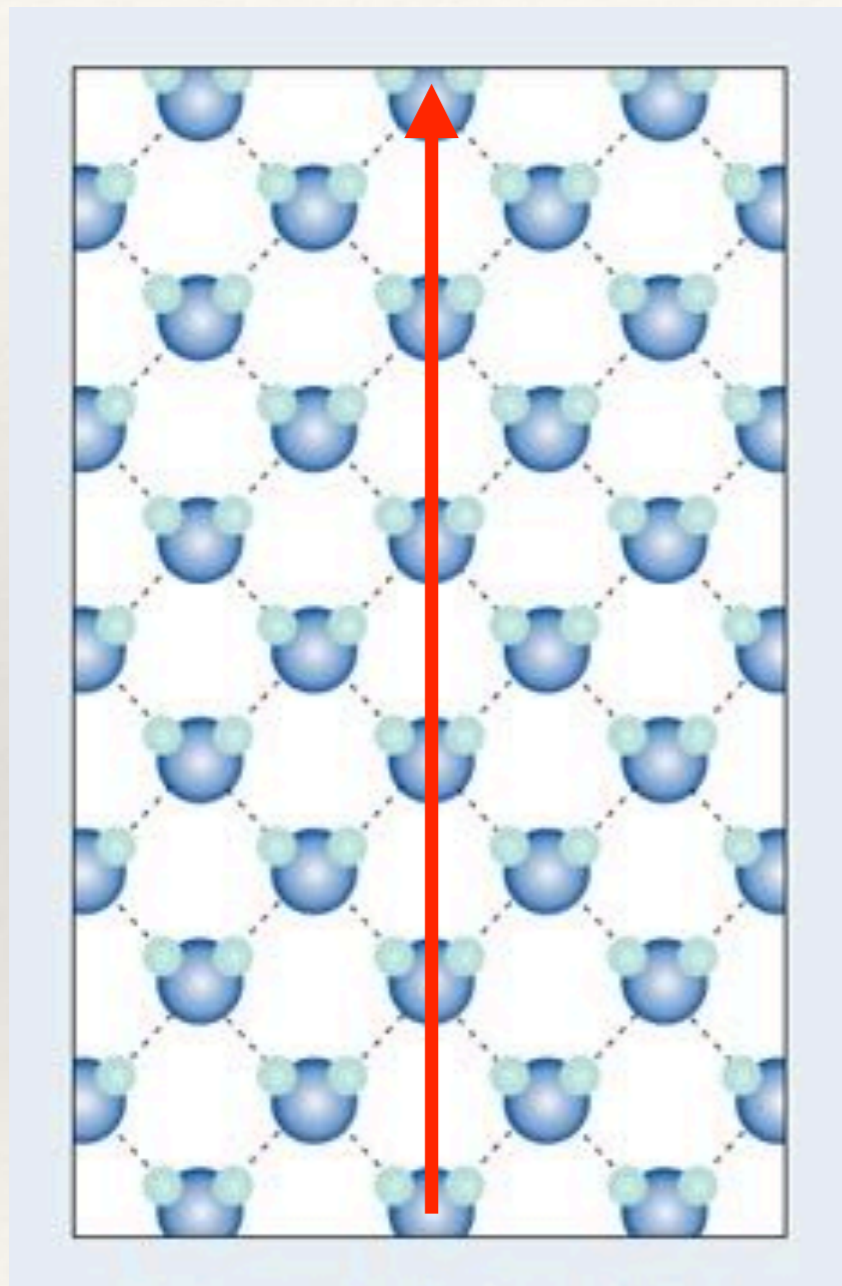
Autre modélisation possible (atomes chargés...) : $E_p \propto e^{-Br}$

Potentiel de Buckingham :

$$E_B = C \left[e^{-Br} - \left(\frac{A}{r} \right)^6 \right]$$

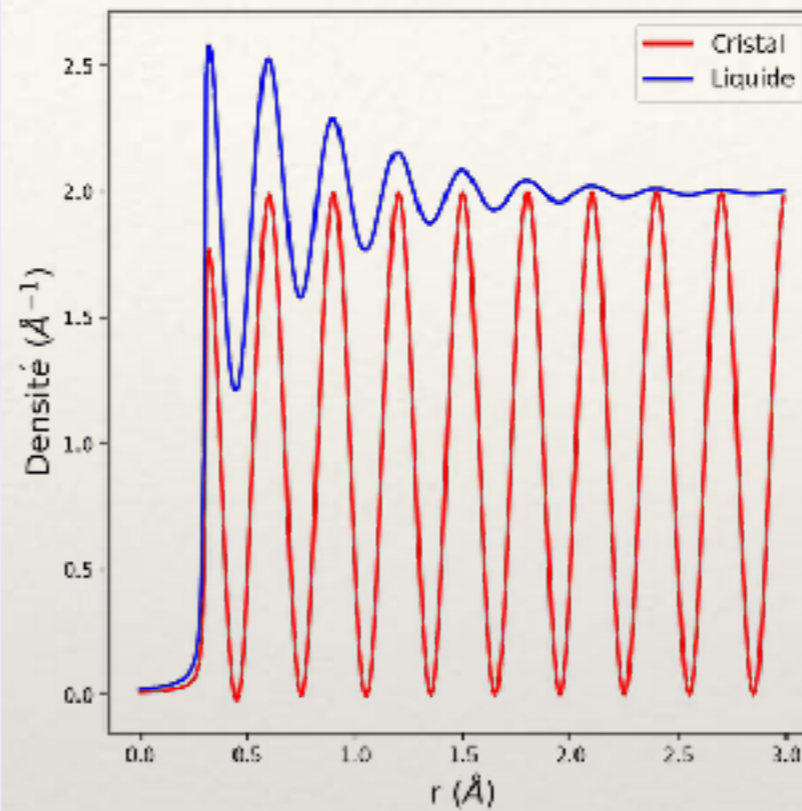


Notion d'ordre

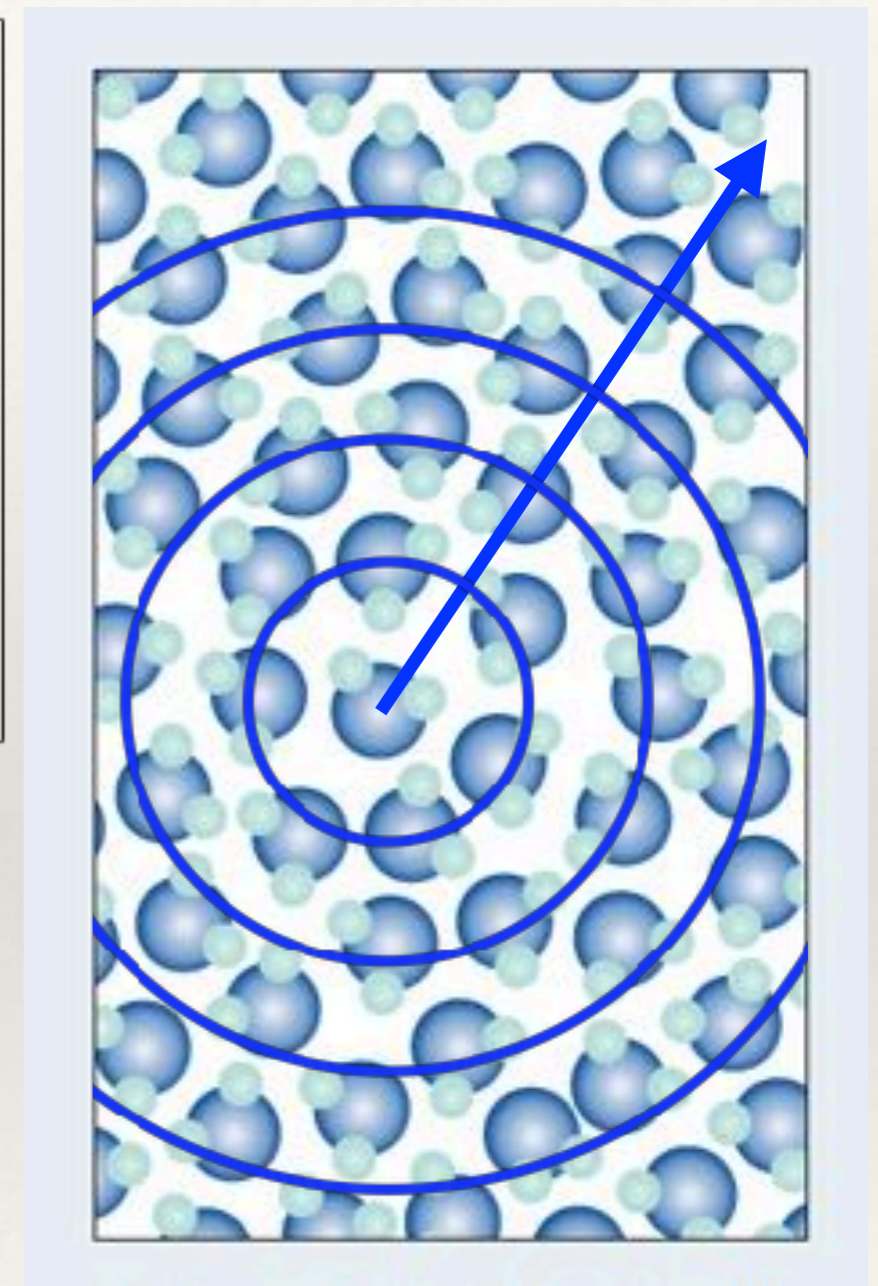


Cristal

Ordre à longue portée



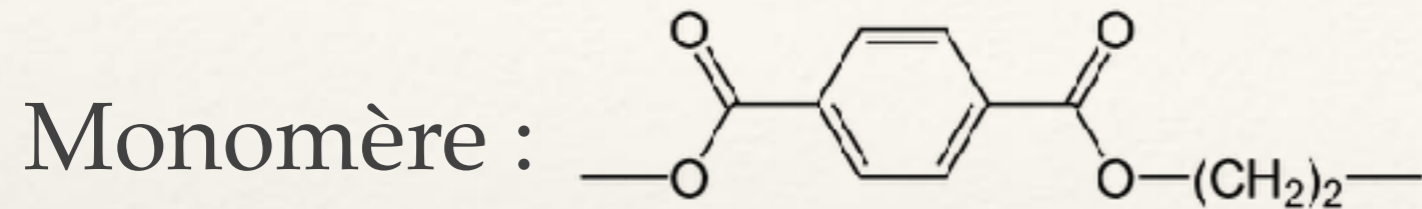
Longueur
de corrélation



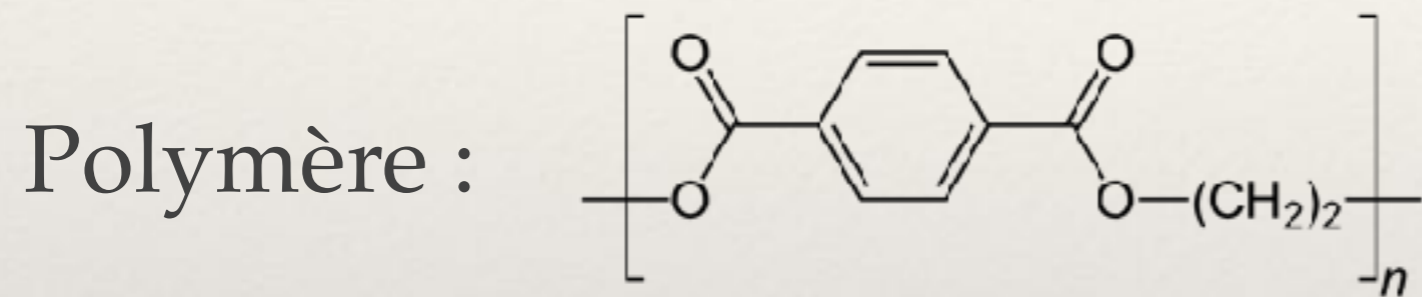
Liquide

Ordre à courte portée

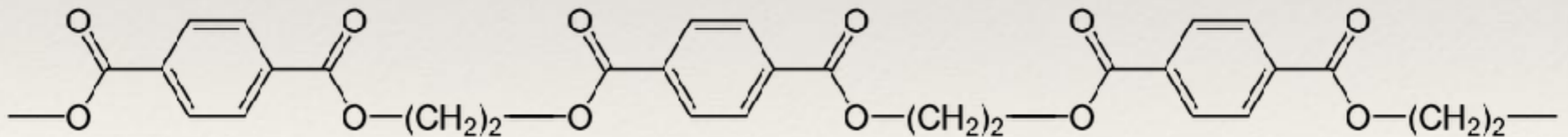
Polymères



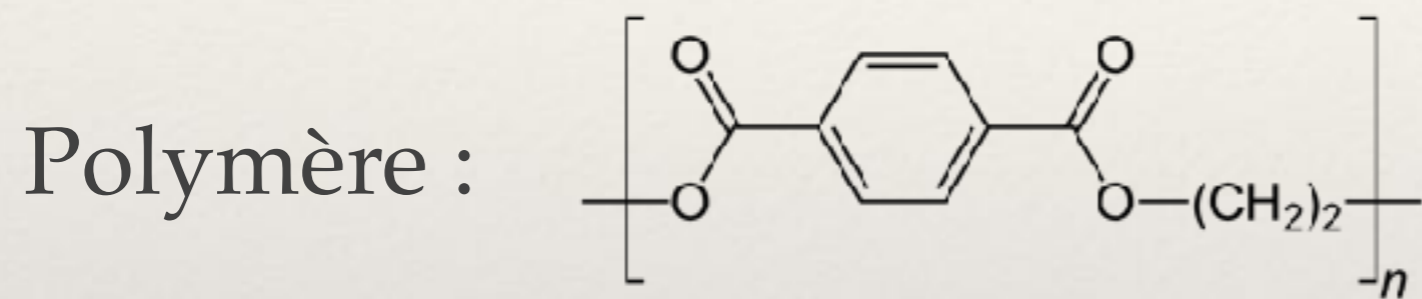
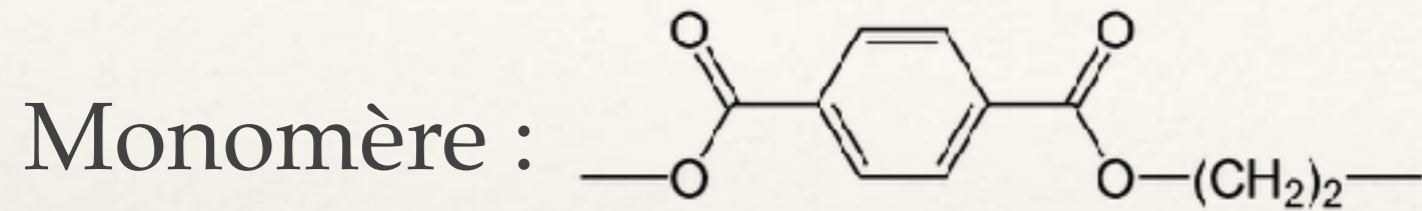
Téréphtalate
d'éthylène : $C_{10}H_8O_4$



Polytéréphtalate
d'éthylène (PET) :
 $(C_{10}H_8O_4)_n$

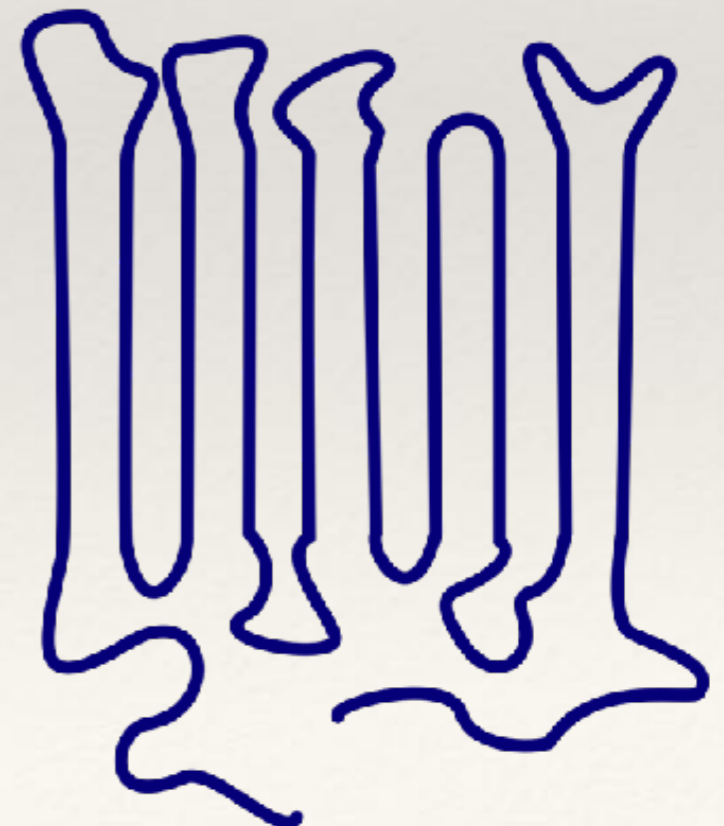


Polymères

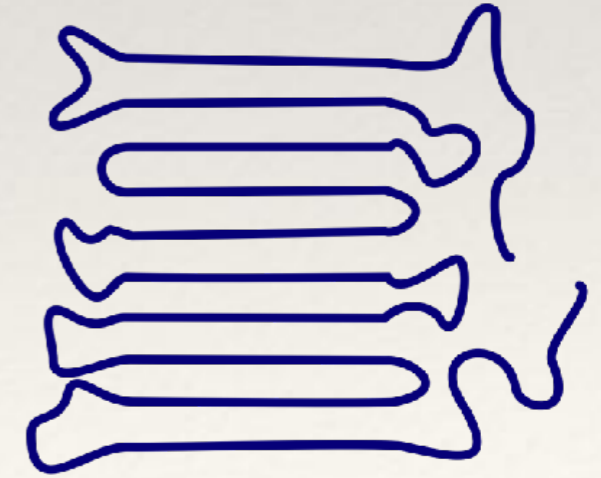
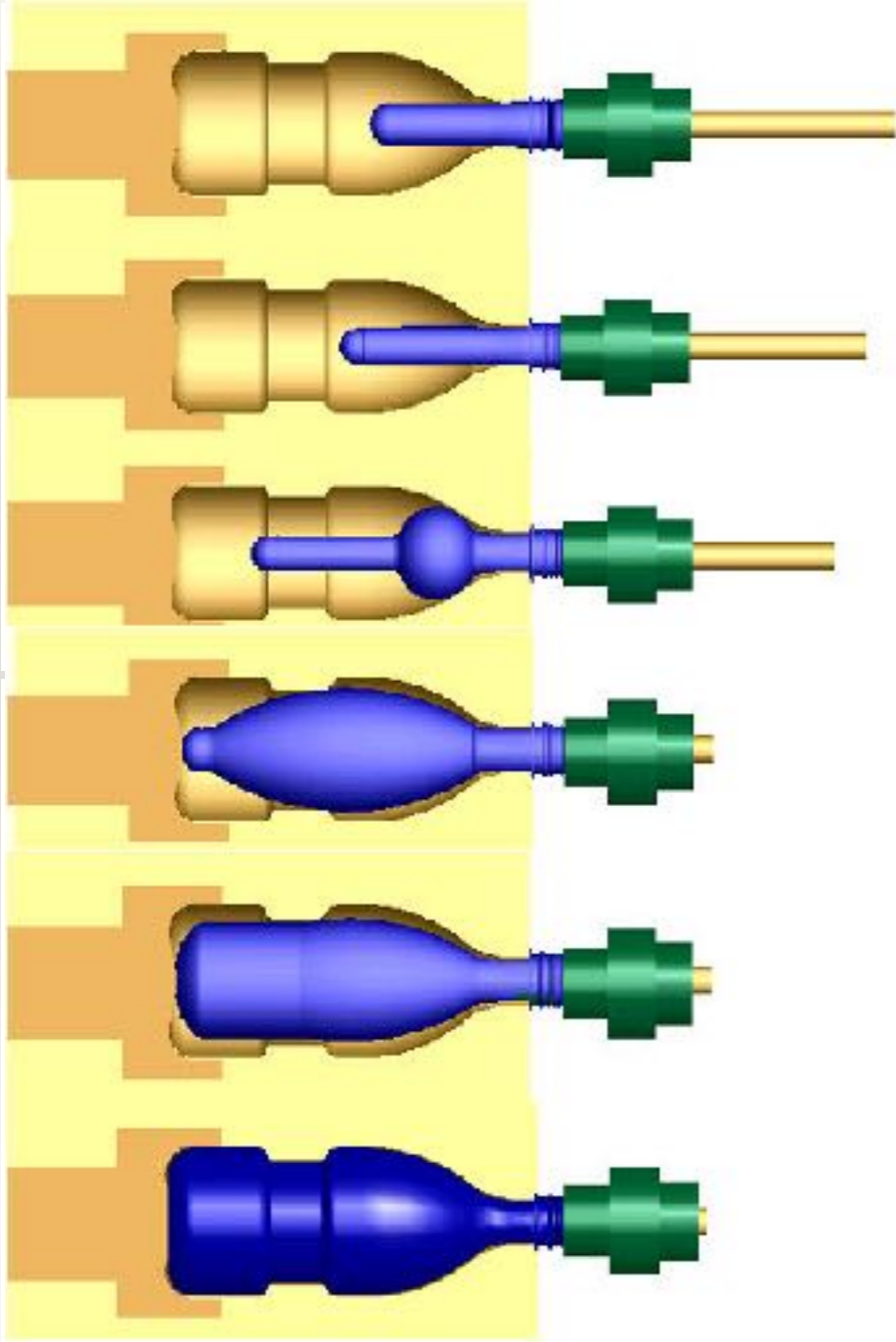


Téréphtalate
d'éthylène : $C_{10}H_8O_4$

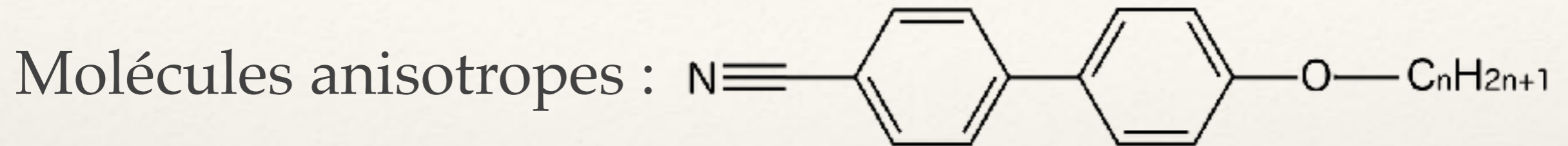
Polytéréphtalate
d'éthylène (PET) :
 $(C_{10}H_8O_4)_n$



Polymères

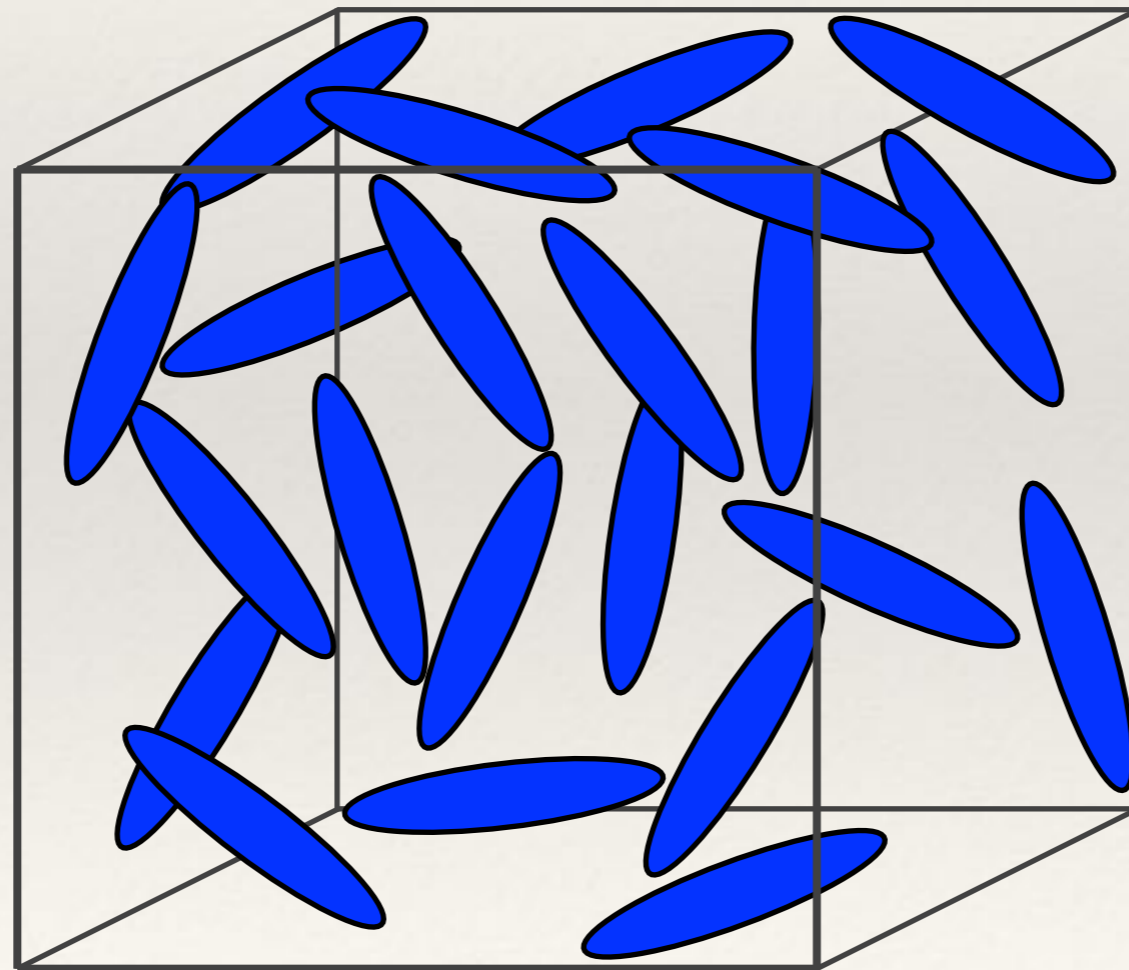
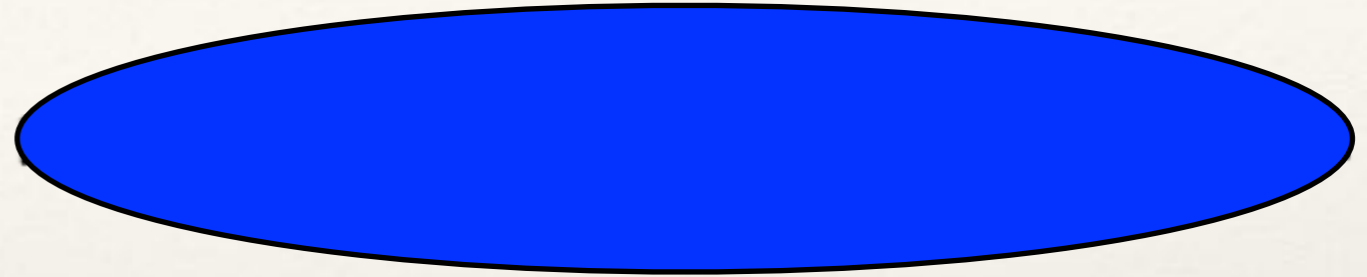


Cristaux liquides



Cristaux liquides

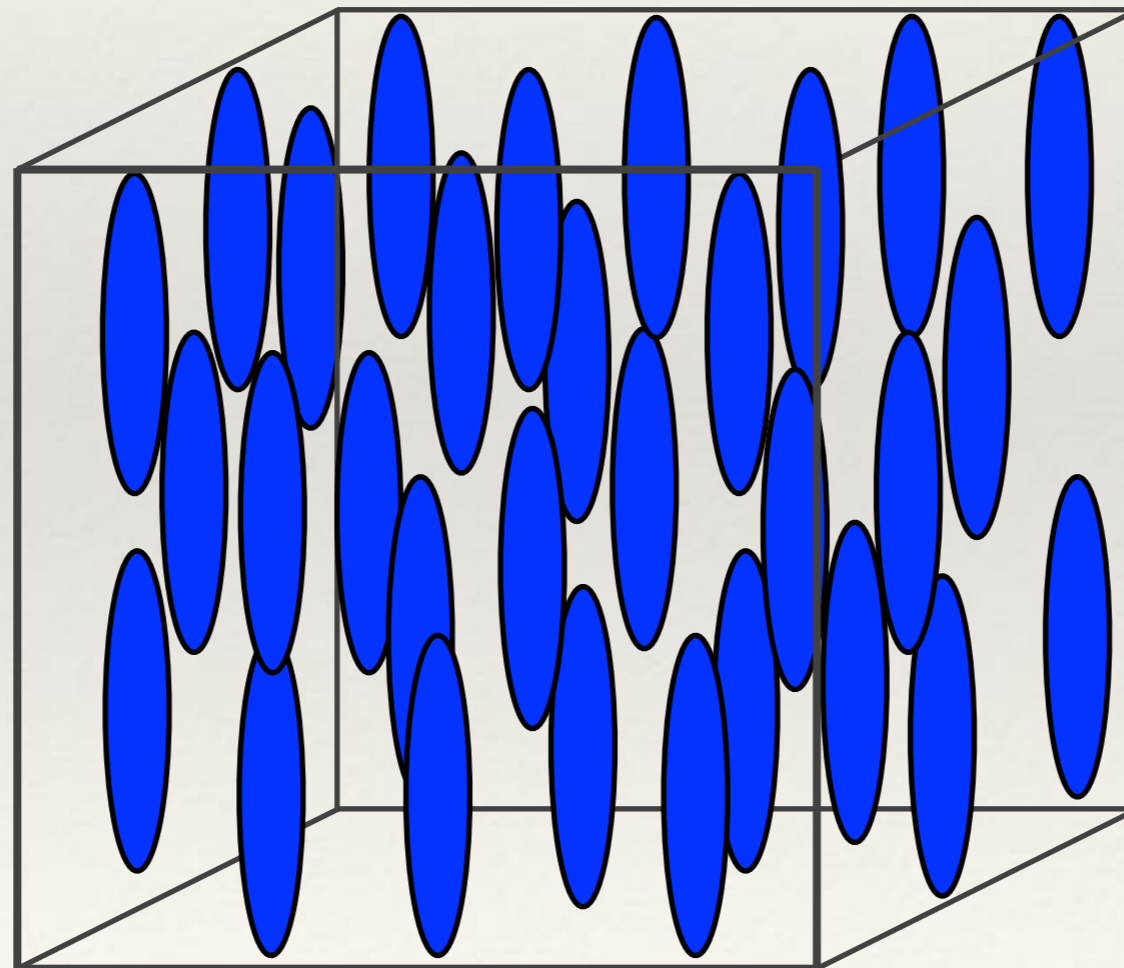
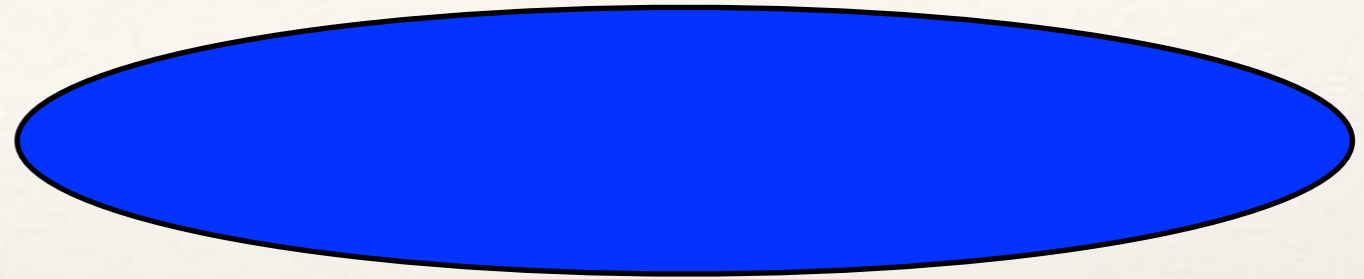
Molécules anisotropes :



Phase
Liquide

Cristaux liquides

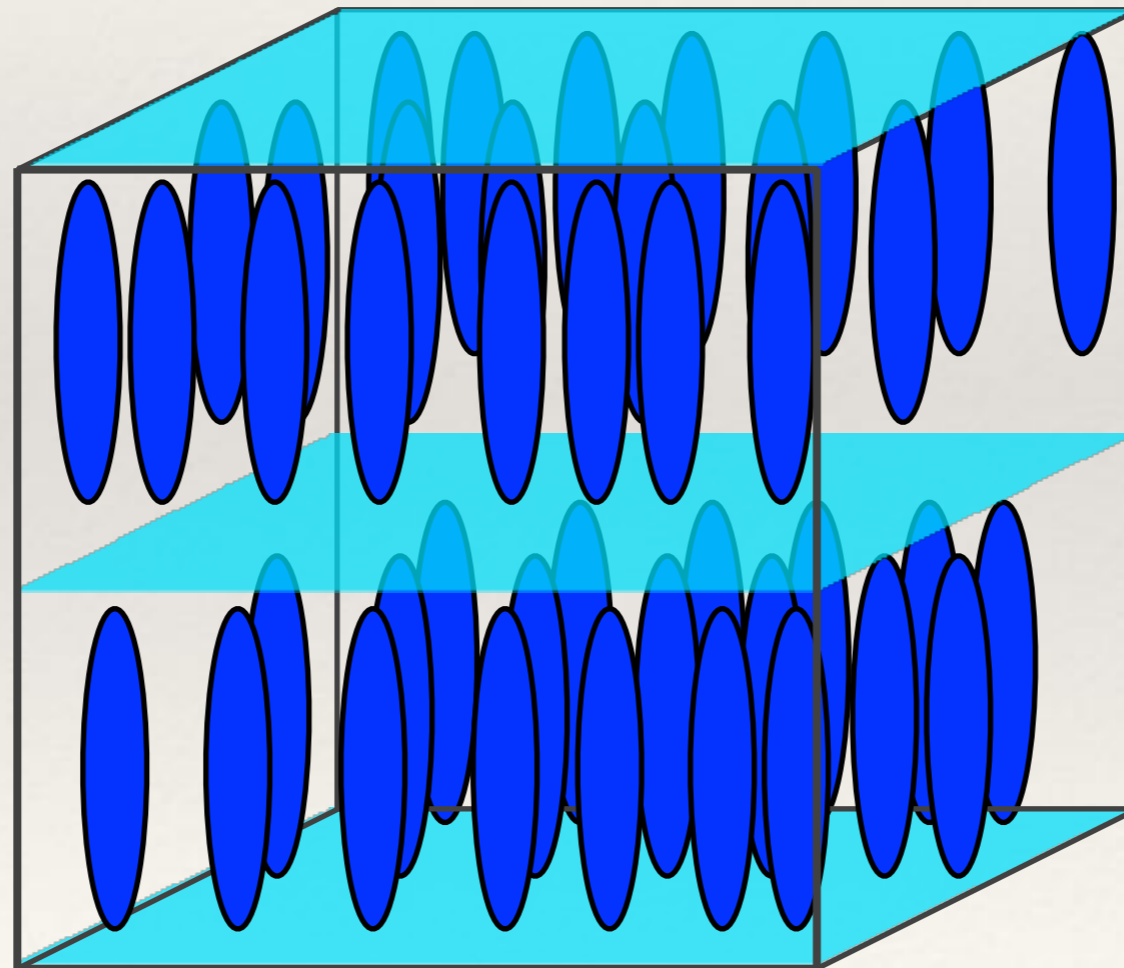
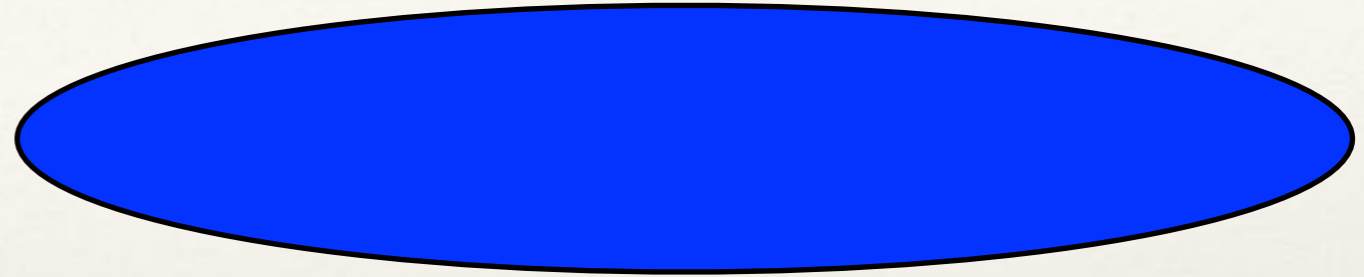
Molécules anisotropes :



Phase
Nématique

Cristaux liquides

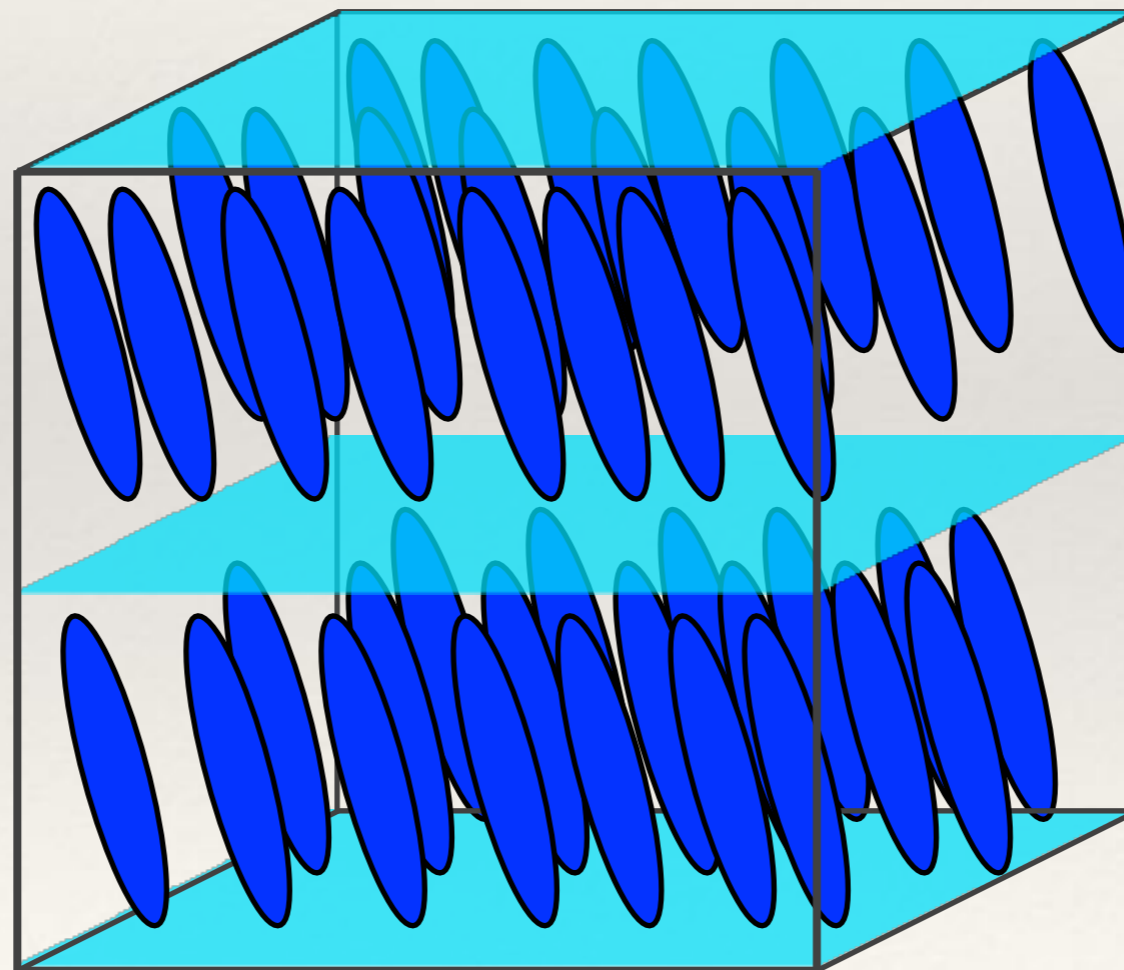
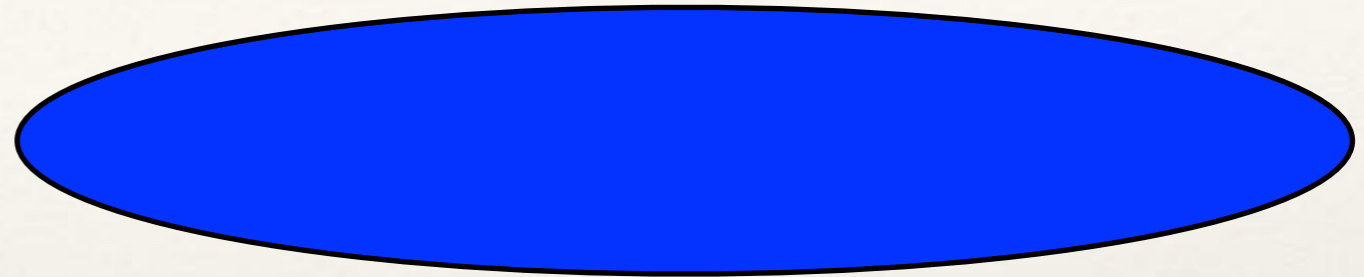
Molécules anisotropes :



Phase
Smectique A

Cristaux liquides

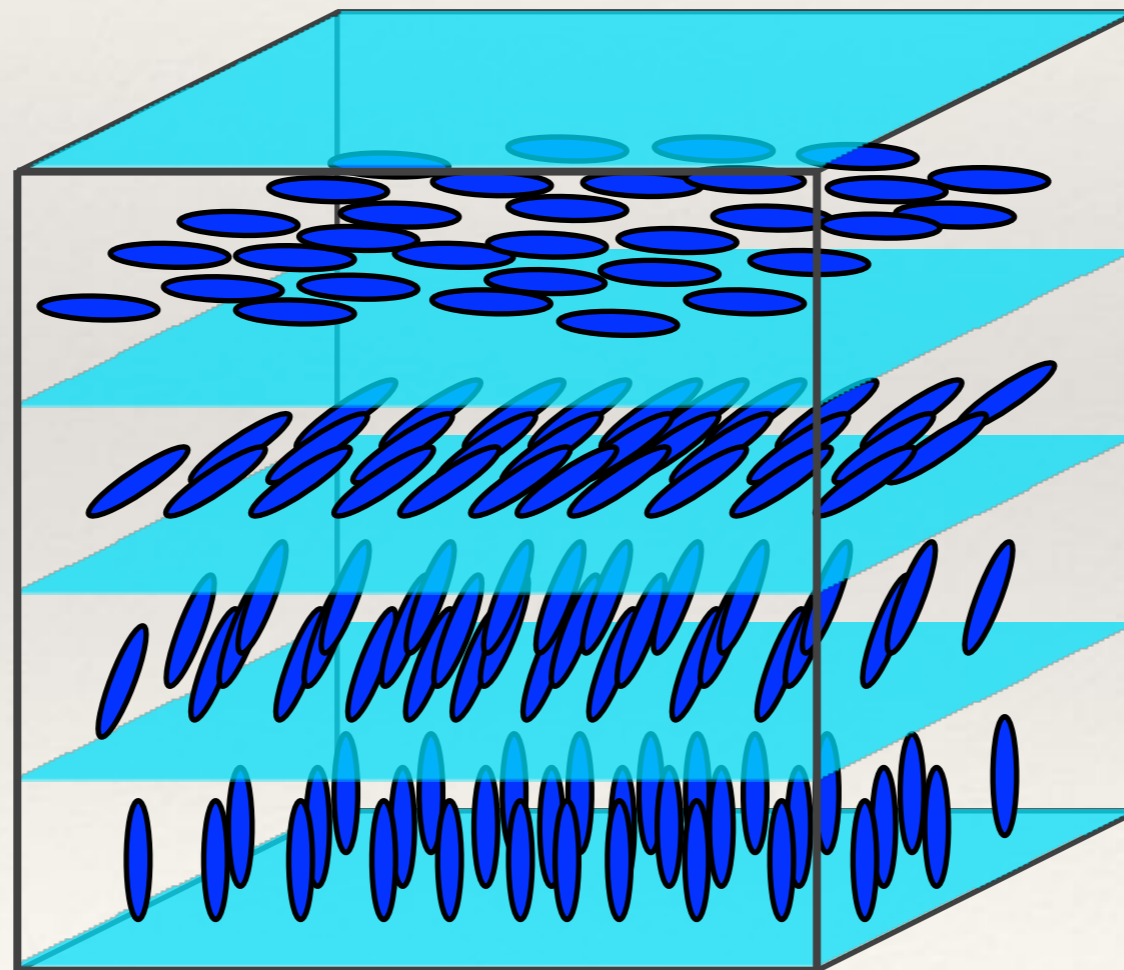
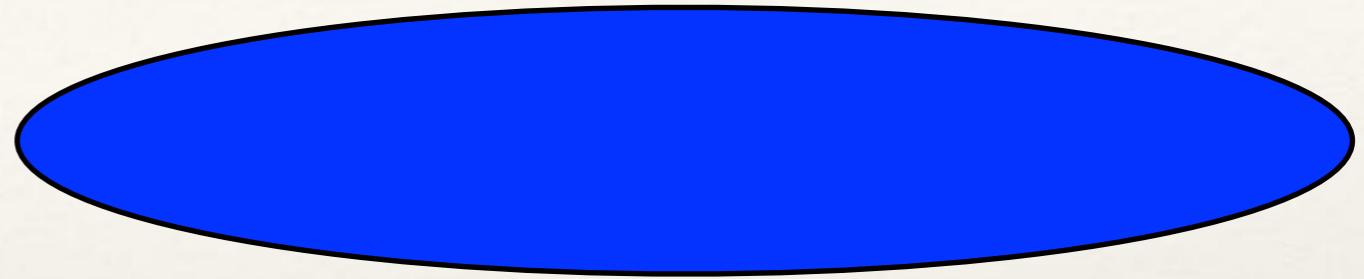
Molécules anisotropes :



Phase
Smectique C

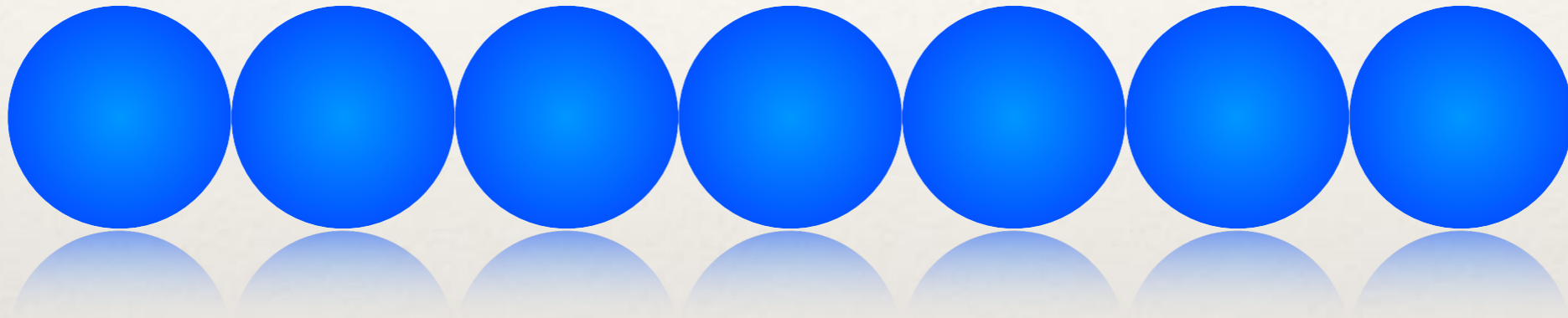
Cristaux liquides

Molécules anisotropes :



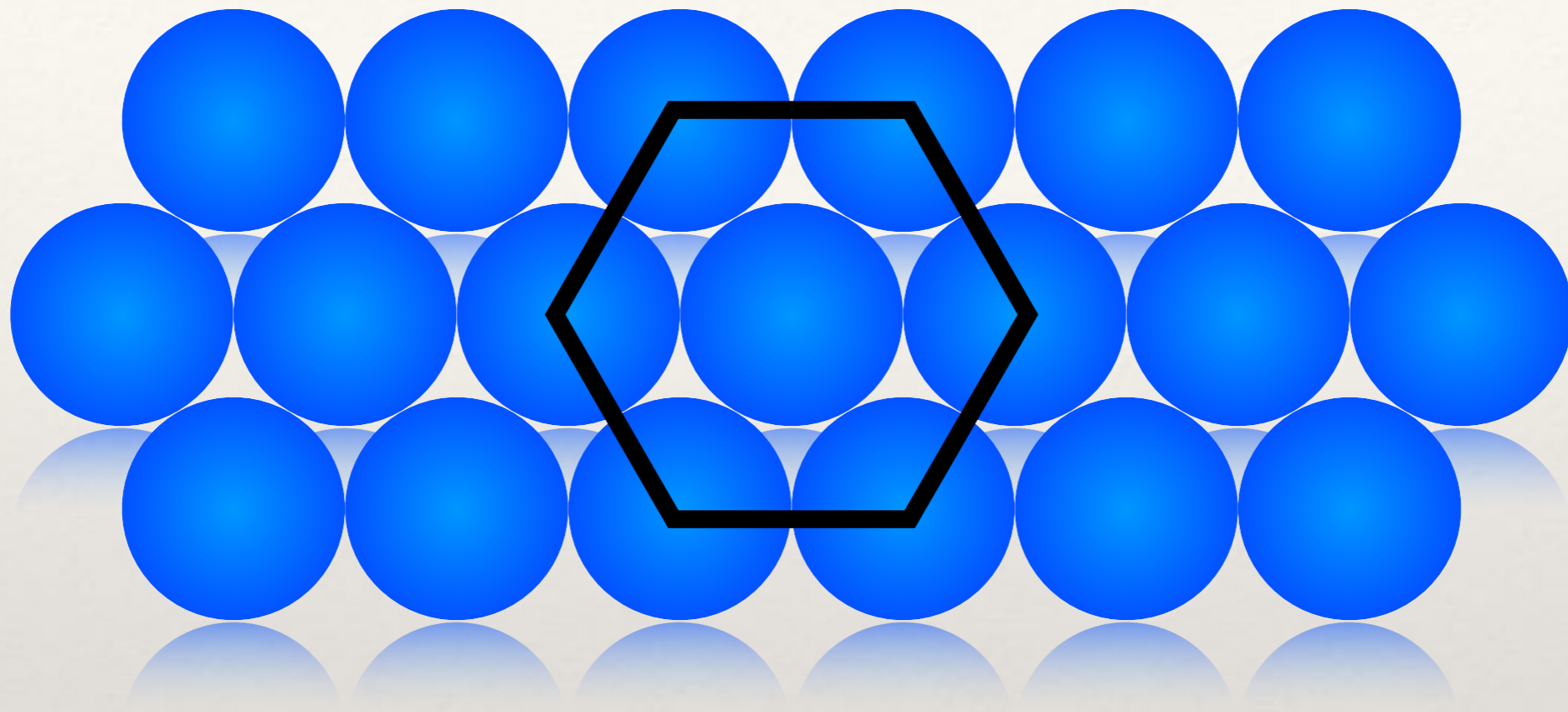
Phase
Cholésterique

Empilements compacts



Empilement compact de sphère dures : 1D

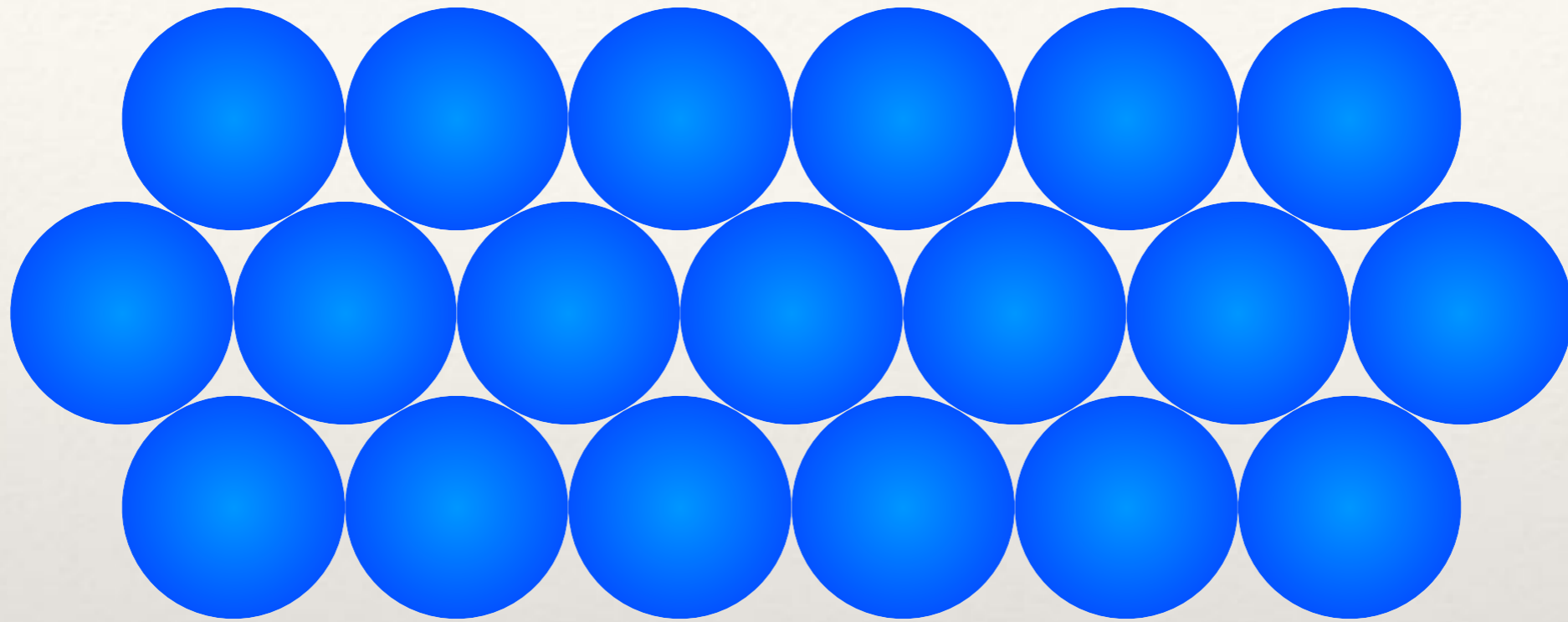
Empilements compacts



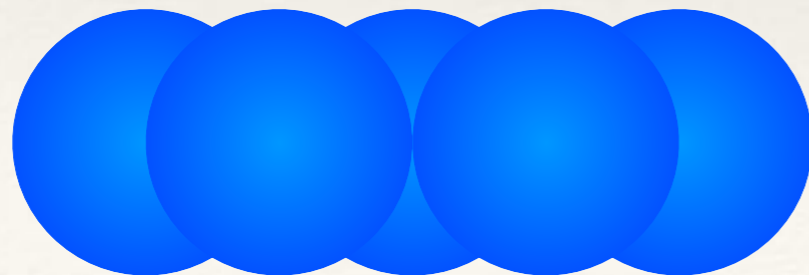
Réseau hexagonal

Empilement compact de sphère dures : 2D

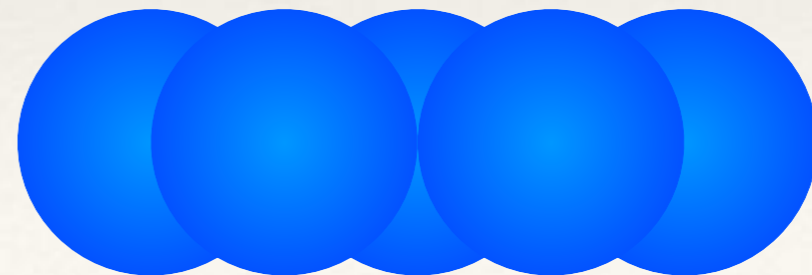
Empilements compacts



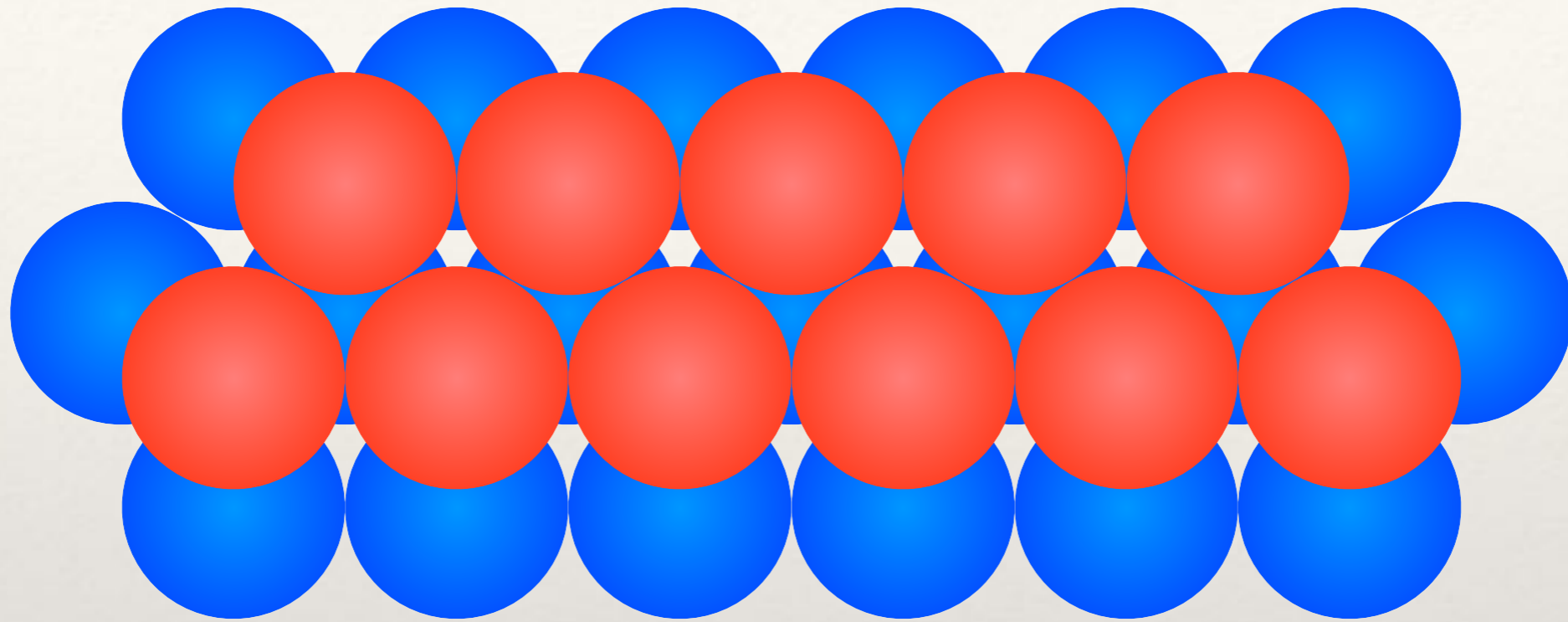
A



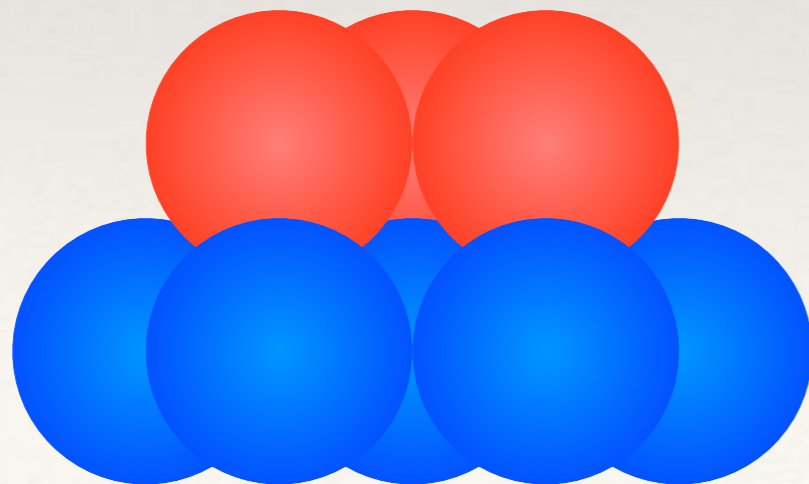
A



Empilements compacts

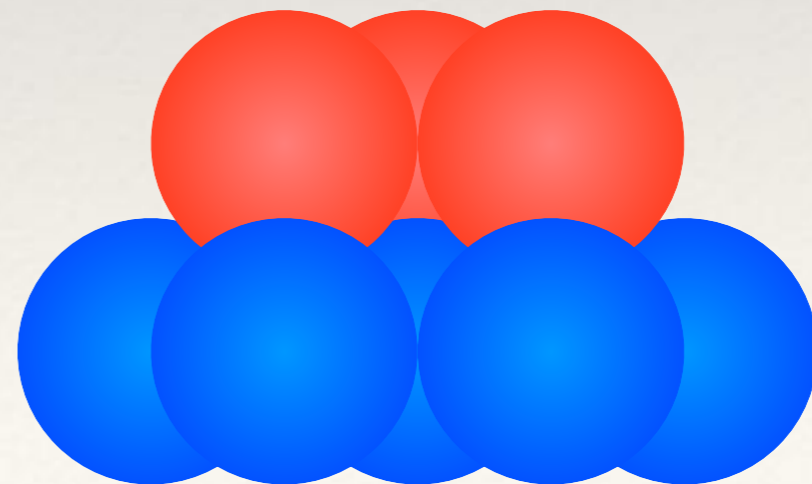


B



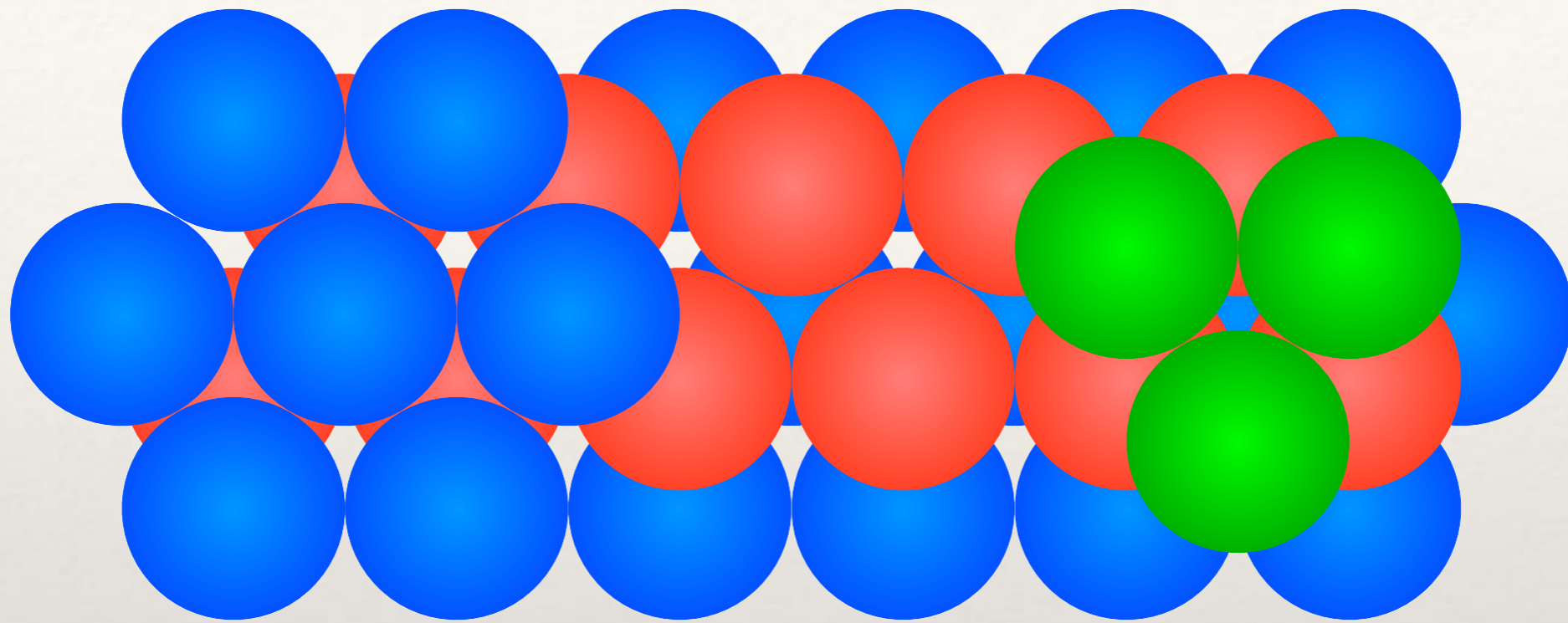
A

B

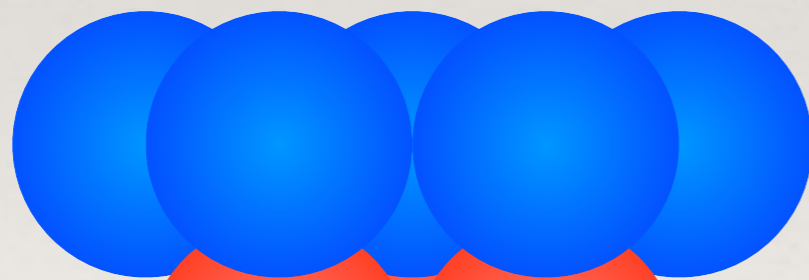


A

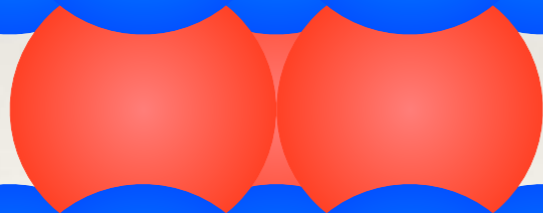
Empilements compacts



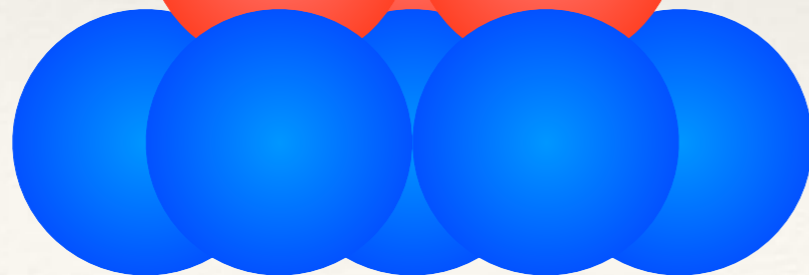
A



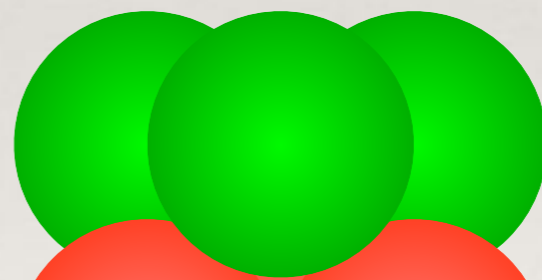
B



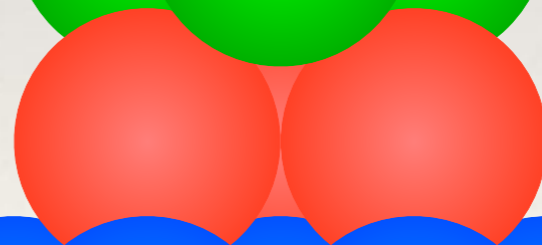
A



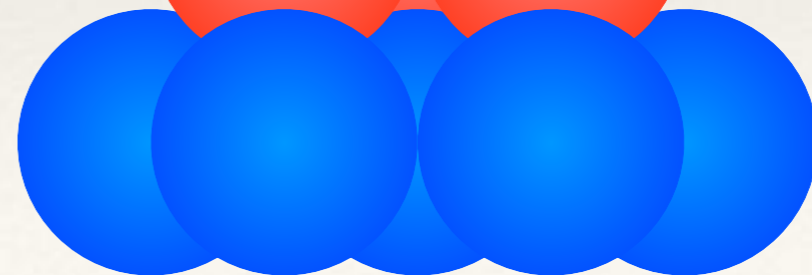
C



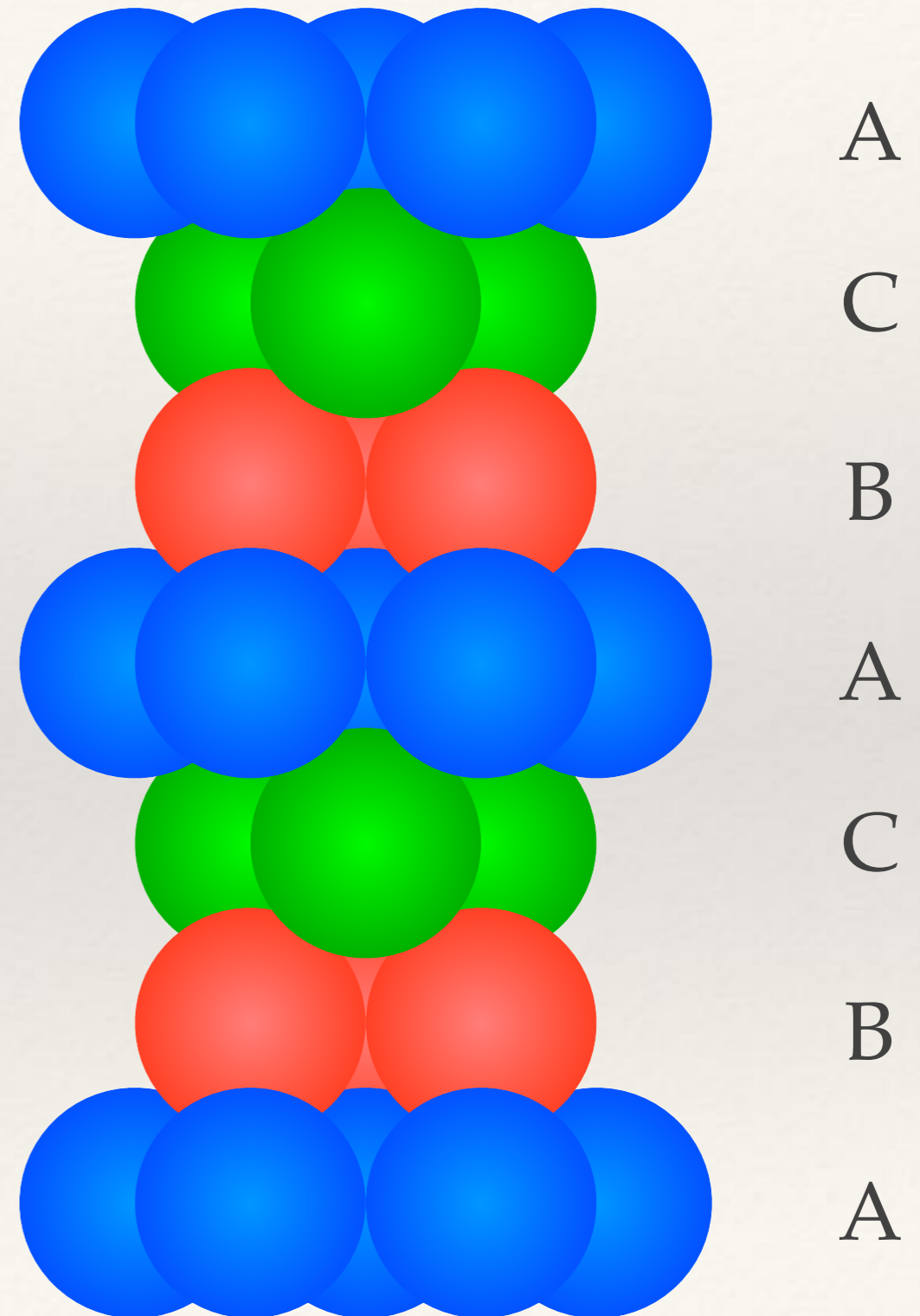
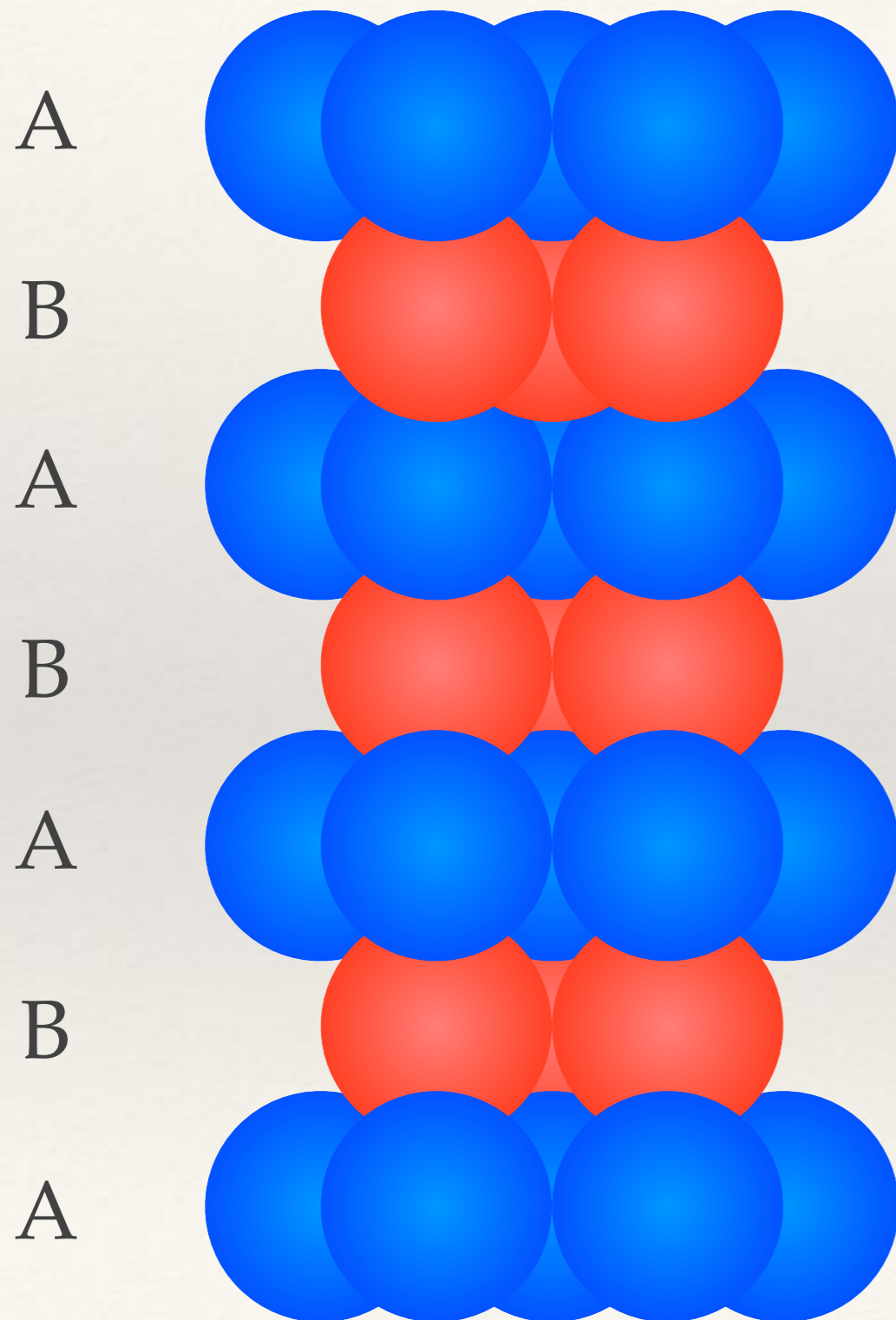
B



A

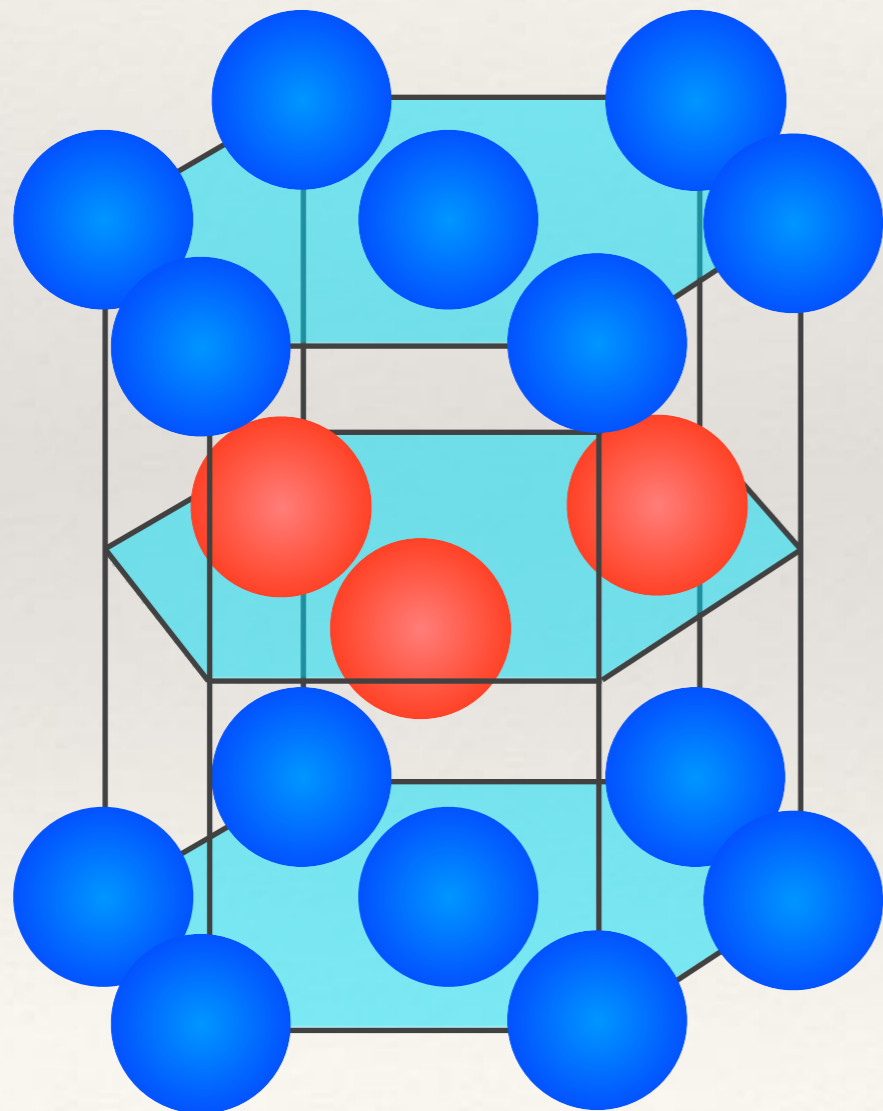


Empilements compacts



Empilements compacts

Réseau
hexagonal compact



Compacité :

$$\begin{aligned} C &= \frac{V_{\text{atomes}}}{V_{\text{maille}}} \\ &= \frac{2 \times \frac{4}{3} \pi R^3}{2R \times 2 \frac{\sqrt{3}}{2} R \times 4 \sqrt{\frac{2}{3}} R} \\ &= 0.74 \end{aligned}$$

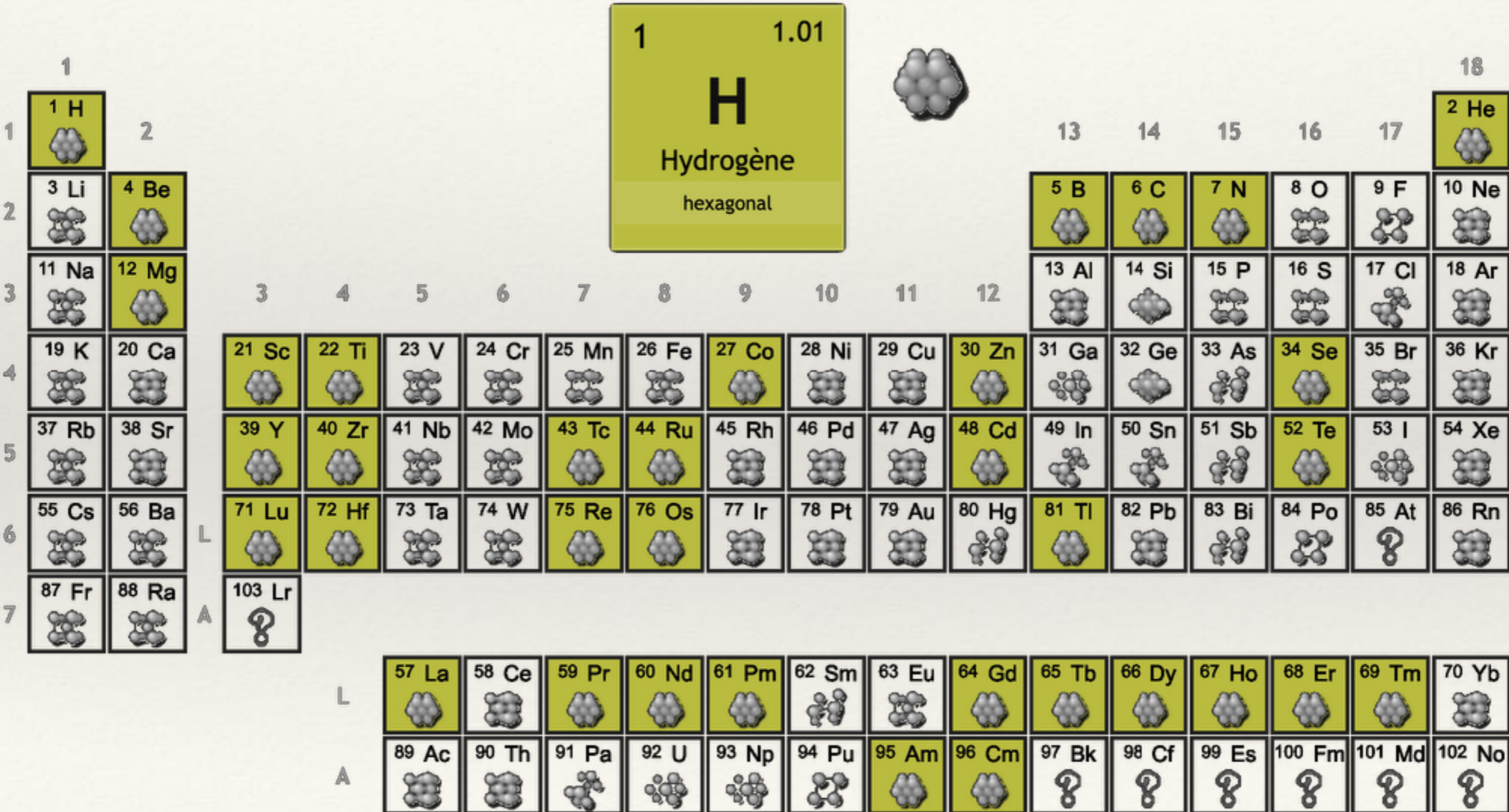
Coordinance = 12 :

6 atomes dans le même plan

3 atomes dans le plan au dessus

3 atomes dans le plan en dessous

Empilements compacts



Empilements compacts

Compacité :

$$\begin{aligned} C &= \frac{V_{\text{atomes}}}{V_{\text{maille}}} \\ &= \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi R^3}{\left(\frac{4R}{\sqrt{2}}\right)^3} \\ &= 0.74 \end{aligned}$$

Coordinance = 12 :

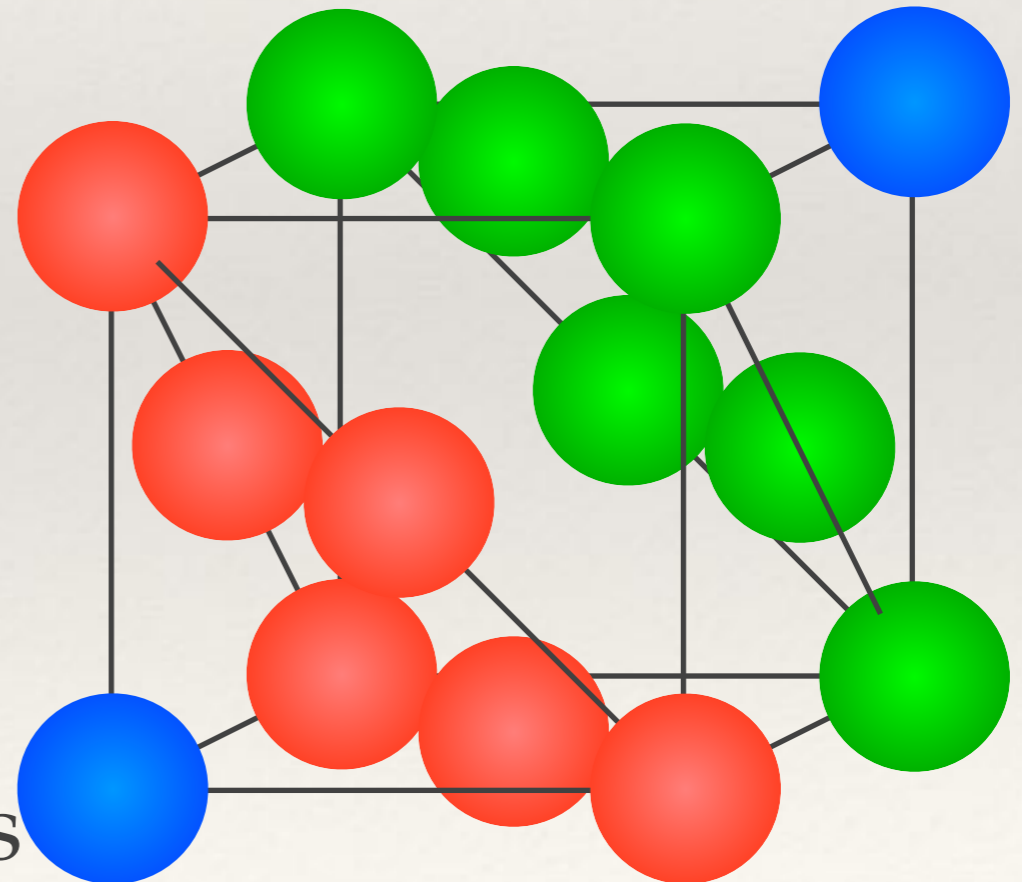
6 atomes dans le même plan

3 atomes dans le plan au dessus

3 atomes dans le plan en dessous

Réseau

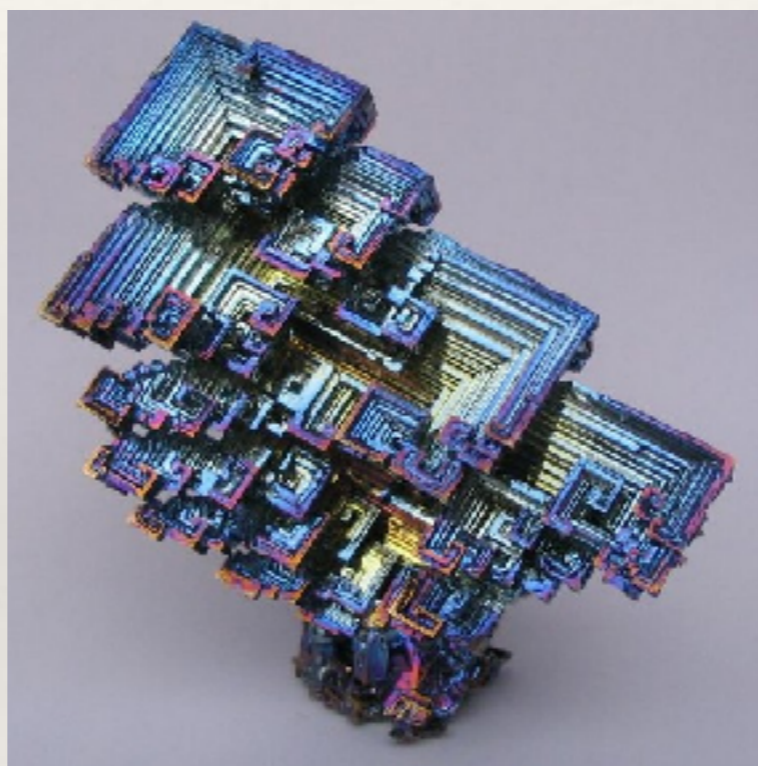
Cubique faces centrées



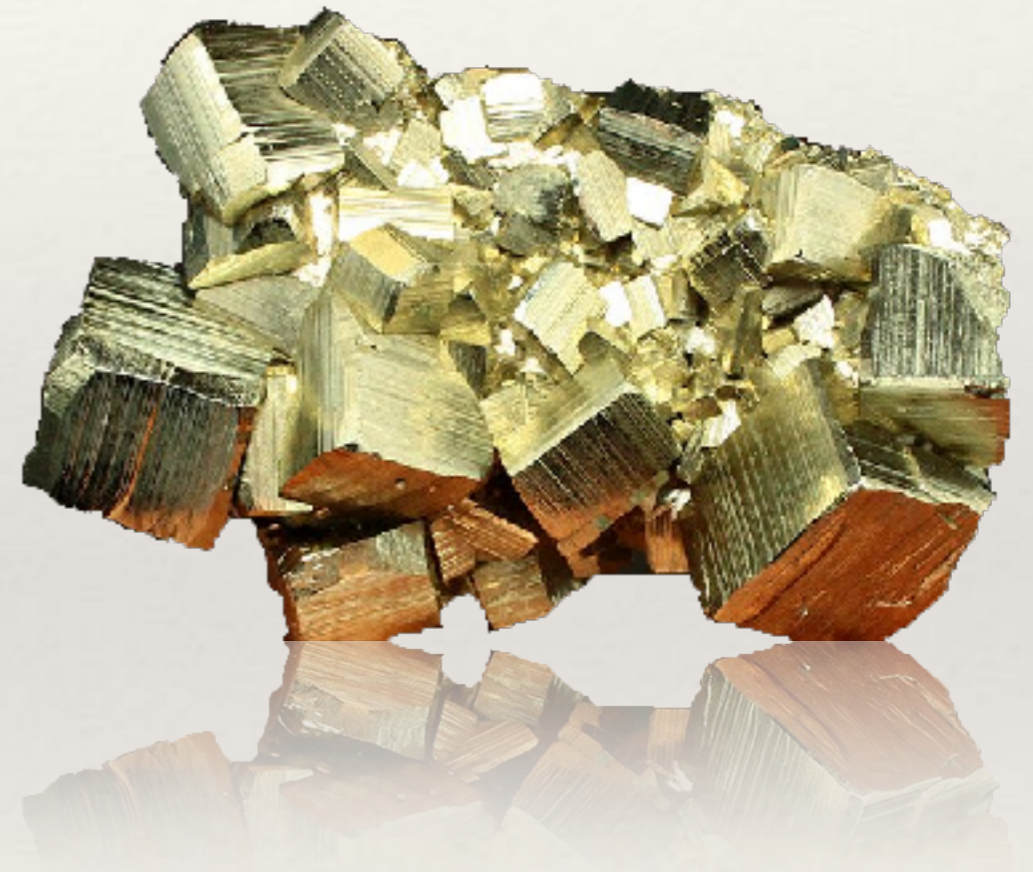
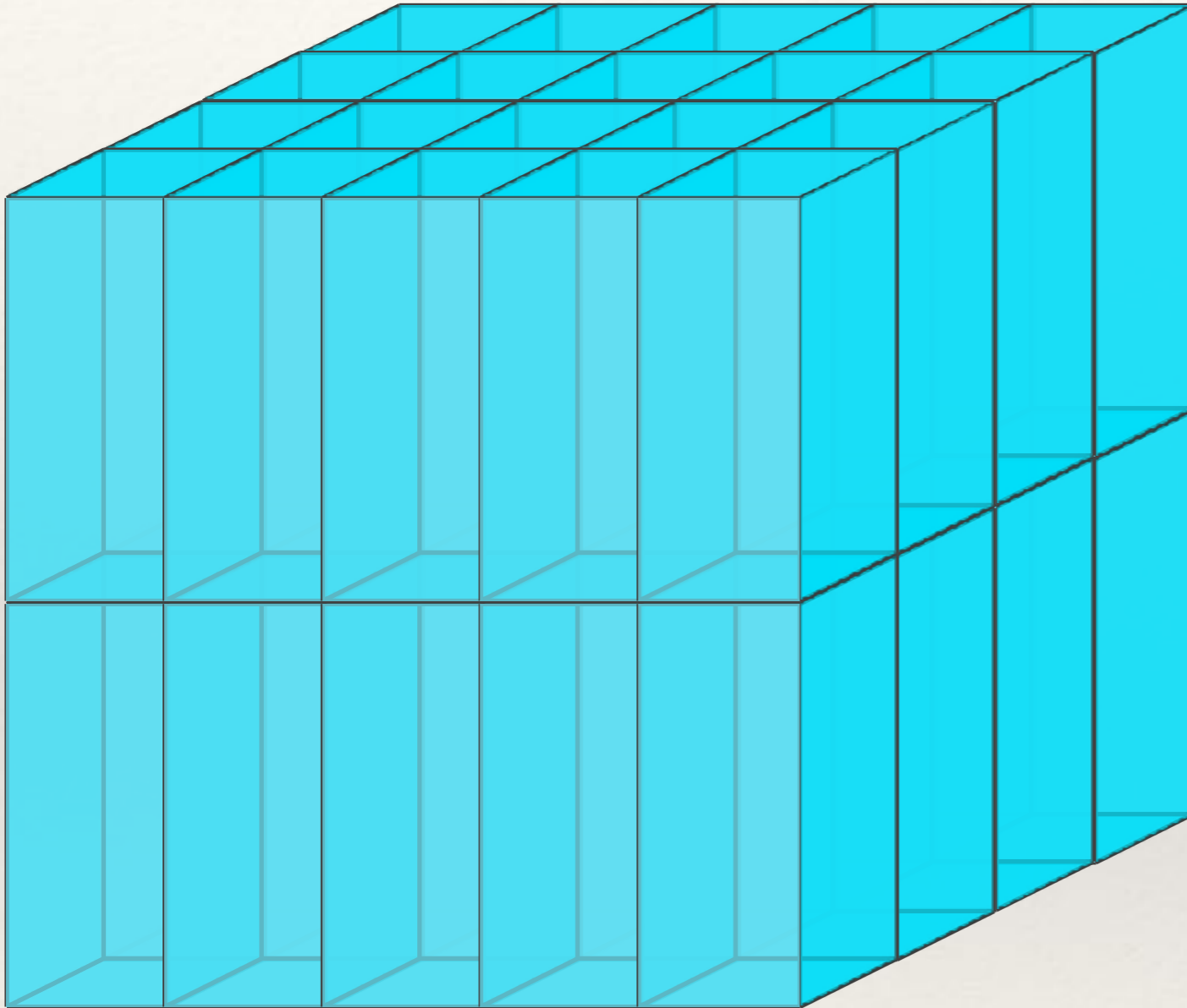
Empilements compacts

		1 1.01																		
1	1 H	2	H Hydrogène hexagonal																	18
	3 Li	4 Be												5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne	
2																				
3	11 Na	12 Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar		
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr		
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe		
6	55 Cs	56 Ba	71 Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn		
7	87 Fr	88 Ra	103 Lr																	
			57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb				
			L																	
			A	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No			

Cristaux

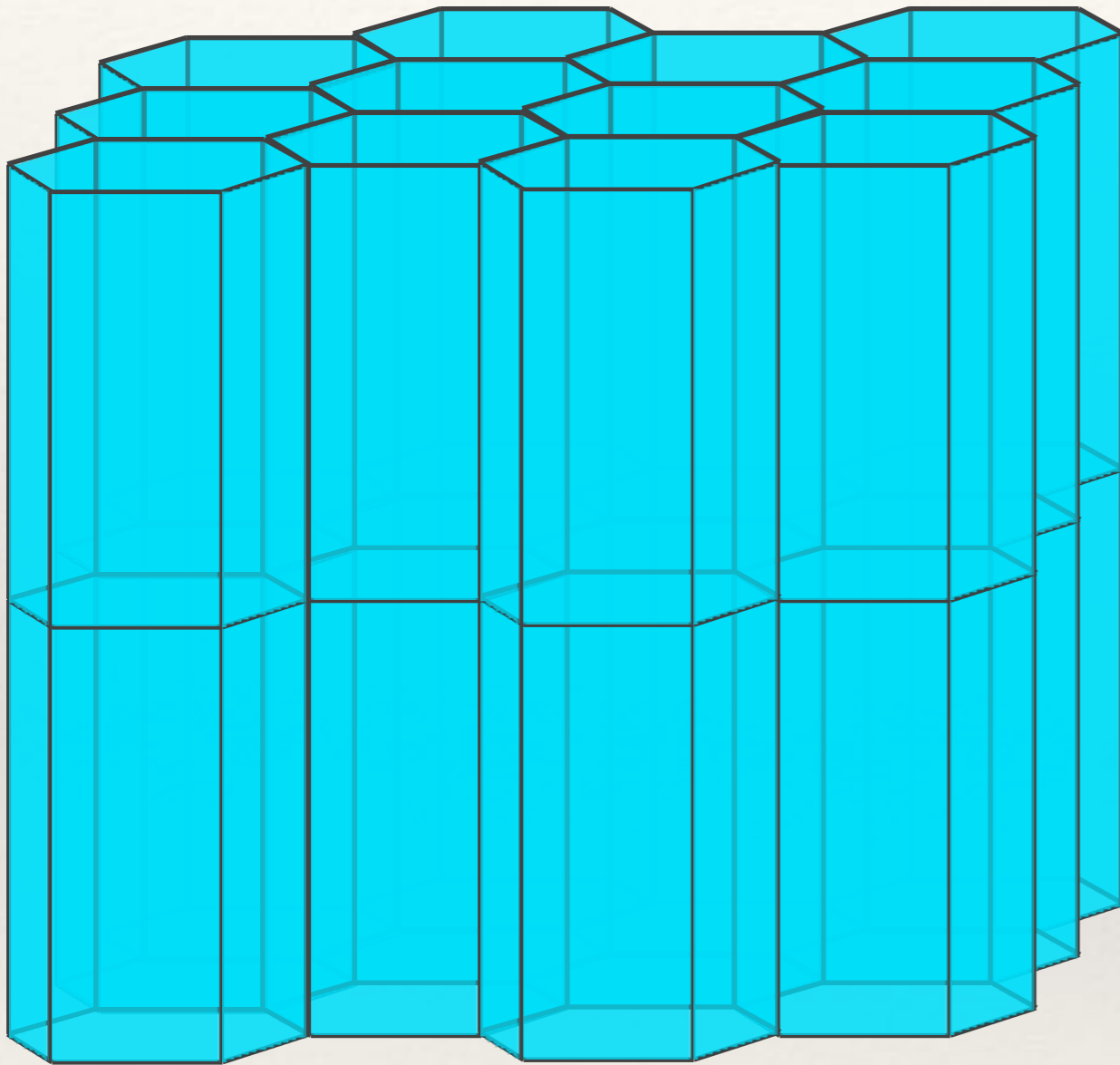


Cristaux



Un volume élémentaire pour remplir l'espace

Cristaux



Un volume élémentaire pour remplir l'espace

Partie 1 : Résumé

Il existe un grand nombre d'interaction attractives (liaisons) d'énergie variable tandis que la répulsion est due au principe de Pauli. Le résultat de cette compétition conduit à une distance entre les atomes et molécules.

La notion d'ordre est liée à la périodicité dans l'espace. Cet ordre peut être de courte ou de longue portée, et à 1, 2 ou 3 dimensions.

En considérant des sphères dures identiques, il existe 2 empilements compacts. Ils ont la même coordinence et la même compacité.

Partie 2 : Les symétries d'orientation

- ❖ Symétrie d'orientation
- ❖ Groupe ponctuel
- ❖ Représentation stéréographique
- ❖ Principe de Curie

Symétries d'orientation

Définition : les symétries d'orientation sont les symétries qui relient les directions équivalentes.

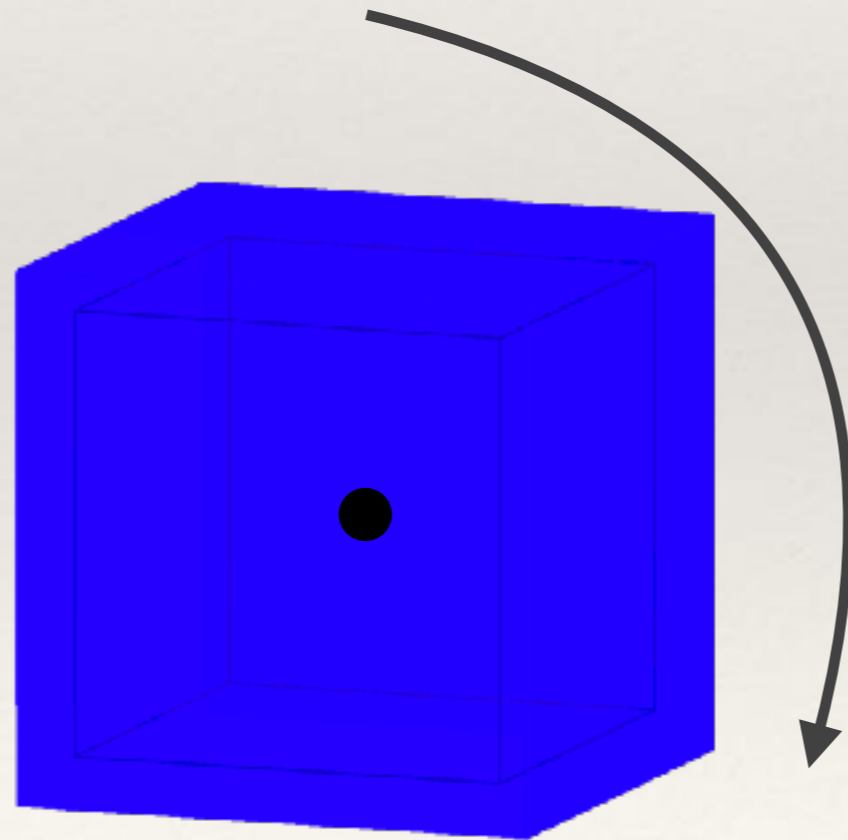
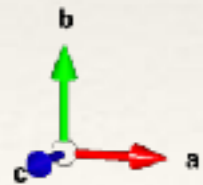
Il s'agit de rotations, d'inversion et de roto-inversions.

Notation des éléments de symétrie :

- n : rotation de $\frac{2\pi}{n}$
- \bar{n} : roto-inversion de $\frac{2\pi}{n}$
- m : miroir (défini par le vecteur normal au plan miroir)

Symétries d'orientation

Exemple de rotation de $\theta = \frac{2\pi}{3}$

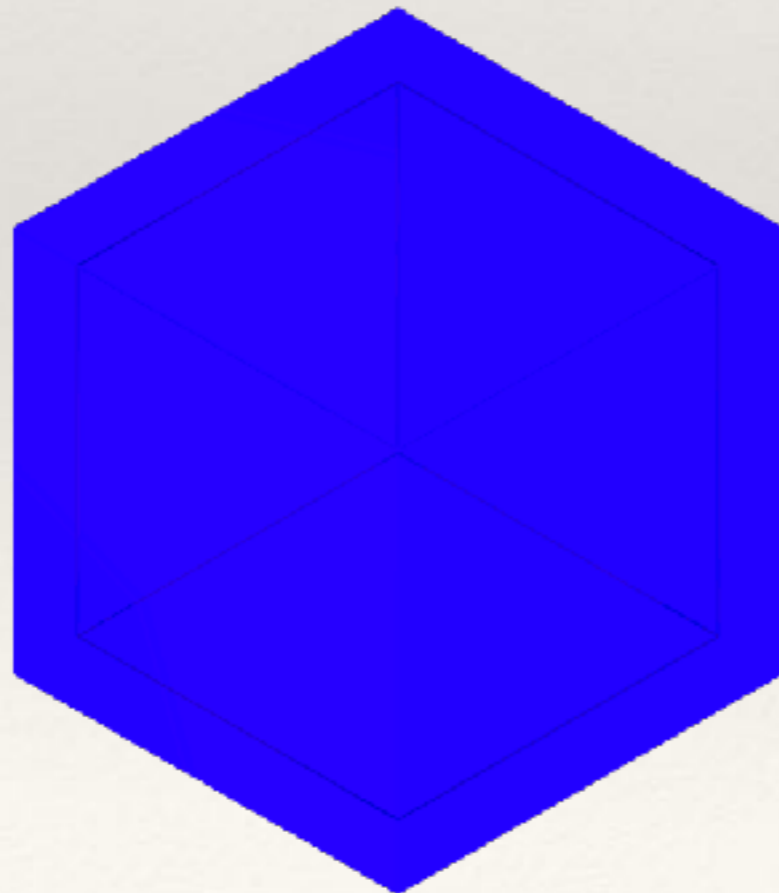
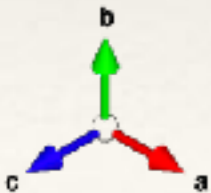


Rotation de $\theta = \frac{2\pi}{3}$

Symétries d'orientation

Exemple de rotation de $\theta = \frac{2\pi}{3}$

Notation : 3

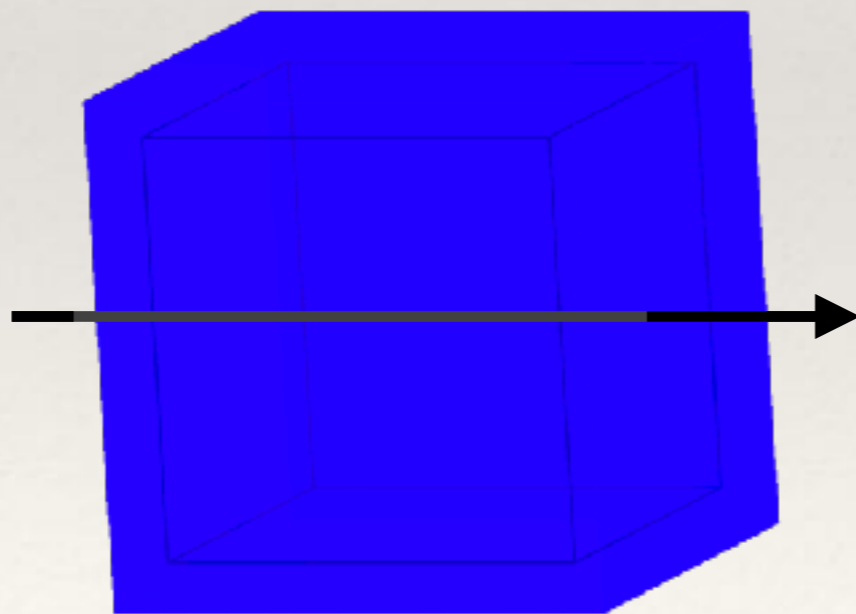
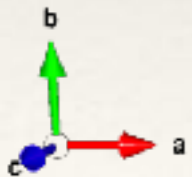


$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Symétries d'orientation

Exemple de rotation de $\theta = \frac{\pi}{2}$

Notation : 4

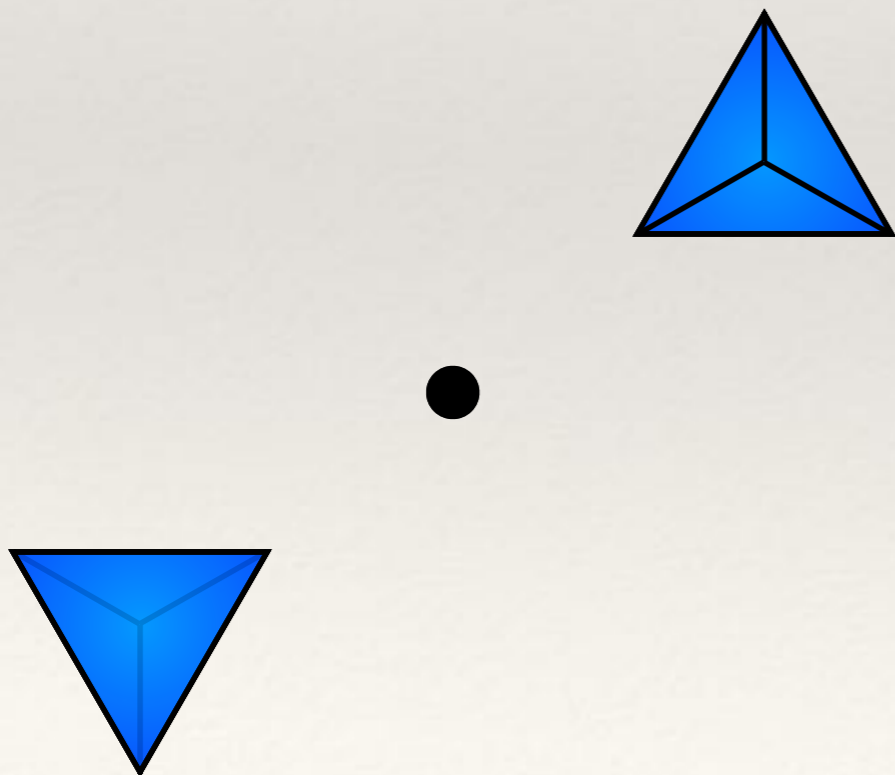


$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Symétries d'orientation

Exemple d'inversion

Notation : $\bar{1}$

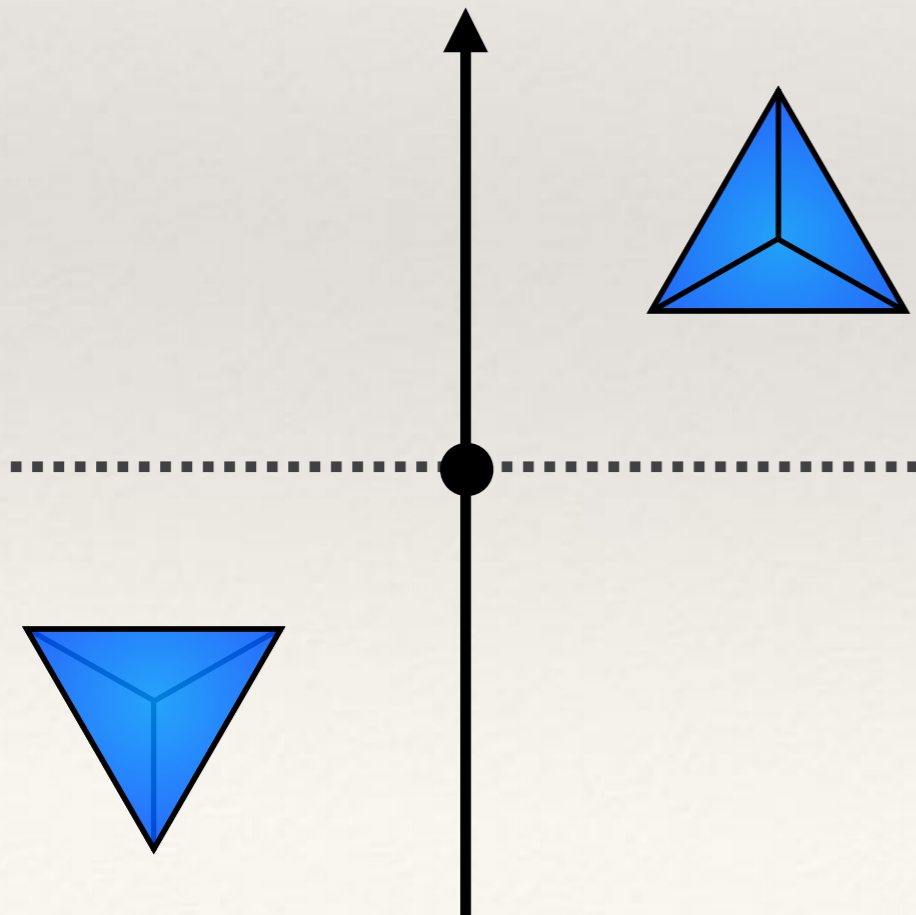


$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Symétries d'orientation

Exemple d'inversion

Notation : $\bar{1}$

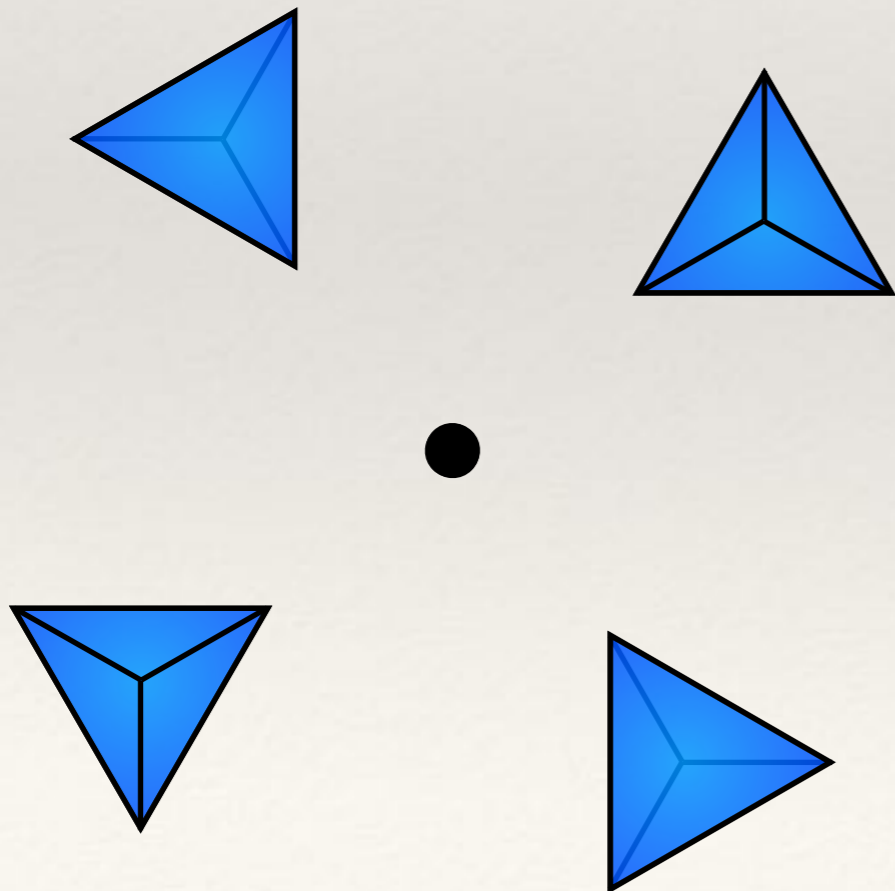


$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Symétries d'orientation

Exemple de roto-inversion de $\theta = \frac{\pi}{2}$

Notation : $\bar{4}$

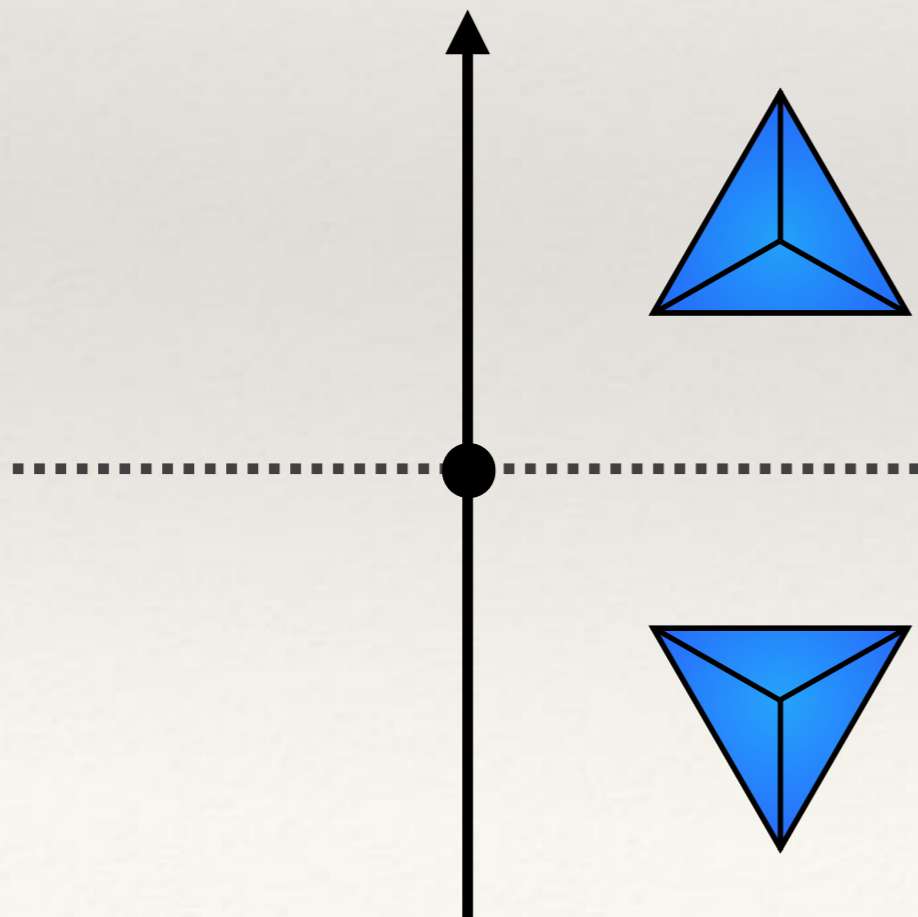


$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Symétries d'orientation

Exemple de miroir (roto-inversion de $\theta = \pi$)

Notation : m



$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Symétries d'orientation

Rotation de $\theta = \frac{2\pi}{n}$

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} x \cos(\theta) - y \sin(\theta) \\ x \sin(\theta) + y \cos(\theta) \\ z \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) & 0 \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Roto-inversion de $\theta = \frac{2\pi}{n}$

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} -x \cos(\theta) + y \sin(\theta) \\ -x \sin(\theta) - y \cos(\theta) \\ -z \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -\cos(\theta) & \sin(\theta) & 0 \\ -\sin(\theta) & -\cos(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Inversion

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ -z \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Groupe ponctuel

Définition : le groupe ponctuel est l'ensemble des opérations de symétrie d'orientation laissant invariant une figure.

Par définition un groupe \mathcal{G} doit vérifier 4 propriétés :

- Une loi de composition interne \times :

$$\forall a, b \in \mathcal{G}, a \times b \in \mathcal{G}$$

- L'associativité de la loi de composition :

$$\forall a, b, c \in \mathcal{G}, (a \times b) \times c = a \times (b \times c)$$

- Posséder un élément neutre e :

$$\exists e, \forall a \in \mathcal{G}, e \times a = a \times e = a$$

- Être symétrique :

$$\forall a \in \mathcal{G}, \exists b, a \times b = b \times a = e$$

Groupe ponctuel

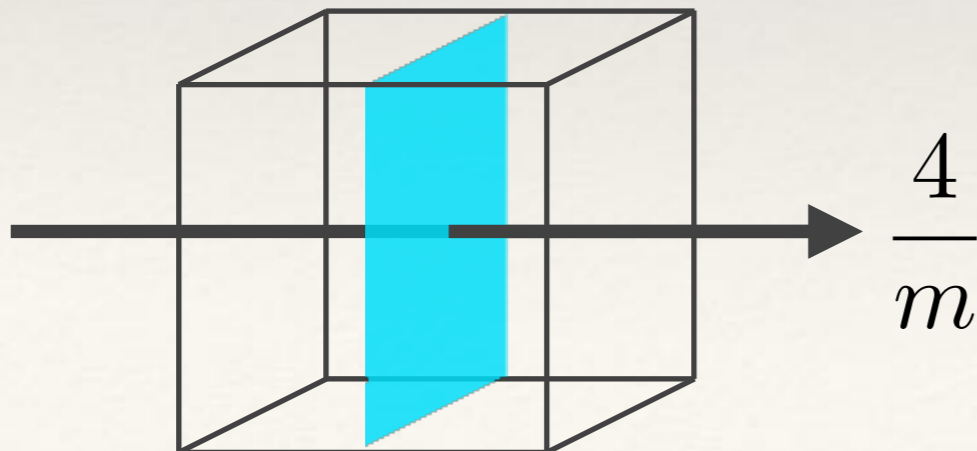
Notation du groupe ponctuel :

- opération de symétrie de degré le plus élevé
→ axe primaire
- opération de symétrie de degré le plus élevé suivant
→ axe secondaire
- opération de symétrie de degré le plus élevé suivant
→ axe tertiaire

Groupe ponctuel

Exemple du cube

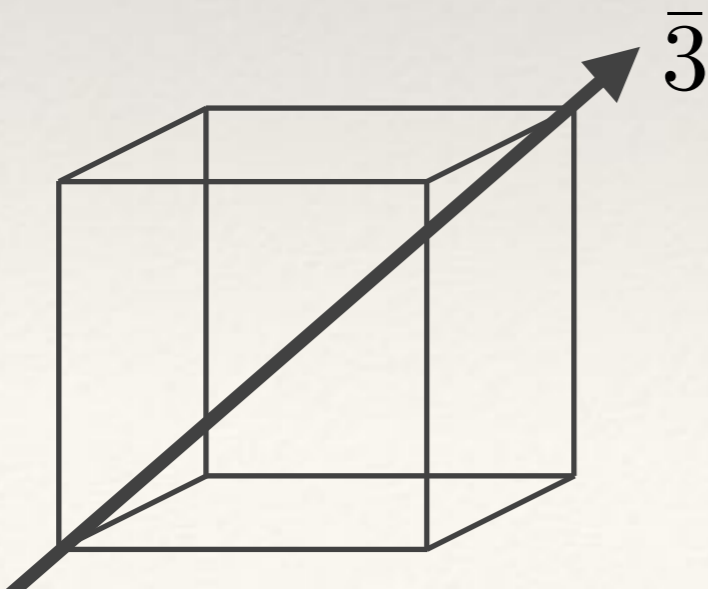
- opération de symétrie de degré le plus élevé
→ axe primaire : $\frac{4}{m}$



Groupe ponctuel

Exemple du cube

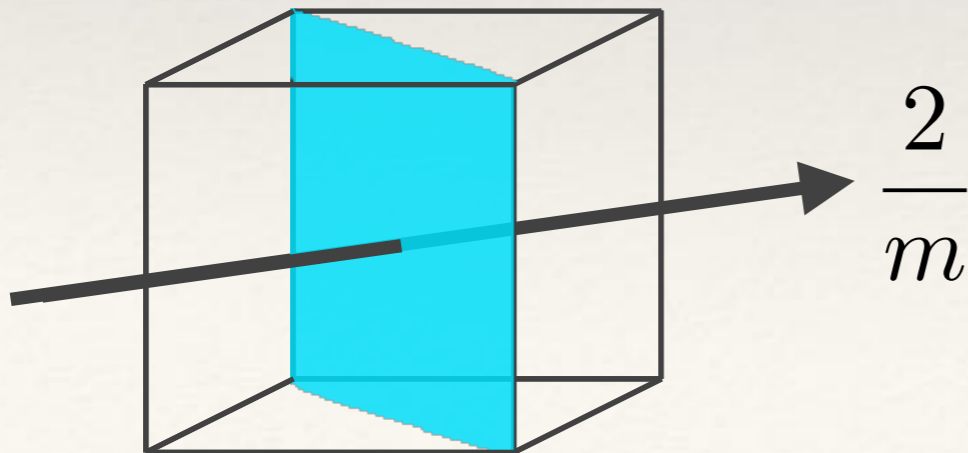
- opération de symétrie de degré le plus élevé
→ axe primaire : $\frac{4}{m}$
- opération de symétrie de degré le plus élevé suivant
→ axe secondaire : $\bar{3}$



Groupe ponctuel

Exemple du cube

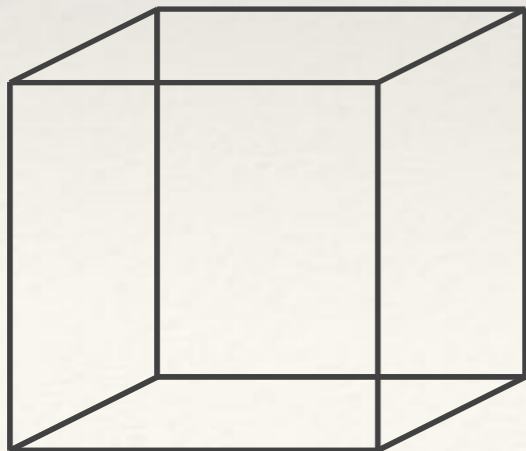
- opération de symétrie de degré le plus élevé
→ axe primaire : $\frac{4}{m}$
- opération de symétrie de degré le plus élevé suivant
→ axe secondaire : $\bar{3}$
- opération de symétrie de degré le plus élevé suivant
→ axe tertiaire : $\frac{2}{m}$



Groupe ponctuel

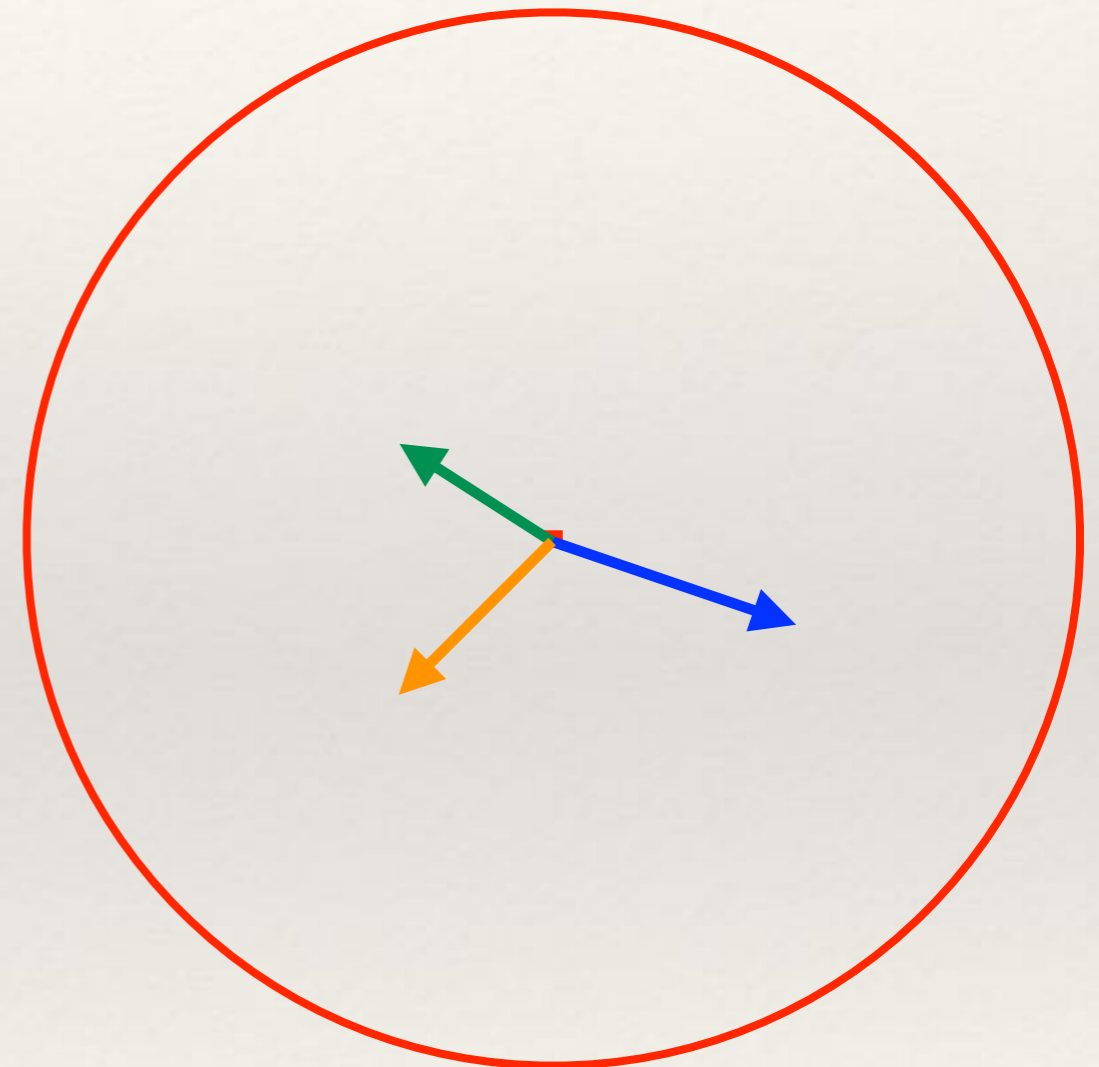
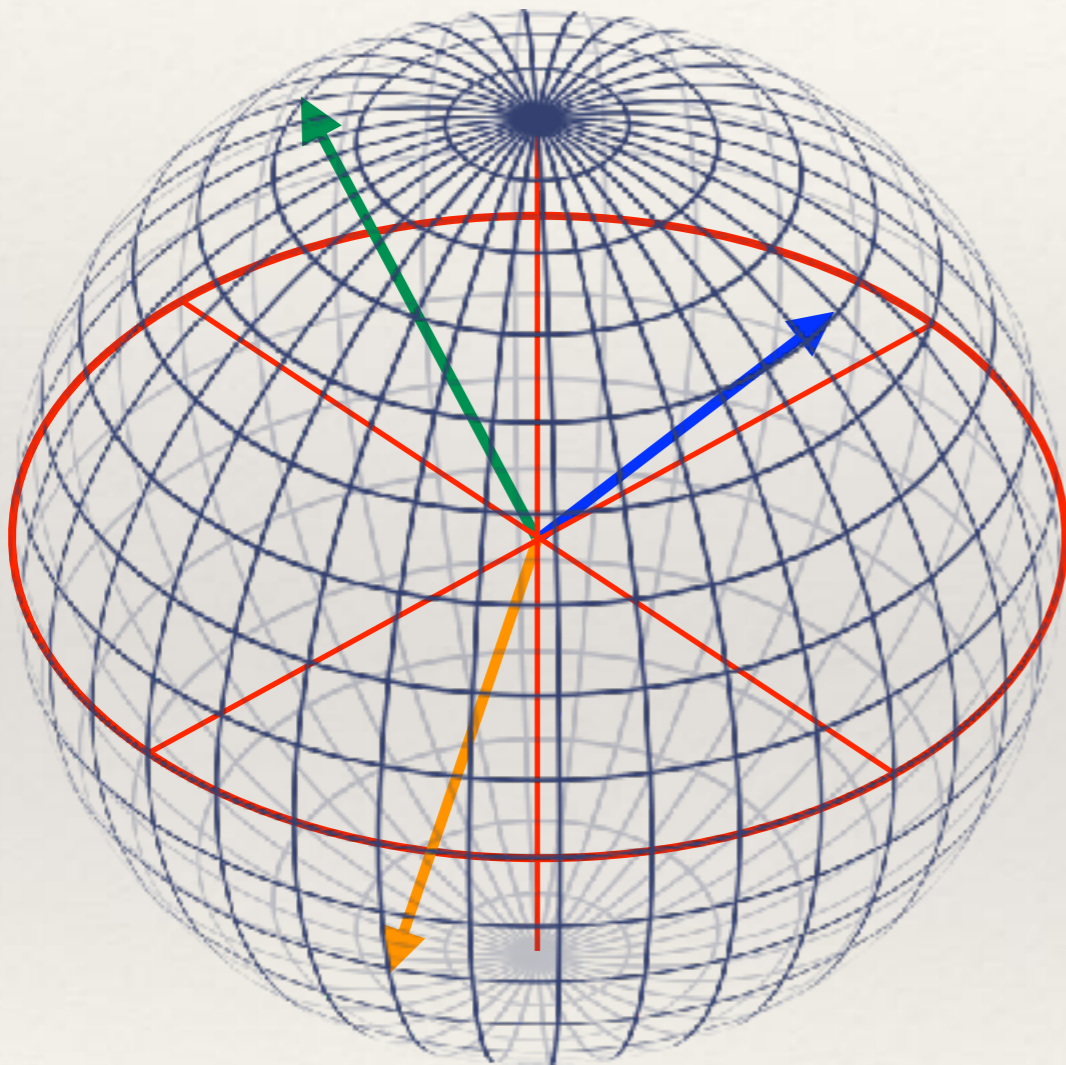
Exemple du cube

- opération de symétrie de degré le plus élevé
→ axe primaire : $\frac{4}{m}$
- opération de symétrie de degré le plus élevé suivant
→ axe secondaire : $\bar{3}$
- opération de symétrie de degré le plus élevé suivant
→ axe tertiaire : $\frac{2}{m}$

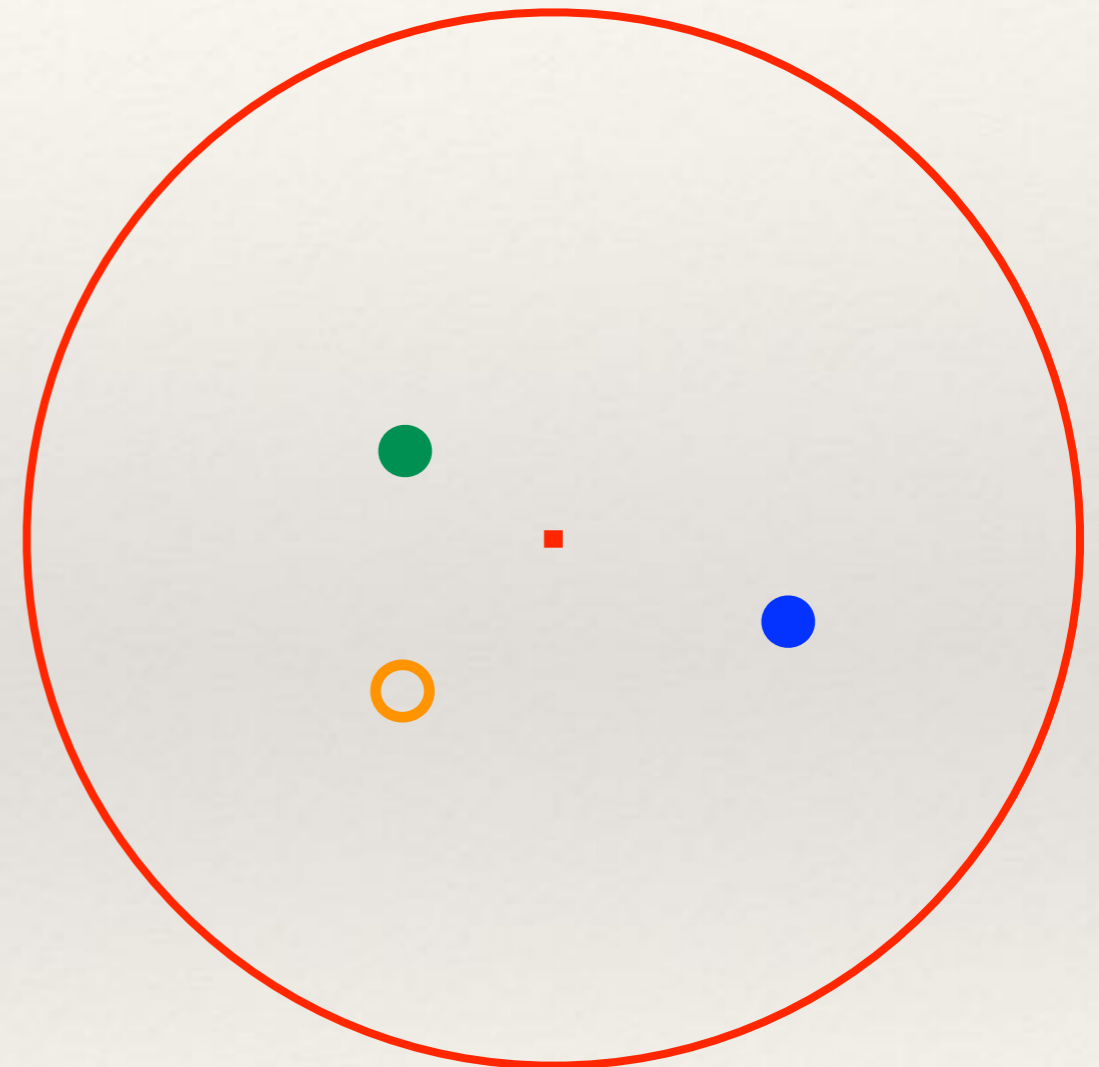
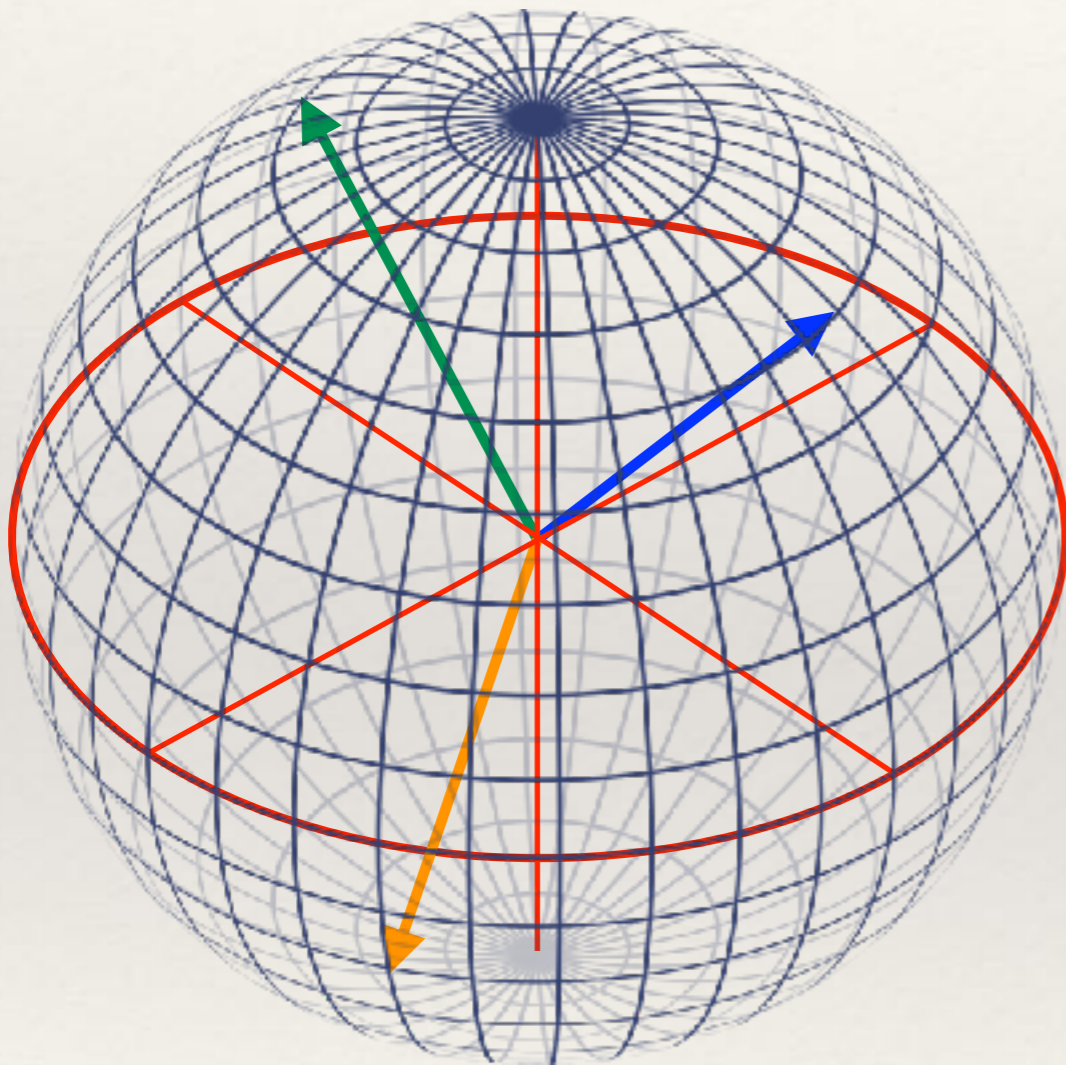


Groupe ponctuel : $\frac{4}{m} \bar{3} \frac{2}{m}$

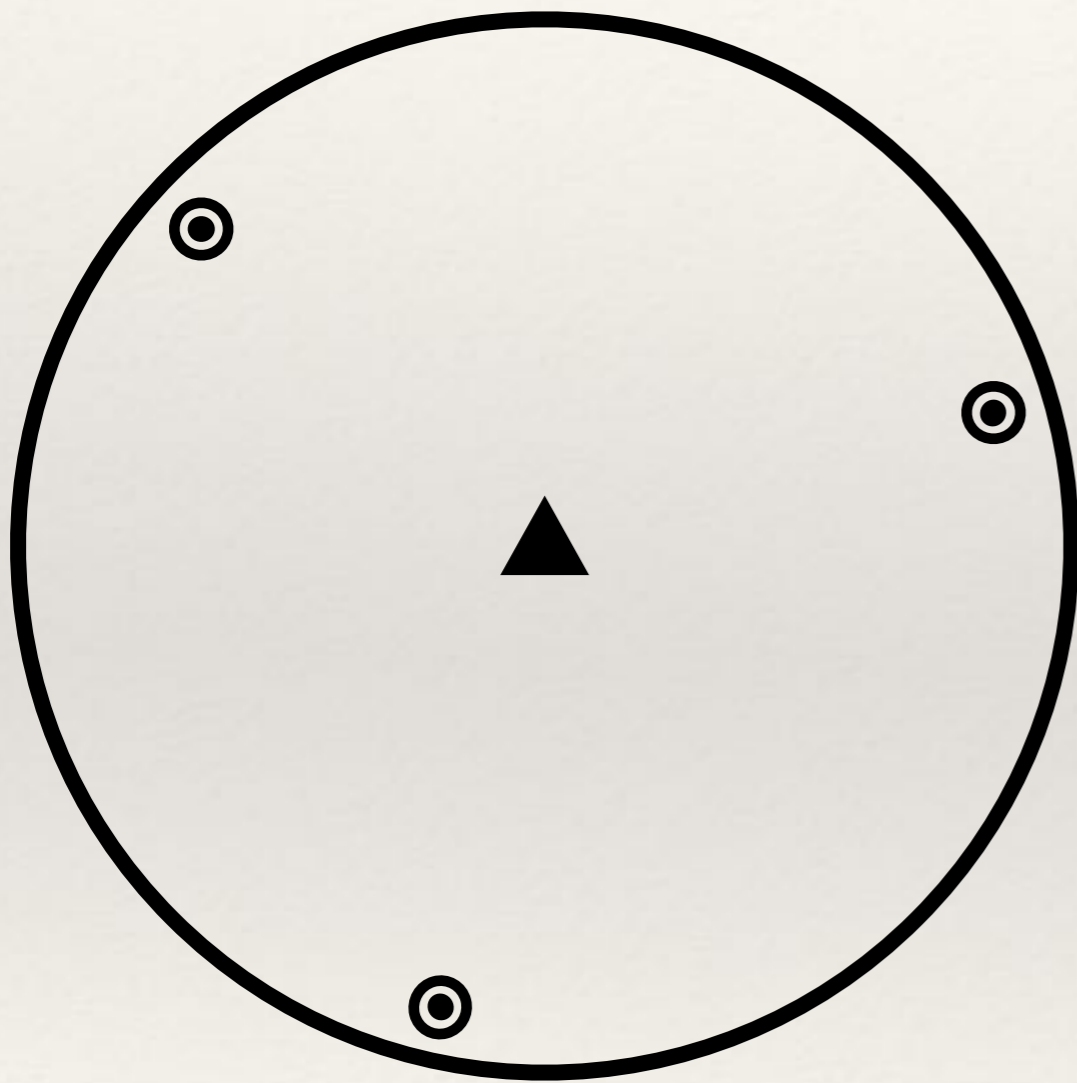
Projection stéréographique



Projection stéréographique



Projection stéréographique

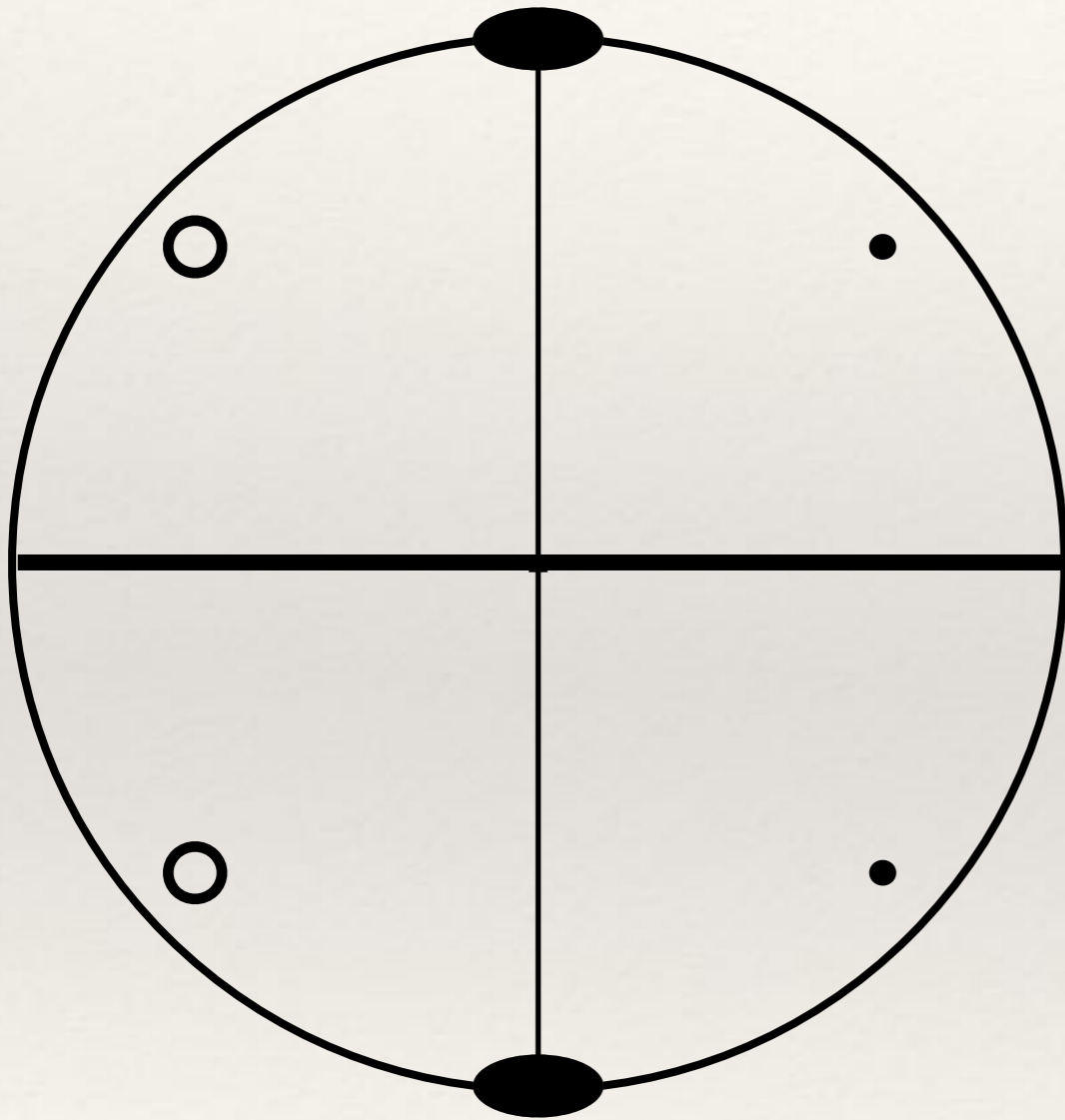


$$\frac{3}{m}$$

Axe d'ordre 3

Miroir perpendiculaire à l'axe d'ordre 3

Projection stéréographique

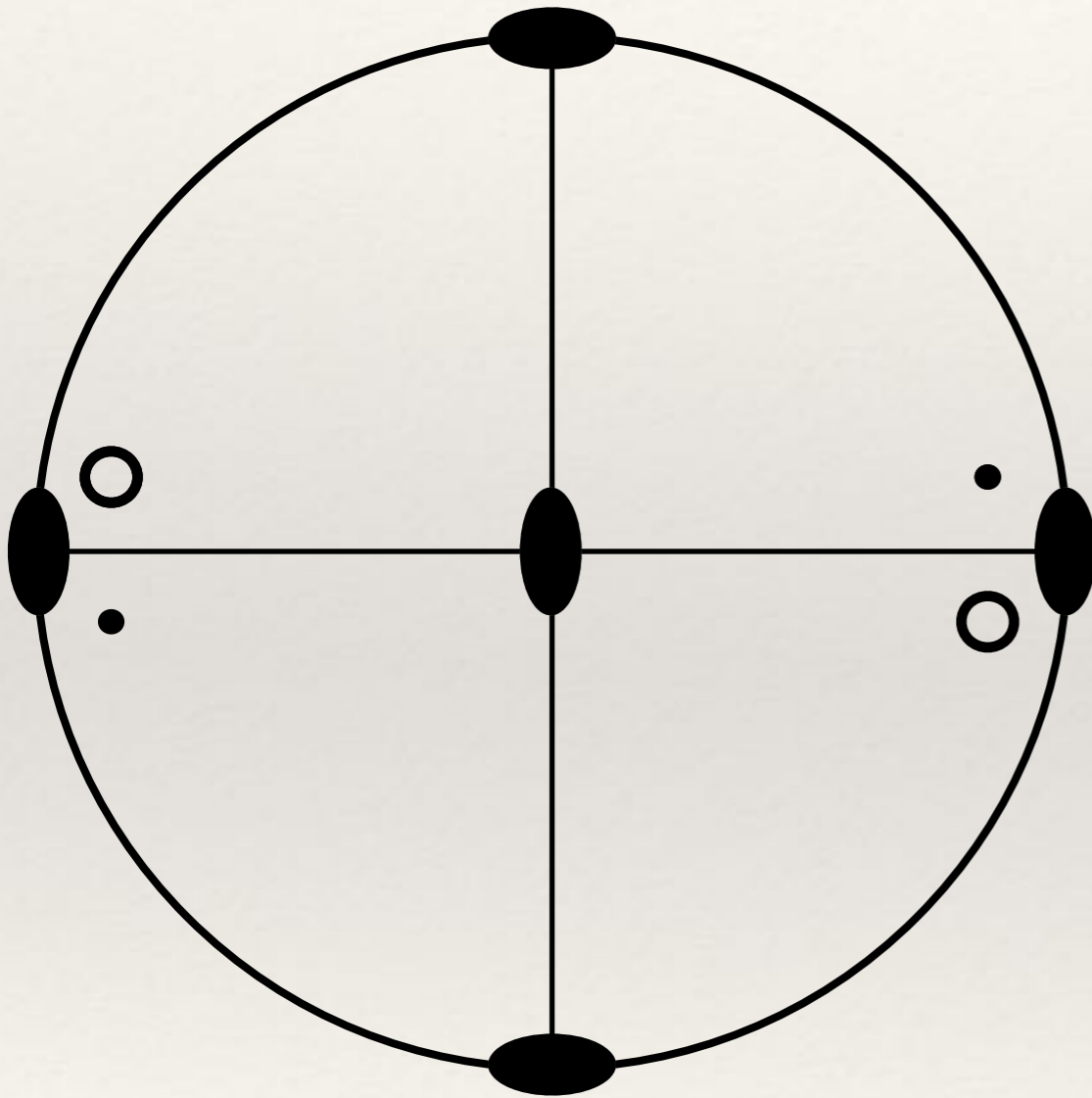


$$\frac{2}{m}$$

Axe d'ordre 2

Miroir perpendiculaire à l'axe d'ordre 2

Projection stéréographique



222

Axe d'ordre 2

Axe d'ordre 2

Axe d'ordre 2

Principe de Curie

Définition : principe de Curie : les symétries des causes sont incluses dans les symétries des effets.

L'effet est plus symétrique que les causes.

Principe de Curie

Exemple de la ferroélectricité

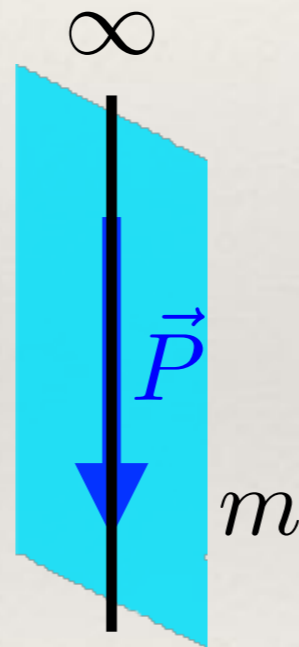
Groupe ponctuel de la ferroélectricité :



Principe de Curie

Exemple de la ferroélectricité

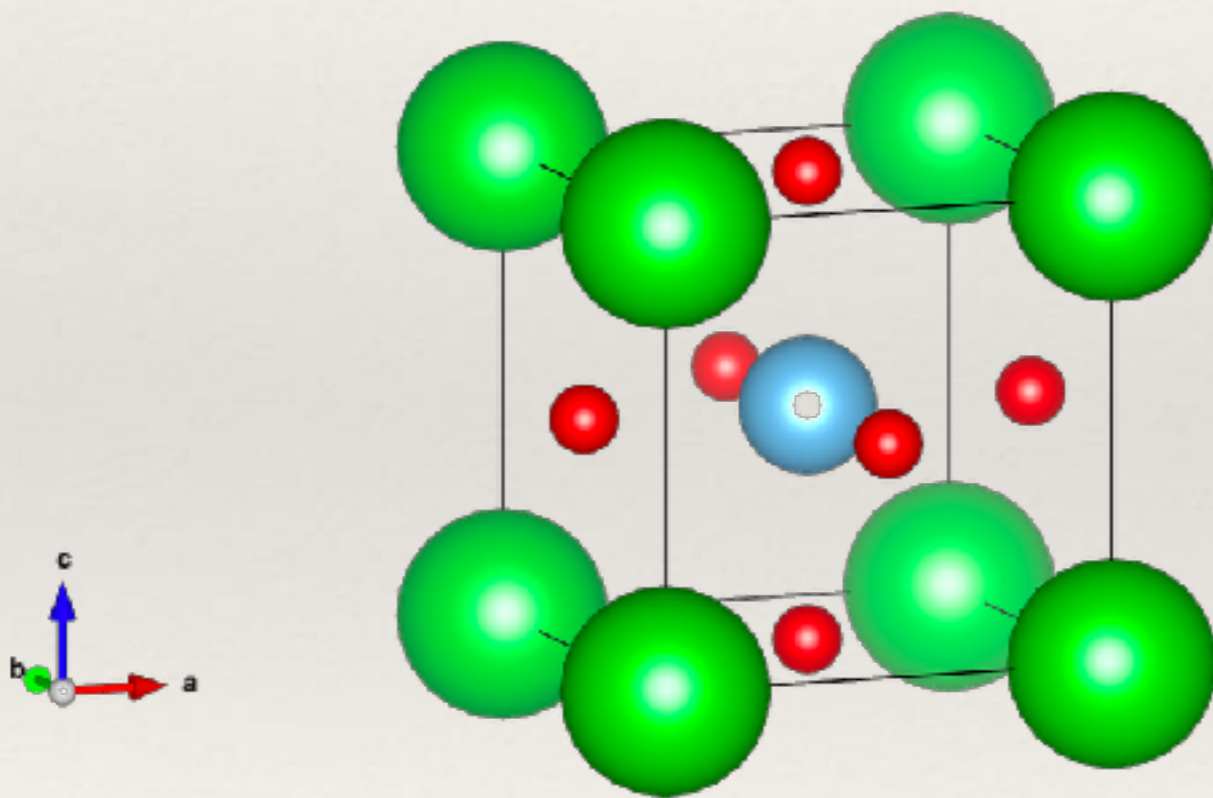
Groupe ponctuel de la ferroélectricité : ∞m



Principe de Curie

Exemple de la ferroélectricité

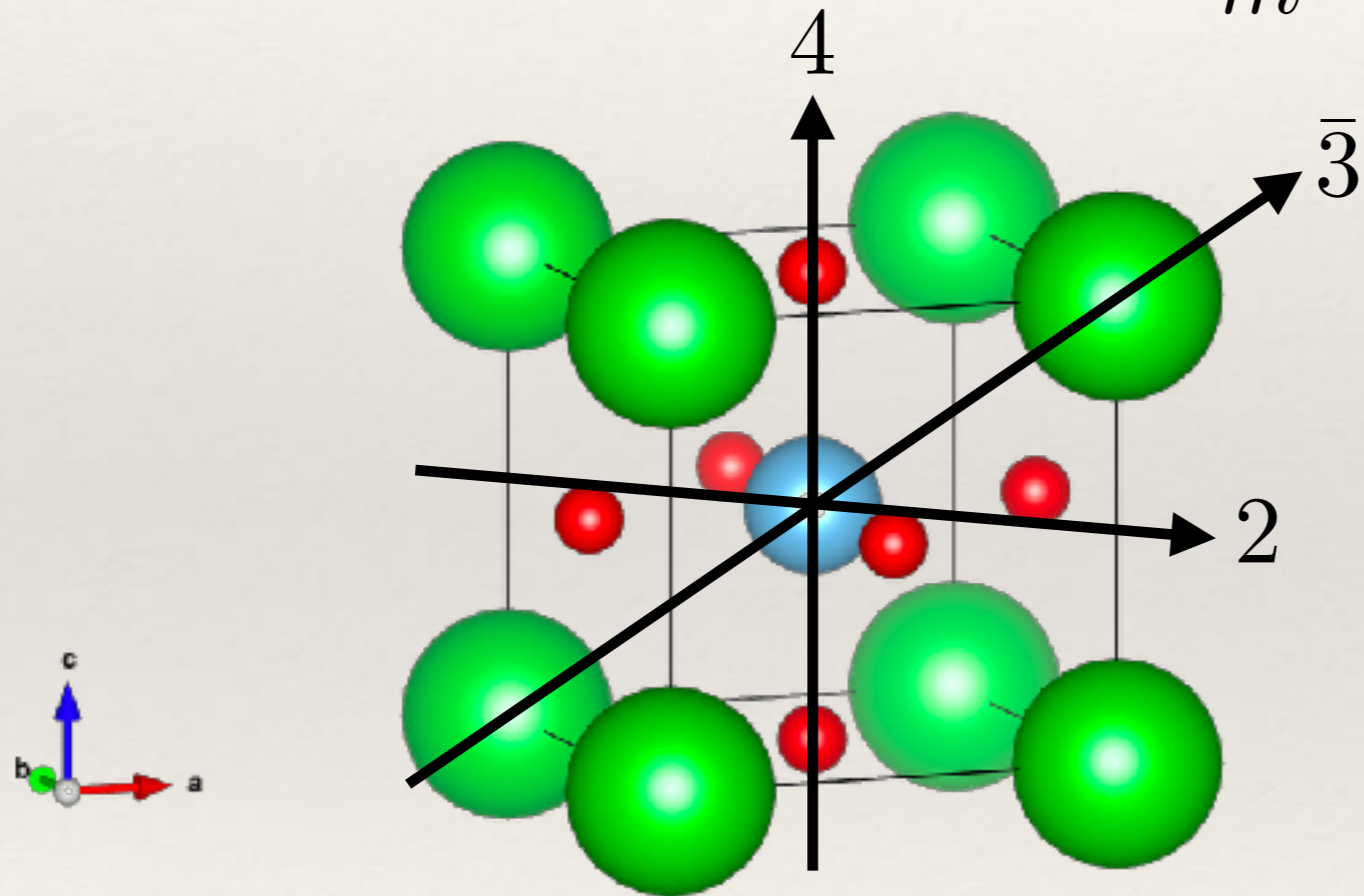
Groupe ponctuel du cristal : $\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$ $m\bar{3}m$



Principe de Curie

Exemple de la ferroélectricité

Groupe ponctuel du cristal : $\frac{4}{m} \bar{3} \frac{2}{m} \quad m\bar{3}m$

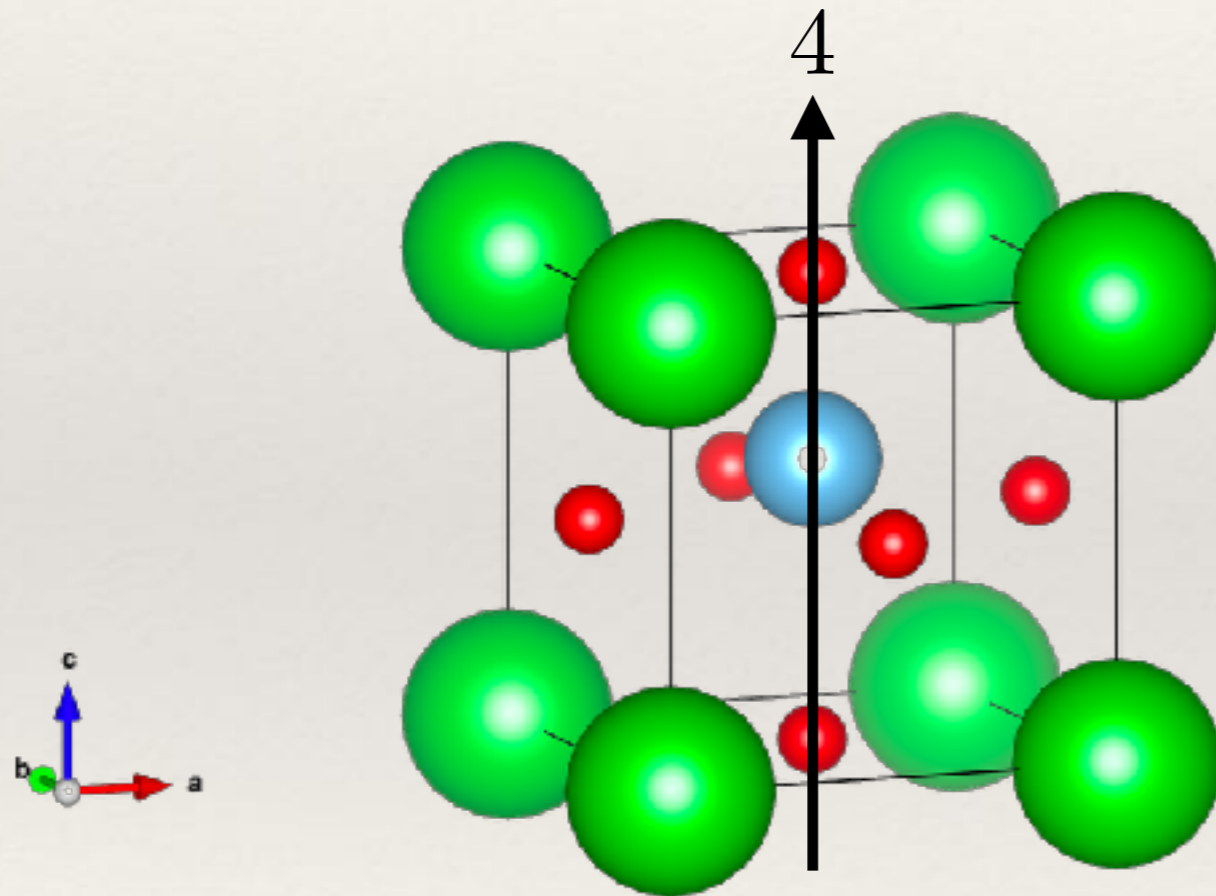


Principe de Curie : $m\bar{3}m \notin \infty m$: pas de ferroélectricité !

Principe de Curie

Exemple de la ferroélectricité

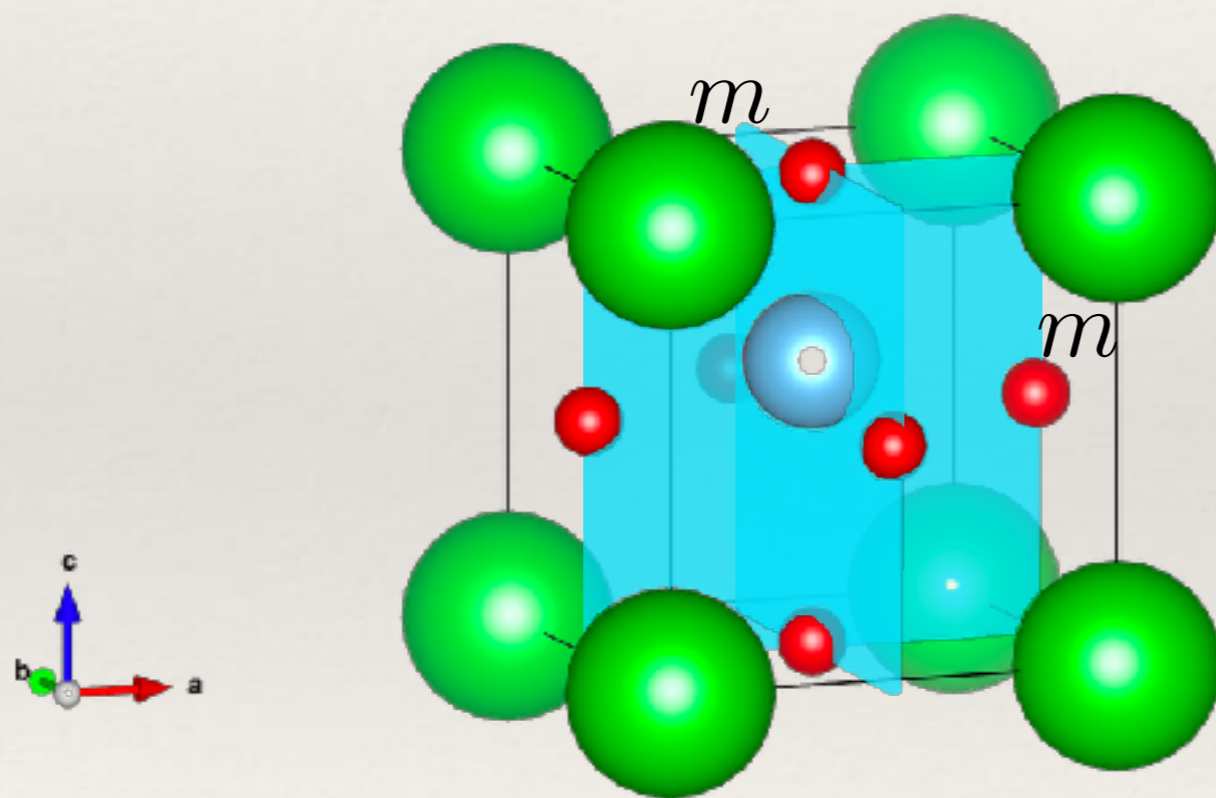
Groupe ponctuel du cristal : $4mm$



Principe de Curie

Exemple de la ferroélectricité

Groupe ponctuel du cristal : $4mm$



Principe de Curie : $4mm \in \infty m$: ferroélectricité !

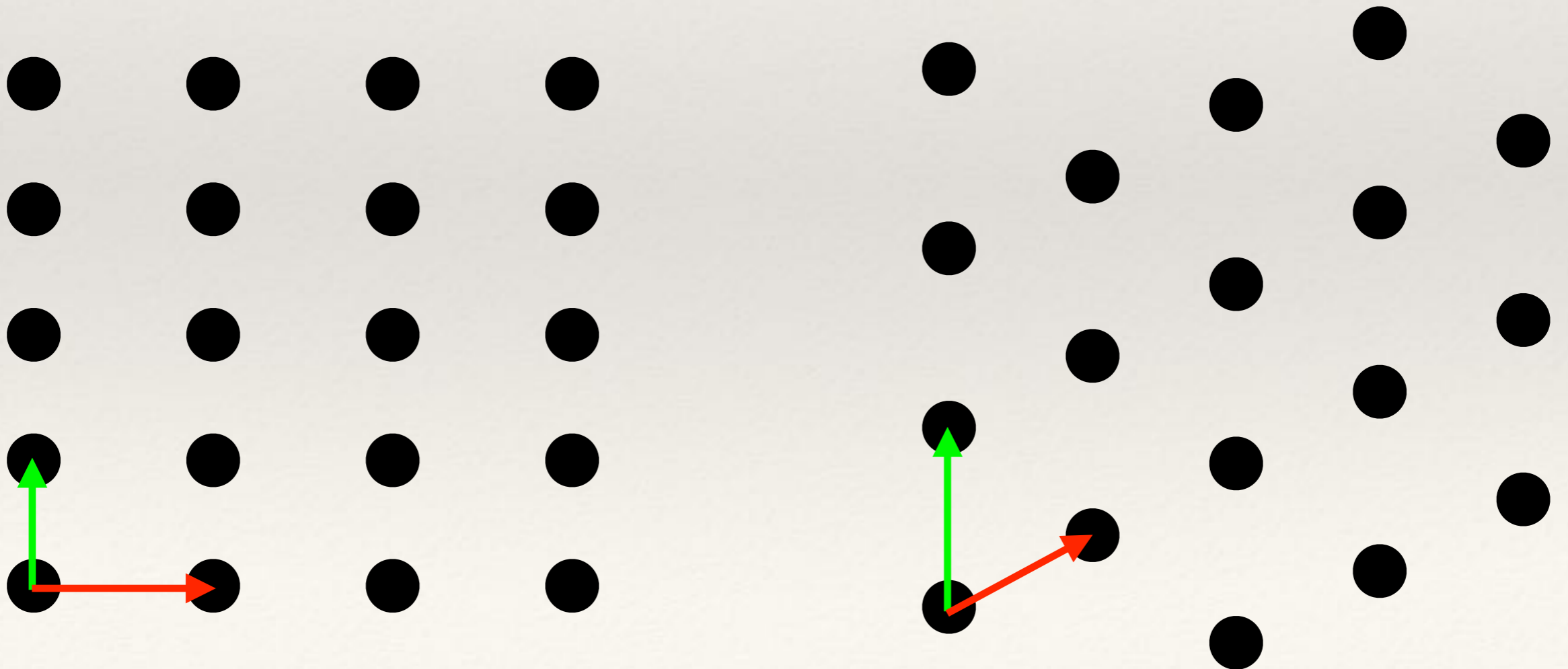
Partie 3 : Le réseau

- ❖ Réseau
- ❖ Maille élémentaire, primitive, multiple ou conventionnelle
- ❖ Cellule de Wigner-Seitz
- ❖ Plans réticulaires
- ❖ Symétrie et réseau
- ❖ Classe de symétrie, classe de Laue, Systèmes cristallin, et réseau de Bravais : classification
- ❖ Mode de réseau

Réseau

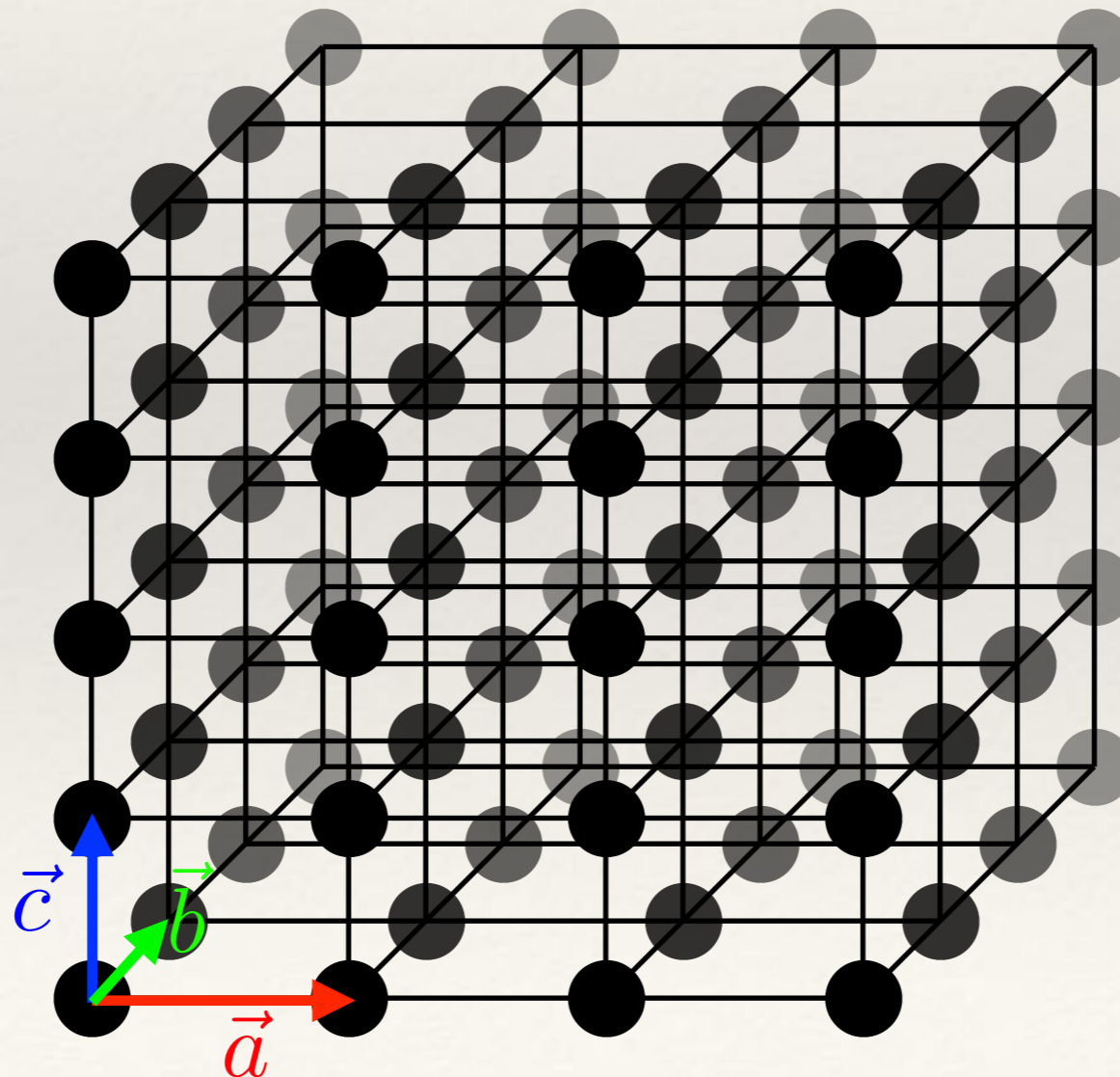
Définition : un réseau est un ensemble de points (appelés noeuds) répartis périodiquement dans l'espace.

Les noeuds sont reliés entre eux par des translations.



Réseau

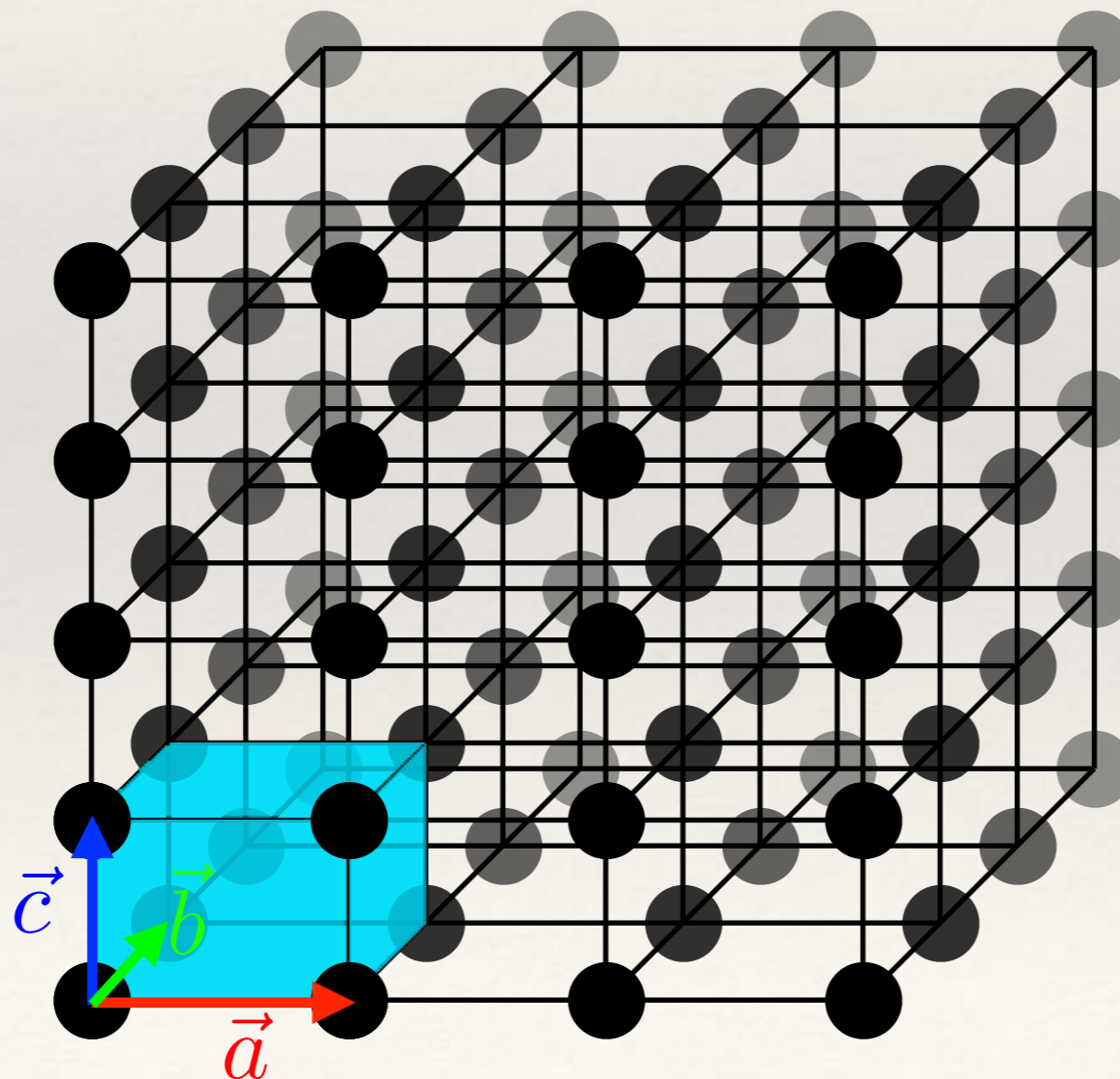
La position de chaque noeud peut s'écrire comme la combinaison linéaire de 3 vecteurs de bases (notés \vec{a} \vec{b} \vec{c}) :

$$\vec{R}_{noeud} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$


Maille primitive

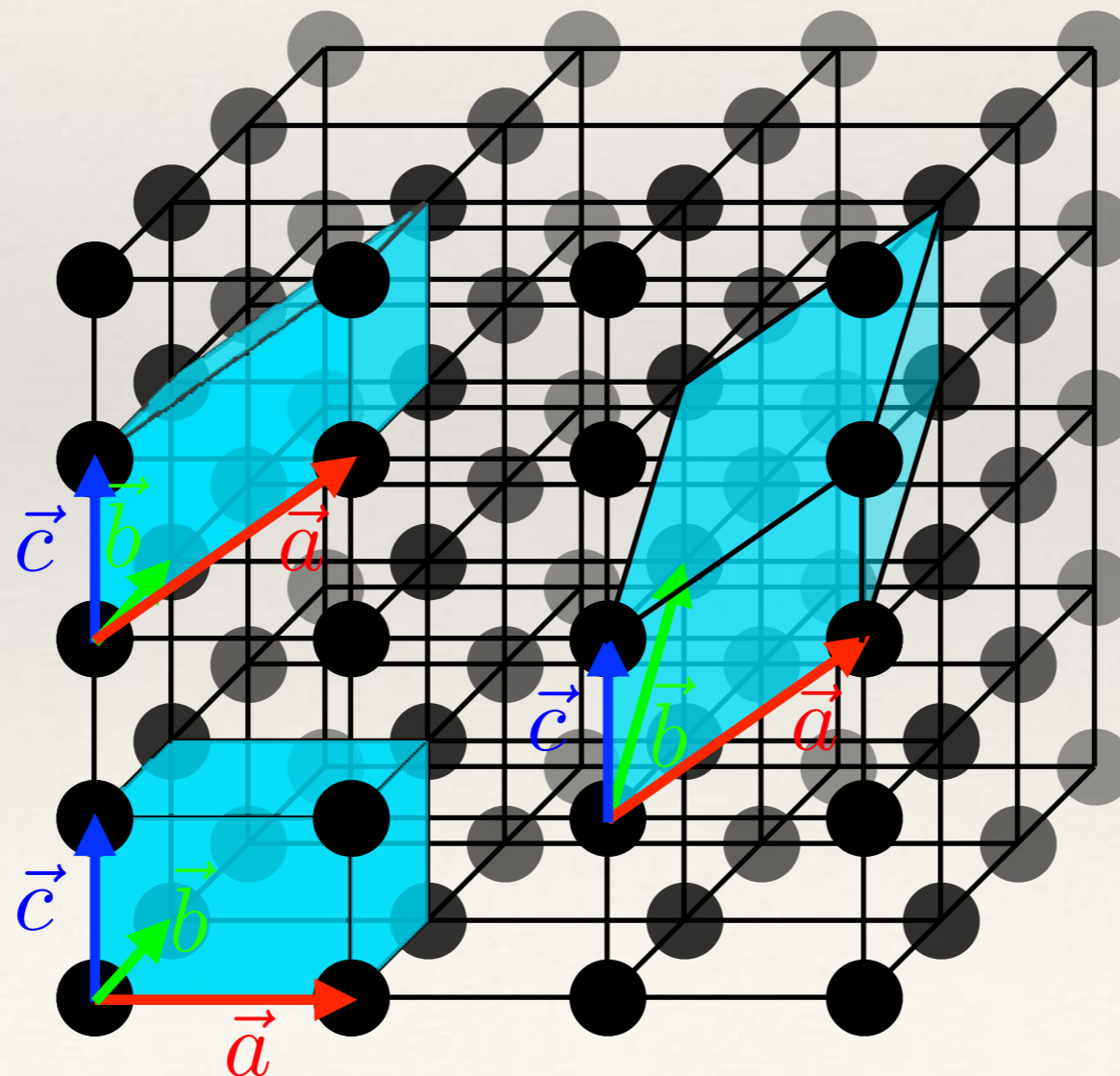
Définition : La maille primitive est le volume formé par 3 vecteurs de bases \vec{a} \vec{b} \vec{c} ne contenant qu'un seul noeud.

$$\text{Volume} = abc$$



Maille primitive

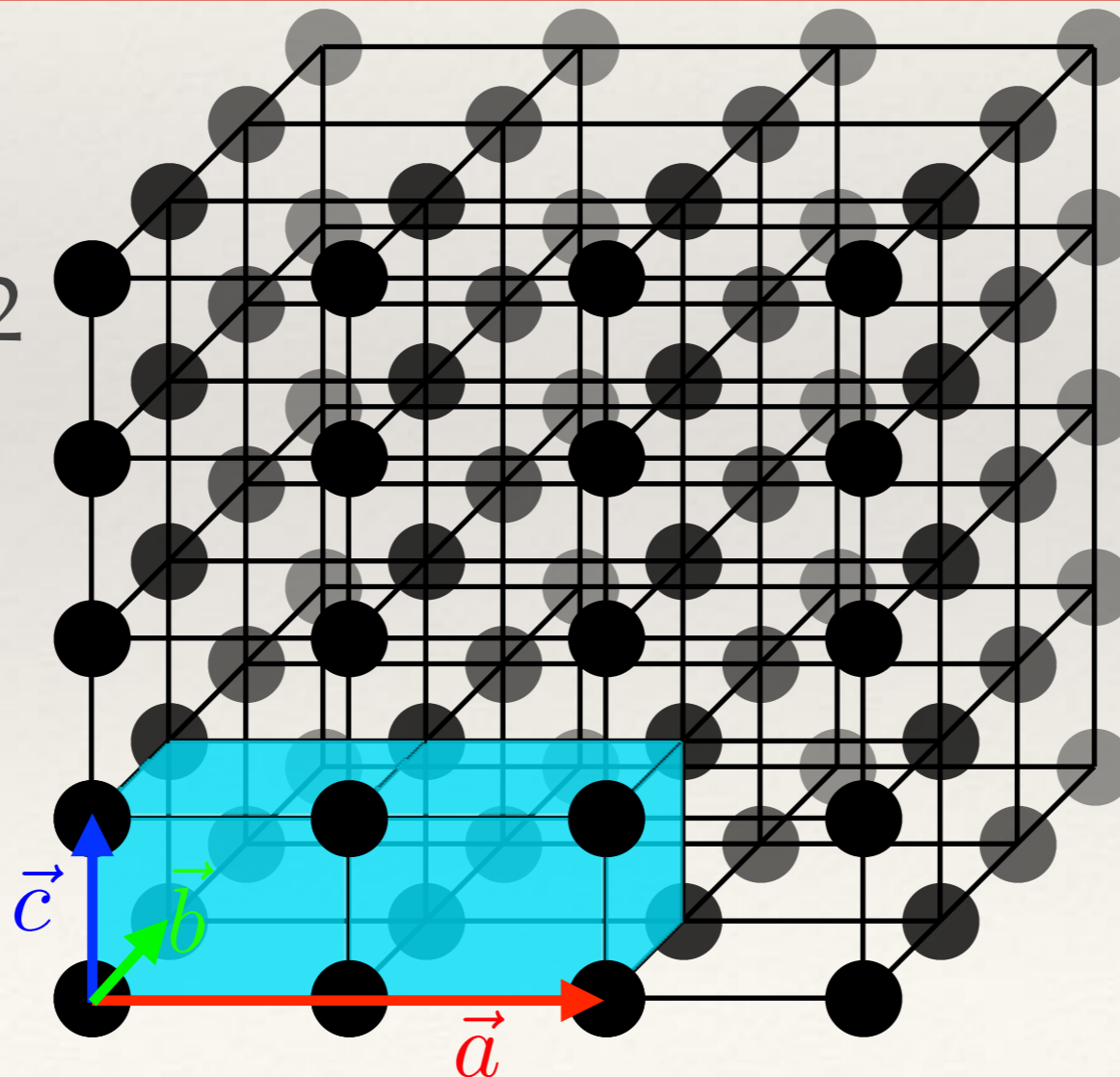
Il existe une infinité de maille primitive, possédant toutes le même volume.



Maille multiple

Définition : Une maille multiple est une maille contenant plusieurs noeuds. Sa multiplicité correspond au nombre de noeuds

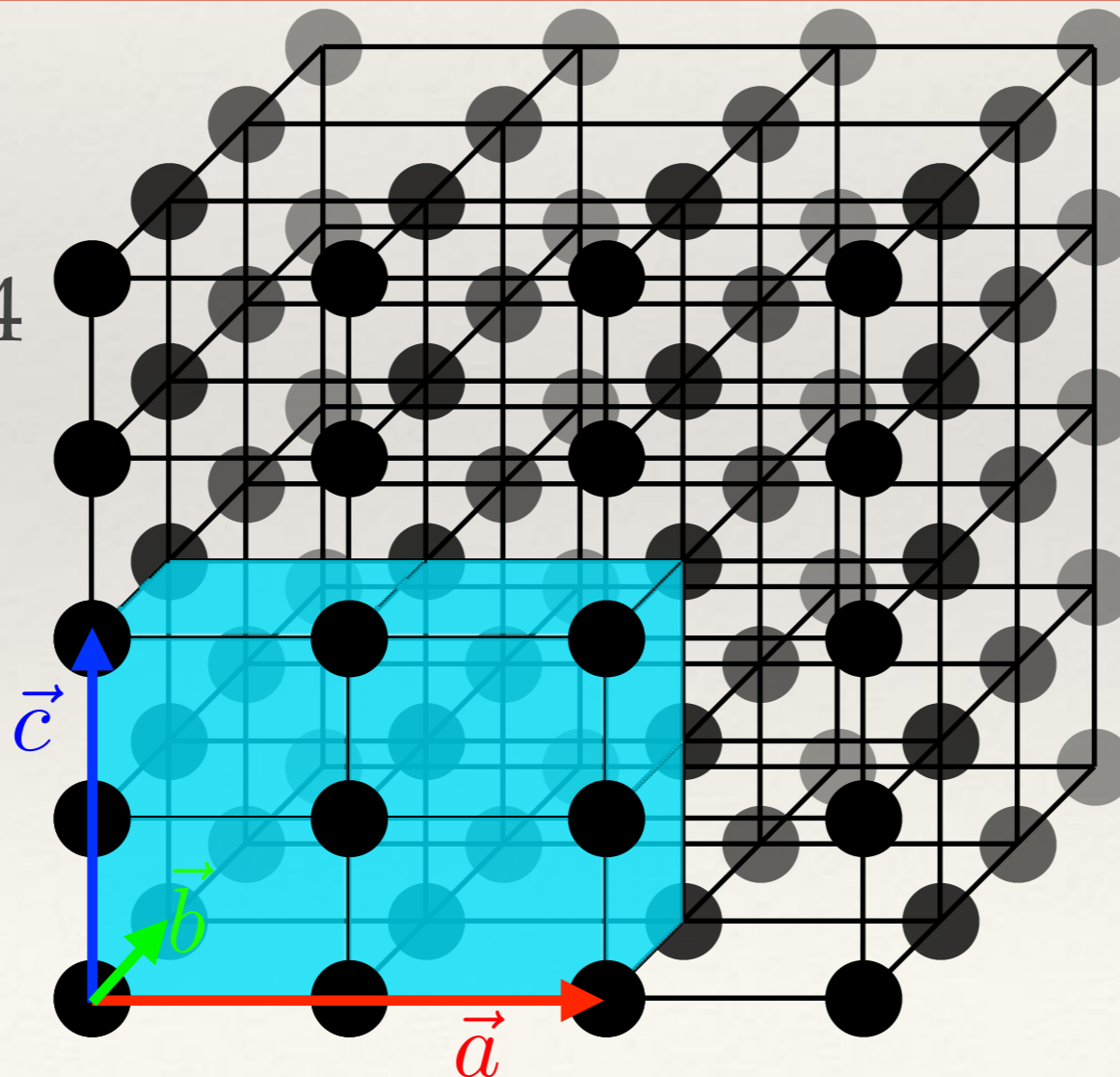
Volume = $2abc$
Multiplicité = 2



Maille multiple

Définition : Une maille multiple est une maille contenant plusieurs noeuds. Sa multiplicité correspond au nombre de noeuds

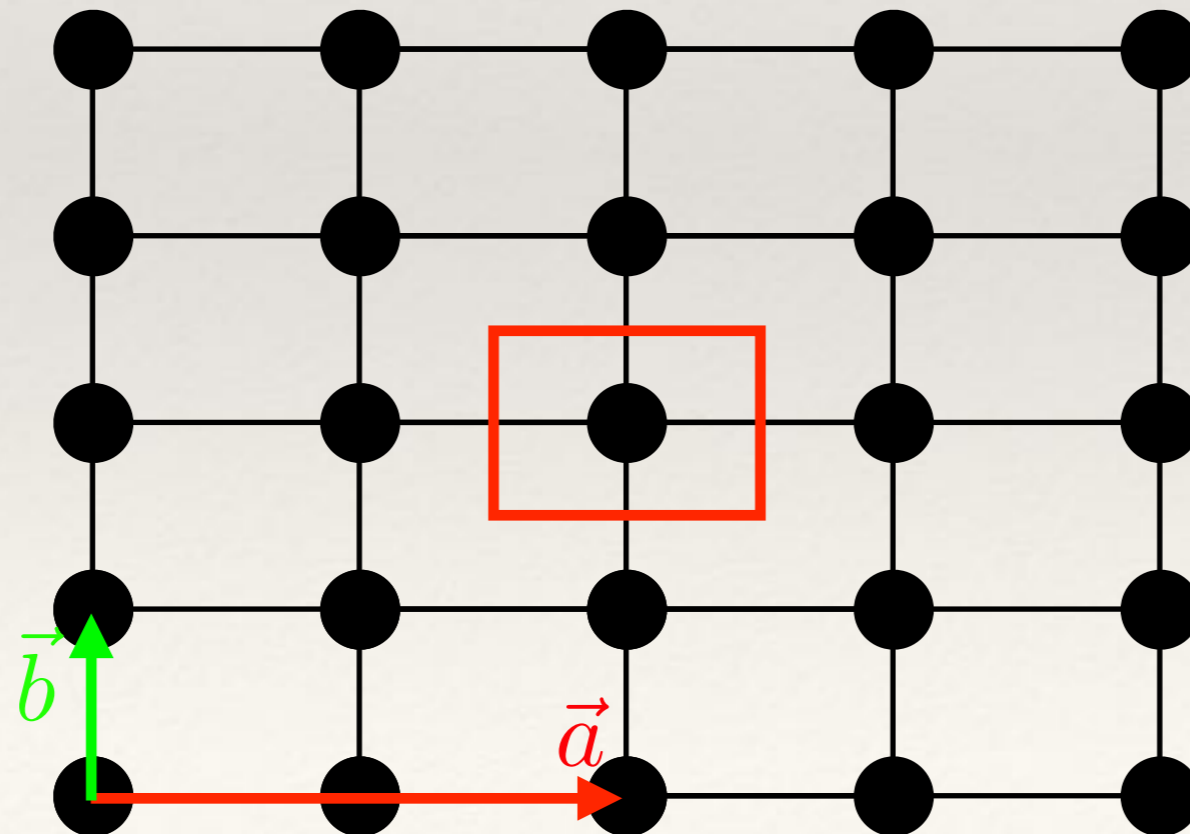
Volume = $4abc$
Multiplicité = 4



Cellule de Wigner-Seitz

Définition : La cellule de Wigner-Seitz est l'ensemble des points plus proche d'un noeud que des noeuds voisins.

La cellule de Wigner-Seitz est primitive : elle a le même volume que la maille primitive, mais n'est pas forcément parallélipédique.

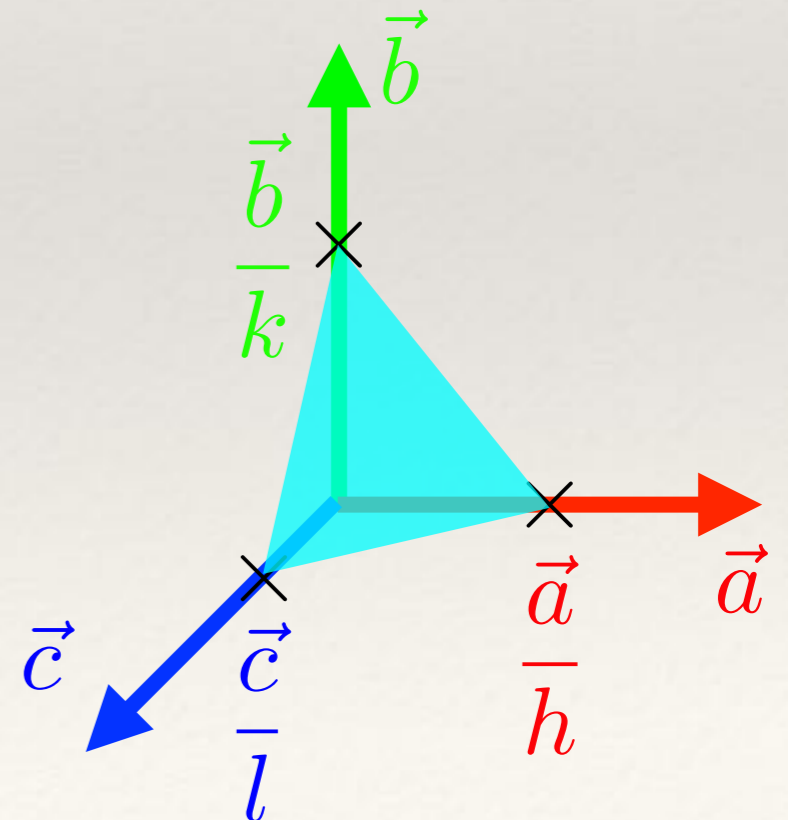


Plans réticulaires

Définition : Une famille de plan réticulaire est une famille de plans contenant tous les noeuds du réseau.

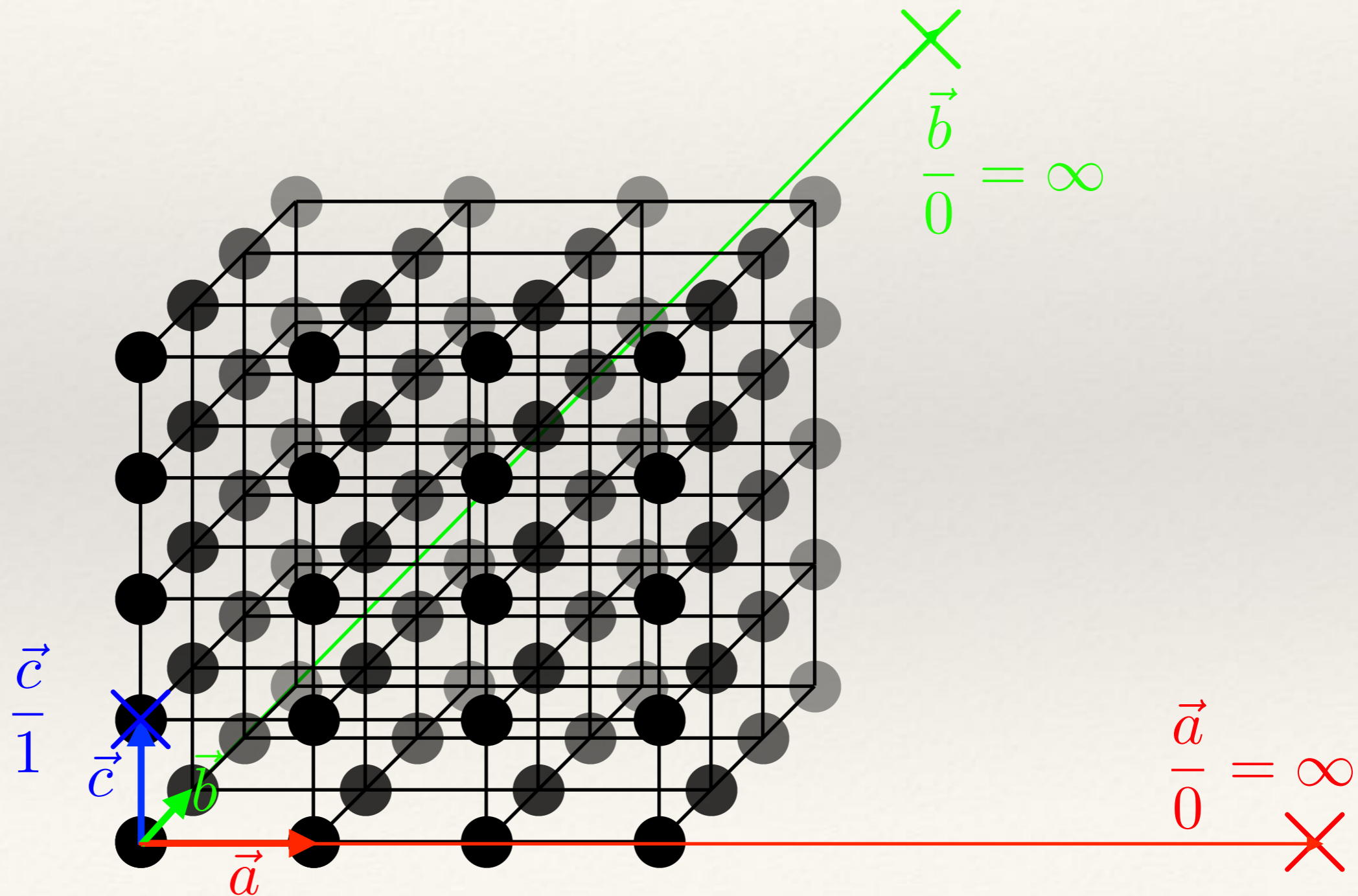
Une famille de plan peut être définie par 3 indices (hkl) appelés indices de Miller correspondant au plan le plus proche de l'origine :

- il coupe \vec{a} en $\frac{\vec{a}}{h}$
- il coupe \vec{b} en $\frac{\vec{b}}{k}$
- il coupe \vec{c} en $\frac{\vec{c}}{l}$



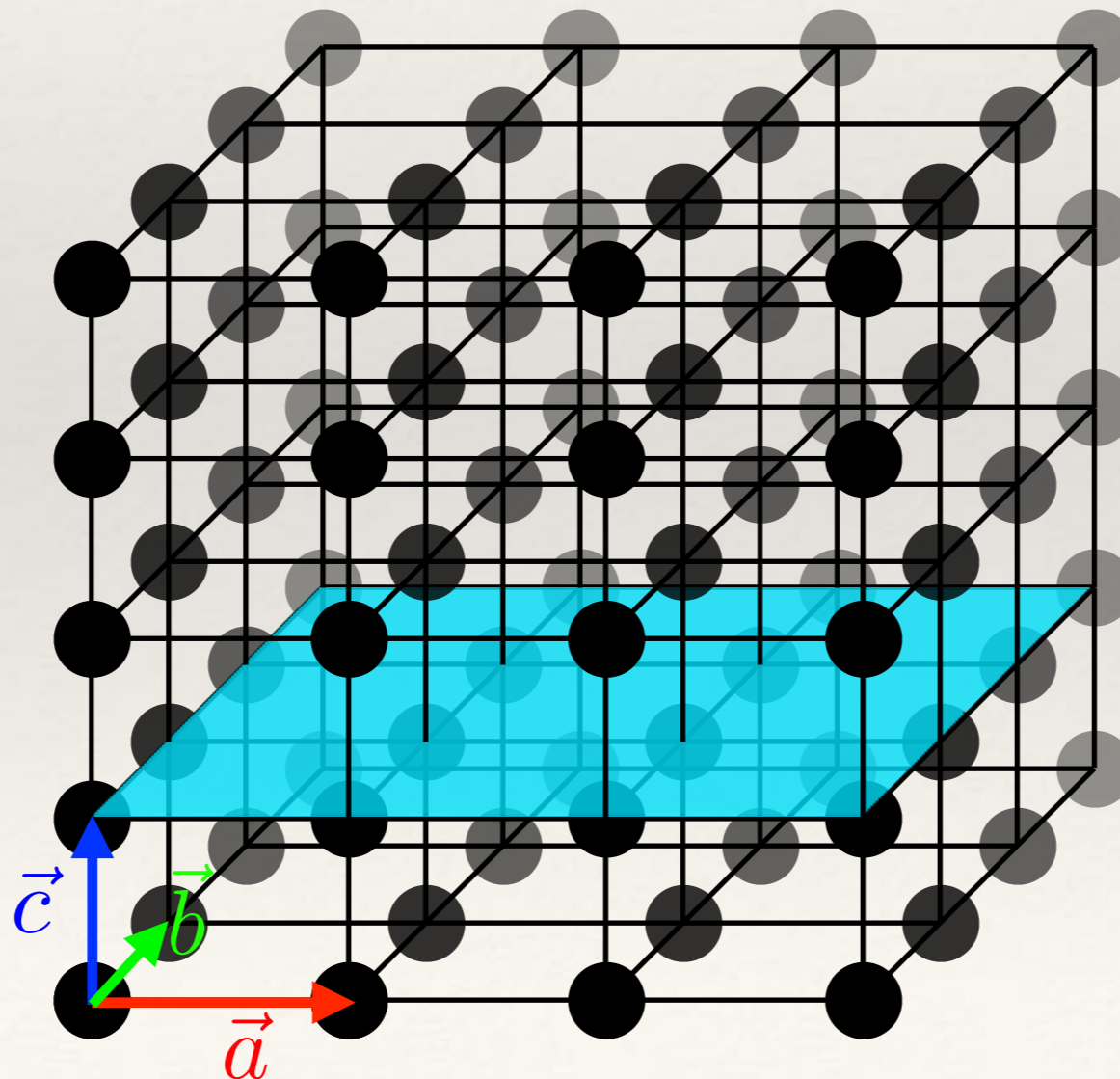
Plans réticulaires

Exemple : famille de plan (0 0 1) : $h=0, k=0, l=1$



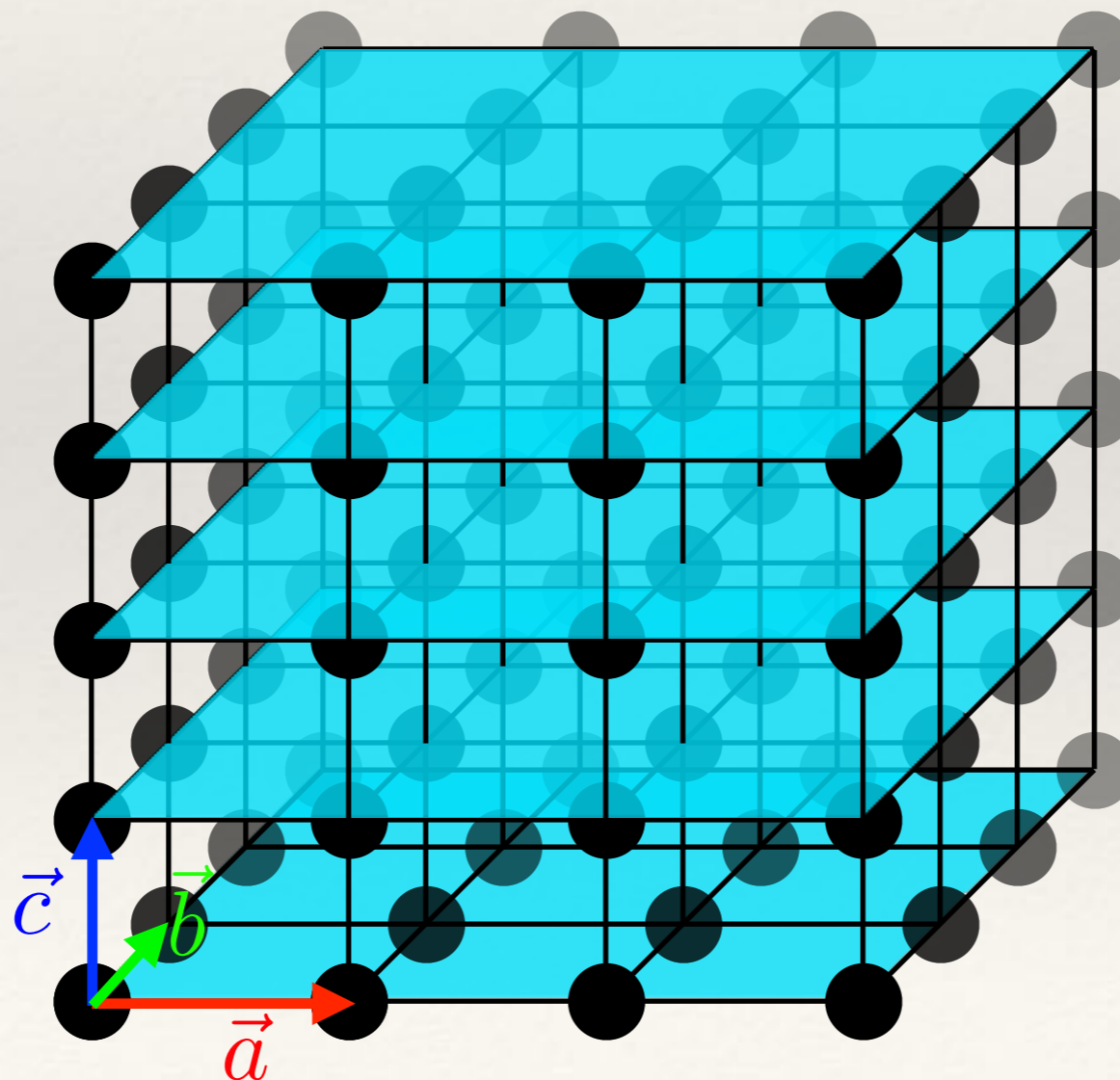
Plans réticulaires

Exemple : famille de plan (0 0 1)



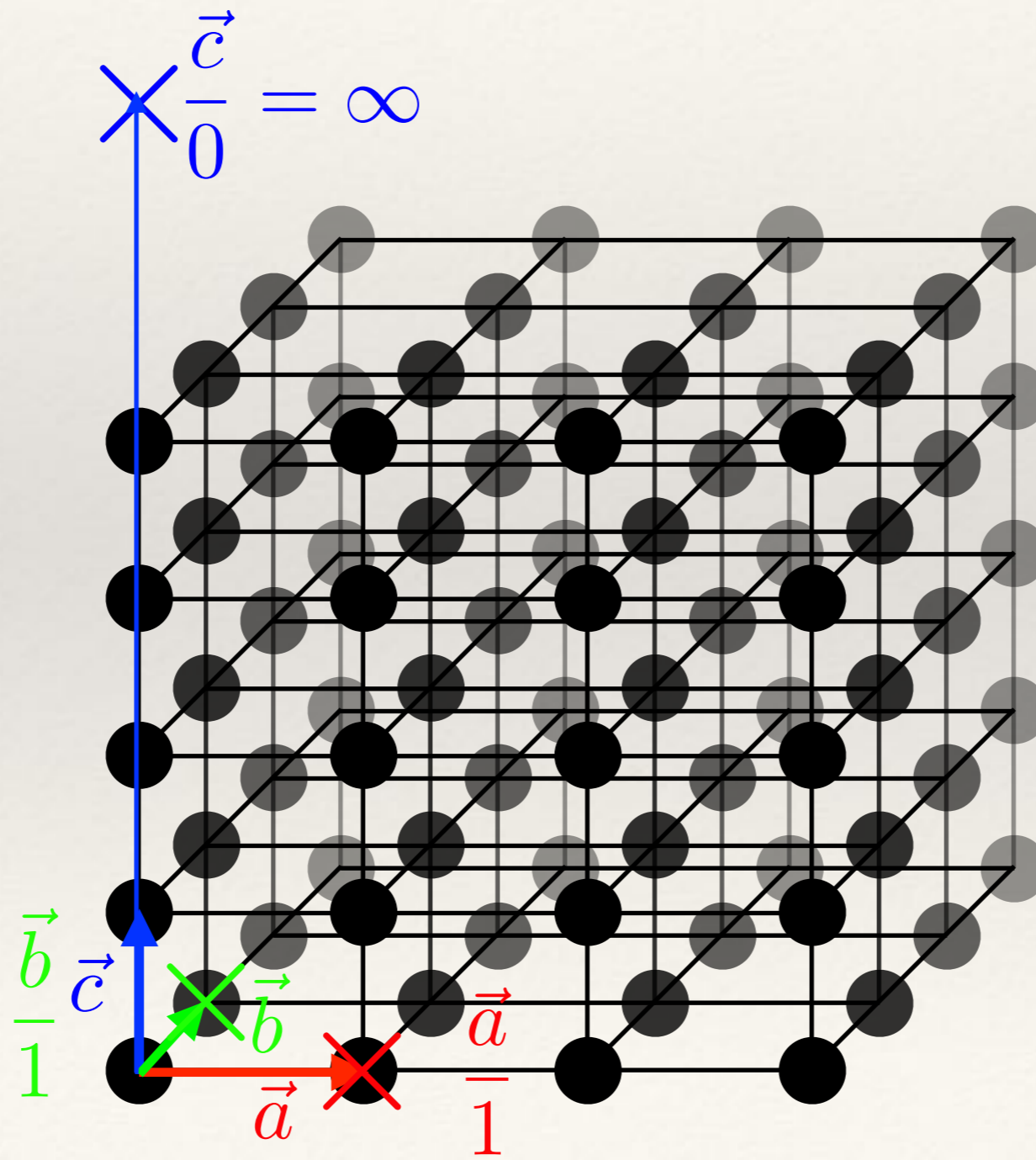
Plans réticulaires

Exemple : famille de plan (0 0 1)



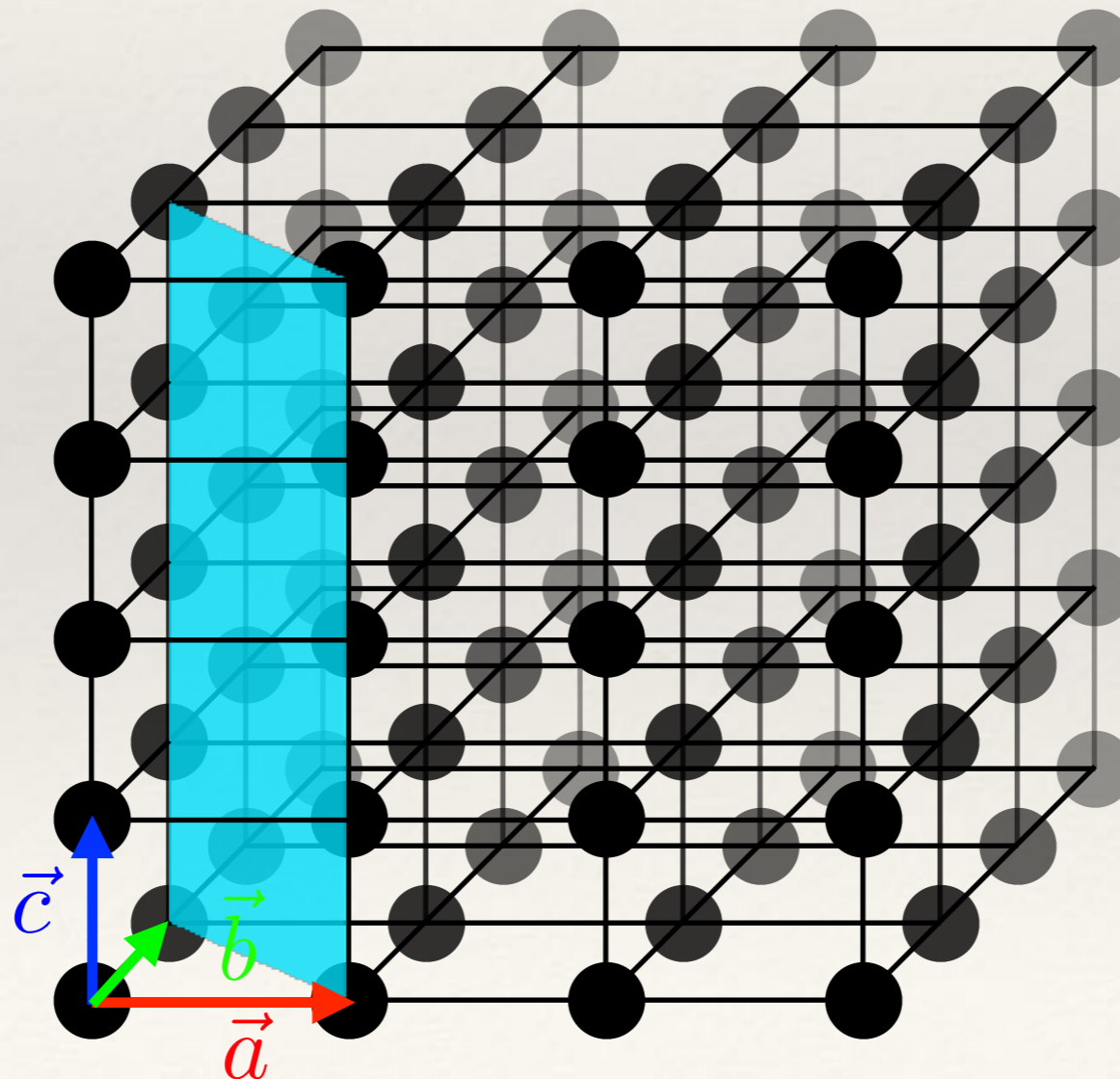
Plans réticulaires

Exemple : famille de plan (1 1 0) : $h=1, k=1, l=0$



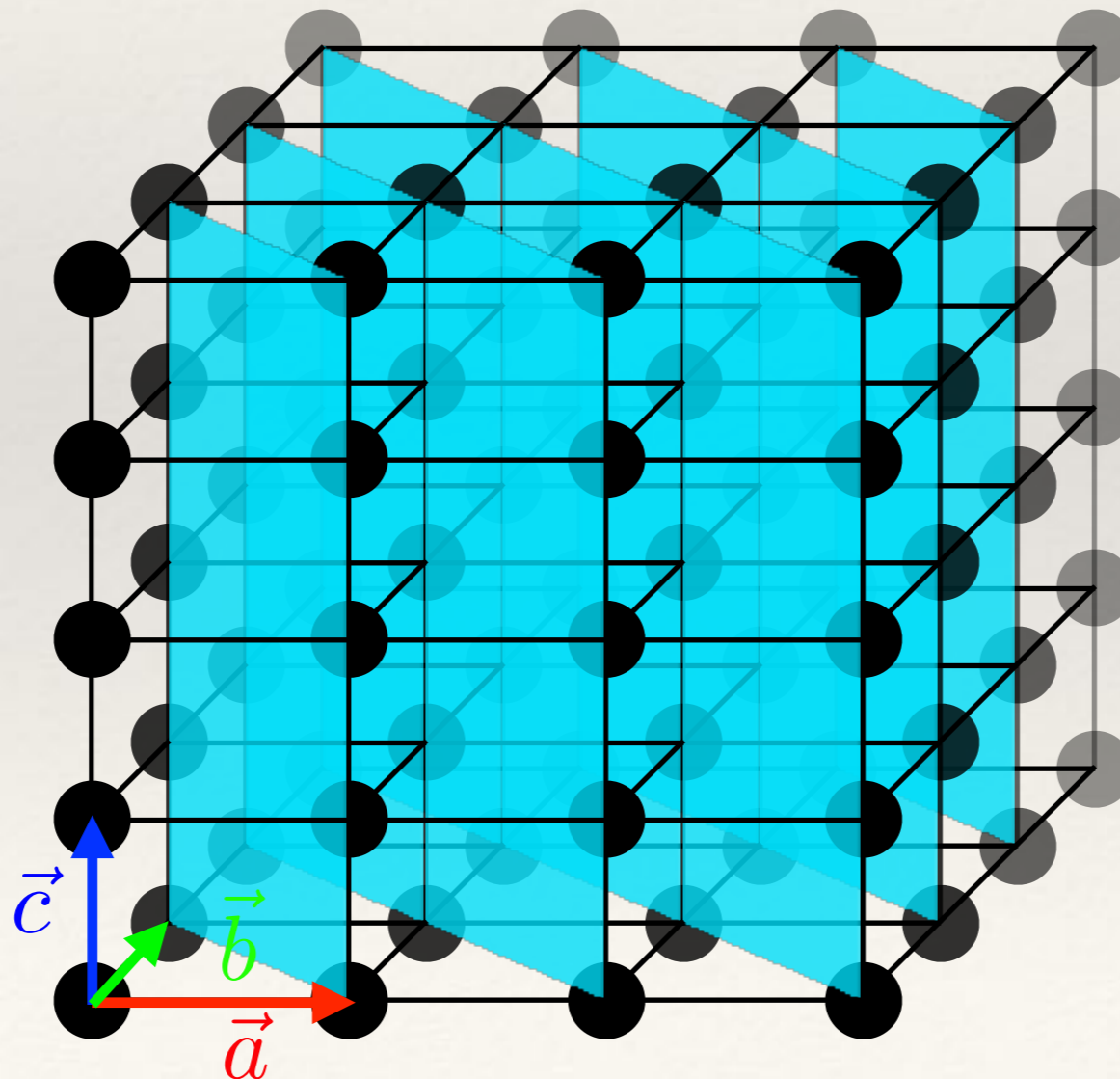
Plans réticulaires

Exemple : famille de plan (1 1 0) : $h=1, k=1, l=0$



Plans réticulaires

Exemple : famille de plan (1 1 0) : $h=1, k=1, l=0$

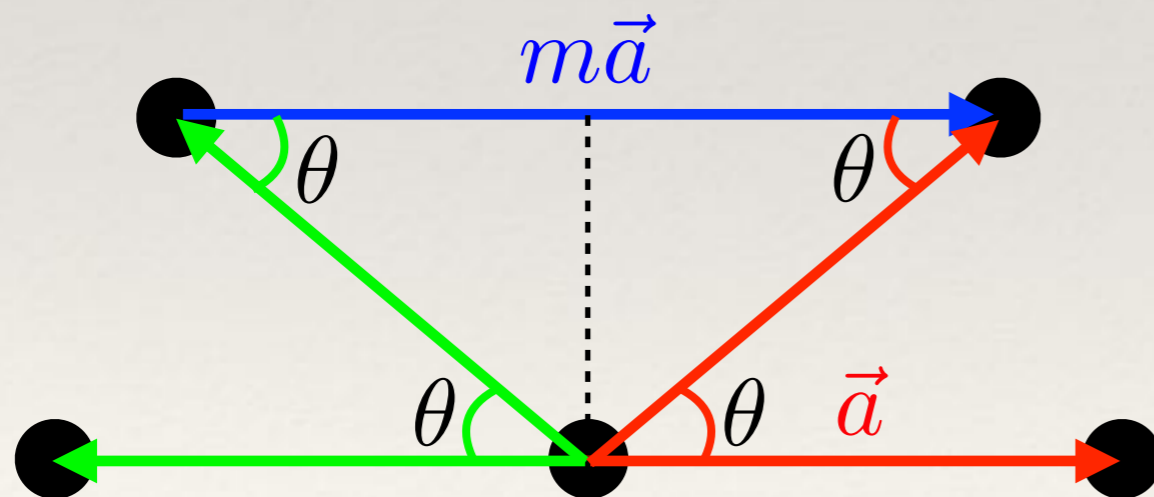


Symétrie et réseau

Le réseau possède des symétrie d'orientation : il a des directions équivalentes.

Toutes les symétries ne sont pas autorisées : seules les rotations (roto-inversions) d'ordre 1,2,3,4 et 6 sont possibles.

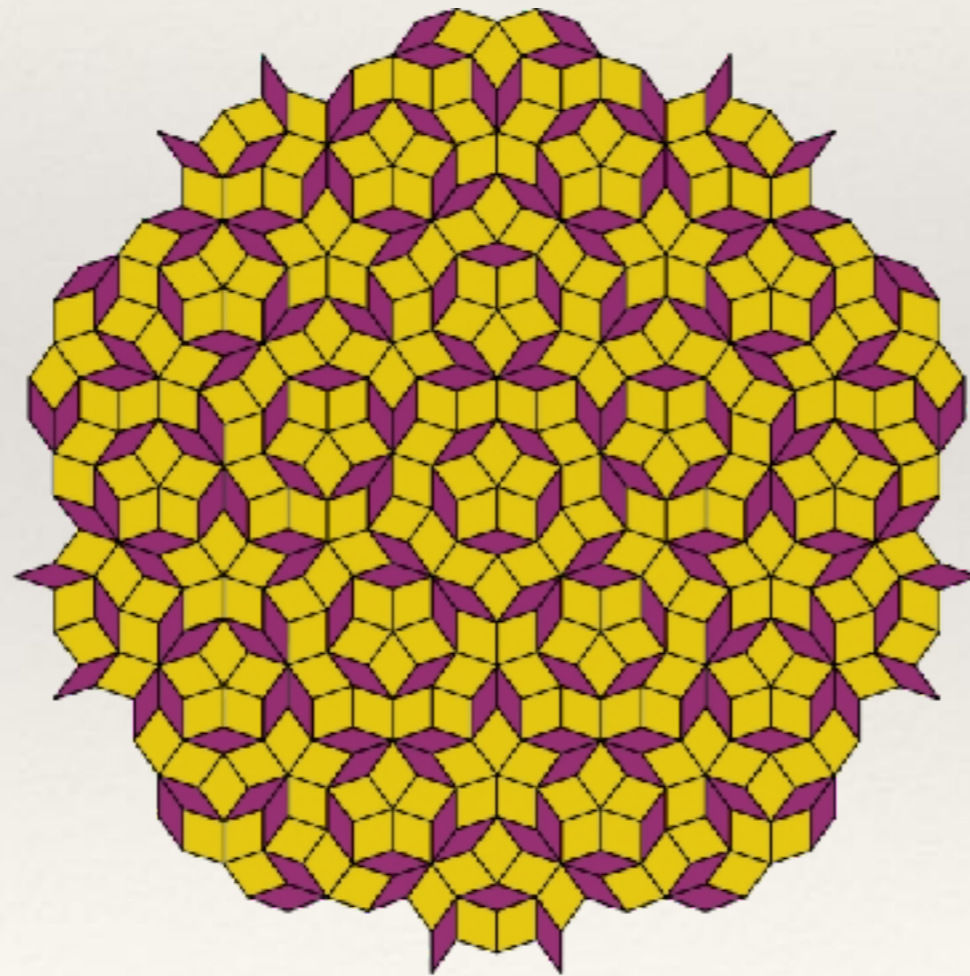
$$\cos(\theta) = \frac{\frac{1}{2}ma}{a} = \frac{m}{2}$$



m	-2	-1	0	1	2
cos(θ)	-1	-1/2	0	1/2	1
θ	π	2π/3	π/2	π/3	2π
n	2	3	4	6	1

Symétrie et réseau

Il est possible de trouver des objets avec une symétrie d'orientation d'ordre 5, mais ils ne peuvent former un réseau.



Classe de symétrie et de Laüe

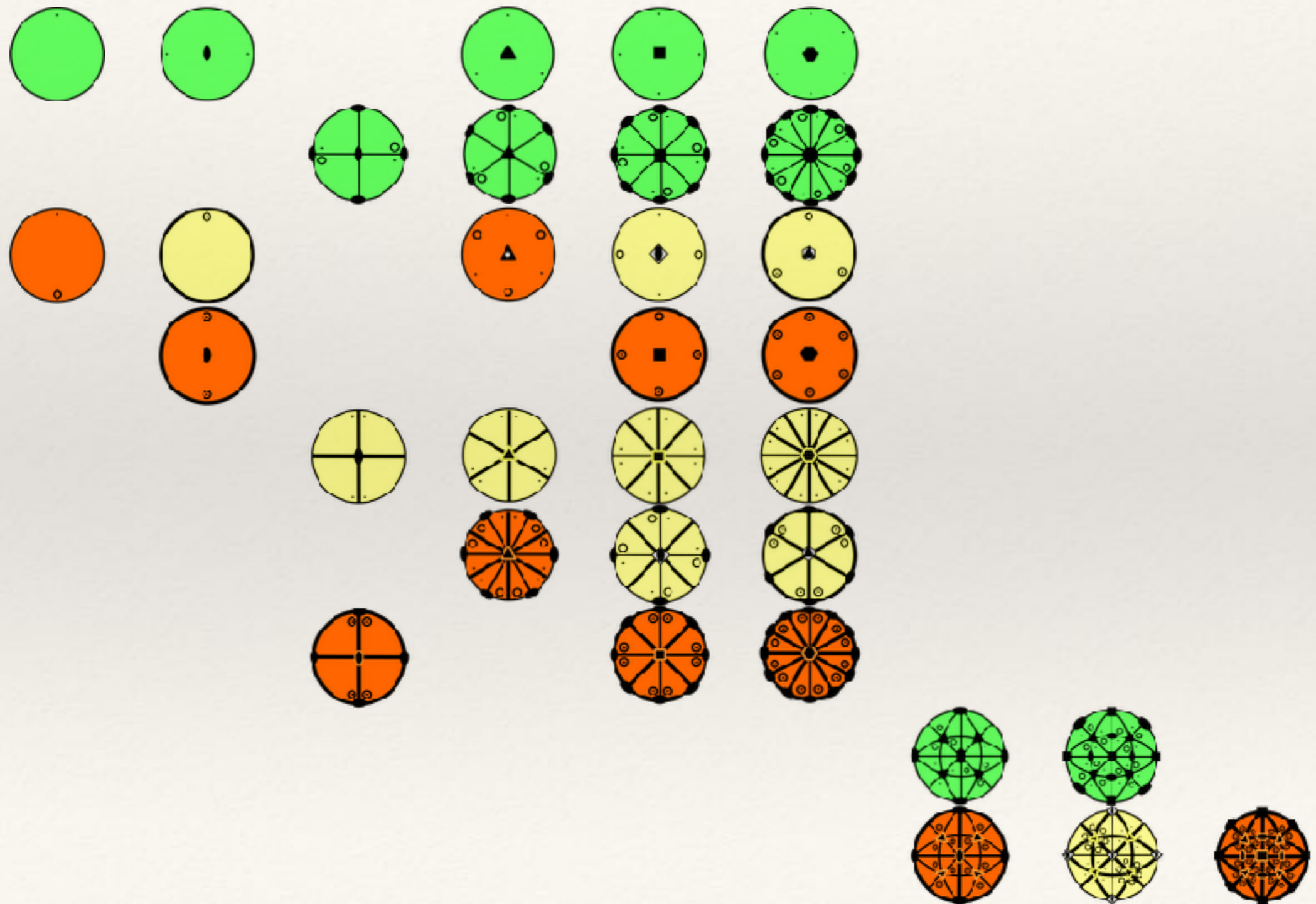
Définition : Une classe de symétrie est un groupe ponctuel compatible avec un réseau (contenant uniquement des axes d'ordre 1,2,3,4 ou 6). Il en existe 32.

Définition : Les classes de Laüe sont les classes possédant un centre d'inversion.

Classe de symétrie et de Laue

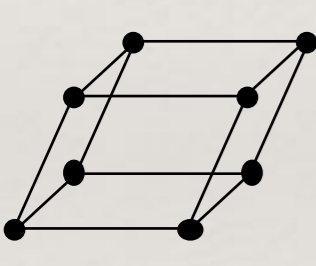
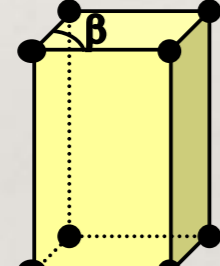
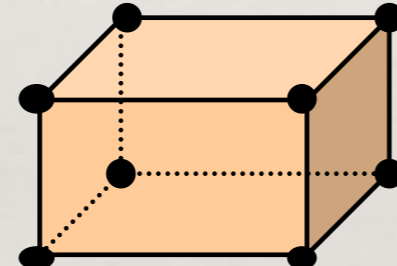
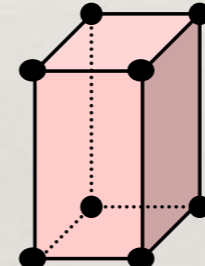
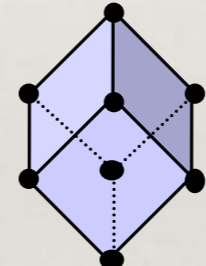
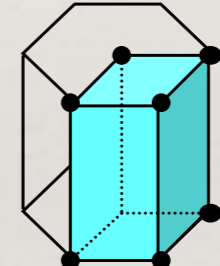
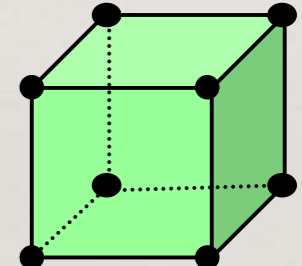
1	2		3	4	6		
		222	32	422	622		
$\bar{1}$	$\bar{2}$		$\bar{3}$	$\bar{4}$	$\bar{6}$		
	$\frac{2}{m}$			$\frac{4}{m}$	$\frac{6}{m}$		
		$2mm$	$3m$	$4mm$	$6mm$		
			$\bar{3}m$	$\bar{4}2m$	$\bar{6}2m$		
		mmm		$\frac{4}{m}mm$	$\frac{6}{m}mm$		
						23	432
						$\bar{4}3m$	$m\bar{3}$ $m\bar{3}m$

Classe de symétrie et de Laue



Systemes cristallins

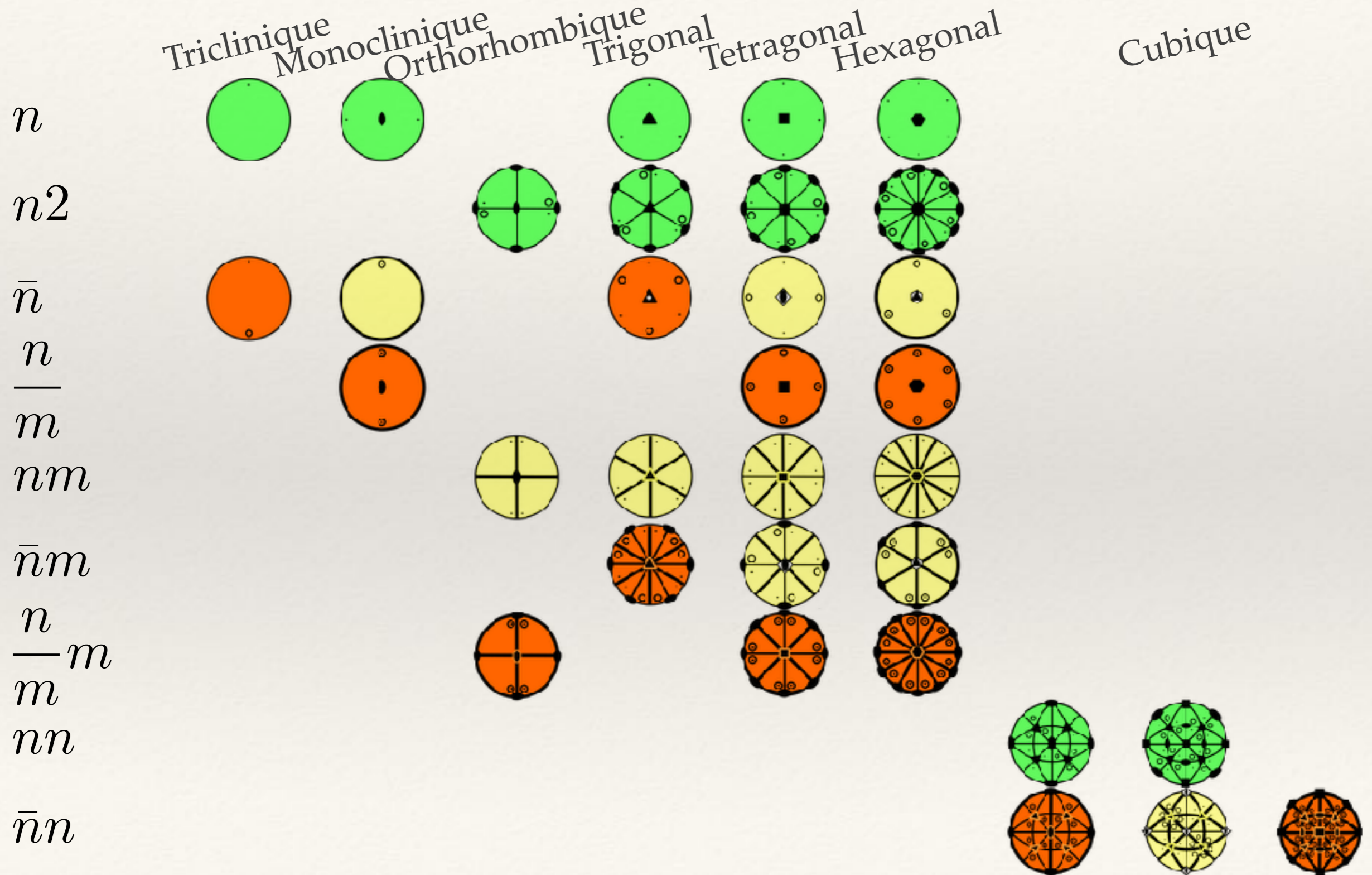
Définition : On classe tous les groupes ponctuels en 7 systemes cristallins : triclinique, monoclinique, orthorhombique, trigonal, tetragonal, hexagonal et cubique.

Triclinique	Monoclinique	Orthorhombique	Tetragonal	Trigonal	Hexagonal	Cubique
						
$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ$ $\beta \neq 90^\circ$	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma$	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Systemes cristallins

	Triclinique	Monoclinique	Orthorhombique	Trigonal	Tetragonal	Hexagonal	Cubique
n	1	2		3	4	6	
$n2$			222	32	422	622	
\bar{n}	$\bar{1}$	$\bar{2}$		$\bar{3}$	$\bar{4}$	$\bar{6}$	
$\frac{n}{m}$		$\frac{2}{m}$			$\frac{4}{m}$	$\frac{6}{m}$	
nm			$2mm$	$3m$	$4mm$	$6mm$	
$\bar{n}m$				$\bar{3}m$	$\bar{4}2m$	$\bar{6}2m$	
$\frac{n}{m}m$			mmm		$\frac{4}{m}mm$	$\frac{6}{m}mm$	
nn							23 432
$\bar{n}n$							$\bar{4}3m$ $m\bar{3}$ $m\bar{3}m$

Systemes cristallins



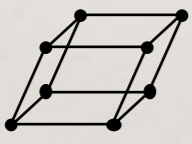
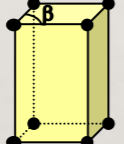
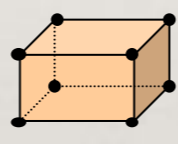
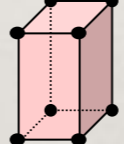
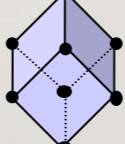
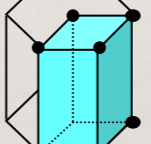
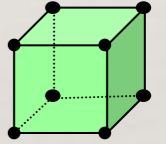
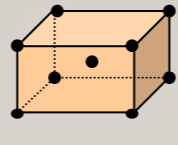
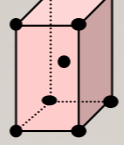
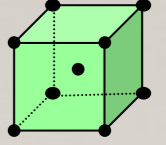
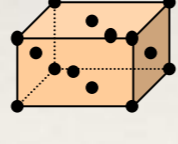
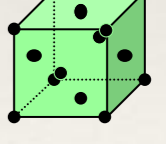
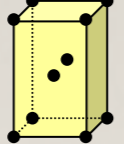
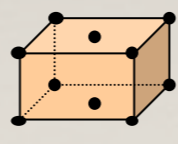
Mailles multiples conventionnelles

Définition : Lorsque la maille primitive ne reflète pas la symétrie apparente du réseau, on choisit alors une maille multiple. Il en existe de 3 types (appelé **modes**) :

- Centré, noté I, possédant 1 noeud supplémentaire au centre de la maille.
- Faces centrées, noté F, possédant 3 noeuds supplémentaire sur chaque face de la maille.
- Face centrée, noté A, B ou C, possédant 1 noeud sur la face de la maille perpendiculaire à \vec{a} , \vec{b} ou \vec{c} .

Réseaux de Bravais

Définition : Les réseaux de Bravais sont formés à partir des 7 systèmes cristallins auxquels on associe les mailles multiples conventionnelles. Il en existe 14.

Mode	Triclinique	Monoclinique	Orthorhombique	Tetragonal	Trigonal	Hexagonal	Cubique
P							
I							
F							
C							

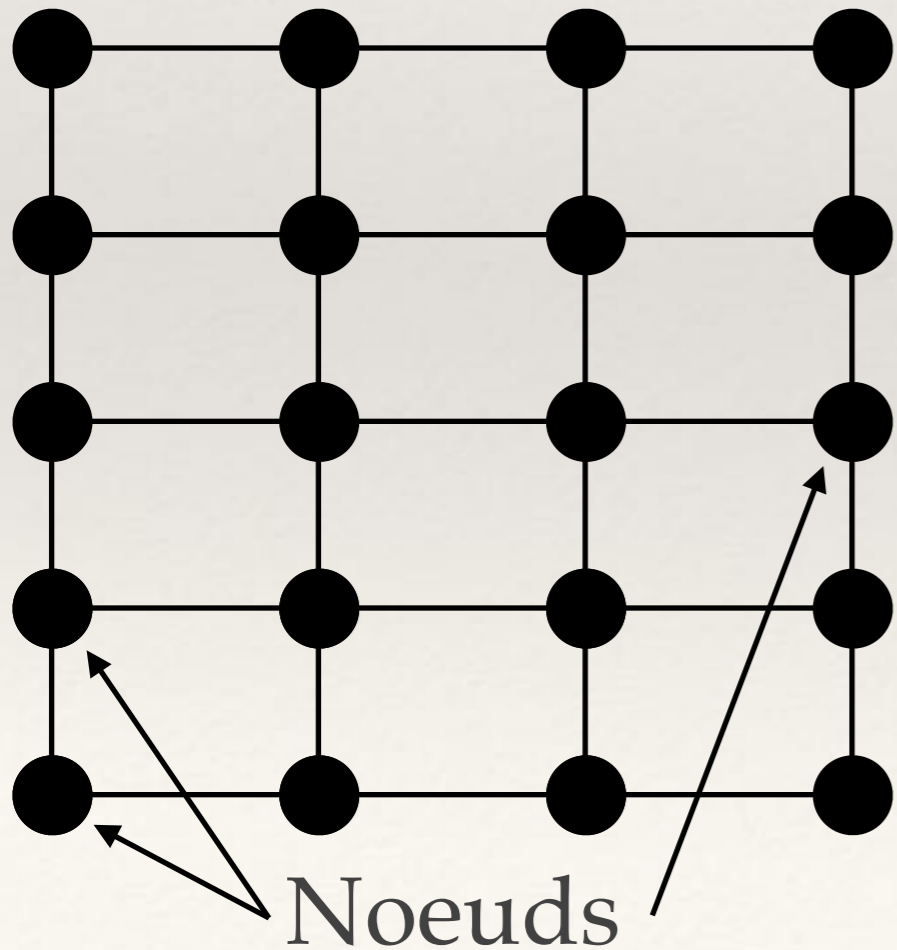
Cristal : réseau et motif

Définition : Le motif est l'ensemble des atomes attachés à chacun des noeuds du réseau.

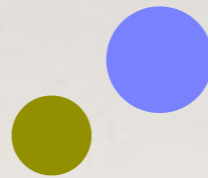
Cristal : réseau et motif

Définition : Le motif est l'ensemble des atomes attachés à chacun des noeuds du réseau.

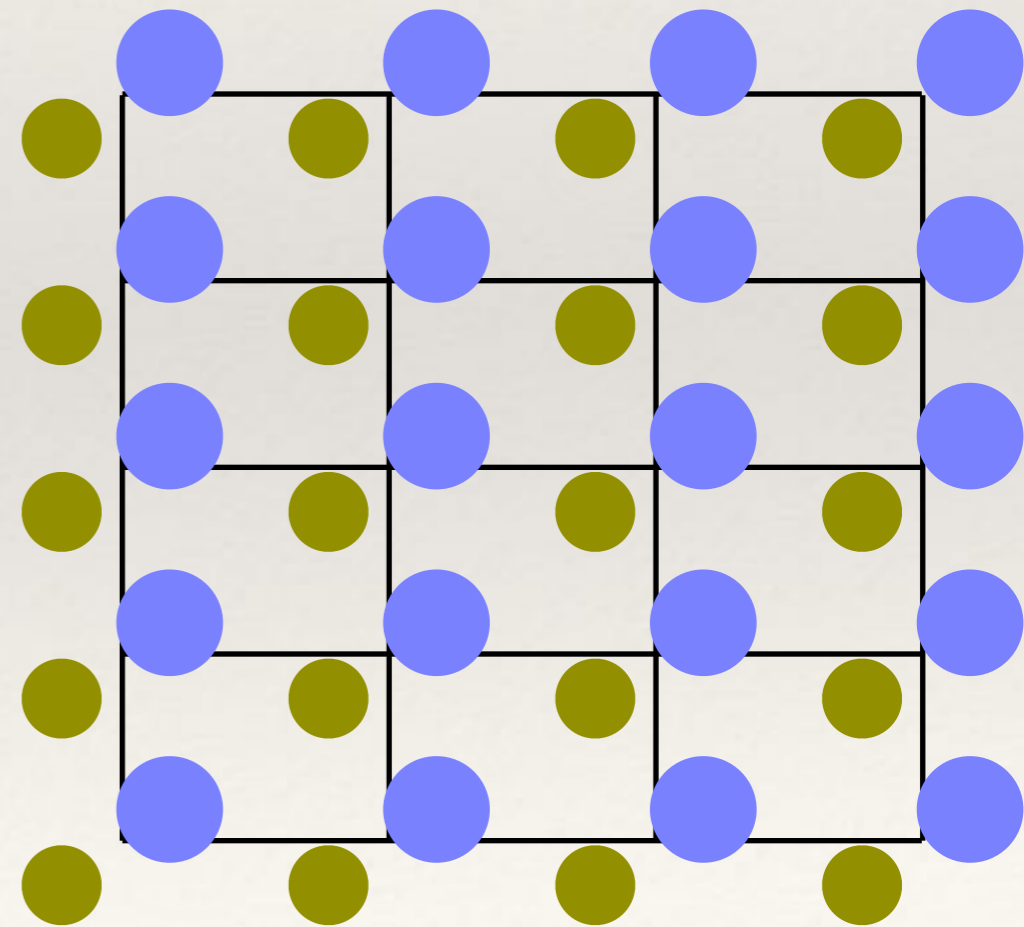
Réseau



Motif



Cristal



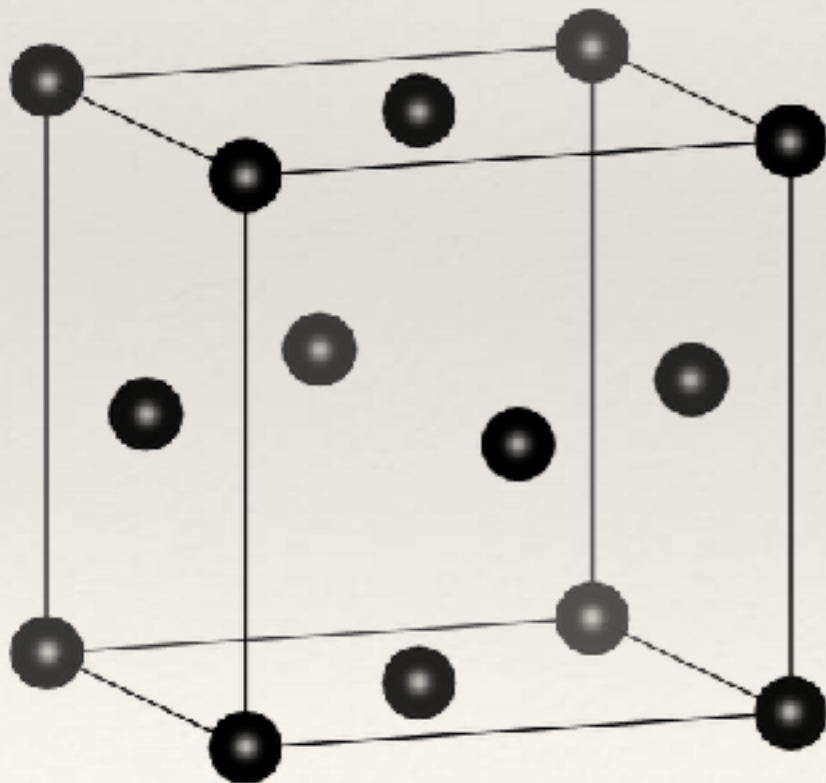
Cristal : réseau et motif

Définition : Le motif est l'ensemble des atomes attachés à chacun des noeuds du réseau.

Cristal : réseau et motif

Définition : Le motif est l'ensemble des atomes attachés à chacun des noeuds du réseau.

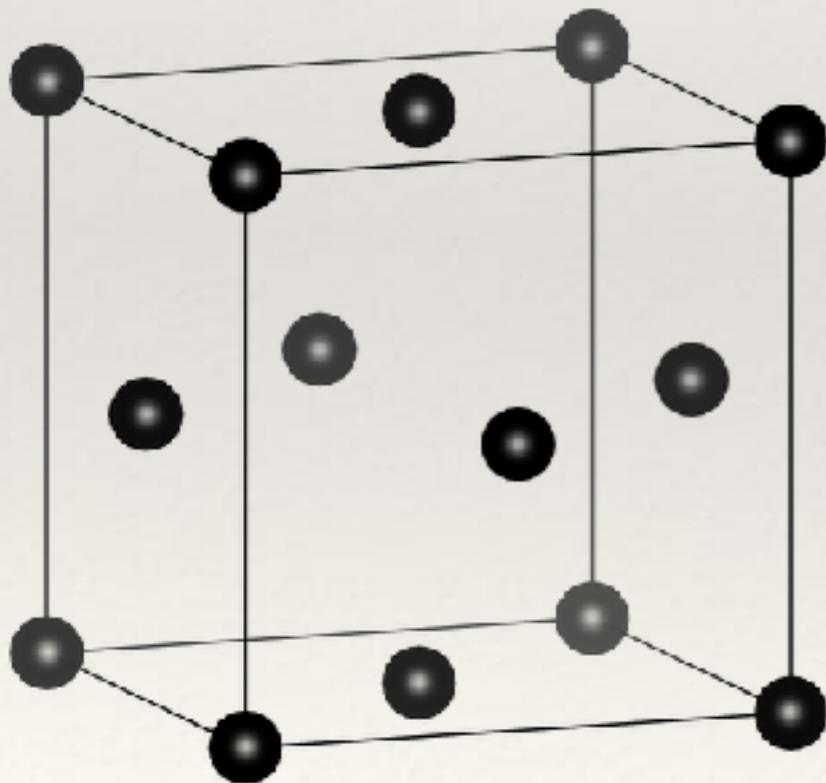
Réseau



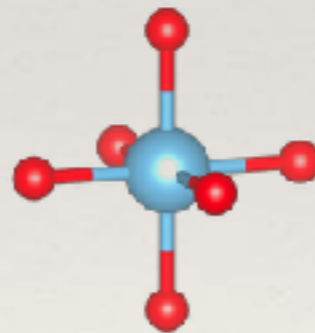
Cristal : réseau et motif

Définition : Le motif est l'ensemble des atomes attachés à chacun des noeuds du réseau.

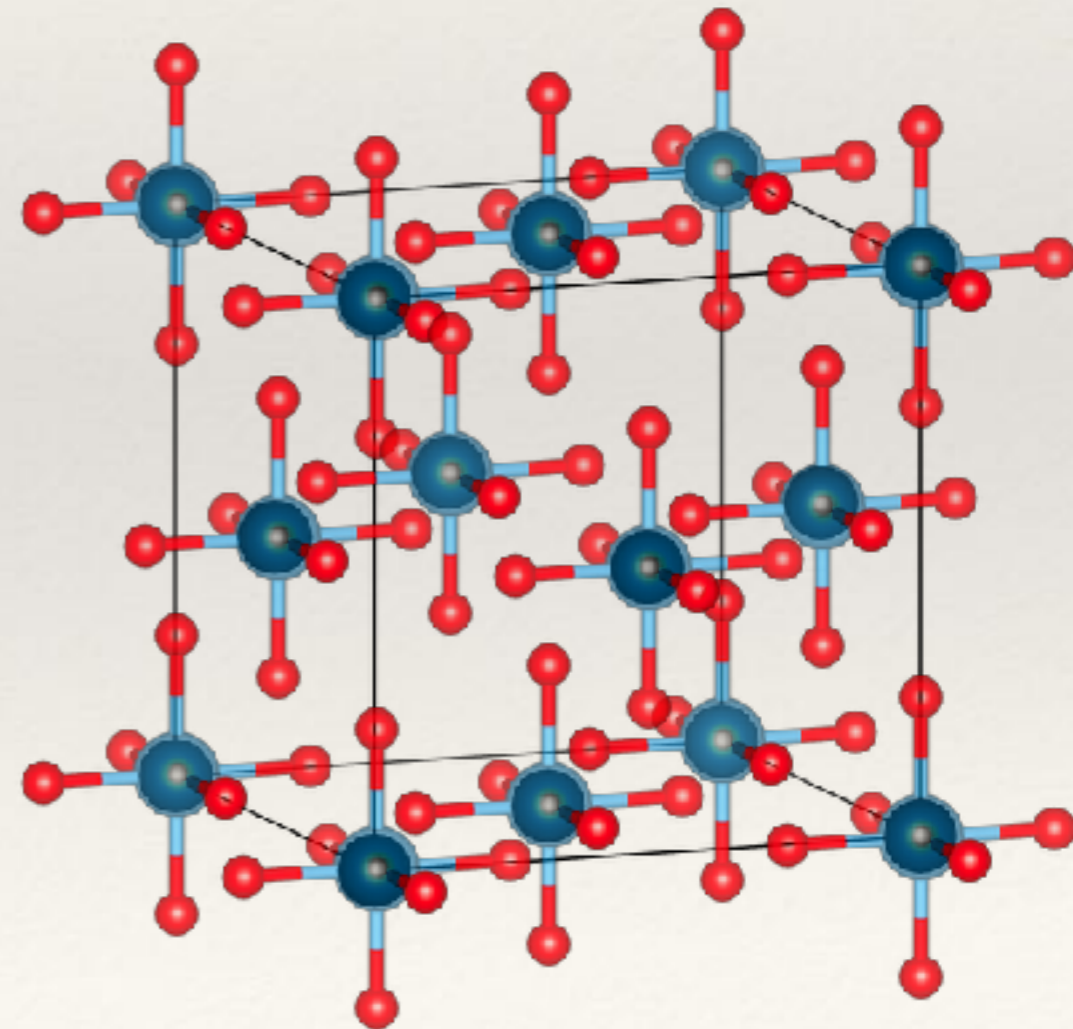
Réseau



Motif



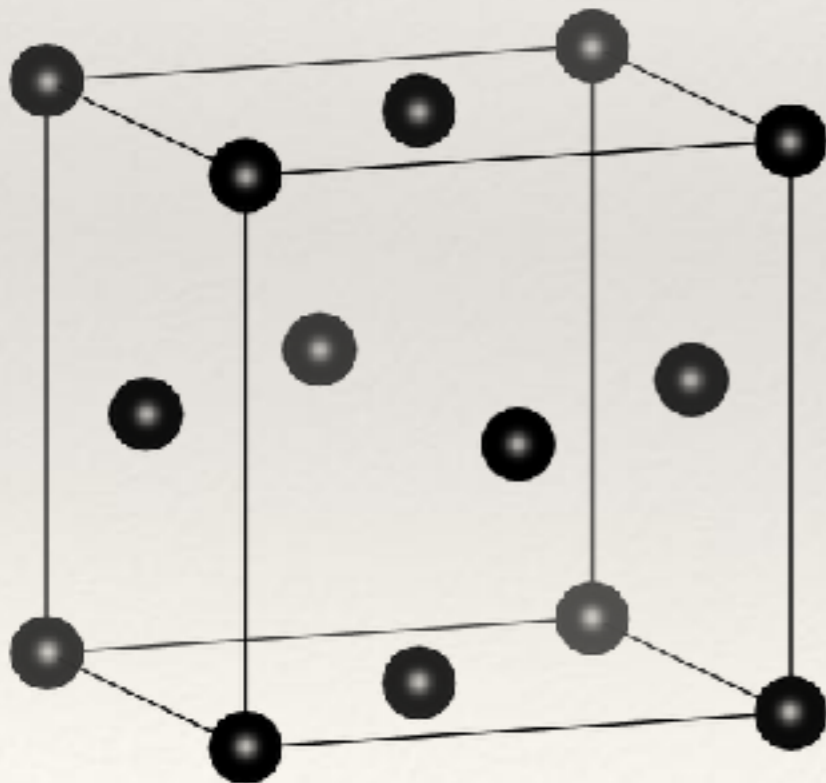
Cristal



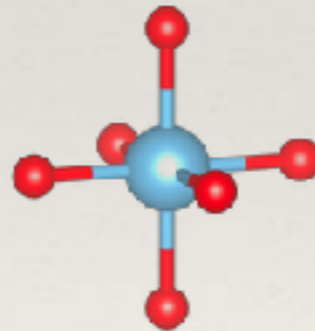
Cristal : réseau et motif

Définition : Le motif est l'ensemble des atomes attachés à chacun des noeuds du réseau.

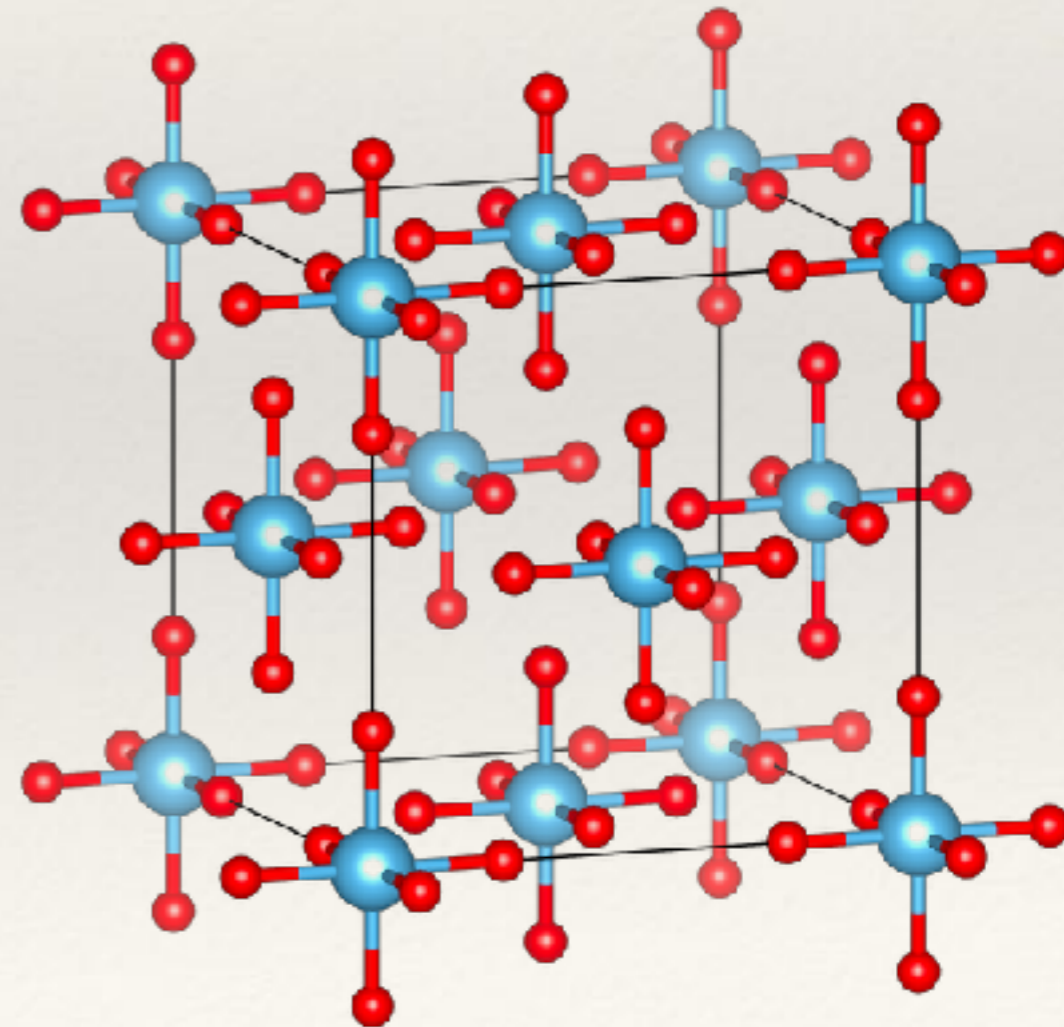
Réseau



Motif

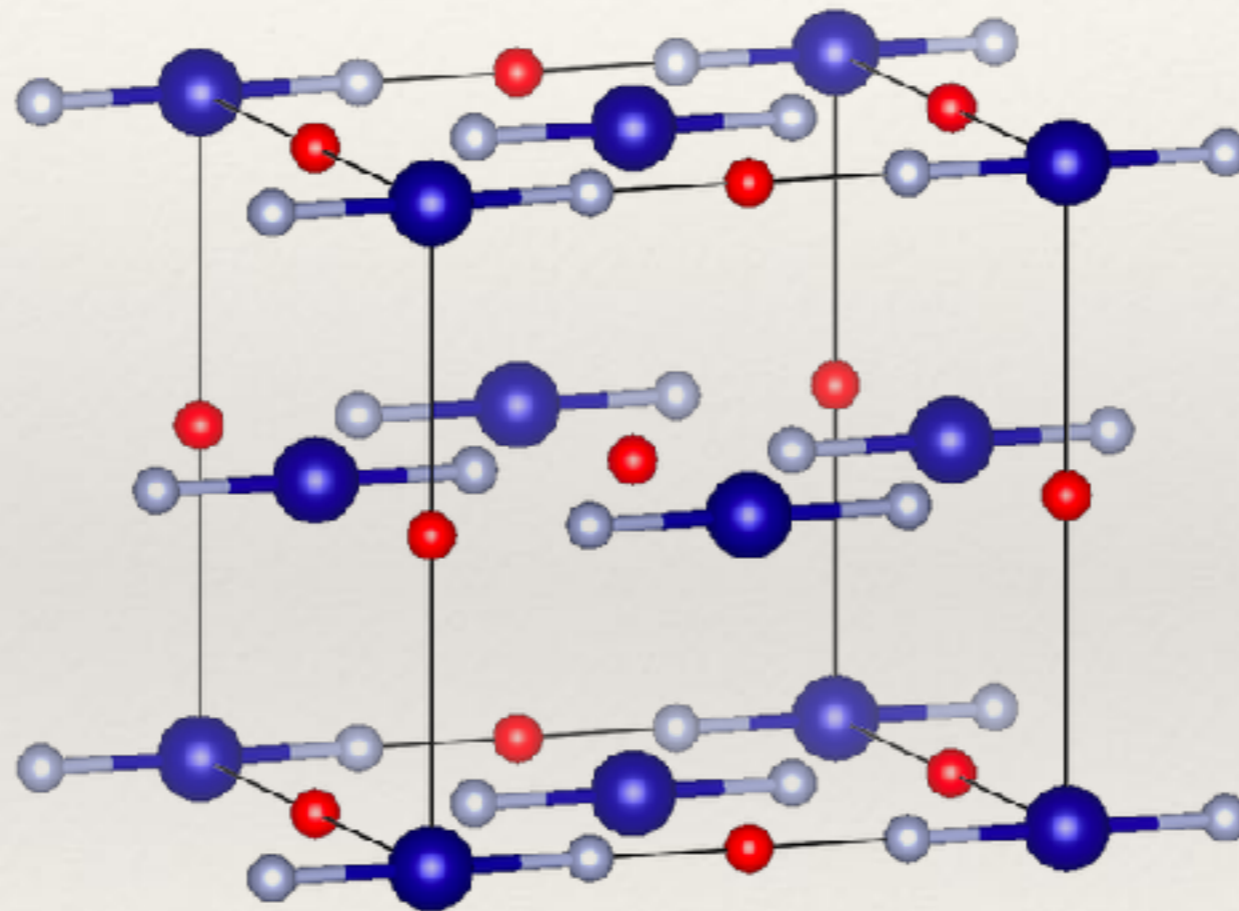


Cristal



Trouver le motif

Exemple d'un cubique face centré (F)

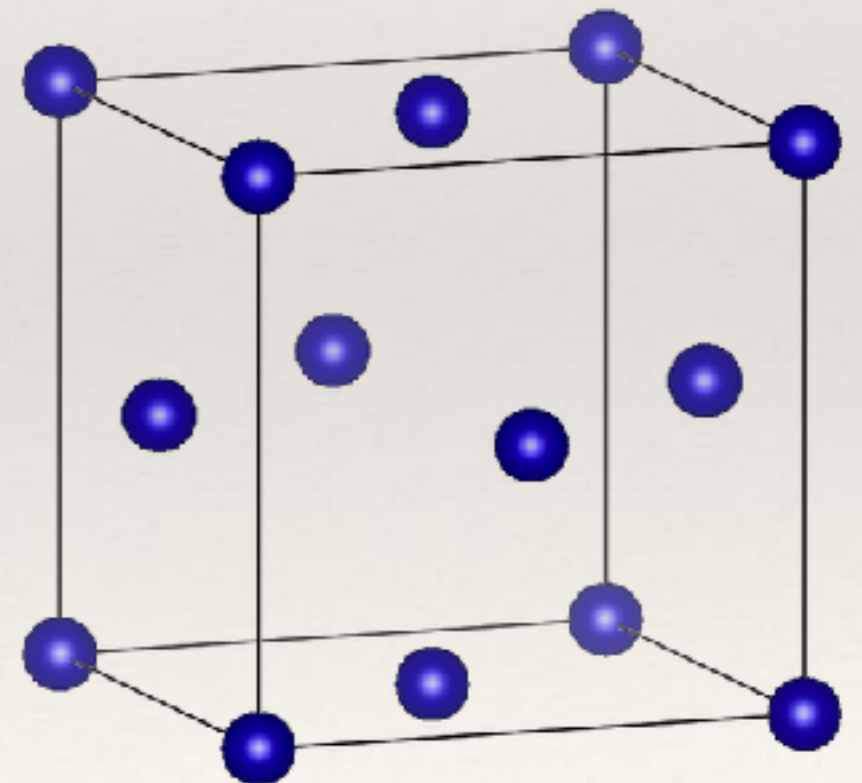
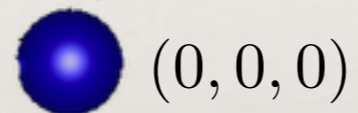
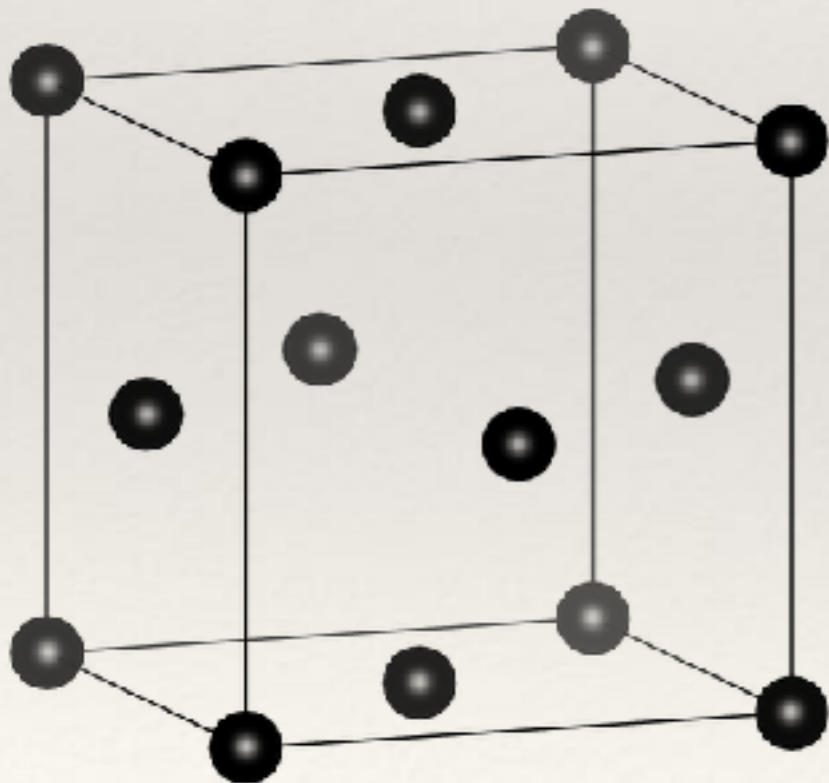


Trouver le motif

Réseau : mode F

Motif

Maille

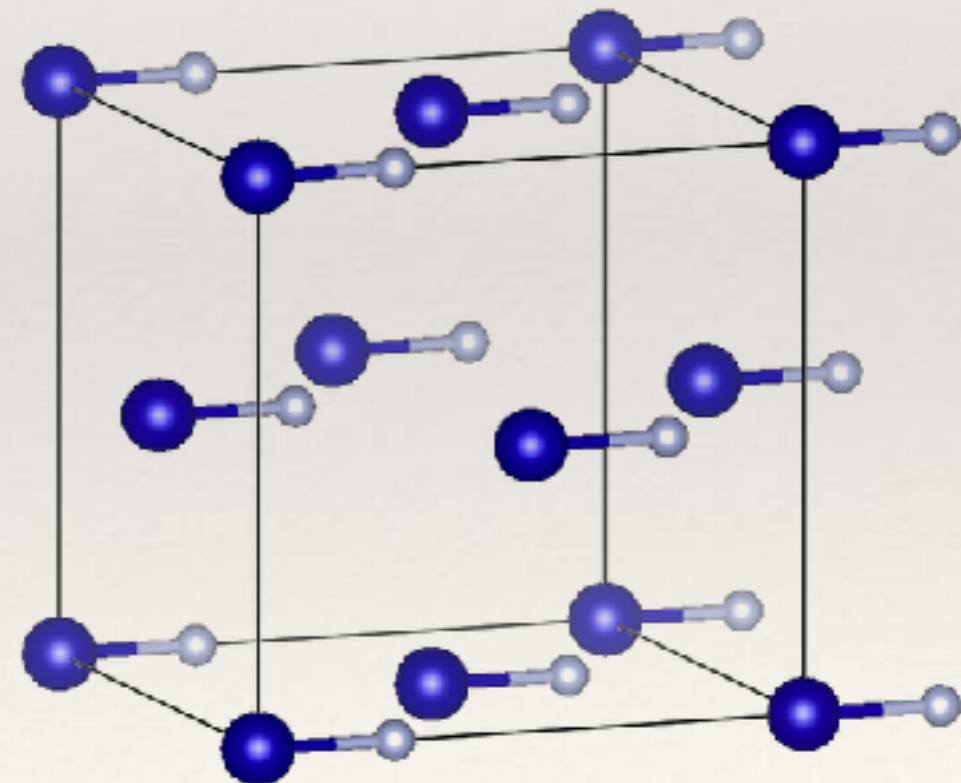
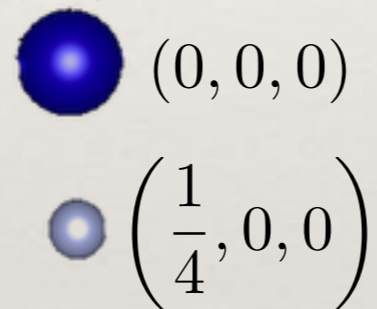
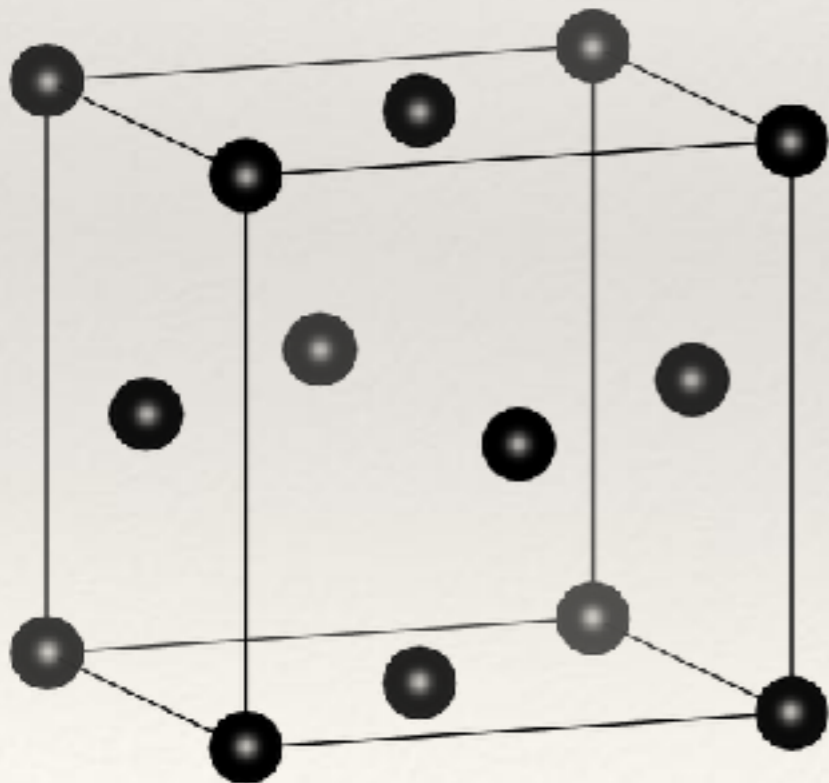


Trouver le motif

Réseau : mode F

Motif

Maille

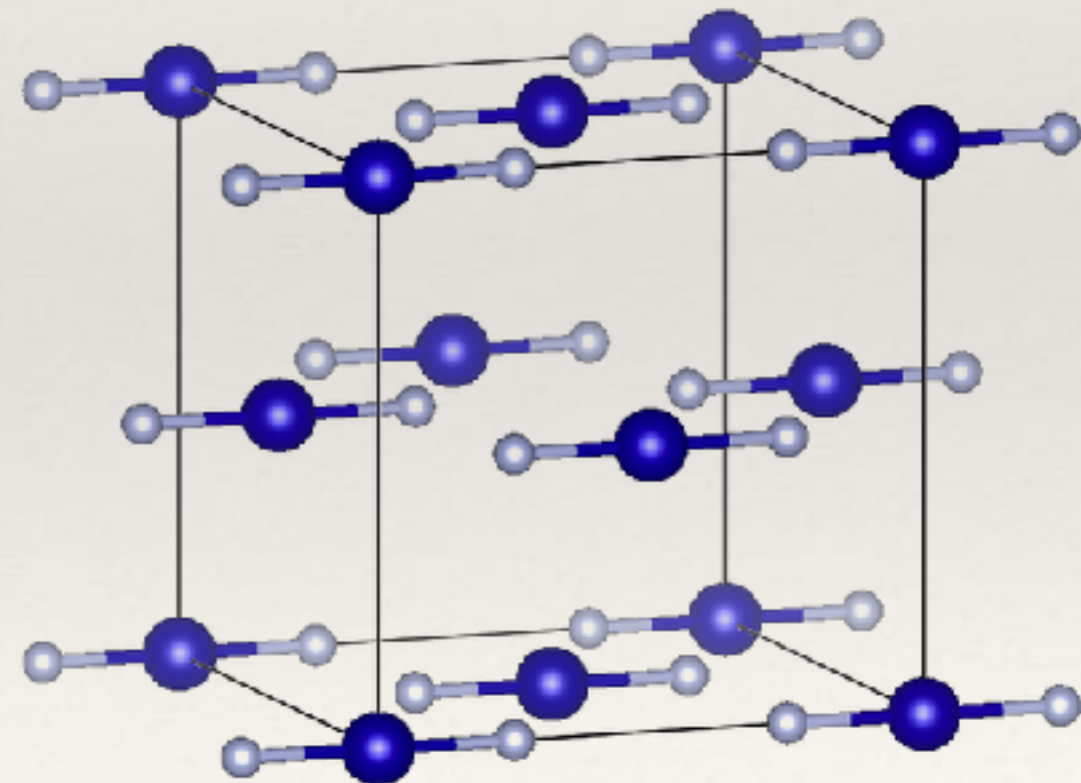
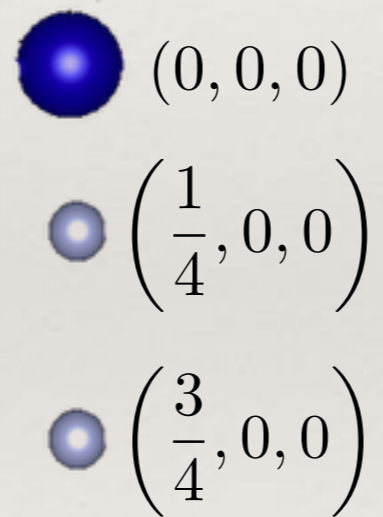
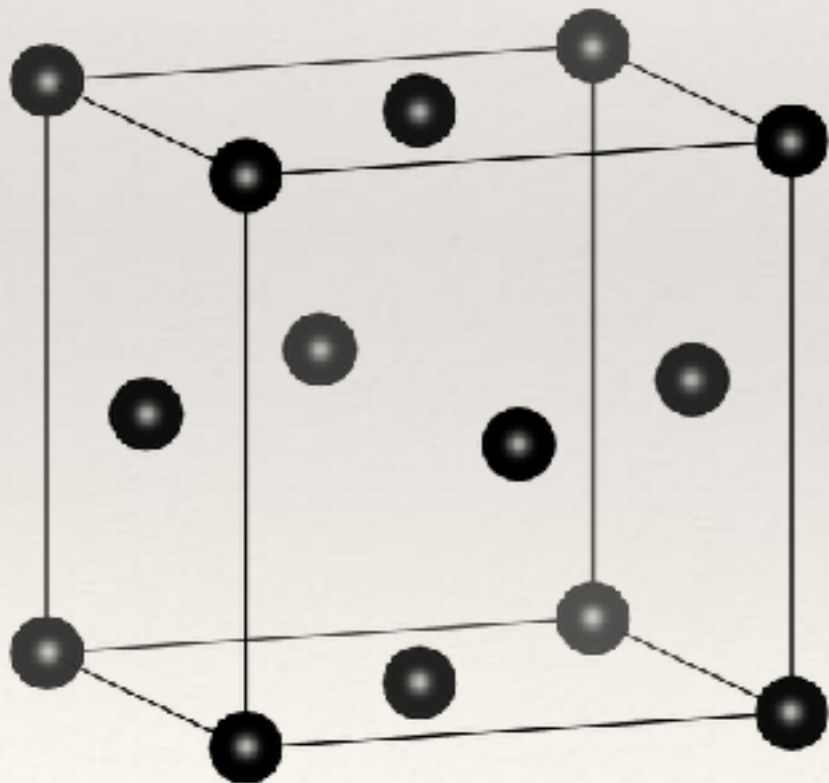


Trouver le motif

Réseau : mode F

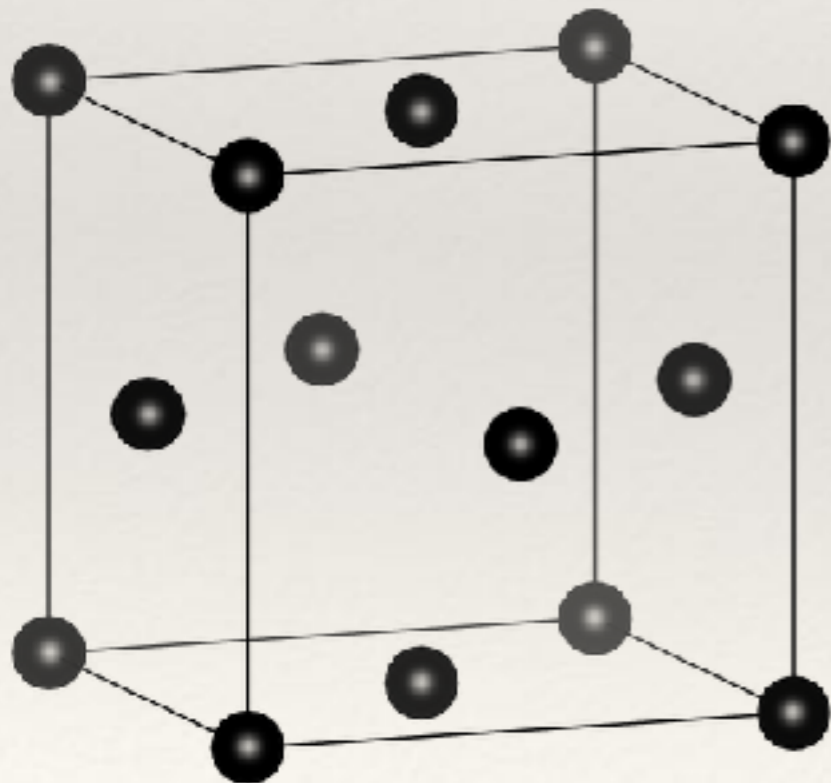
Motif

Maille

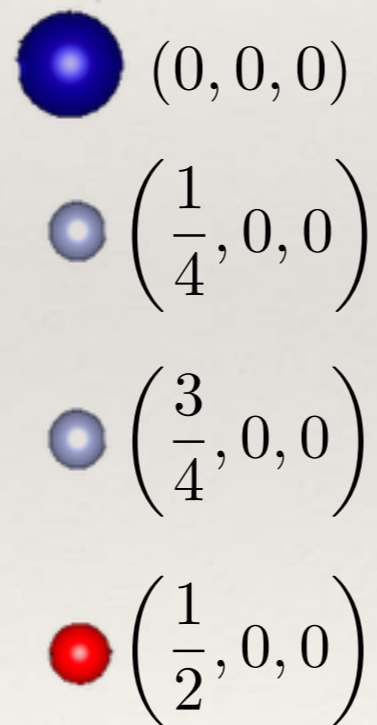


Trouver le motif

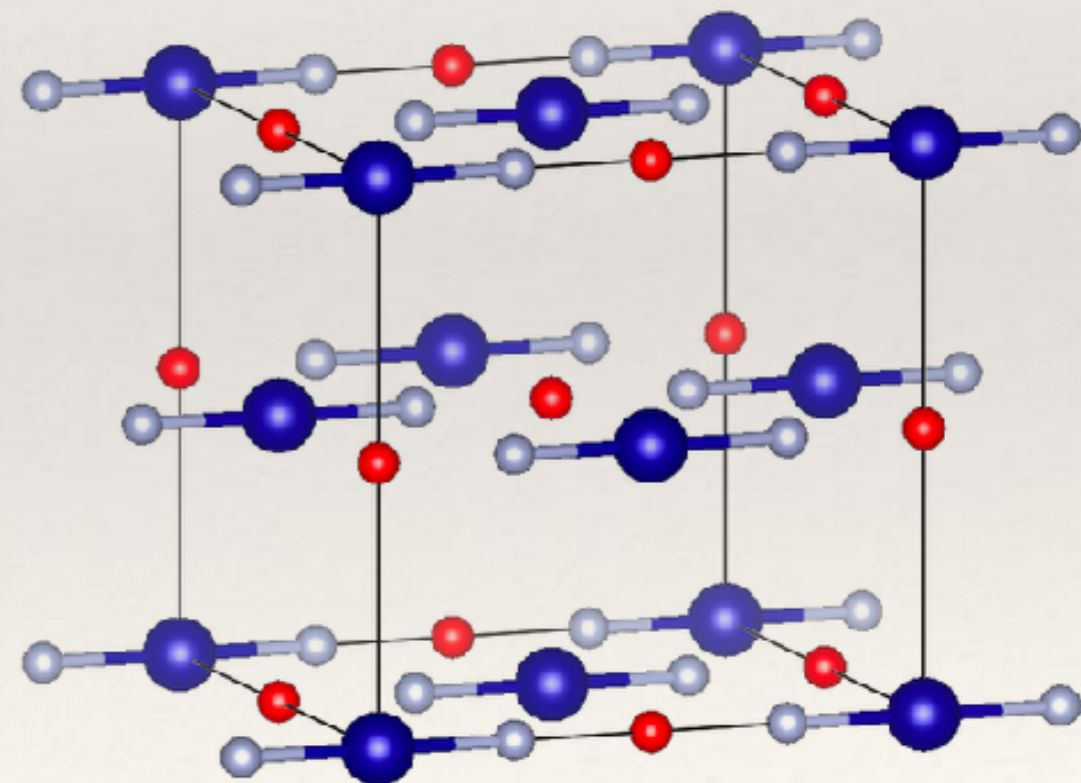
Réseau : mode F



Motif



Maille

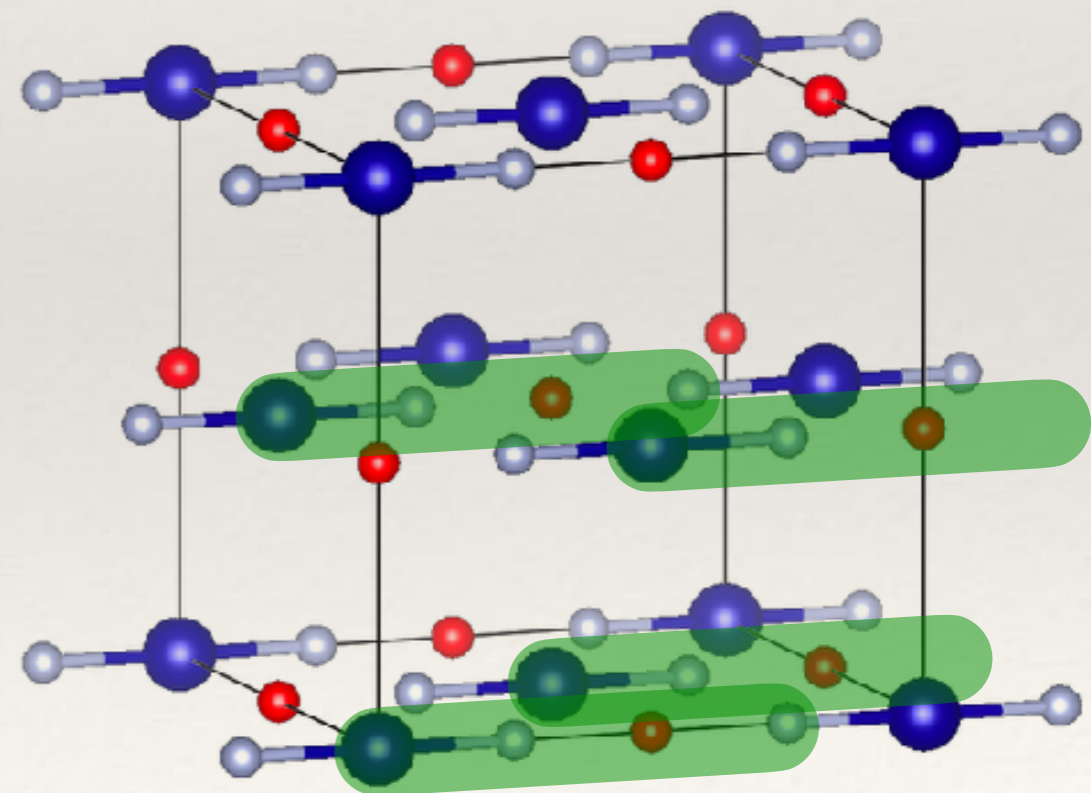
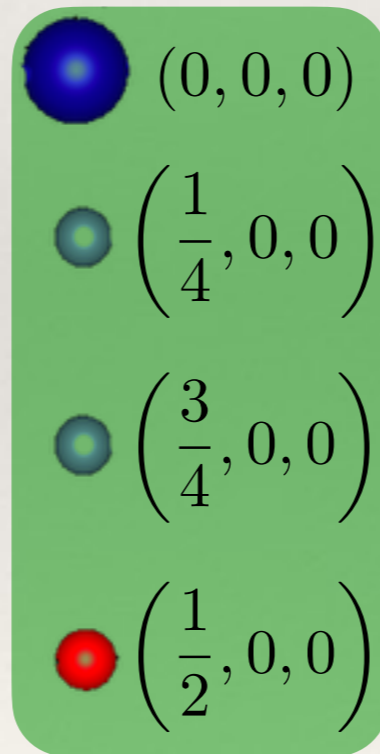
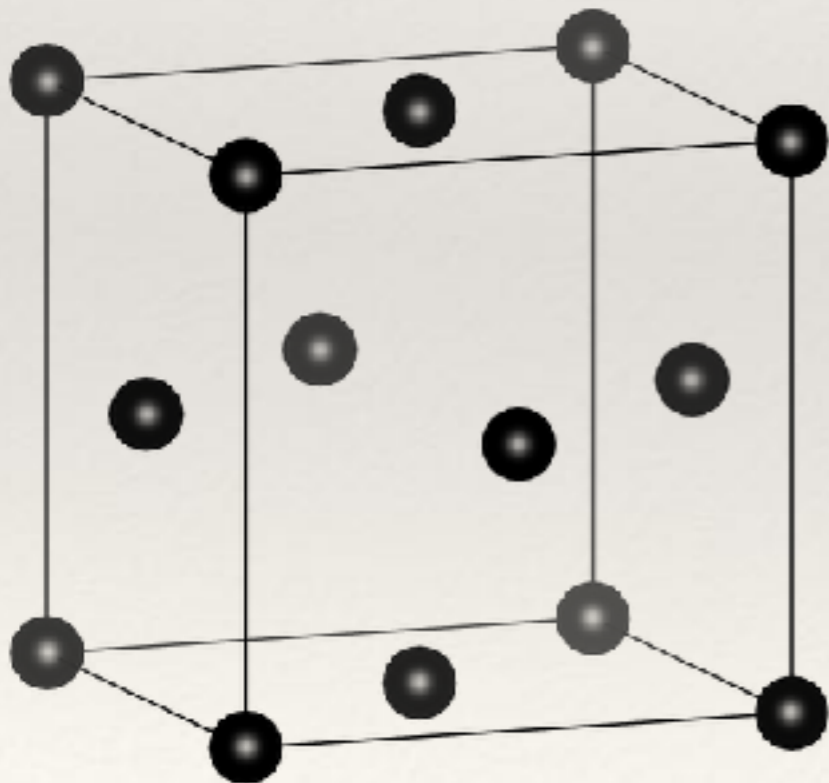


Trouver le motif

Réseau : mode F

Motif

Maille

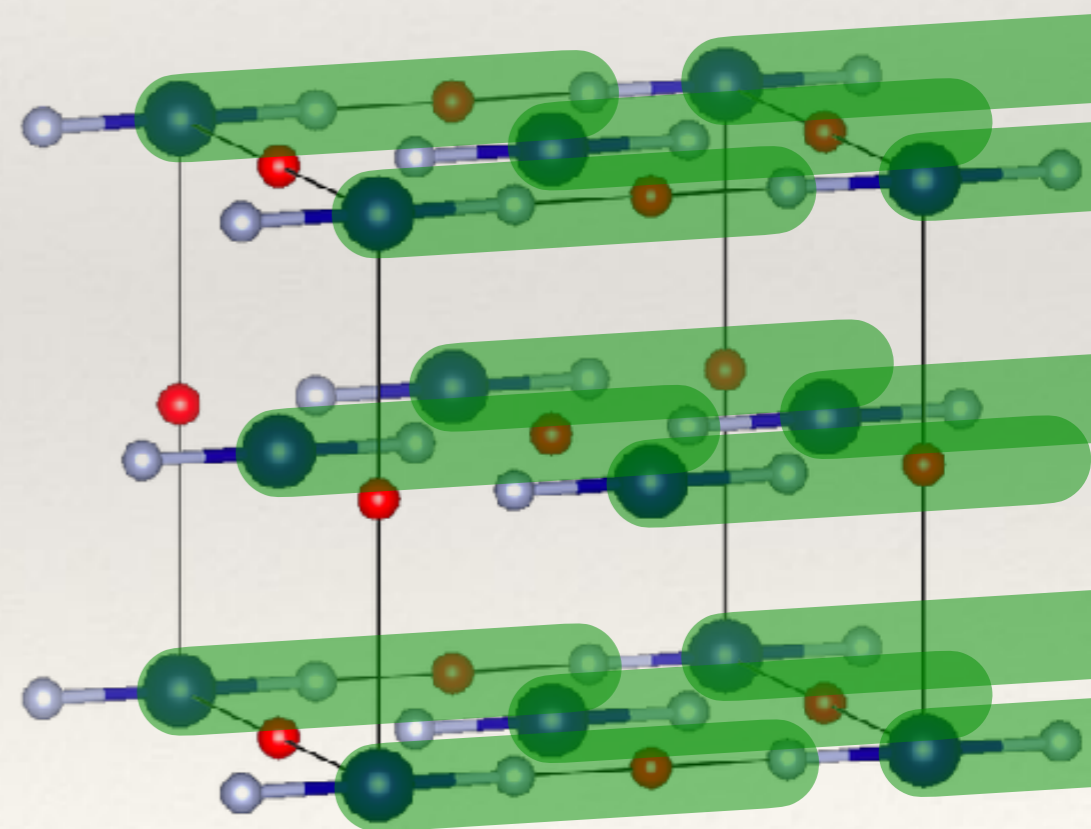
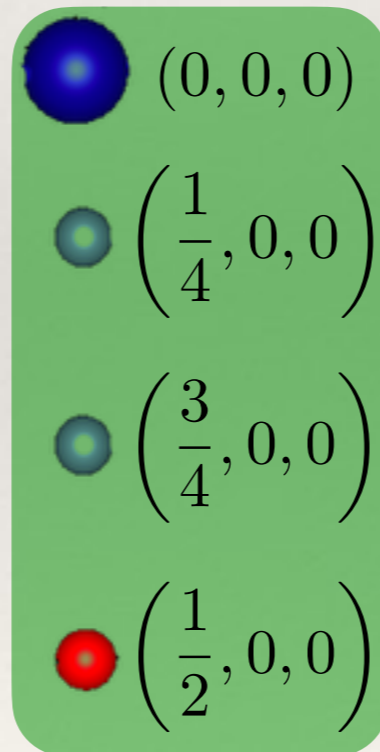
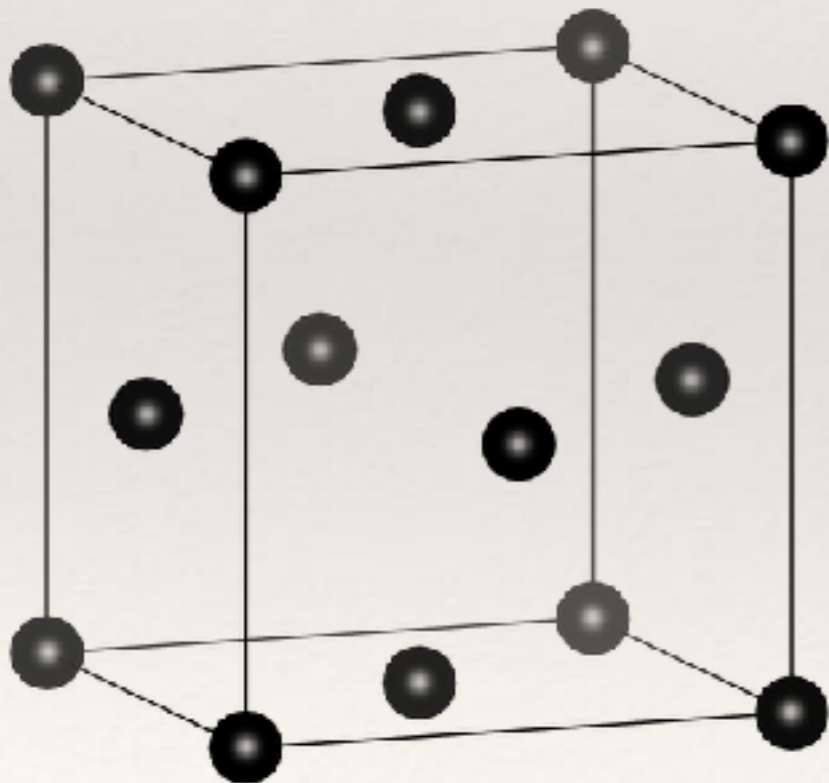


Trouver le motif

Réseau : mode F

Motif

Maille

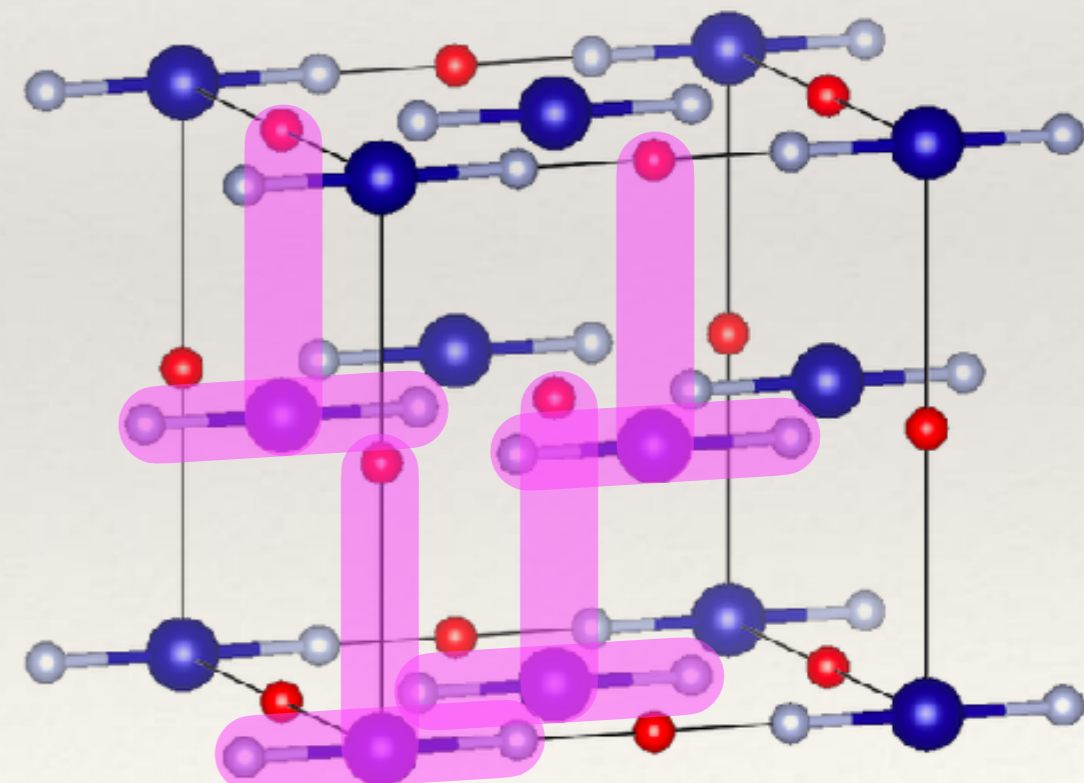
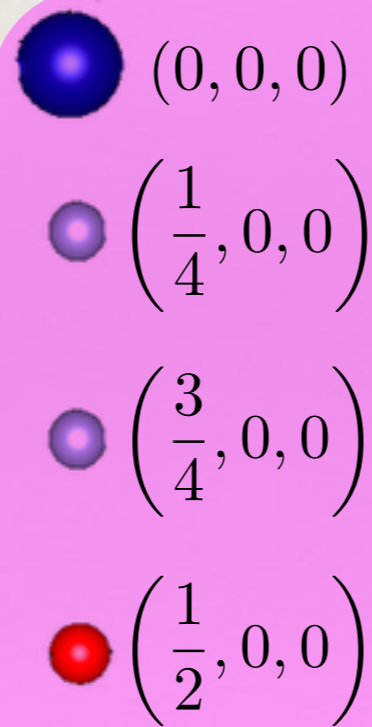
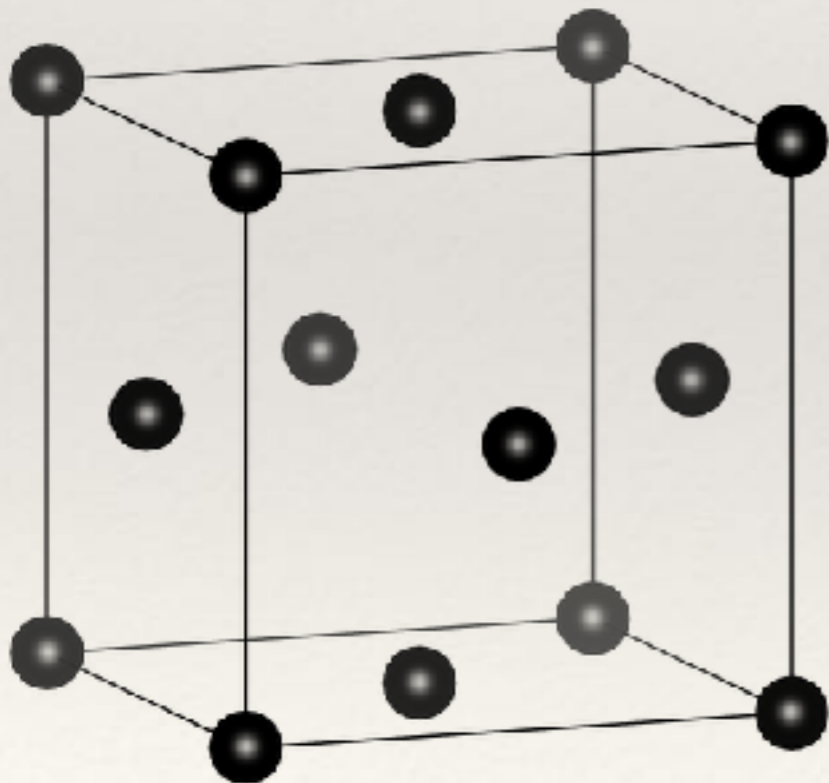


Trouver le motif

Réseau : mode F

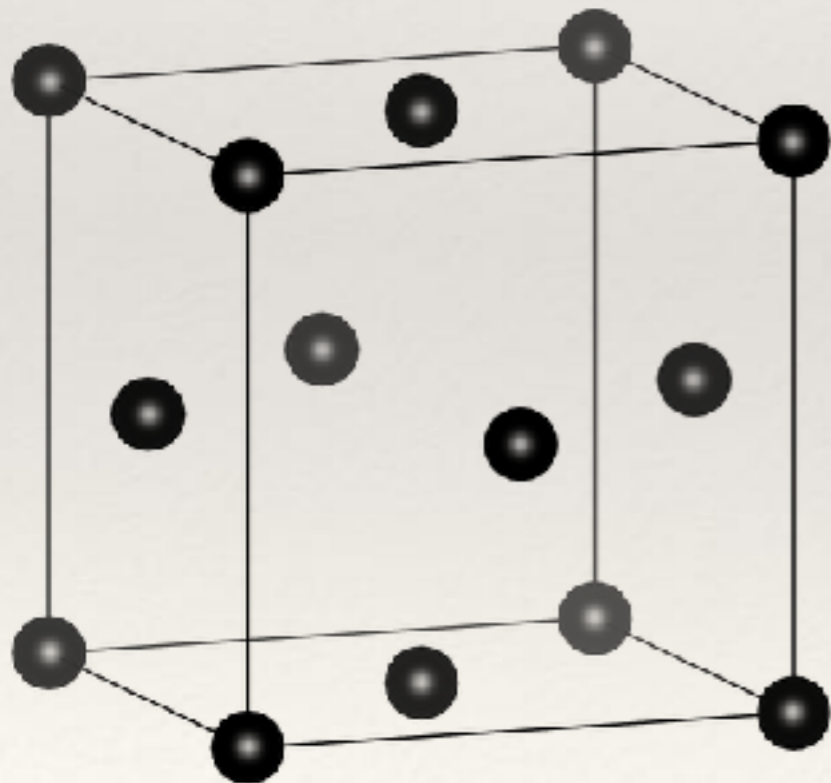
Motif

Maille

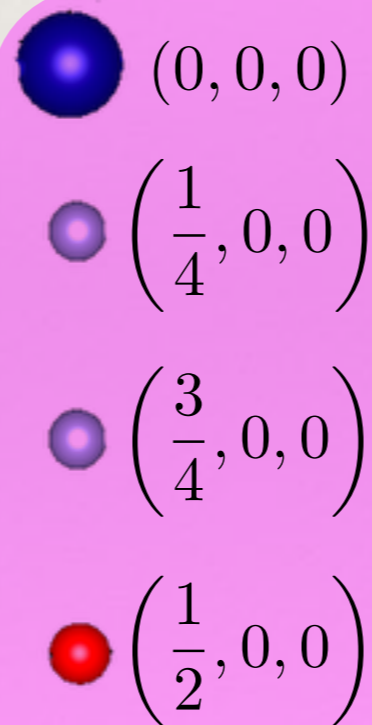


Trouver le motif

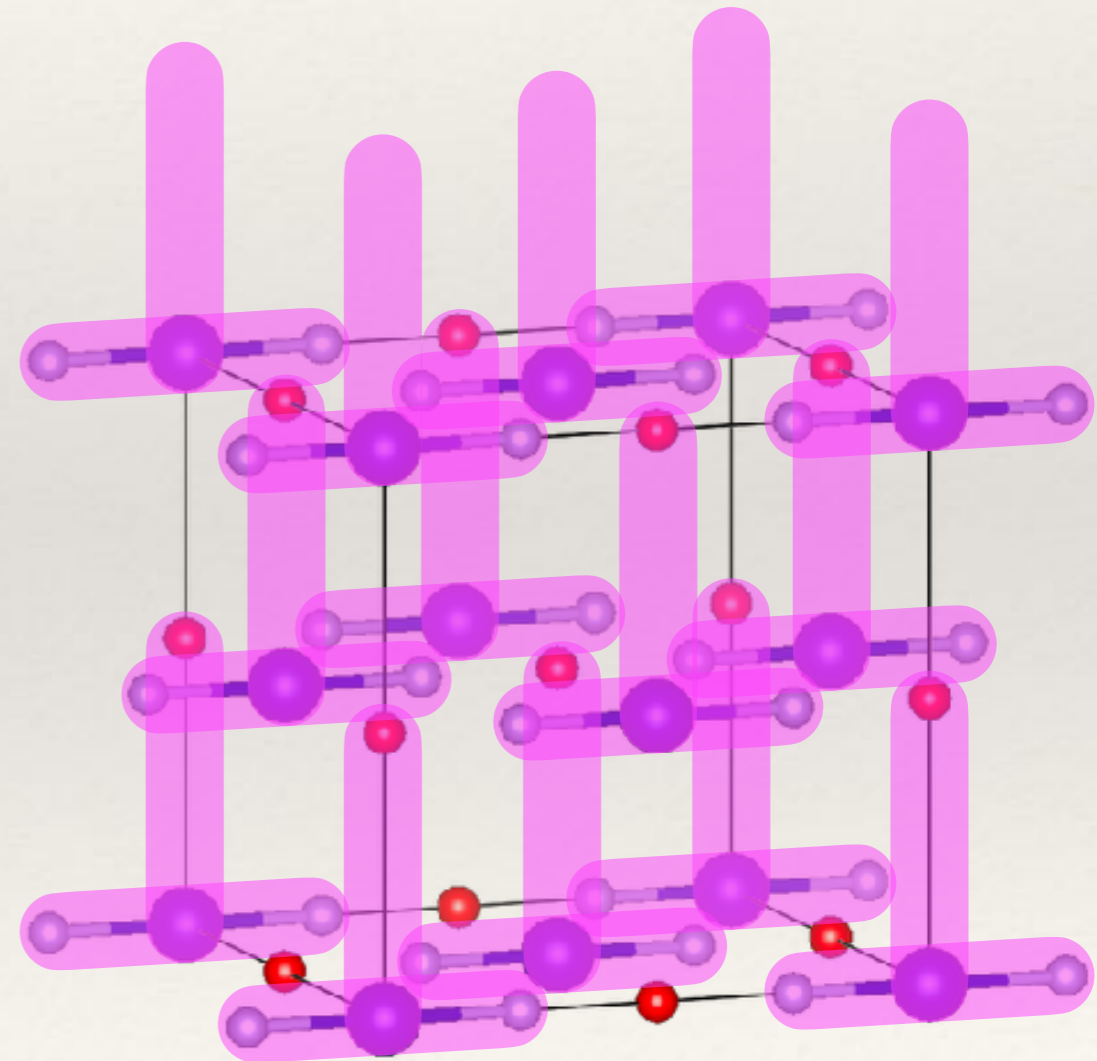
Réseau : mode F



Motif



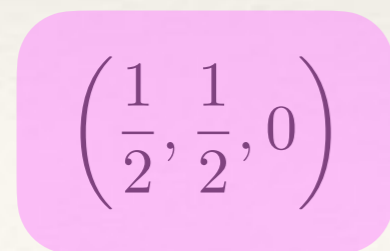
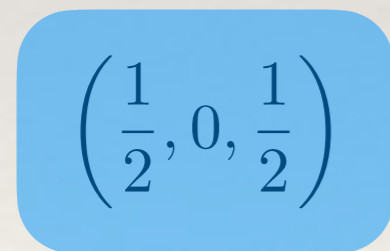
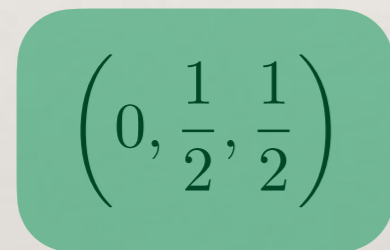
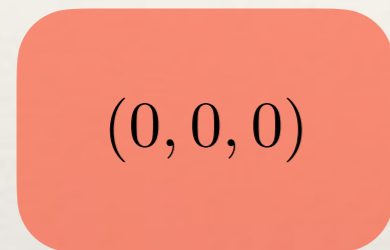
Maille



Trouver le motif

Réseau : mode F

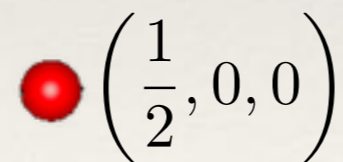
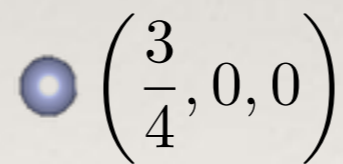
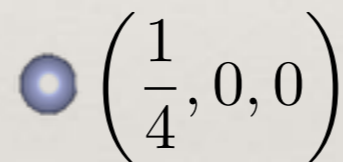
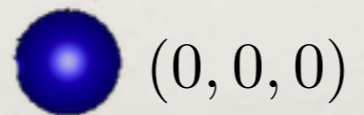
4 noeuds



×

Motif

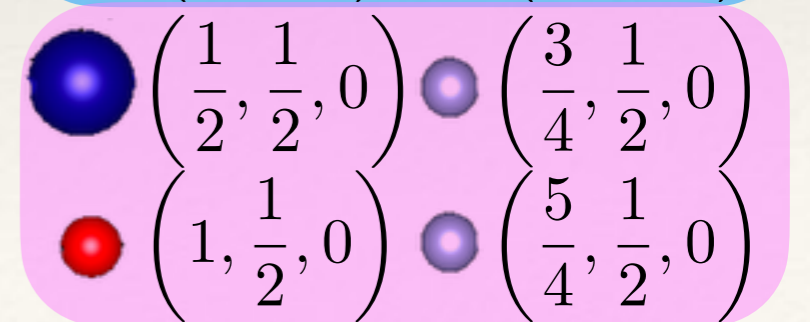
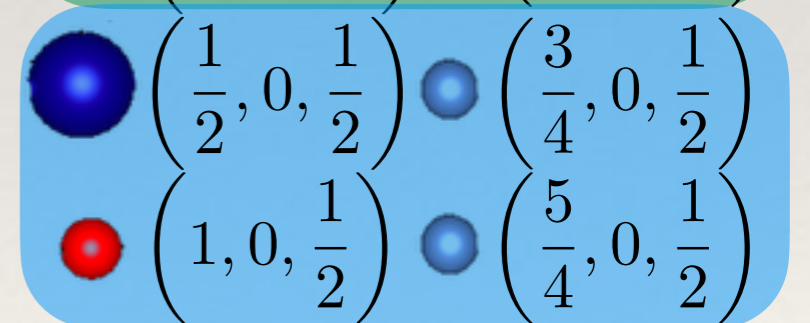
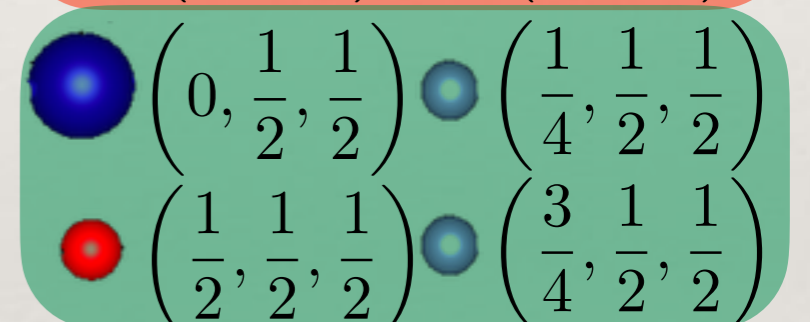
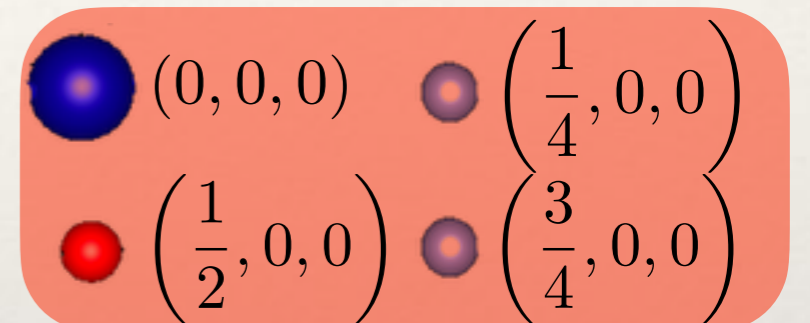
4 atomes



=

Maille

16 atomes



Trouver le motif

Réseau \times Motif = Maille
 N noeuds \times M atomes = NxM atomes

Motif \rightarrow Noeuds \downarrow	(x_1^m, y_1^m, z_1^m)	...	(x_j^m, y_j^m, z_j^m)	...	(x_M^m, y_M^m, z_M^m)
(x_1^n, y_1^n, z_1^n)	$(x_1^n + x_1^m, y_1^n + y_1^m, z_1^n + z_1^m)$...	$(x_1^n + x_j^m, y_1^n + y_j^m, z_1^n + z_j^m)$...	$(x_1^n + x_M^m, y_1^n + y_M^m, z_1^n + z_M^m)$
...
(x_i^n, y_i^n, z_i^n)	$(x_i^n + x_1^m, y_i^n + y_1^m, z_i^n + z_1^m)$...	$(x_i^n + x_j^m, y_i^n + y_j^m, z_i^n + z_j^m)$...	$(x_i^n + x_M^m, y_i^n + y_M^m, z_i^n + z_M^m)$
...
(x_N^n, y_N^n, z_N^n)	$(x_N^n + x_1^m, y_N^n + y_1^m, z_N^n + z_1^m)$...	$(x_N^n + x_j^m, y_N^n + y_j^m, z_N^n + z_j^m)$...	$(x_N^n + x_M^m, y_N^n + y_M^m, z_N^n + z_M^m)$

Partie 3 : Résumé 1/2

On définit un réseau comme un ensemble de points reliés entre eux par 3 translation. Ces points équivalents sont appelés les noeuds du réseau.

Le volume défini par les vecteurs forme la maille élémentaire. Si ce volume contient 1 noeuds on parle de maille primitive, sinon on parle de maille multiple.

On peut définir une famille de plans par 3 indices de Miller (hkl). Cette famille de plan est réticulaire si elle contient tous les noeuds du réseau.

Parmi les symétries d'orientations, seules les rotations d'ordre 1,2,3,4 et 6 sont compatibles avec un réseau.

La conséquence est qu'il existe uniquement 32 groupes ponctuels compatible avec un réseau : ce sont les classes de symétries. Si le groupe ponctuel contient la symétrie d'inversion on parle de classe de Laüe.

Partie 3 : Résumé 2/2

On peut classer ces groupes ponctuels en fonction du type de maille élémentaire associée : ce sont les 7 systèmes cristallins.

Certaines mailles sont plus facilement décrites par une maille multiple, qu'on appelle maille conventionnelle : on définit les modes de réseau.

En combinant les modes de réseaux (P,F,I,C) aux 7 systèmes cristallins, on obtient les 14 réseaux de Bravais.

Pour obtenir un cristal, il suffit de coller un motif (ensemble d'atome) sur chaque noeud du réseau.

Partie 4 : Les symétries de position

- ❖ Symétries de positions
- ❖ Symétries de translations
- ❖ Symétries composées
- ❖ Groupe d'espace

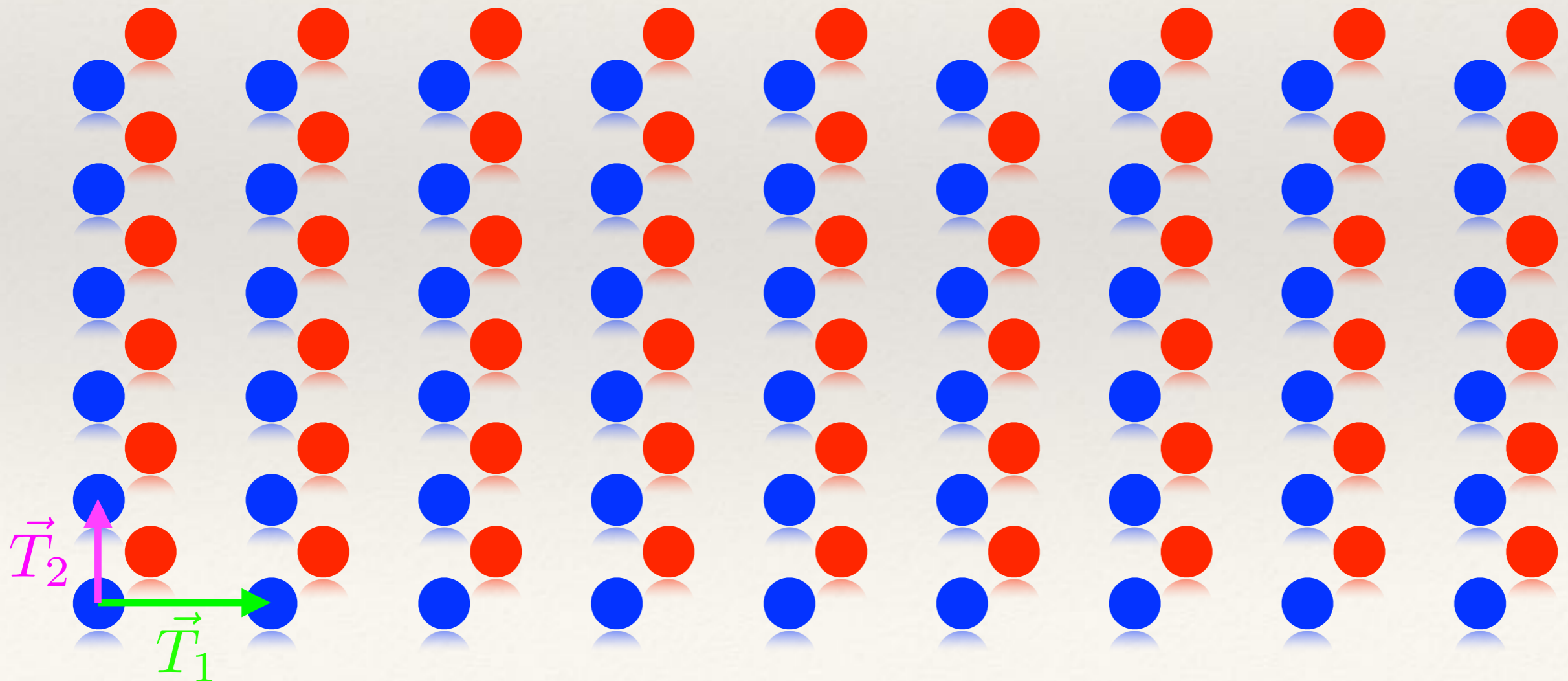
Les symétries de position

Définition : les symétries de position sont les symétries qui relient les points équivalents.

Symétries de translation

Définition : une translation \vec{T} est une symétrie qui relie un point / une position \vec{R} au point / position $\vec{R} + \vec{T}$.

L'ensemble des symétries de translation forme un groupe.



Symétries composées

Il existe 2 types de symétries composées correspondant à une combinaison de symétrie d'orientation et de translation

- les miroirs à glissement (miroir + translation)
- les rotations hélicoïdales (rotations + translation)

Miroirs à glissement

Définition : les miroirs à glissement sont composés d'un miroir et d'une translation dans le plan du miroir.

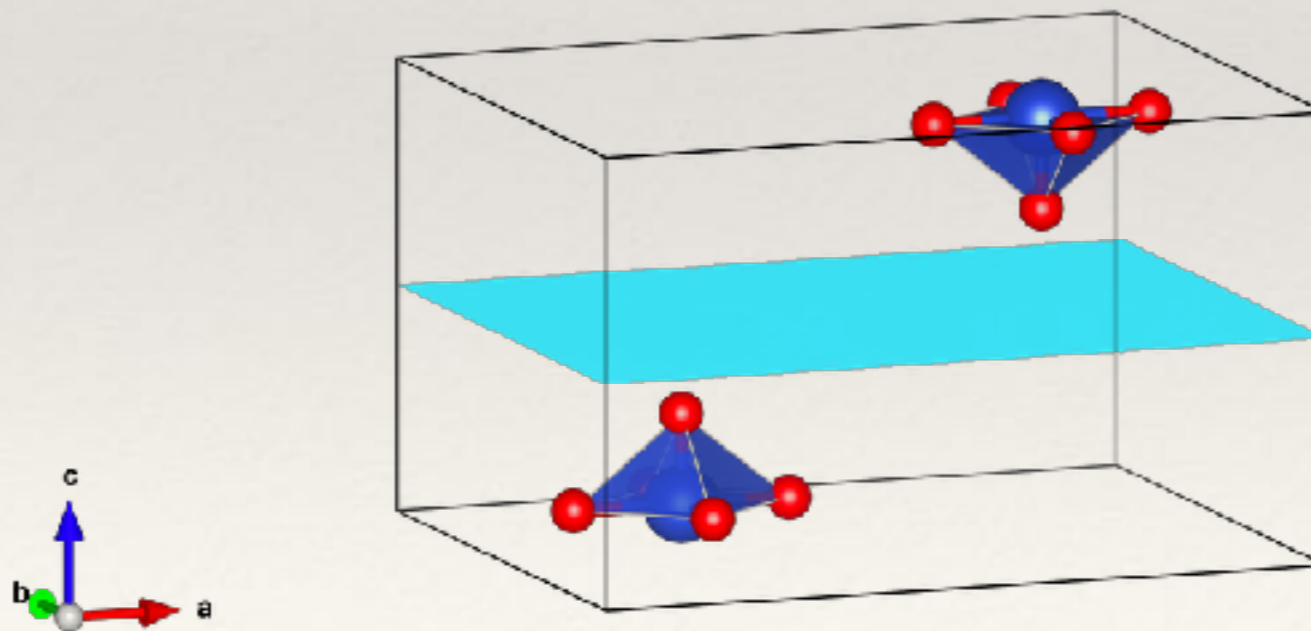
Miroirs à glissement noté a, b, c, n ou d :

- miroir

- translation de $\frac{\vec{a}}{2}, \frac{\vec{b}}{2}, \frac{\vec{c}}{2}$ ou $\frac{\vec{a} + \vec{b}}{2}, \frac{\vec{b} + \vec{c}}{2}, \frac{\vec{a} + \vec{c}}{2}$ ou autre...



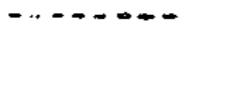


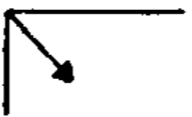
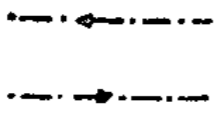
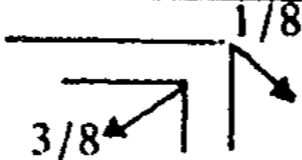
Symétries composées

Exemple de miroir a perpendiculaire à \vec{c}



Miroirs à glissement

Notations

Symbole	Représentation graphique	Nature de la translation
m	<div style="display: flex; justify-content: space-around;"> <div style="text-align: center;"> <p>Normal au plan du dessin</p>  </div> <div style="text-align: center;"> <p>Parallèle</p>  </div> </div>	plan ordinaire, sans translation.
a, b	 	$a/2$ le long de x ou $b/2$ le long de y
c		$c/2$ le long de z ; $(a + b + c)/2$ le long de $[111]$ en axes rhomboédriques
n		$(a + b)/2$ ou $(b + c)/2$ ou $(a + c)/2$ ou $(a + b + c) / 2$ (quadratique et cubique)
d	 	$(a \pm b) / 4$ ou $(b \pm c) / 4$ ou $(c \pm a) / 4$ ou $(a \pm b \pm c) / 4$ (quadratique et cubique)

Rotations hélicoïdale

Définition : les rotations hélicoïdales sont composées d'une rotation et d'une translation suivant l'axe de rotation.

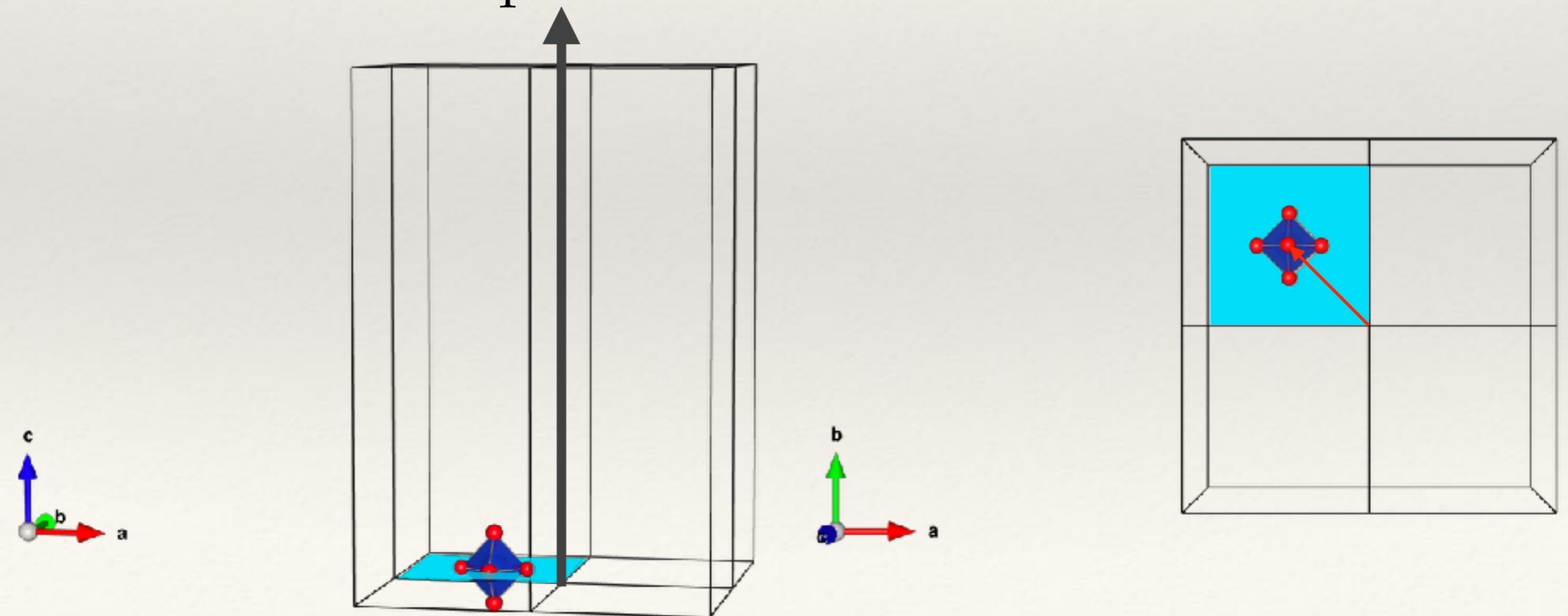
Rotations hélicoïdales, notées n_m :

- rotation de $\frac{2\pi}{n}$
- translation de $\frac{m}{n}$ suivant l'axe de rotation.
- $m < n$ et $m \times n \in \mathbb{N}$

Rotations hélicoïdales

Exemple de rotation hélicoïdale 4_1 ($n=4$, $m=1$) :

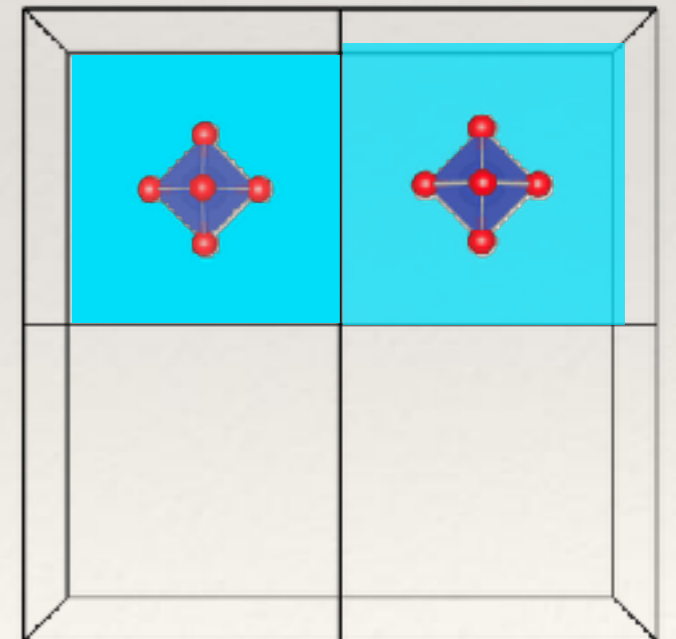
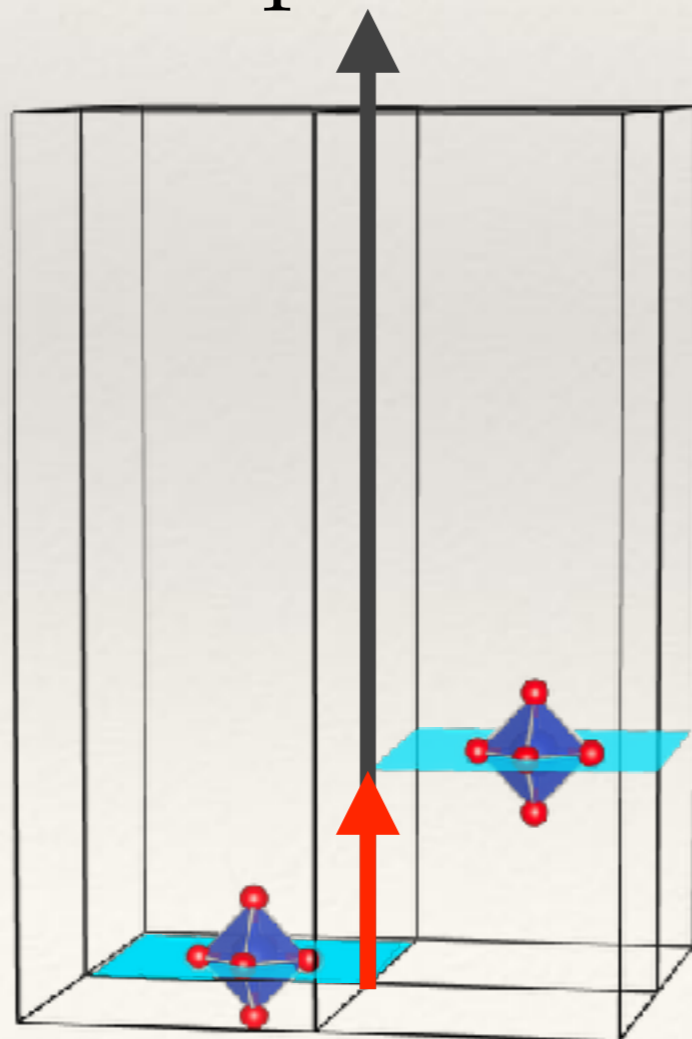
- rotation de $\frac{\pi}{2}$
- translation de $\frac{1}{4}$ suivant l'axe de rotation.



Rotations hélicoïdales

Exemple de rotation hélicoïdale 4_1 ($n=4$, $m=1$) :

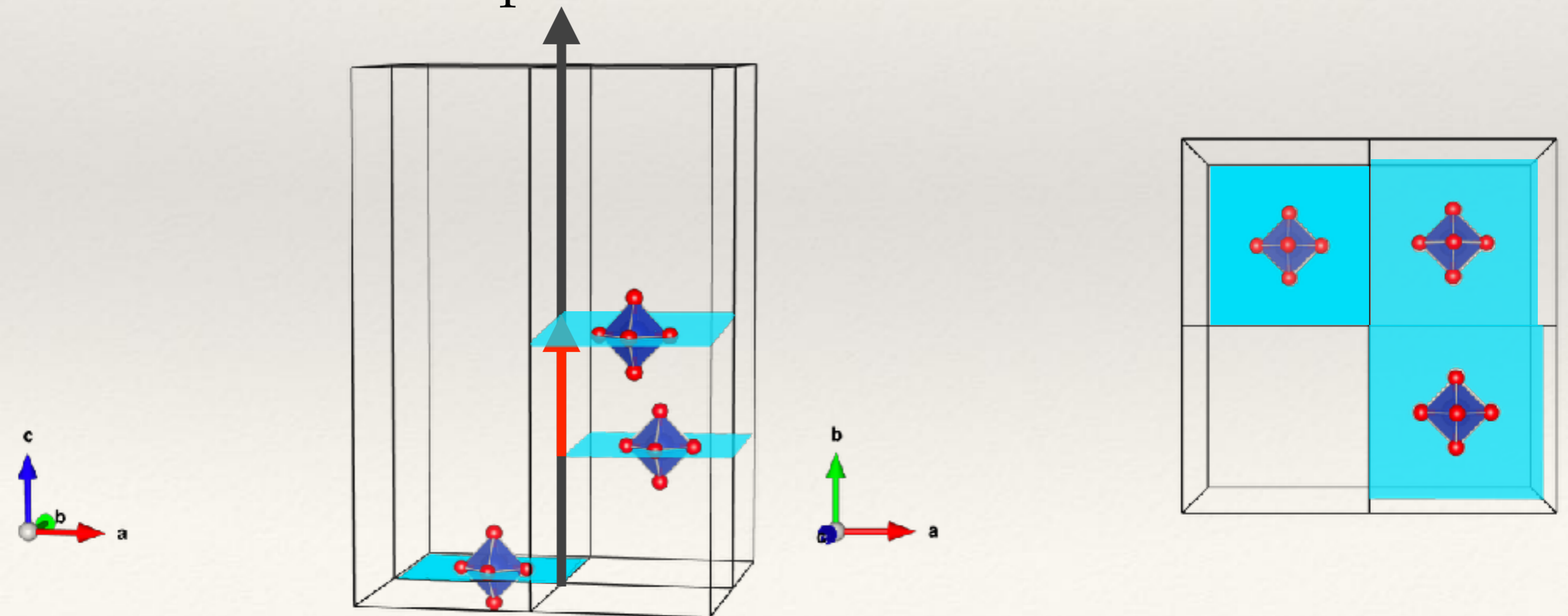
- rotation de $\frac{\pi}{2}$
- translation de $\frac{1}{4}$ suivant l'axe de rotation.



Rotations hélicoïdales

Exemple de rotation hélicoïdale 4_1 ($n=4$, $m=1$) :

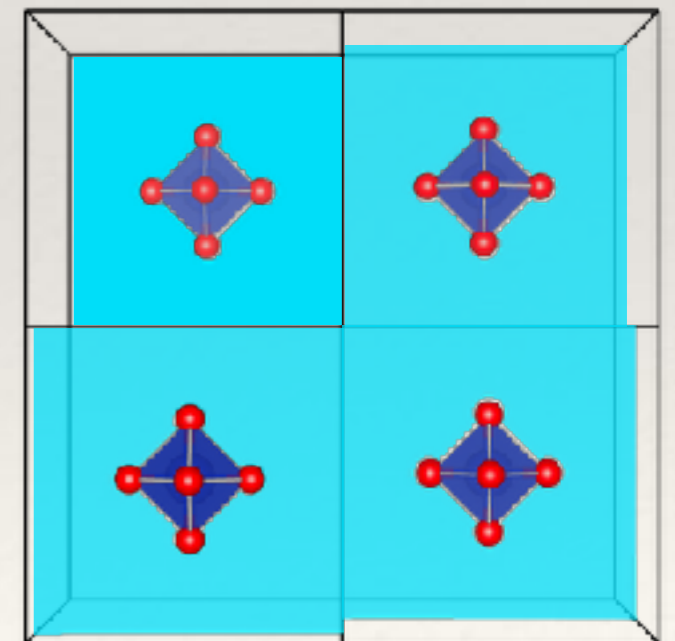
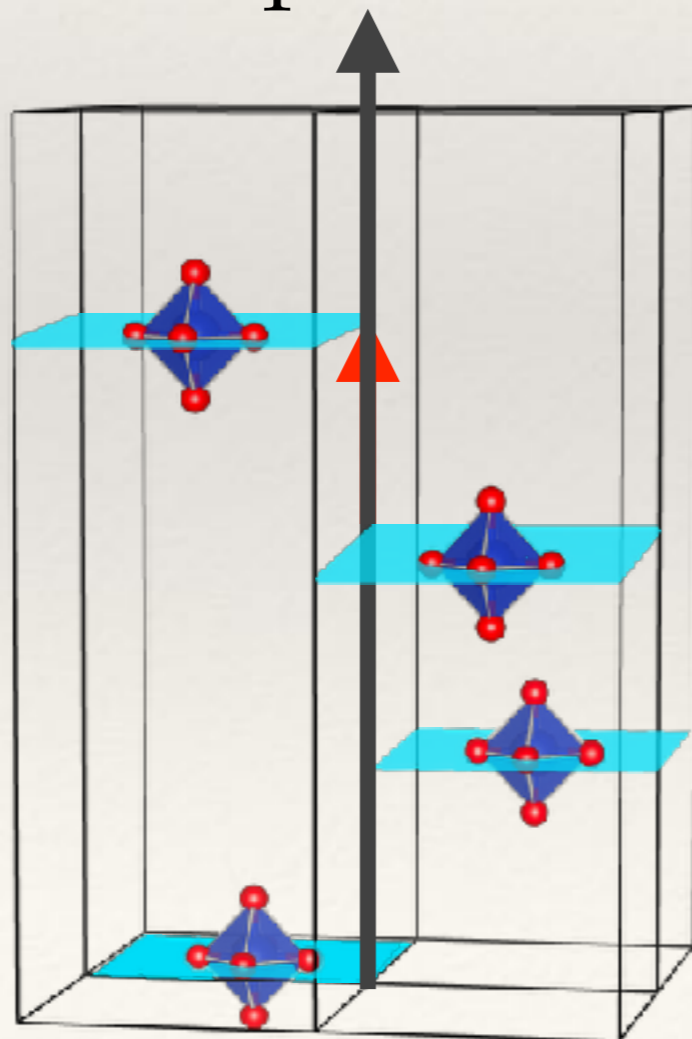
- rotation de $\frac{\pi}{2}$
- translation de $\frac{1}{4}$ suivant l'axe de rotation.



Rotations hélicoïdales

Exemple de rotation hélicoïdale 4_1 ($n=4$, $m=1$) :

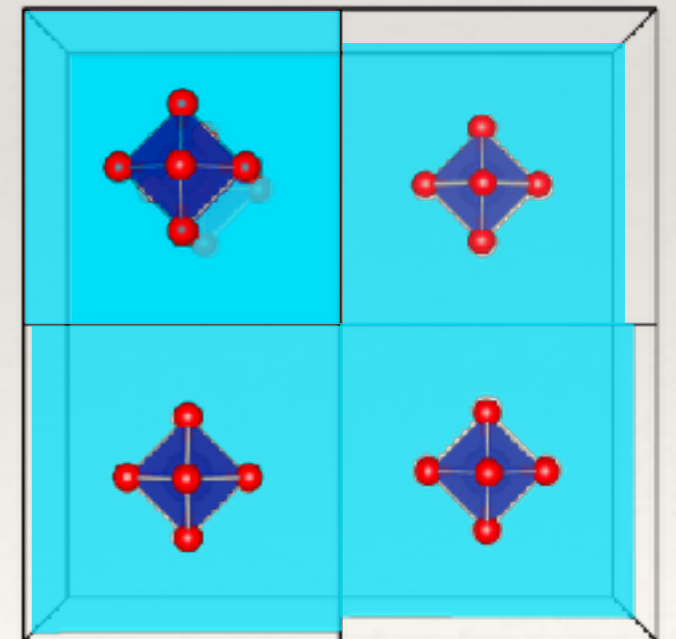
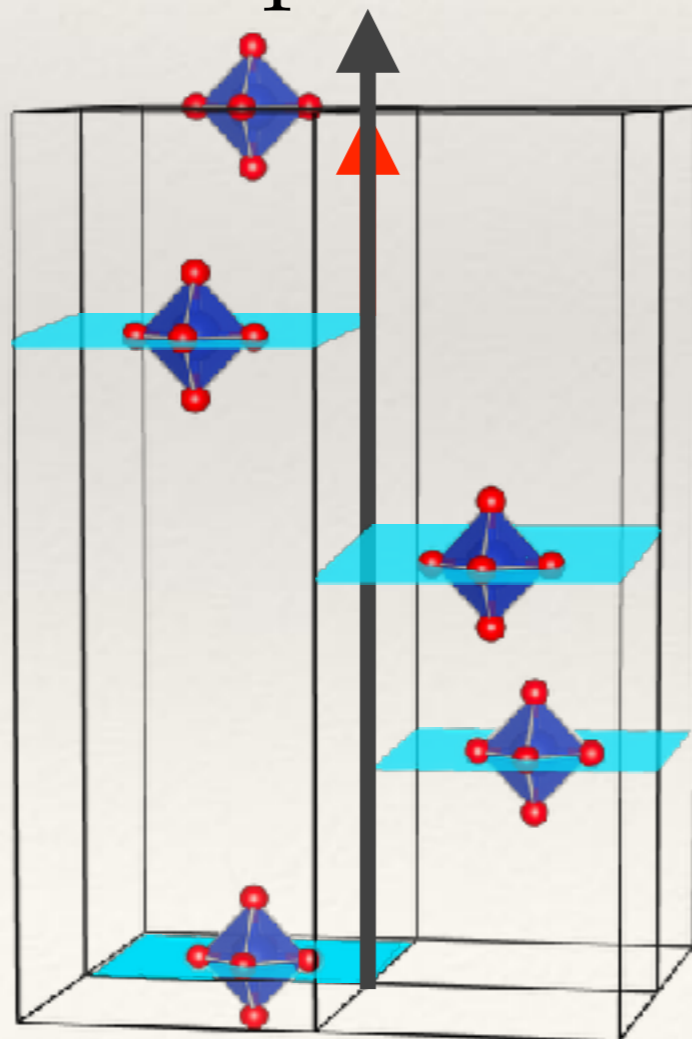
- rotation de $\frac{\pi}{2}$
- translation de $\frac{1}{4}$ suivant l'axe de rotation.



Rotations hélicoïdales






















Exemple de rotation hélicoïdale 4_1 ($n=4$, $m=1$) :

- rotation de $\frac{\pi}{2}$
- translation de $\frac{1}{4}$ suivant l'axe de rotation.



Rotations hélicoïdale

Notations

Symbole	Représentation graphique	Symbole	Représentation graphique	Symbole	Représentation graphique
$\bar{1}$		3_2		6	
2	 N  P	$\bar{3}$		6_1	
2_1	 N  P	4		6_2	
3		4_1		6_3	
3_1		4_2		6_4	
		4_3		6_5	
		$\bar{4}$		$\bar{6}$	

Groupe d'espace

Définition : Le groupe d'espace est l'ensemble des opérations de symétrie de position laissant le cristal invariant. Il en existe 230.

Notation du groupe d'espace :

- lettre correspondant au mode de réseau (P, I, F, A, B, C)
- opération de symétrie de degré le plus élevé
→ axe primaire
- opération de symétrie de degré le plus élevé suivant
→ axe secondaire
- opération de symétrie de degré le plus élevé suivant
→ axe tertiaire

Groupe d'espace

Directions des axes pour les 7 systèmes cristallins :

Système cristallins	Axe Primaire	Axe Secondaire	Axe tertiaire
Triclinique	/	/	/
Monoclinique	Axe 2 (b ou c)	/	/
Orthorhombic	/	/	/
Tétragonal	Axe 4, c	a,b	Bissectrice de a et b
Trigonal	Axe 3	Axe 2	/
Hexagonal	Axe 6 (c)	a,b, a+b	Bissectrice des axes secondaires
Cubique	Axe 4, a	Axe 3 (diagonale du cube)	Axe 2 (diagonale des faces)

Groupe d'espace

Pour déterminer le groupe d'espace :

- 1 - Définir le réseau, son mode, et les axes primaires
- 2 - Déterminer les symétries ponctuelles pour ces 3 axes
- 3 - Donner le mode puis les opérations dans l'ordre décroissant de degré de symétrie

Déduire le groupe ponctuel du groupe d'espace :

- 1 - Supprimer toutes les translations des symétries

$$P \frac{2_1}{c} \rightarrow \frac{2}{m}$$

$$P \frac{6_3}{m} mc \rightarrow \frac{6}{m} mm$$

$$Ia\bar{3}d \rightarrow m\bar{3}m$$

$$Pnma \rightarrow mmm$$

Systemes cristallins

Triclinique	Monoclinique	Orthorhombique	Trigonal	Tetragonal	Hexagonal	Cubique
1	2		3	4	6	
		222	32	422	622	
$\bar{1}$	$\bar{2}$		$\bar{3}$	$\bar{4}$	$\bar{6}$	
	2			4	6	
	\bar{m}			\bar{m}	\bar{m}	
		2mm	3m	4mm	6mm	
			$\bar{3}m$	$\bar{4}2m$	$\bar{6}2m$	
		mmm		$\frac{4}{m}mm$	$\frac{6}{m}mm$	
						23
						432
						$\bar{4}3m$
						$m\bar{3}$
						$m\bar{3}m$

Partie 4 : Résumé

Les symétries de positions relient les positions équivalentes : rotation, miroir, roto-inversion, axe hélicoïdal et miroir à glissement.

L'ensemble de ces symétries forme un groupe, appelé groupe d'espace, dont la notation condensée est basée sur 1 mode et 3 axes.

On passe facilement du groupe d'espace au groupe ponctuel en supprimant toutes les translations.

Partie 5 : Le réseau réciproque

- ❖ Définition
- ❖ Propriétés
- ❖ Indices de Miller
- ❖ Distance interréticulaire

Définition

Définition : le réseau réciproque est l'ensemble des points reliés par toute combinaison linéaire des vecteurs \vec{a}^* , \vec{b}^* et \vec{c}^* :

$$\vec{a}^* = 2\pi \frac{\vec{b} \wedge \vec{c}}{V_{maille}} \quad \vec{b}^* = 2\pi \frac{\vec{c} \wedge \vec{a}}{V_{maille}} \quad \vec{c}^* = 2\pi \frac{\vec{a} \wedge \vec{b}}{V_{maille}}$$

$$V_{maille} = \vec{a} \cdot (\vec{b} \wedge \vec{c})$$

Un point de l'espace réciproque correspond à une périodicité dans l'espace réel.

Propriétés

Les vecteurs du réseau réciproque vérifient :

$$\vec{a}^* \cdot \vec{a} = 2\pi \quad \vec{b}^* \cdot \vec{a} = 0 \quad \vec{c}^* \cdot \vec{a} = 0$$

$$\vec{a}^* \cdot \vec{b} = 0 \quad \vec{b}^* \cdot \vec{b} = 2\pi \quad \vec{c}^* \cdot \vec{b} = 0$$

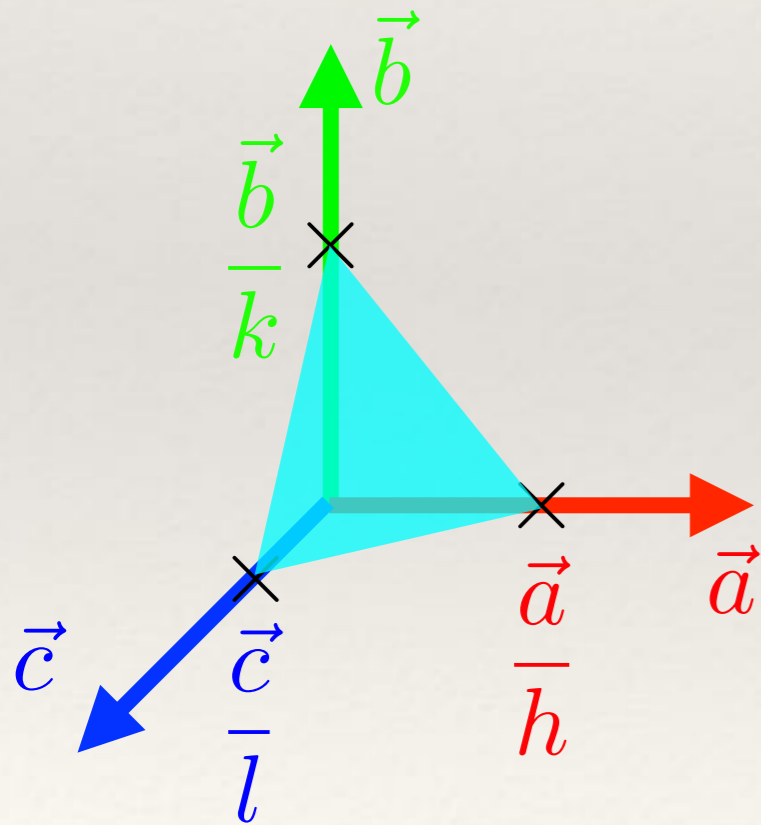
$$\vec{a}^* \cdot \vec{c} = 0 \quad \vec{b}^* \cdot \vec{c} = 0 \quad \vec{c}^* \cdot \vec{c} = 2\pi$$

$$\alpha^* = \pi - \alpha \quad \beta^* = \pi - \beta \quad \gamma^* = \pi - \gamma$$

Le réseau réciproque est le dual du réseau direct : le réseau réciproque du réseau réciproque est le réseau direct.

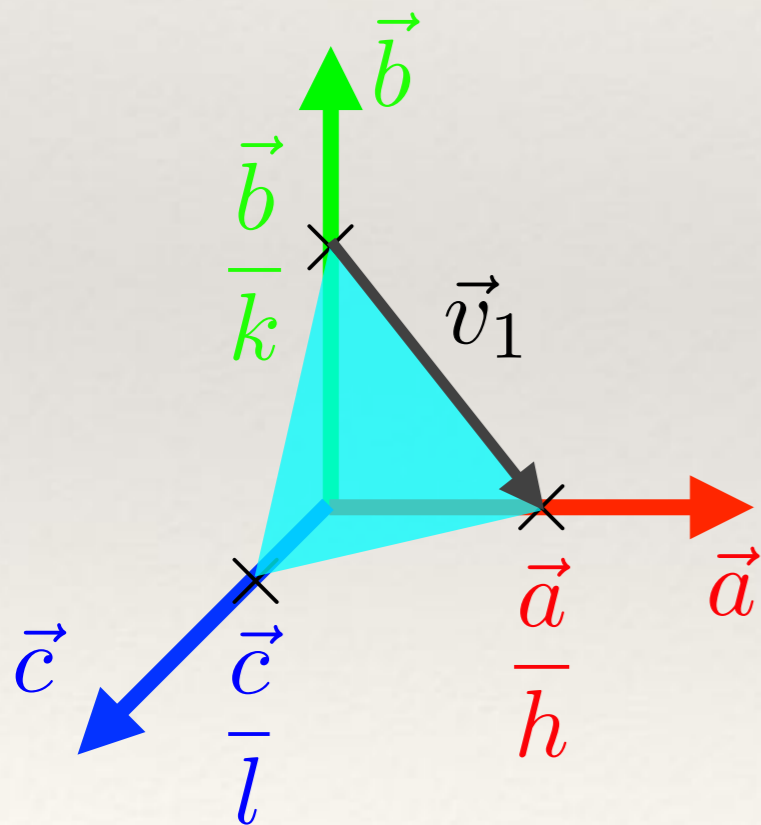
Propriétés

Un vecteur du réseau réciproque $\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$ est perpendiculaire à la famille de plans réticulaires définie par les indices de Miller (hkl).



Propriétés

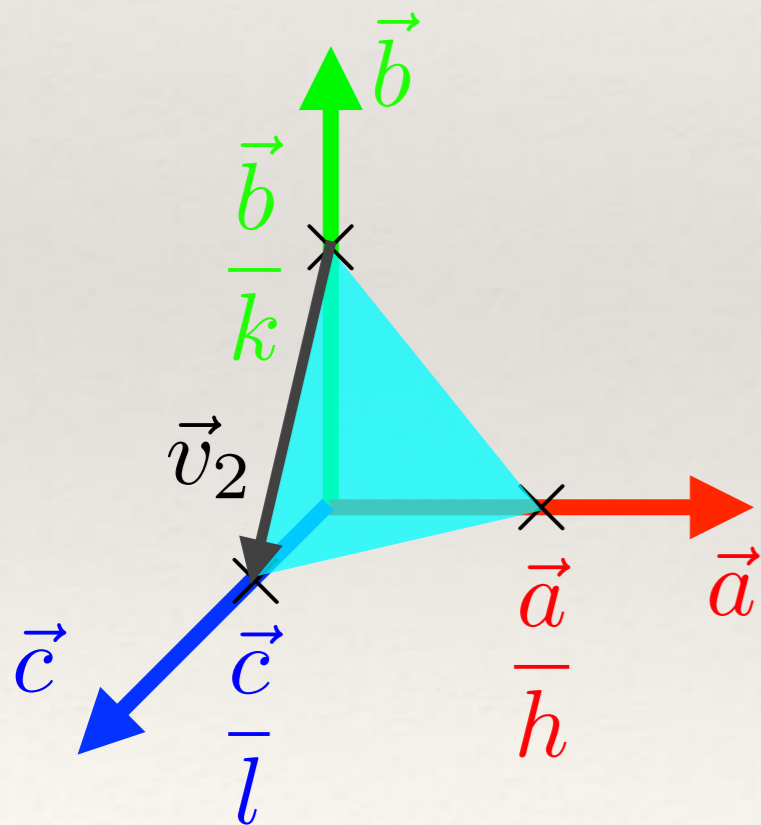
Un vecteur du réseau réciproque $\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$ est perpendiculaire à la famille de plans réticulaires définie par les indices de Miller (hkl).



$$\begin{aligned}\vec{G} \cdot \vec{v}_1 &= (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \cdot \left(\frac{\vec{a}}{h} - \frac{\vec{b}}{k} \right) \\ &= h\vec{a}^* \cdot \frac{\vec{a}}{h} - k\vec{b}^* \cdot \frac{\vec{b}}{k} \\ &= 0\end{aligned}$$

Propriétés

Un vecteur du réseau réciproque $\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$ est perpendiculaire à la famille de plans réticulaires définie par les indices de Miller (hkl).

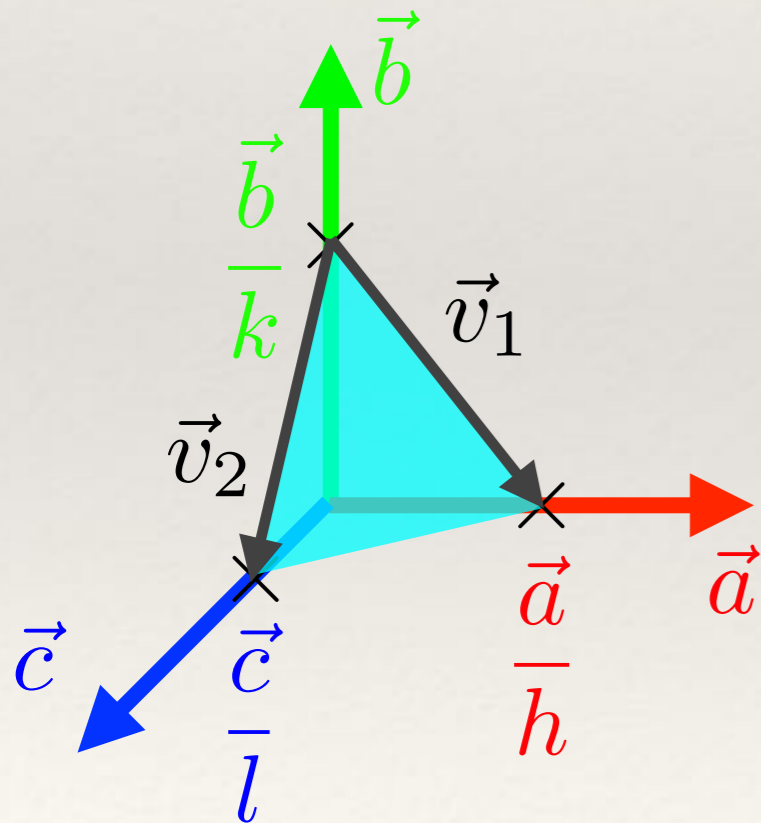


$$\begin{aligned}\vec{G} \cdot \vec{v}_2 &= (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \cdot \left(\frac{\vec{c}}{l} - \frac{\vec{b}}{k} \right) \\ &= -k\vec{b}^* \cdot \frac{\vec{b}}{k} + l\vec{c}^* \cdot \frac{\vec{c}}{l} \\ &= 0\end{aligned}$$

Propriétés

Un vecteur du réseau réciproque $\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$ est perpendiculaire à la famille de plans réticulaires définie par les indices de Miller (hkl).

$$\vec{G} \cdot \vec{v}_1 = \vec{G} \cdot \vec{v}_2 = 0$$



Propriétés

La distance inter-réticulaire d_{hkl} entre les plans définis par le vecteur $\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$ est donné par $d_{hkl} = \frac{2\pi}{\|\vec{G}\|}$

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{\sqrt{h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hka^*b^* \cos(\gamma^*) + 2klb^*c^* \cos(\alpha^*) + 2hla^*c^* \cos(\beta^*)}}$$

Propriétés

Systeme triclinique :

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{\sqrt{h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hka^* b^* \cos(\gamma^*) + 2klb^* c^* \cos(\alpha^*) + 2hla^* c^* \cos(\beta^*)}}$$

Systeme monoclinique :

$$d_{hkl} = \frac{\sin(\beta)}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} + \frac{k^2 \sin^2(\beta)}{b^2} - 2\frac{hl \cos(\beta)}{ac}}}$$

Systeme hexagonal :

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2 + k^2 + hk) + l^2 \left(\frac{a}{c}\right)^2}}$$

Propriétés

Systeme rhomboédrique / trigonal :

$$d_{hkl} = \frac{a (1 + 2\cos^3\alpha - 3\cos^2\alpha)}{\sqrt{(h^2 + k^2 + l^2) \sin^2\alpha + 2(hk + kl + hl) (\cos^2\alpha - \cos\alpha)}}$$

Systeme orthorhombique :

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

Systeme tétragonal :

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \left(\frac{a}{c}\right)^2}$$

Systeme cubique :

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

Partie 5 : Résumé

Le réseau réciproque est défini par 3 vecteurs, dont chacun est perpendiculaire à 2 vecteurs du réseau direct.

Tout point du réseau réciproque peut s'écrire comme une combinaison de ces 3 vecteurs $\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$

Les indices h,k,l définissent alors une famille de plans, perpendiculaires à G et dont la distance inter-plans est $d_{hkl} = \frac{2\pi}{\|\vec{G}\|}$

Partie 6 : Absorption et Diffusion

- ❖ Absorption
 - ❖ Loi de Beer Lambert
 - ❖ Loi de Bragg-Pierce
 - ❖ Seuils d'absorption
- ❖ Diffusion Thomson
 - ❖ Section efficace
 - ❖ Longueur de diffusion
 - ❖ Facteur de polarisation
- ❖ Diffusion Compton
 - ❖ Conservation de l'énergie et du moment
 - ❖ Comparaison Thomson-Compton

Absorption

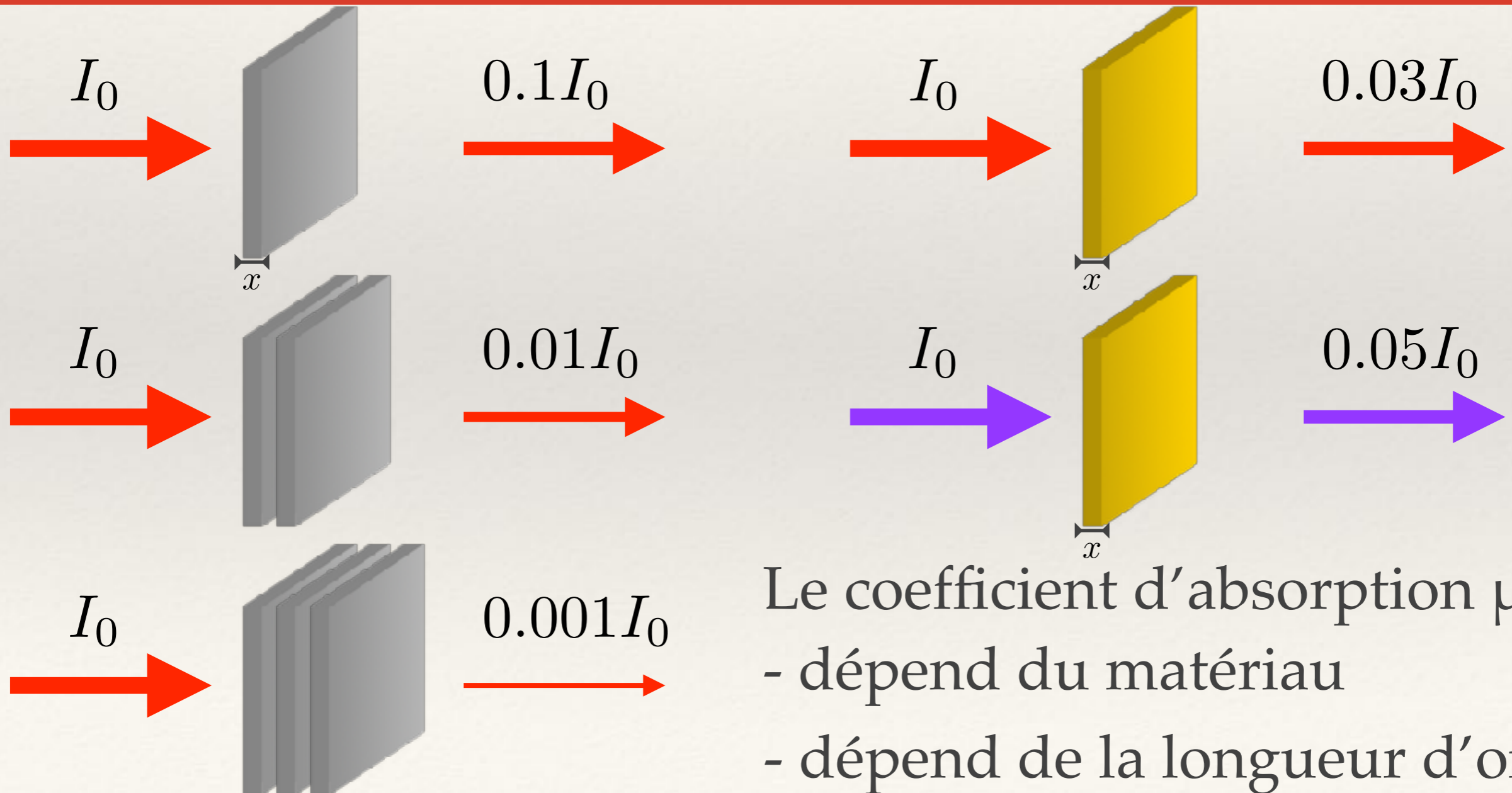
Définition : la loi de Beer-Lambert s'écrit :

$$I = I_0 e^{-\mu x}$$

Absorption

Définition : la loi de Beer-Lambert s'écrit :

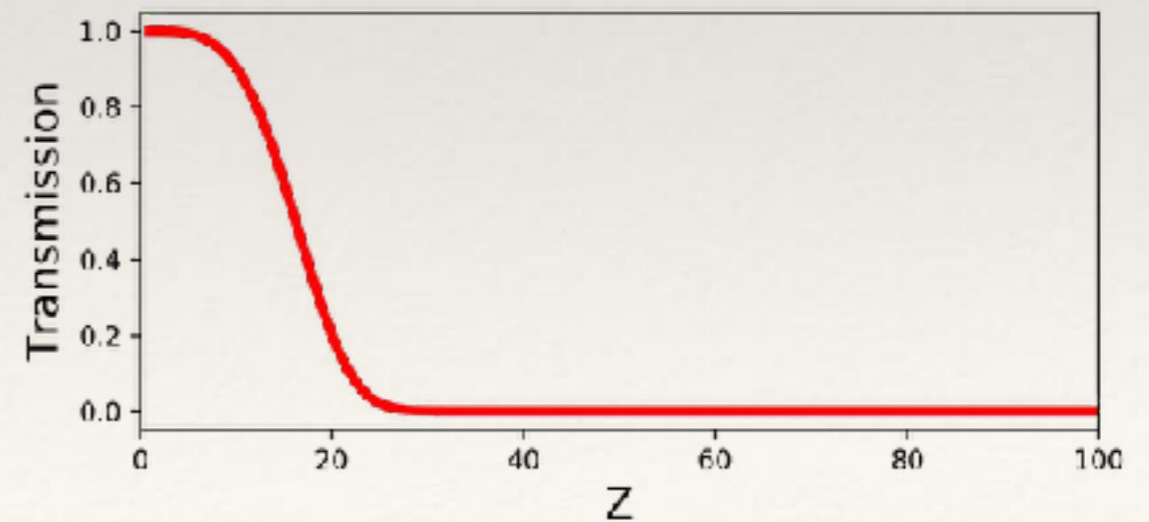
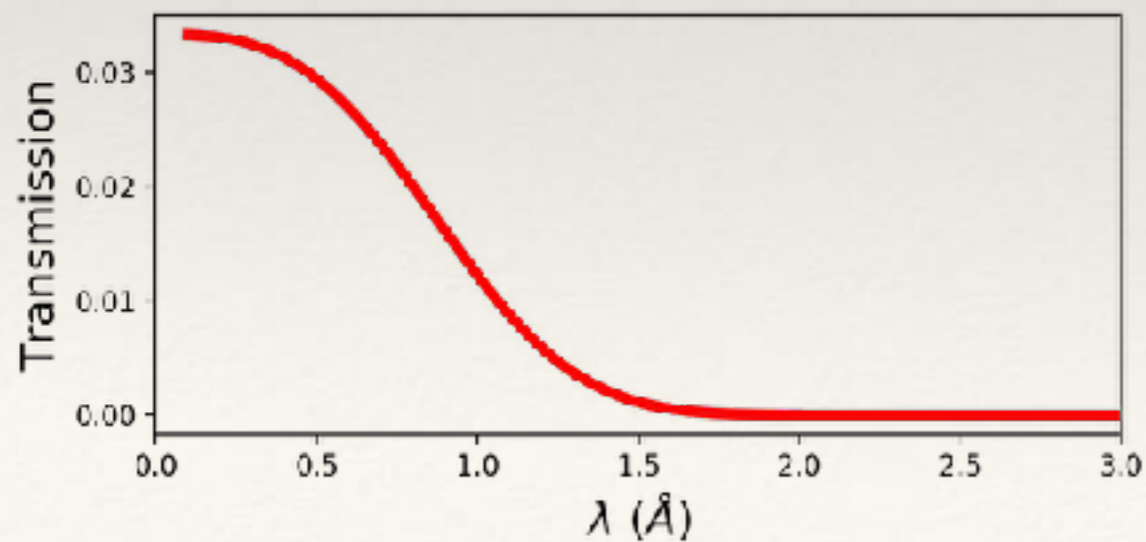
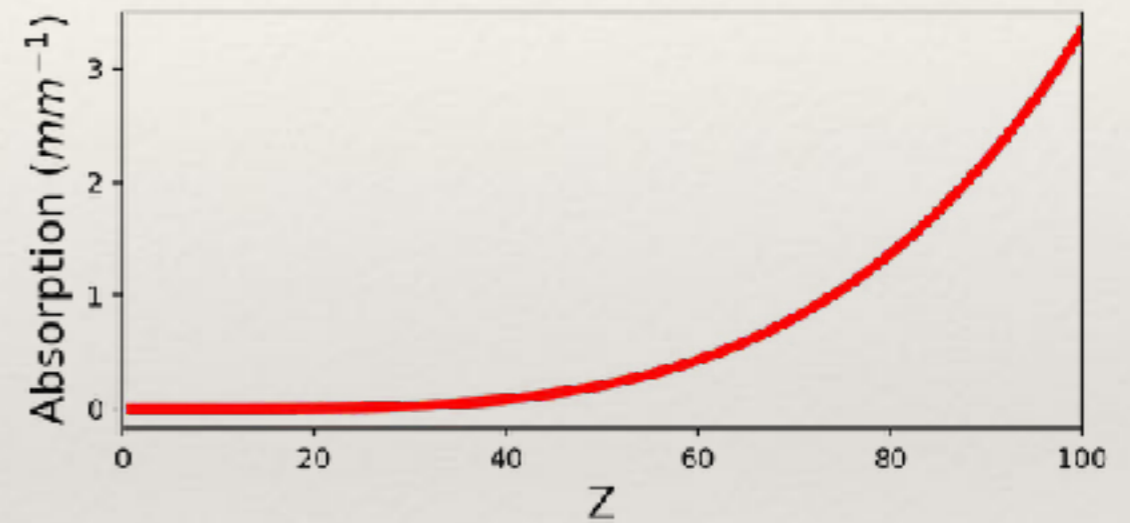
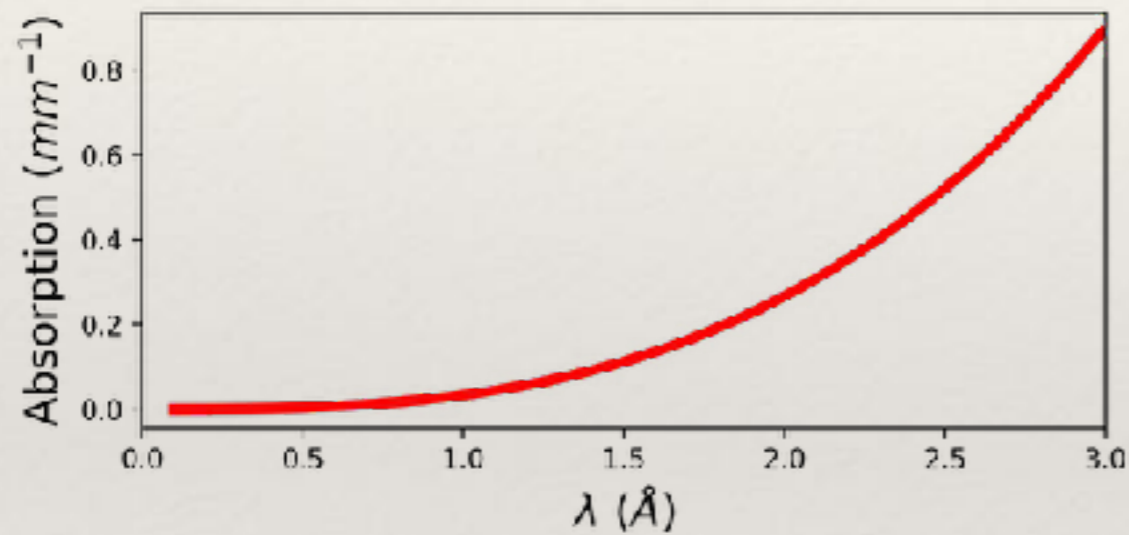
$$I = I_0 e^{-\mu x}$$



Absorption

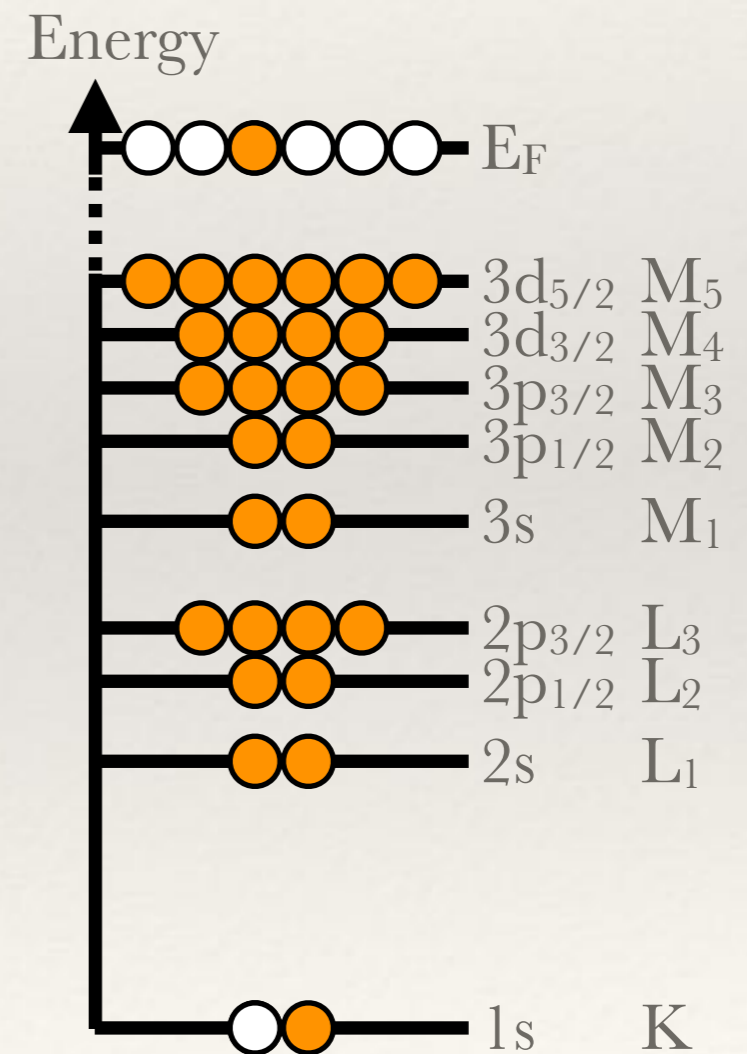
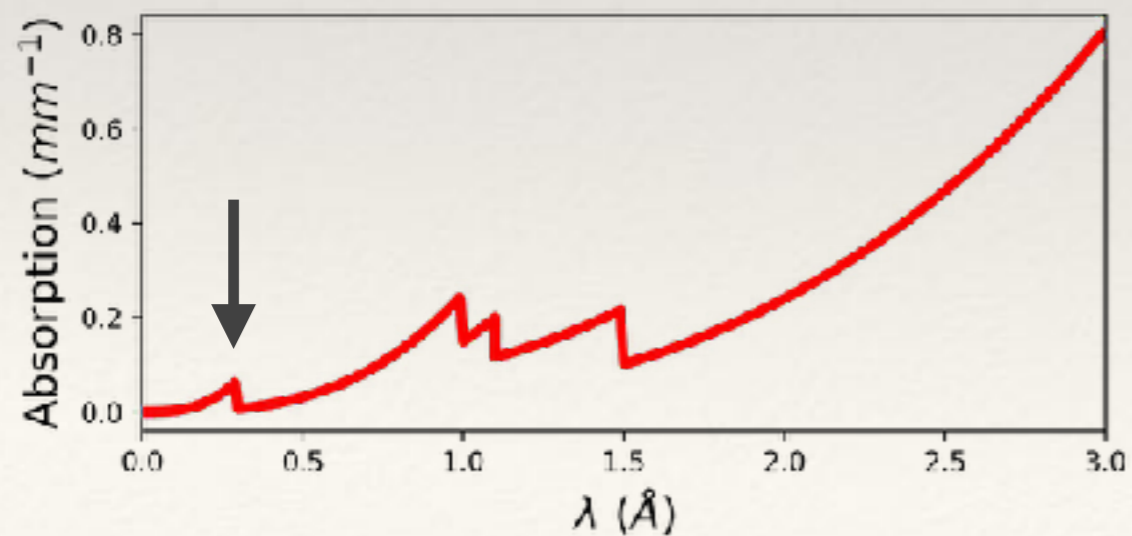
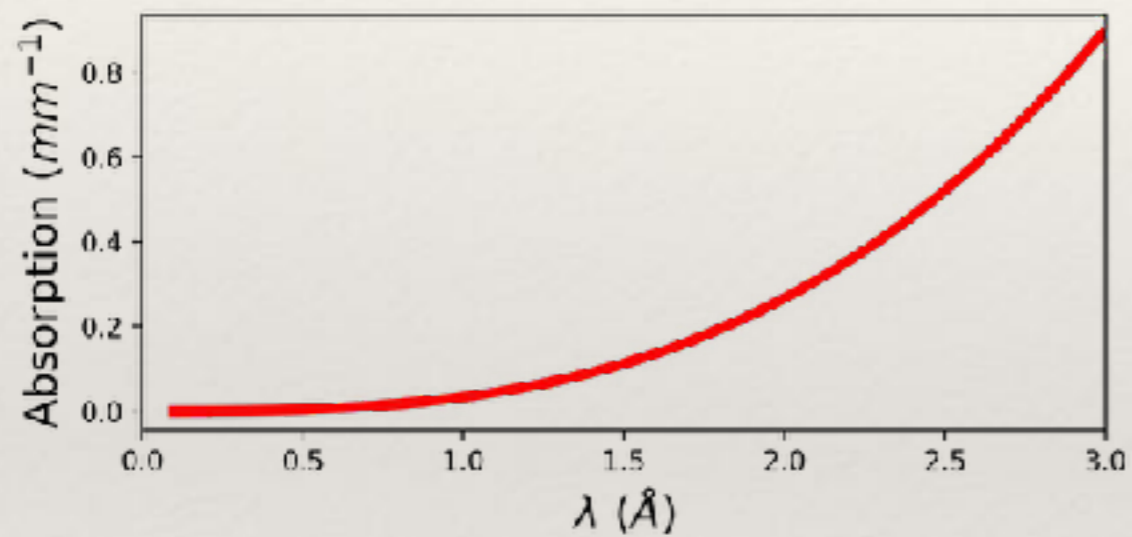
Définition : la loi de Bragg-Pierce s'écrit :

$$\mu \propto \lambda^3 Z^4$$



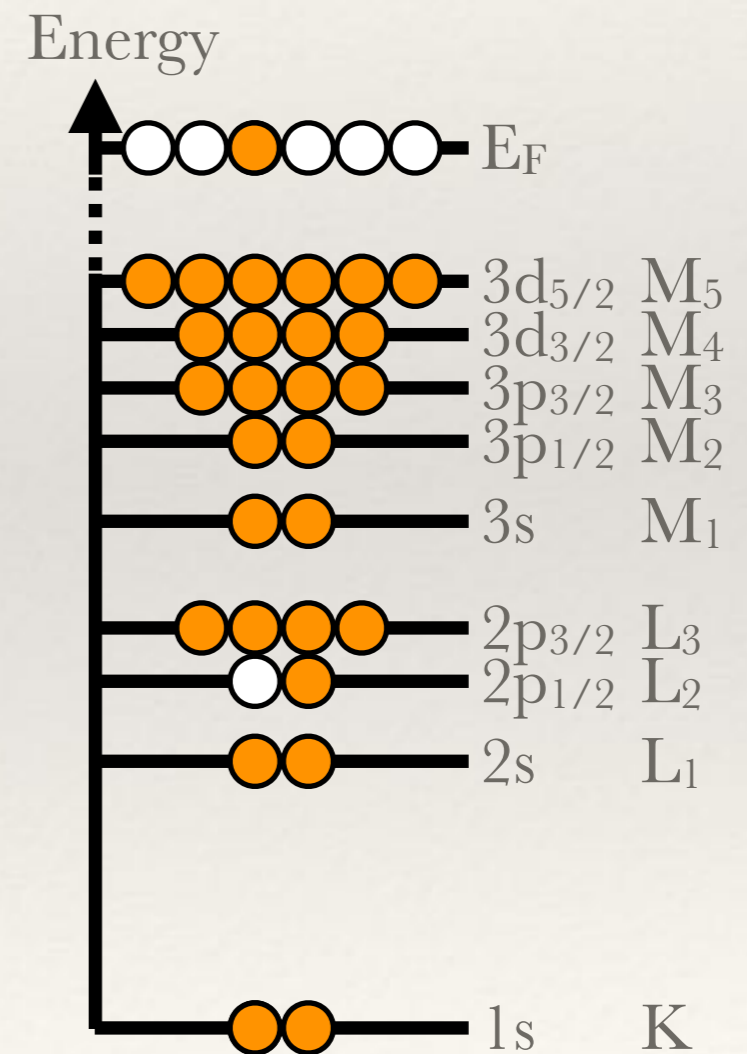
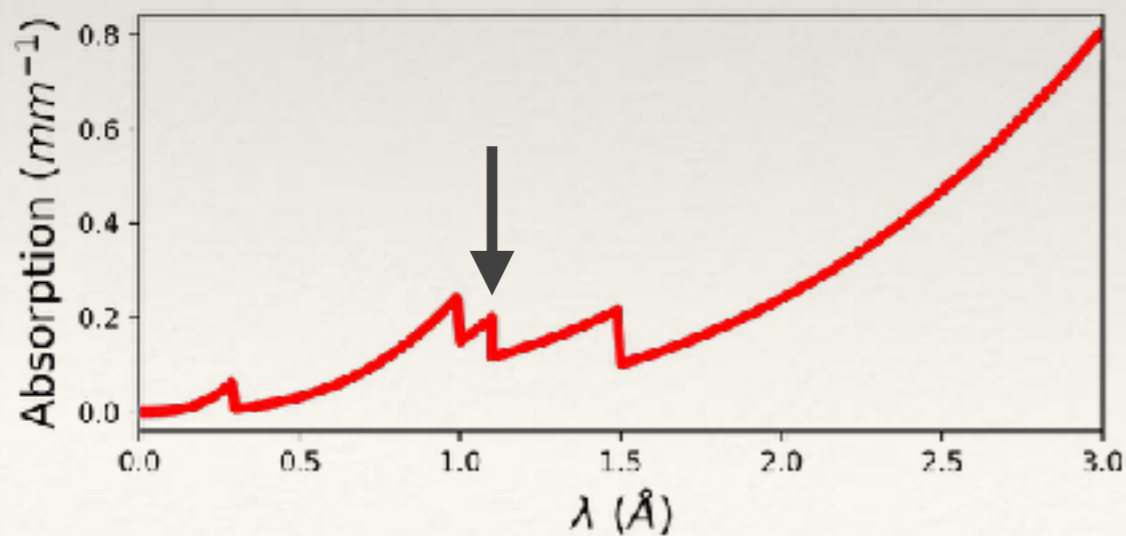
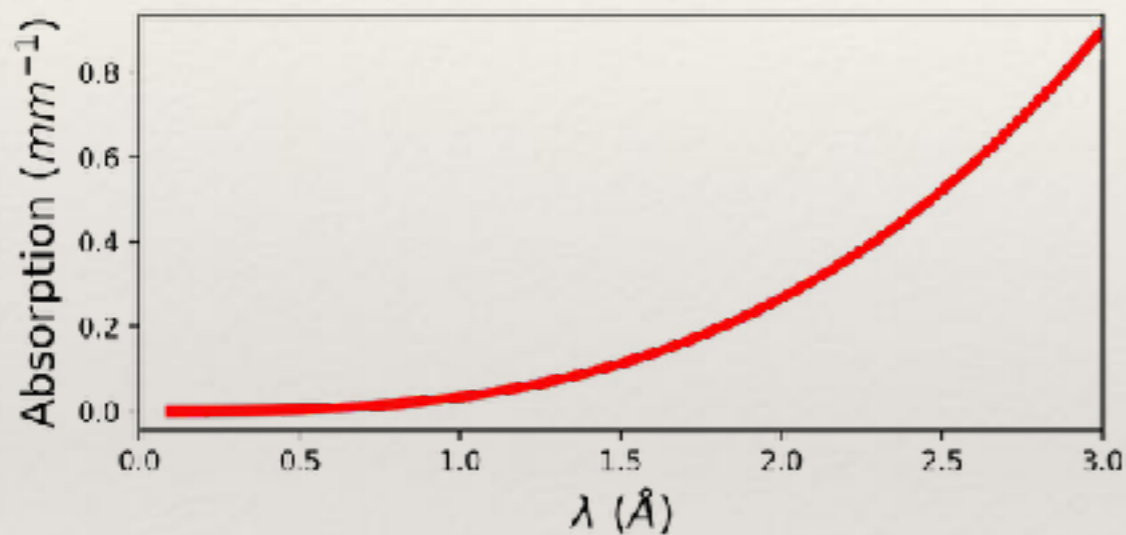
Absorption

Seuil d'absorption



Absorption

Seuil d'absorption

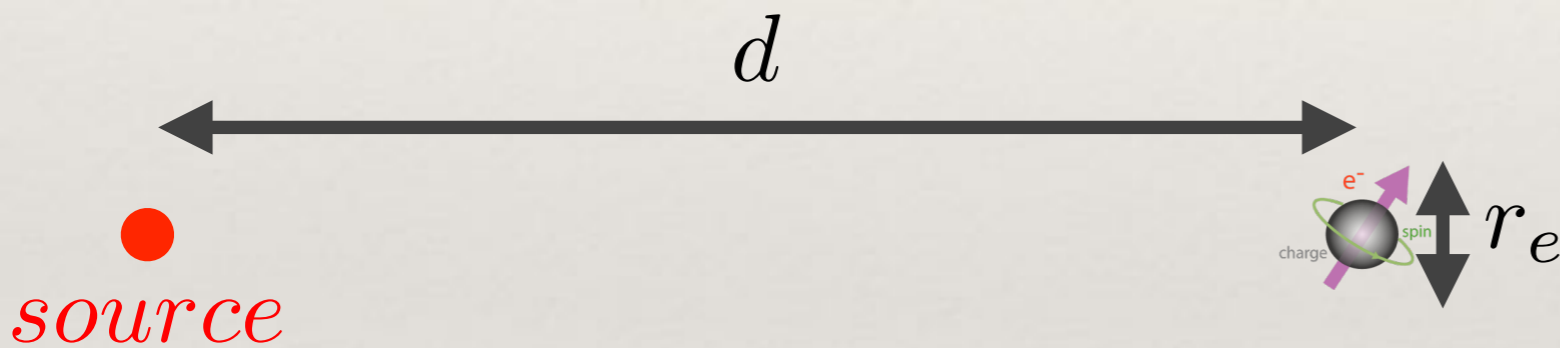


Diffusion Thomson

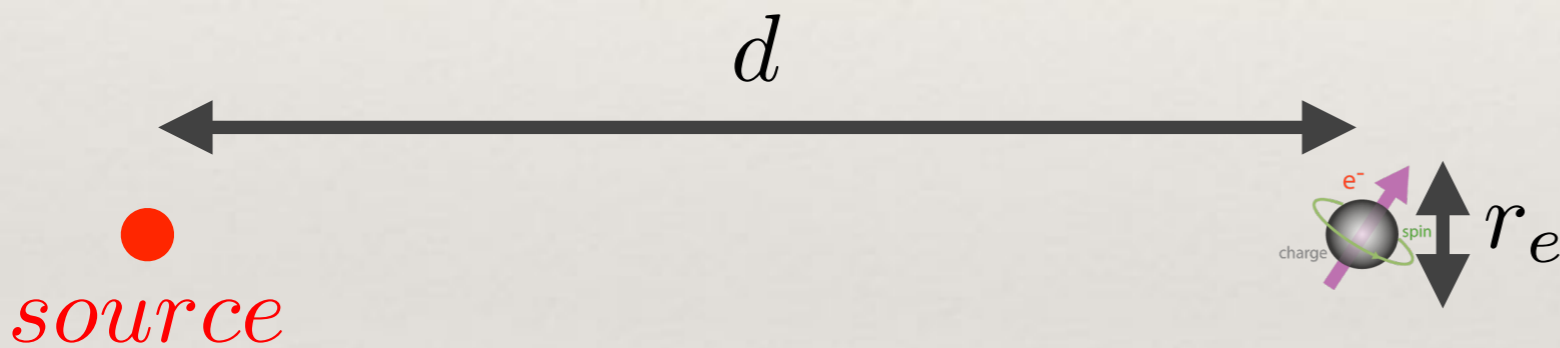
Onde plane progressive :

$$\vec{E}_i = E_0 e^{-i(\omega t + \vec{k}_i \cdot \vec{r})} \vec{e}_i$$

($d \gg r_e$)



Diffusion Thomson



Onde plane progressive :

$$\vec{E}_i = E_0 e^{-i(\omega t + \vec{k}_i \cdot \vec{r})} \vec{e}_i$$

($d \gg r_e$)

Monochromatique :

$$\hbar\omega_i = \hbar c \frac{2\pi}{\lambda_i} = \hbar c k_i$$

$$\lambda_{RX} \approx 1 \text{ \AA} \approx 10^{-10} \text{ m}$$

$$\lambda_{vis} \approx 500 \text{ nm} \approx 10^{-7} \text{ m}$$

Diffusion élastique :

$$k_i = k_f$$

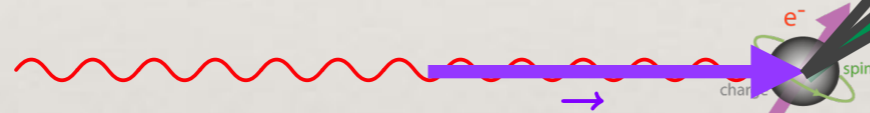
Section efficace

Intensité diffusée :

$$dI_f = \Phi_f dS = \Phi_i \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$$

$$\vec{E}_f = E_f e^{-i(\omega t + \vec{k}_f \cdot \vec{r})} \vec{e}_f$$

$$\vec{E}_i = E_0 e^{-i(\omega t + \vec{k}_i \cdot \vec{r})} \vec{e}_i$$



$$\vec{F} = -e\vec{E}_i = m_e \vec{a}$$

$$\Phi_{i,f} = \|\vec{E}_{i,f}\|^2 \frac{c}{\lambda_{i,f}} : \text{flux incident / diffusé } (m^{-2} \cdot s^{-1})$$

$$d\Omega = \frac{dS}{r^2} : \text{angle solide } (sr)$$

Section efficace

Intensité diffusée :

$$dI_f = \Phi_f dS = \Phi_i \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$$

$$\Phi_{i,f} = \|\vec{E}_{i,f}\|^2 \frac{c}{\lambda_{i,f}} : \text{flux incident / diffusé } (m^{-2} \cdot s^{-1})$$

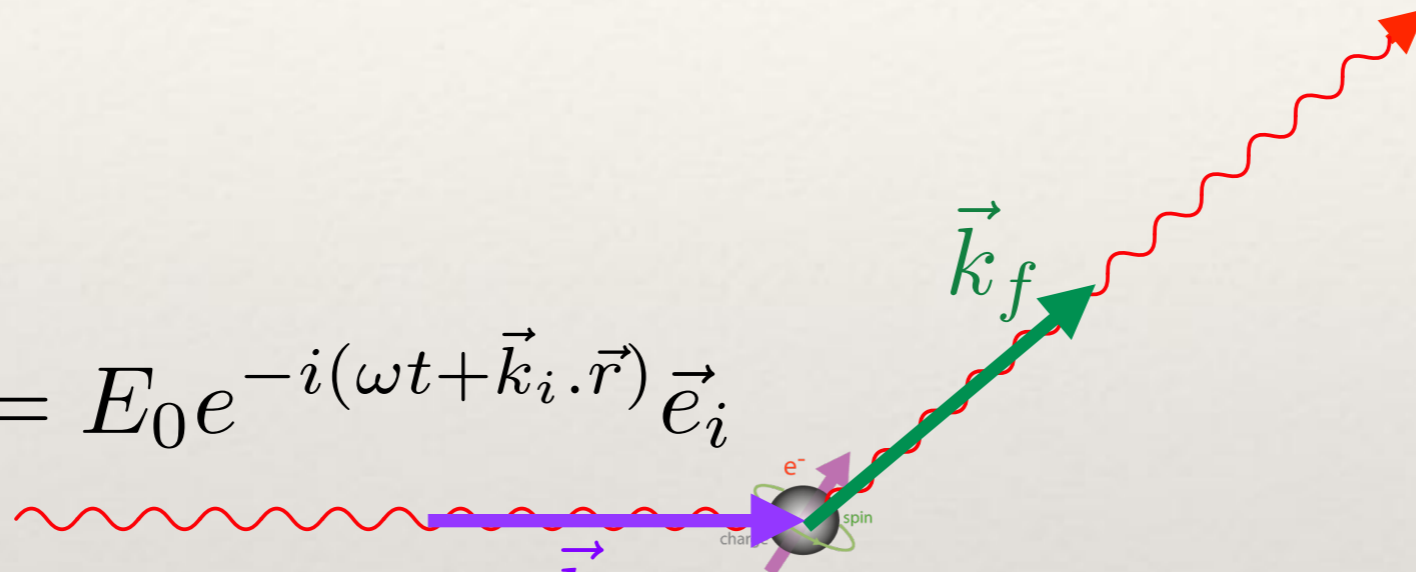
$$d\Omega = \frac{dS}{r^2} : \text{angle solide } (sr)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\|\vec{E}_f\|^2}{\|\vec{E}_i\|^2} \frac{\lambda_i}{\lambda_f} : \text{section efficace de diffusion}$$

Longueur de diffusion

$$\vec{E}_f = E_f e^{-i(\omega t + \vec{k}_f \cdot \vec{r})} \vec{e}_f$$

$$\vec{E}_i = E_0 e^{-i(\omega t + \vec{k}_i \cdot \vec{r})} \vec{e}_i$$



$$\vec{F} = -e\vec{E}_i = m_e \vec{a}$$

Amplitude diffusée :

$$E_f = \frac{E_0 e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2 r} (\vec{e}_i \cdot \vec{e}_f) = E_0 \frac{b_{Th}}{r}$$

Longueur de diffusion

$$b_{Th} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2} (\vec{e}_i \cdot \vec{e}_f)$$

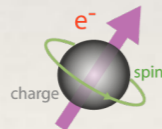
Longueur de diffusion

Amplitude diffusée :

$$E_f = \frac{E_0 e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2 r} (\vec{e}_i \cdot \vec{e}_f) = E_0 \frac{b_{Th}}{r}$$

$$r_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2} \approx 2.8 \cdot 10^{-15} m$$

Électron



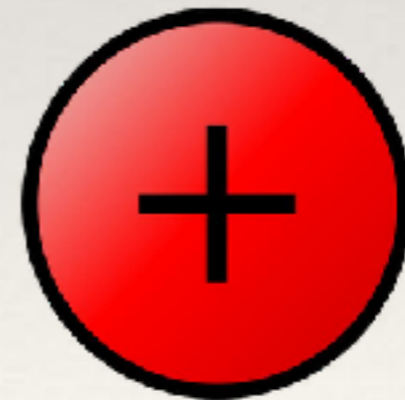
$$m_e = 9.1094 \cdot 10^{-31} kg$$

Longueur de diffusion :

$$b_{Th} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2} (\vec{e}_i \cdot \vec{e}_f)$$

$$b_{Th} = r_e (\vec{e}_i \cdot \vec{e}_f)$$

Proton



$$m_p = 1,6726 \cdot 10^{-27} kg$$

Longueur de diffusion

Amplitude diffusée :

$$E_f = \frac{E_0 e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2 r} (\vec{e}_i \cdot \vec{e}_f) = E_0 \frac{b_{Th}}{r}$$

$$r_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2}$$

Longueur de diffusion :

$$b_{Th} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2} (\vec{e}_i \cdot \vec{e}_f)$$

$$b_{Th} = r_e (\vec{e}_i \cdot \vec{e}_f)$$

Section efficace de diffusion

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = b b^*$$

Facteur de polarisation

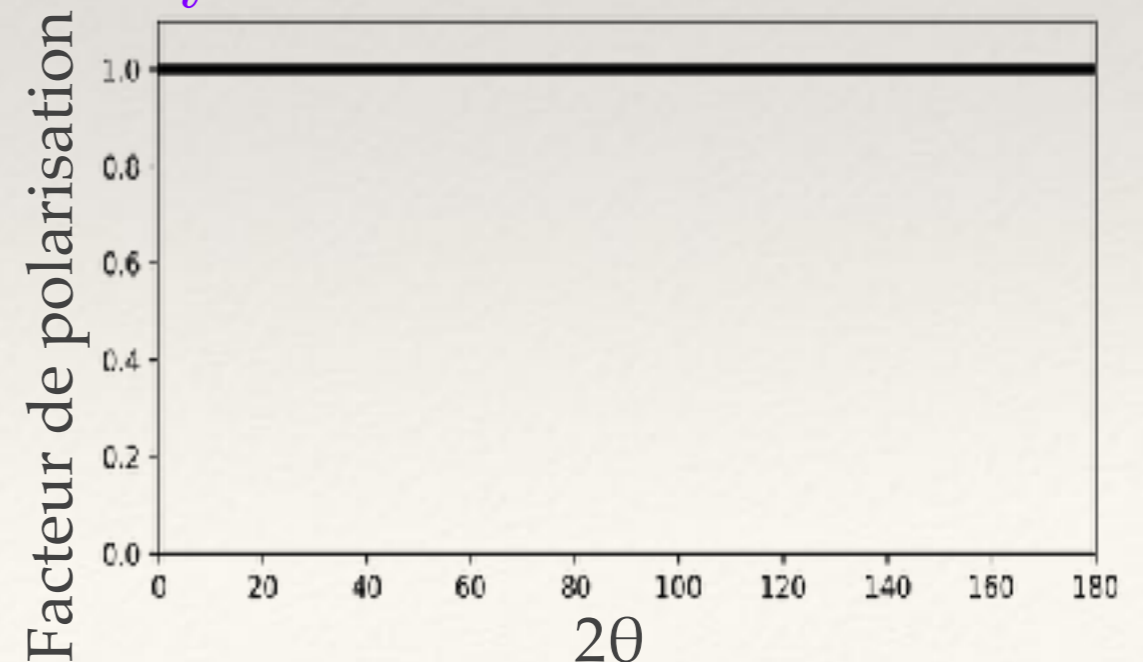
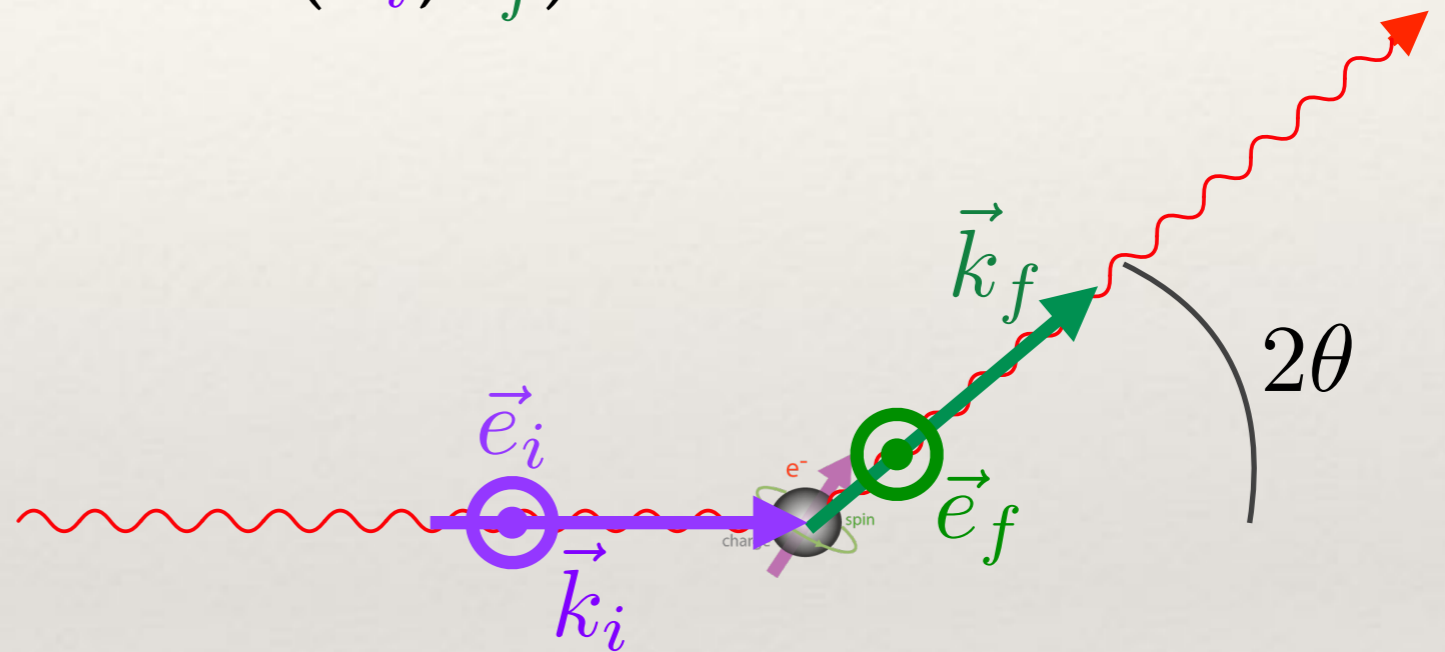
$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_f$$

Facteur de polarisation

Plan de diffusion : (\vec{k}_i, \vec{k}_f)

Cas 1 : \vec{e}_i, \vec{e}_f perpendiculaire à (\vec{k}_i, \vec{k}_f)

$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_f = 1$$



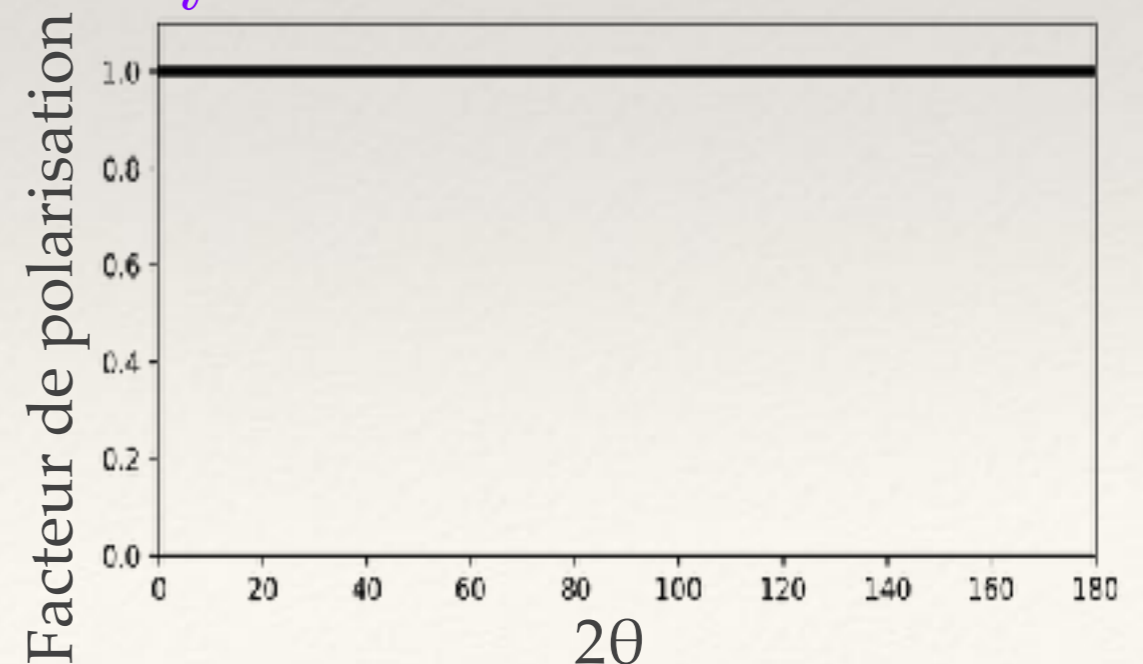
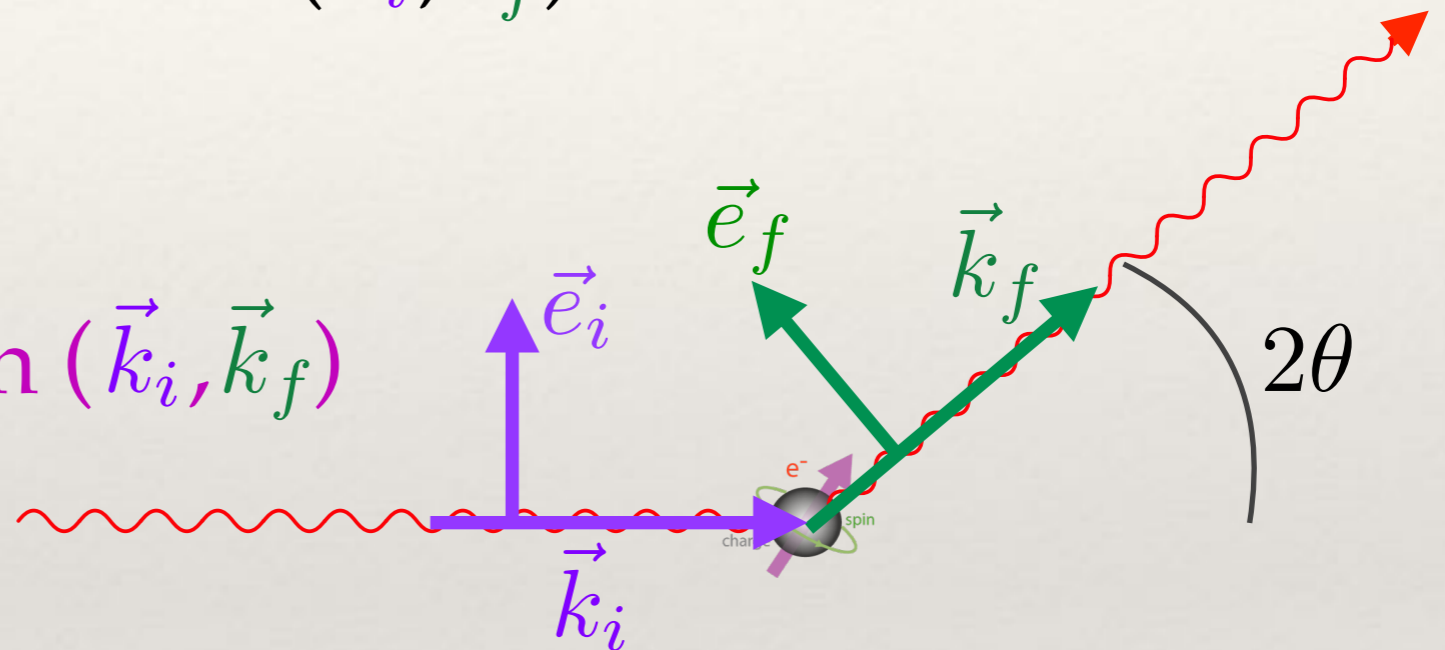
Facteur de polarisation

Plan de diffusion : (\vec{k}_i, \vec{k}_f)

Cas 1 : \vec{e}_i, \vec{e}_f perpendiculaire à (\vec{k}_i, \vec{k}_f)

$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_f = 1$$

Cas 2 : \vec{e}_i, \vec{e}_f dans le plan (\vec{k}_i, \vec{k}_f)



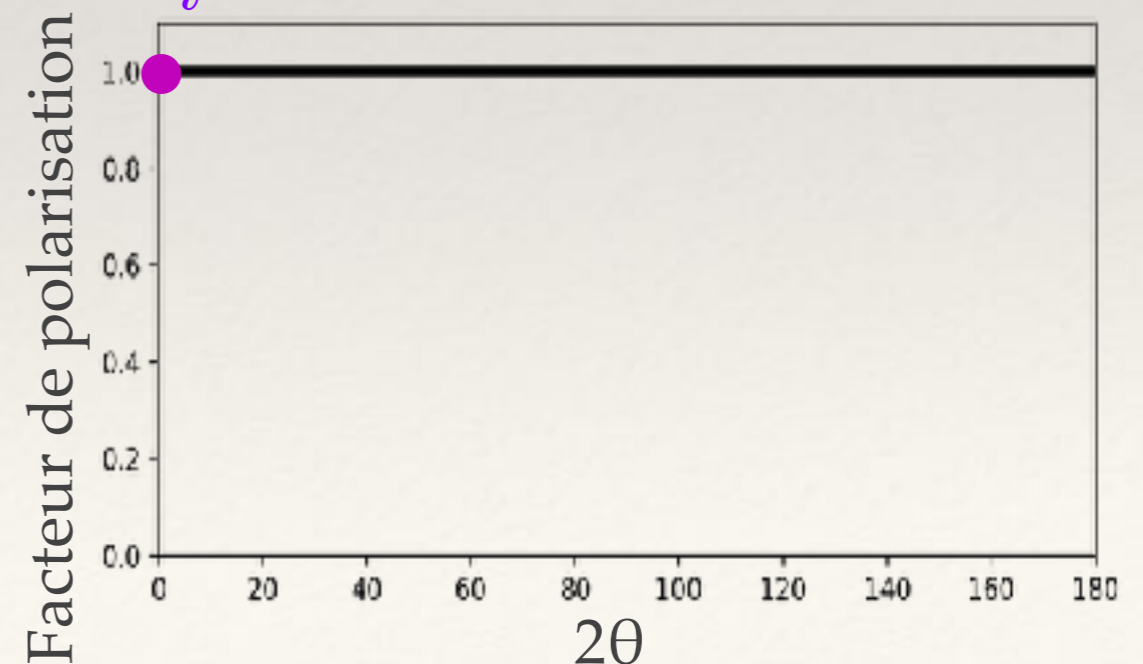
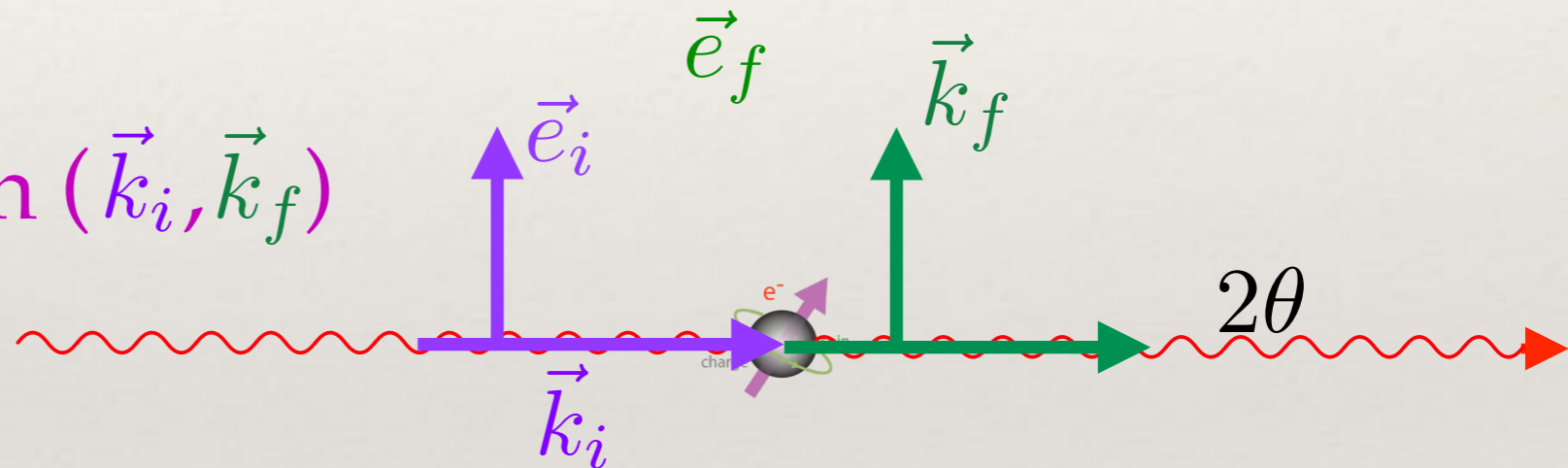
Facteur de polarisation

Plan de diffusion : (\vec{k}_i, \vec{k}_f)

Cas 1 : \vec{e}_i, \vec{e}_f perpendiculaire à (\vec{k}_i, \vec{k}_f)

$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_f = 1$$

Cas 2 : \vec{e}_i, \vec{e}_f dans le plan (\vec{k}_i, \vec{k}_f)



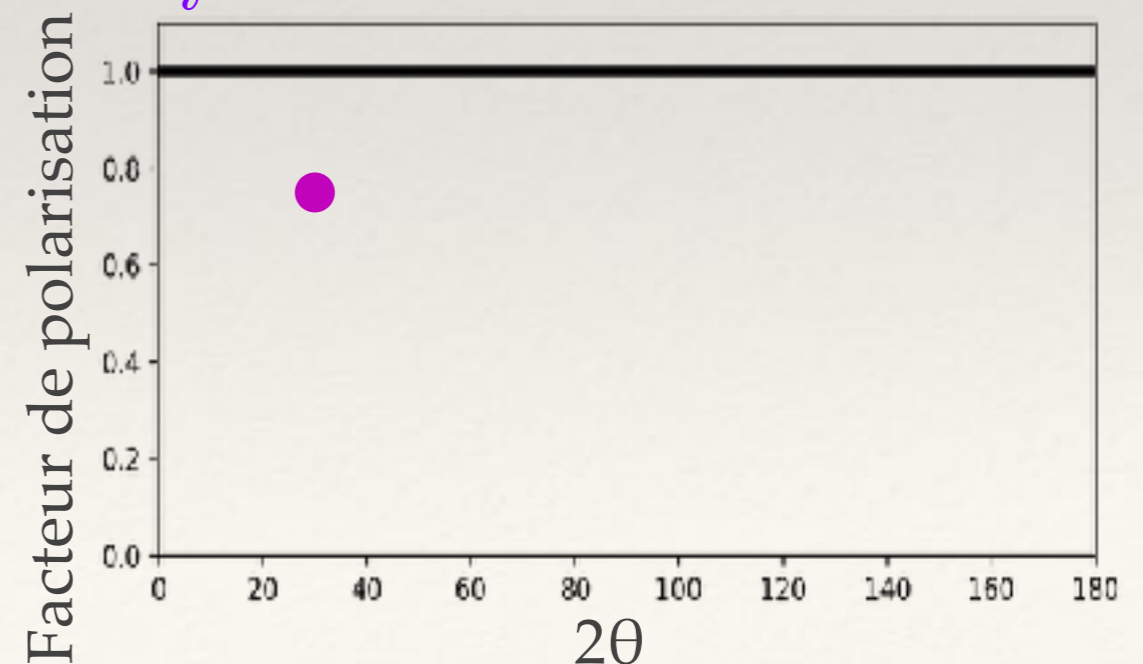
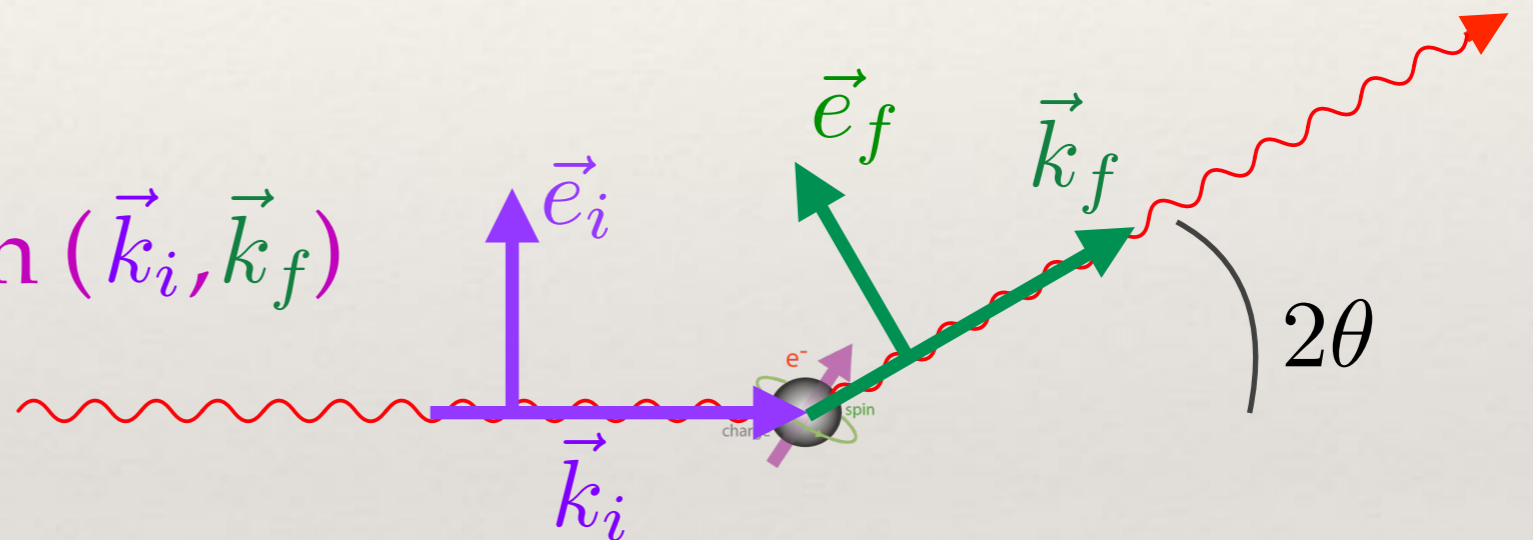
Facteur de polarisation

Plan de diffusion : (\vec{k}_i, \vec{k}_f)

Cas 1 : \vec{e}_i, \vec{e}_f perpendiculaire à (\vec{k}_i, \vec{k}_f)

$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_f = 1$$

Cas 2 : \vec{e}_i, \vec{e}_f dans le plan (\vec{k}_i, \vec{k}_f)



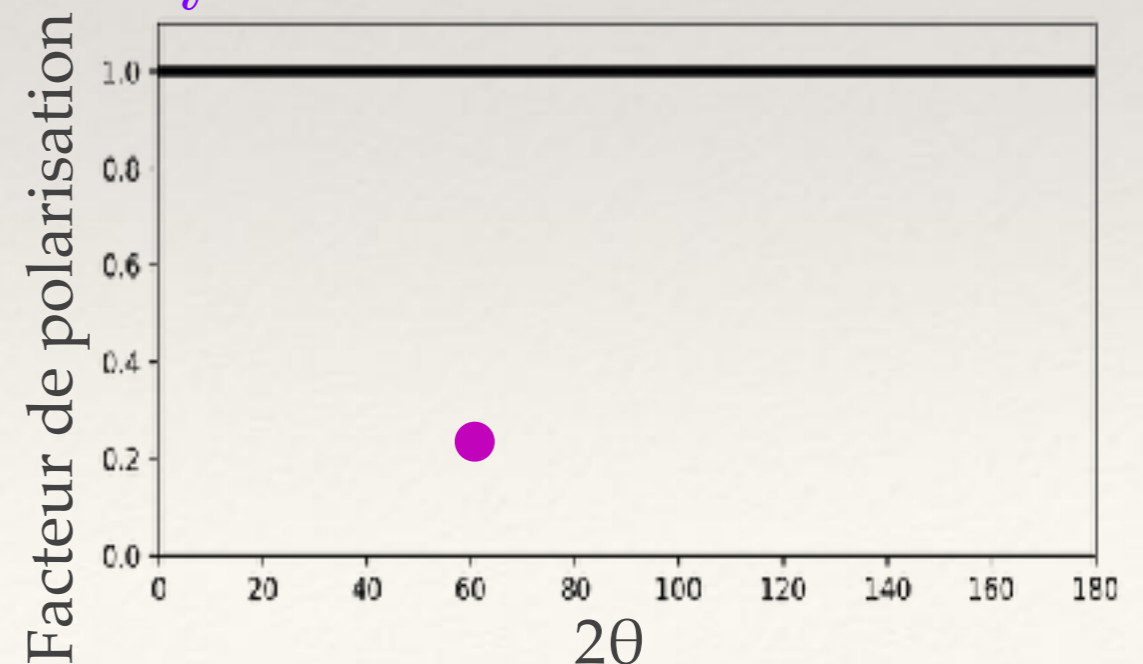
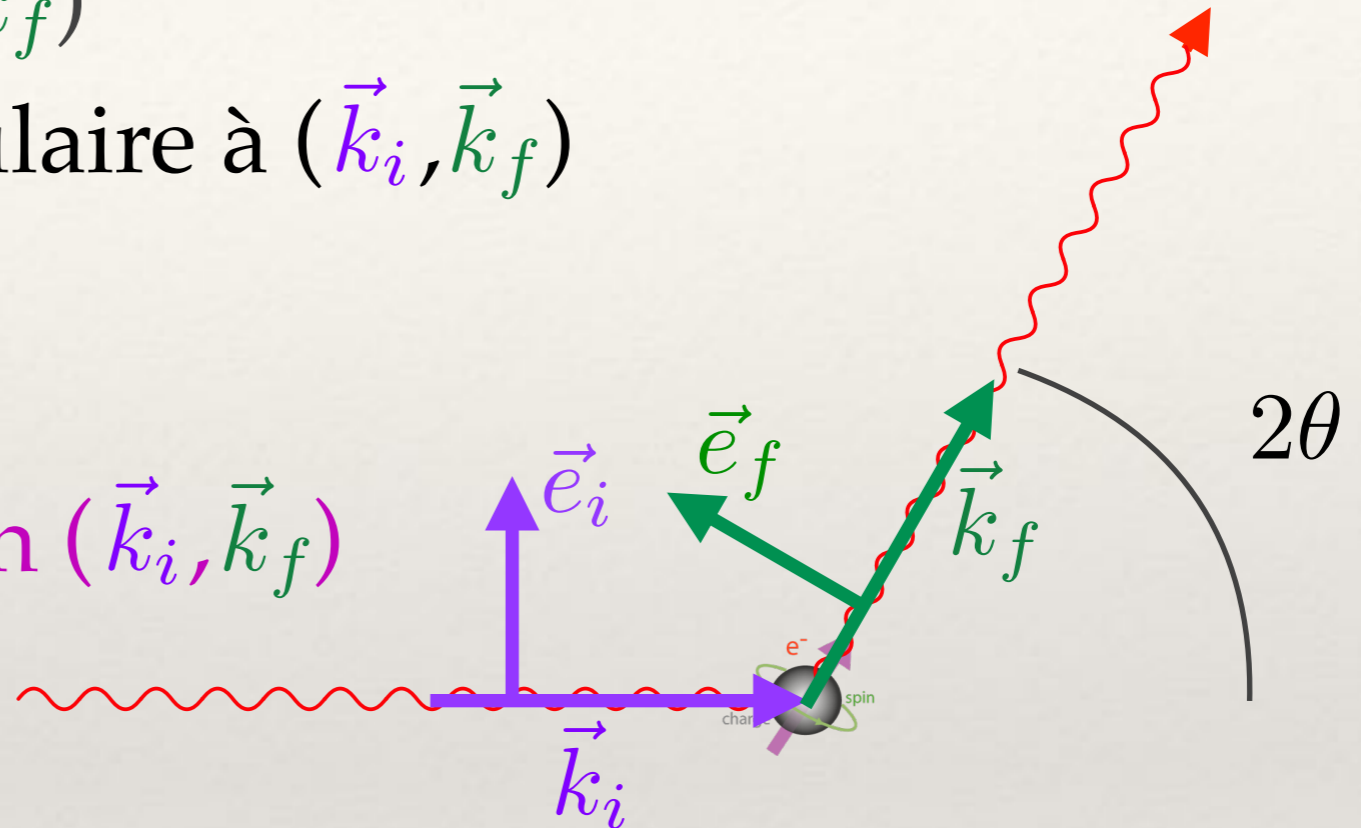
Facteur de polarisation

Plan de diffusion : (\vec{k}_i, \vec{k}_f)

Cas 1 : \vec{e}_i, \vec{e}_f perpendiculaire à (\vec{k}_i, \vec{k}_f)

$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_f = 1$$

Cas 2 : \vec{e}_i, \vec{e}_f dans le plan (\vec{k}_i, \vec{k}_f)



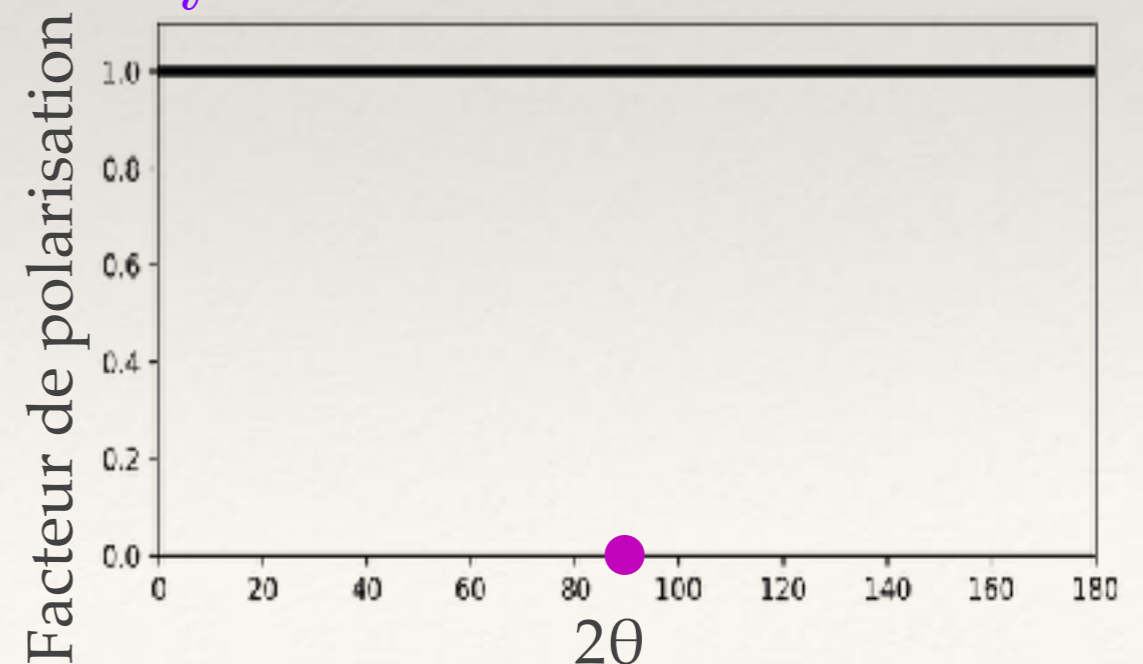
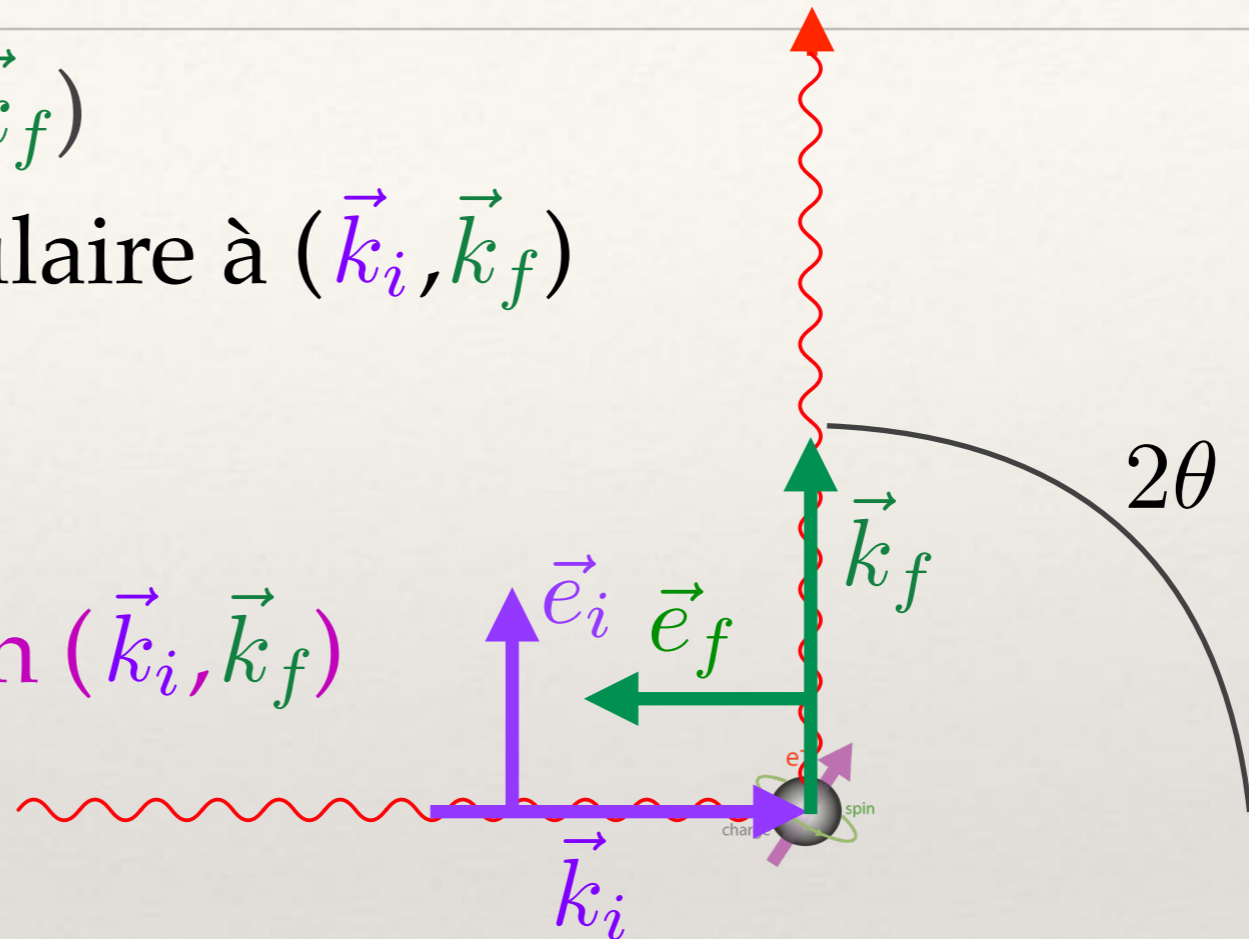
Facteur de polarisation

Plan de diffusion : (\vec{k}_i, \vec{k}_f)

Cas 1 : \vec{e}_i, \vec{e}_f perpendiculaire à (\vec{k}_i, \vec{k}_f)

$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_f = 1$$

Cas 2 : \vec{e}_i, \vec{e}_f dans le plan (\vec{k}_i, \vec{k}_f)



Facteur de polarisation

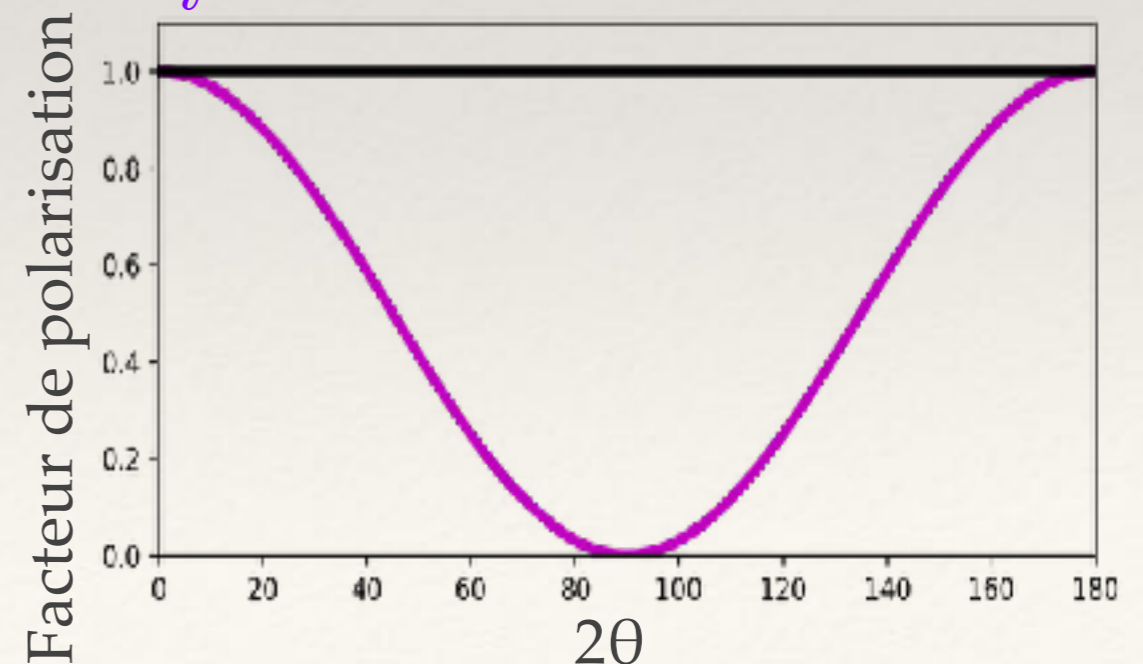
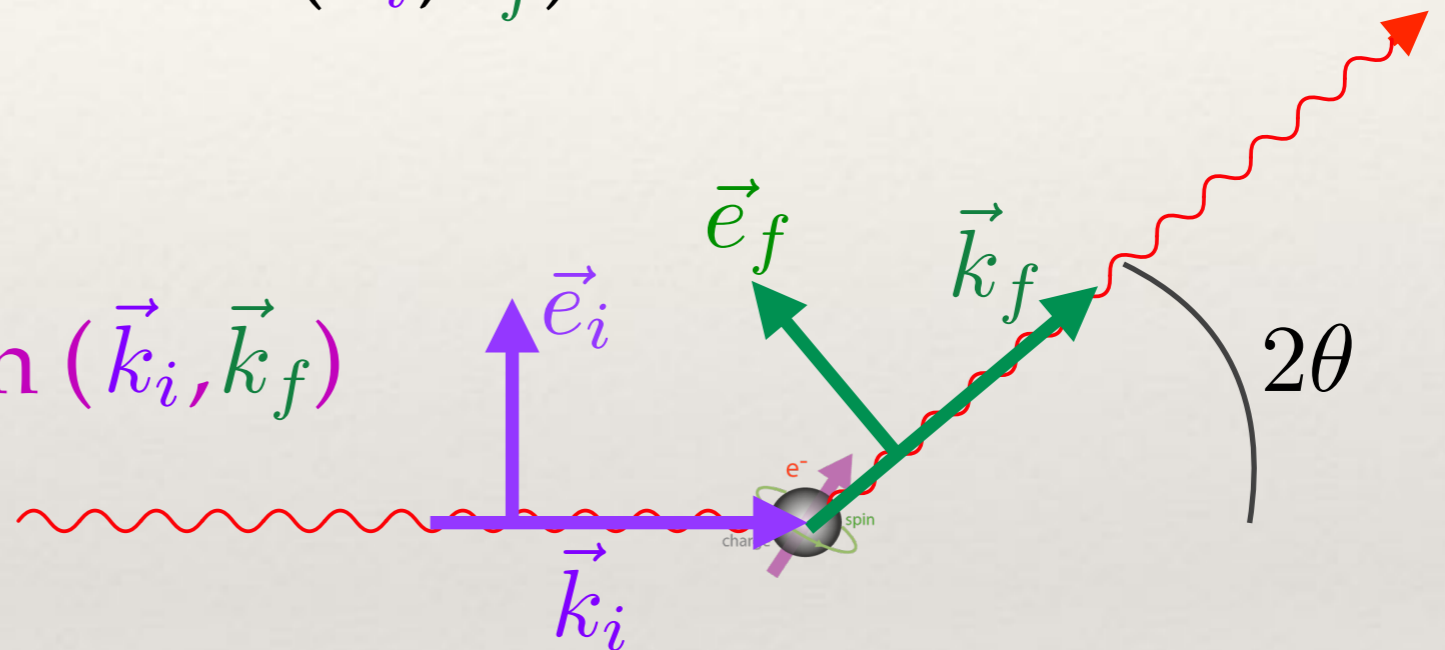
Plan de diffusion : (\vec{k}_i, \vec{k}_f)

Cas 1 : \vec{e}_i, \vec{e}_f perpendiculaire à (\vec{k}_i, \vec{k}_f)

$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_f = 1$$

Cas 2 : \vec{e}_i, \vec{e}_f dans le plan (\vec{k}_i, \vec{k}_f)

$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_f = \cos(2\theta)$$



Facteur de polarisation

Plan de diffusion : (\vec{k}_i, \vec{k}_f)

Cas 1 : \vec{e}_i, \vec{e}_f perpendiculaire à (\vec{k}_i, \vec{k}_f)

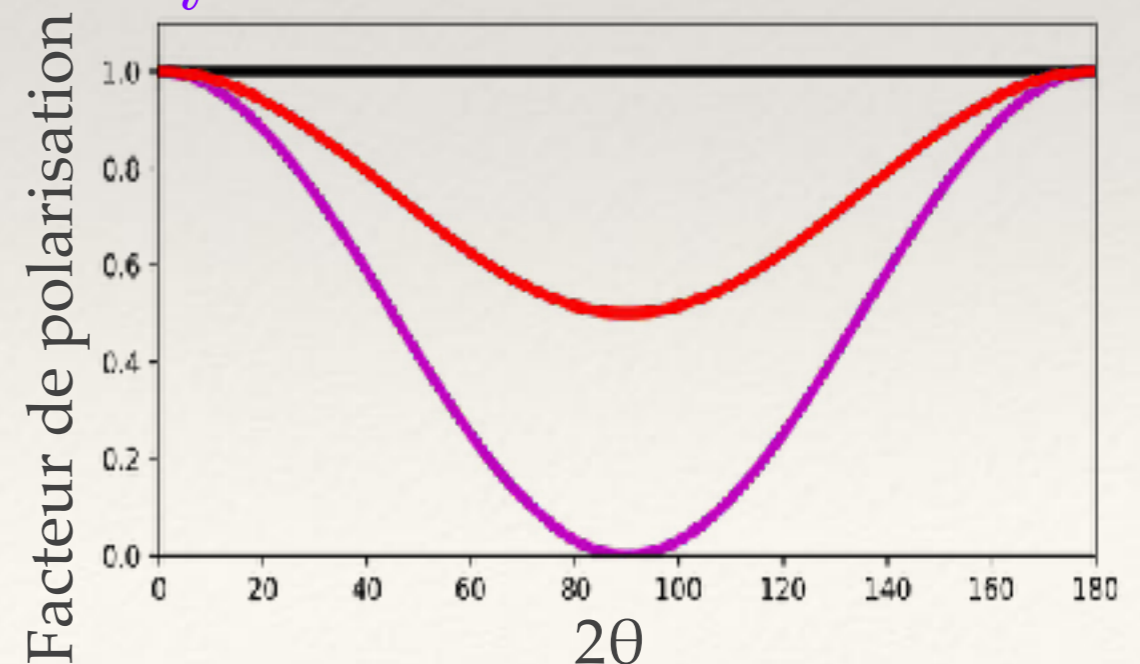
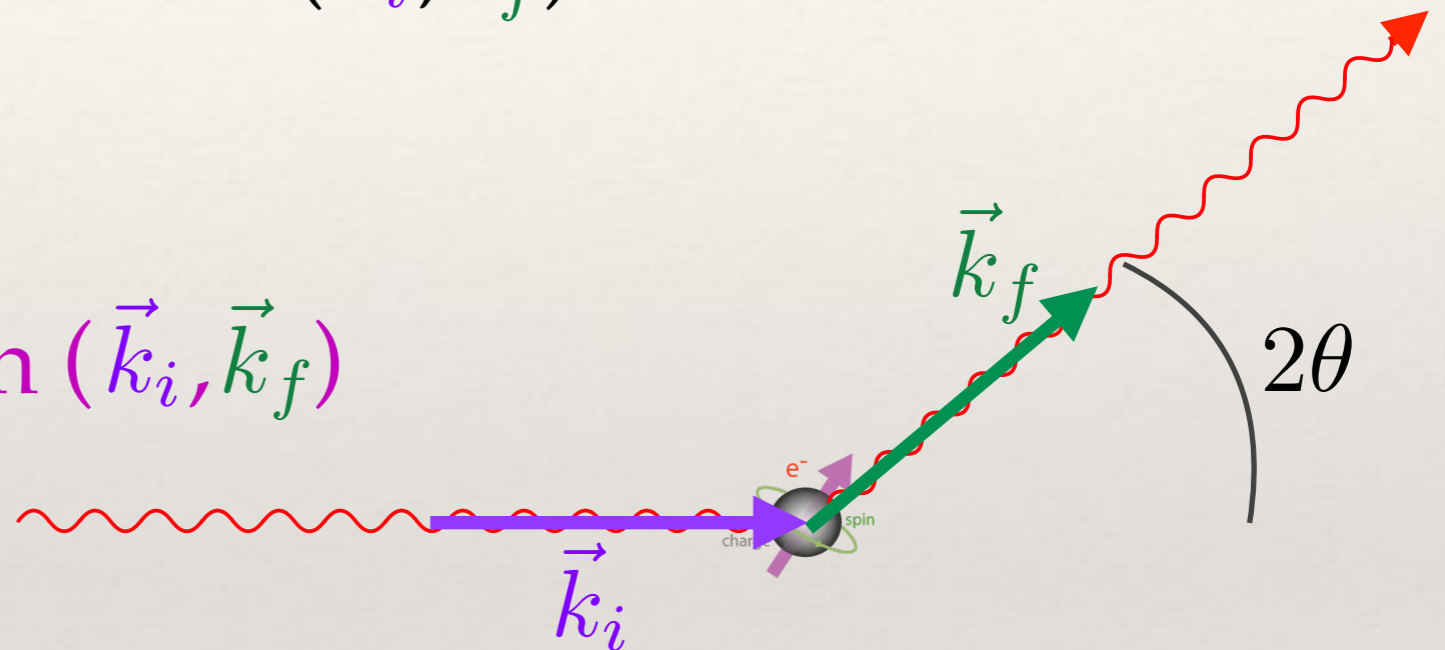
$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_f = 1$$

Cas 2 : \vec{e}_i, \vec{e}_f dans le plan (\vec{k}_i, \vec{k}_f)

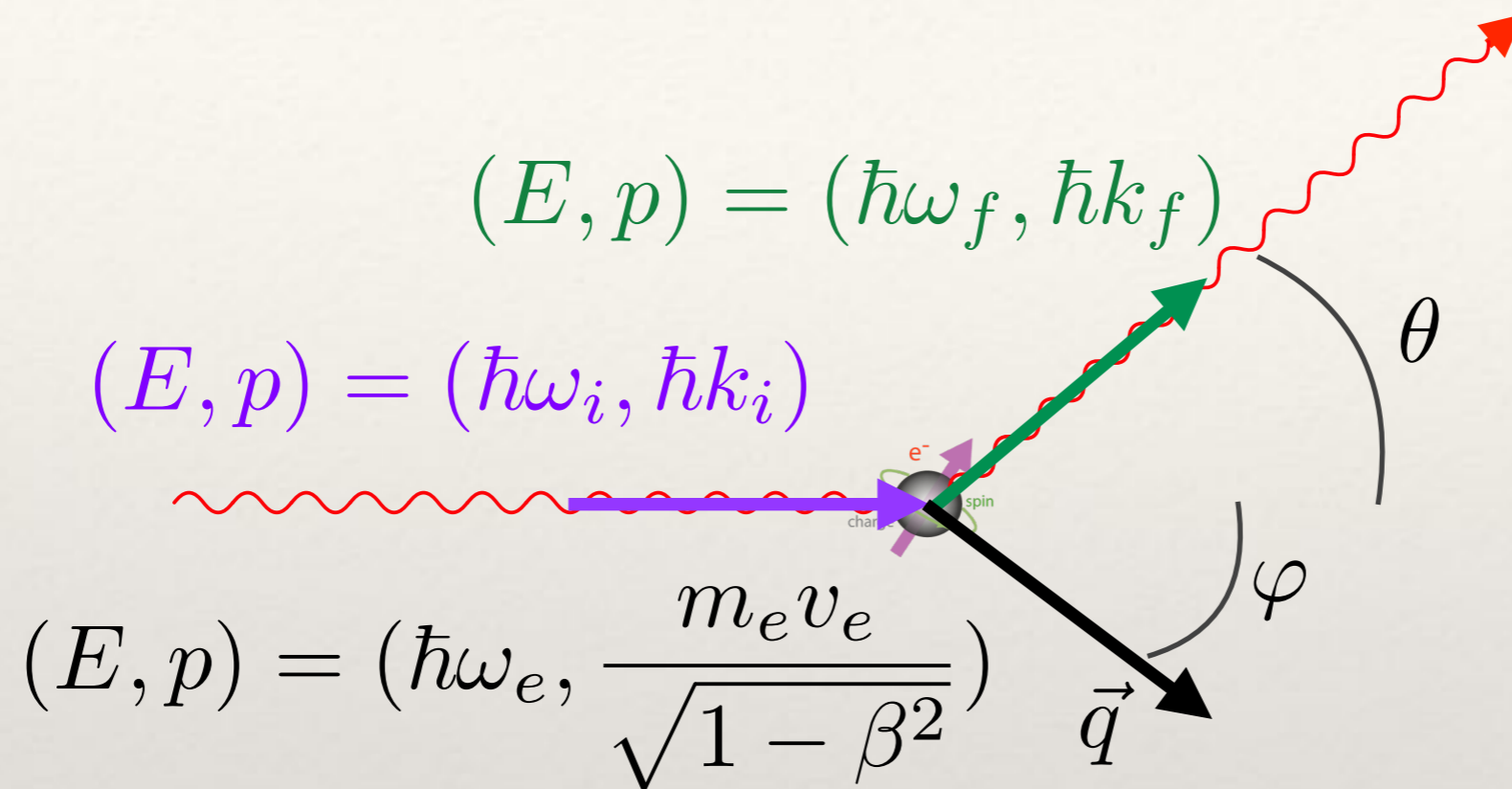
$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_f = \cos(2\theta)$$

Cas 3 : \vec{e}_i, \vec{e}_f non polarisé

$$\langle \vec{e}_i \cdot \vec{e}_f \rangle = \frac{1 + \cos^2(2\theta)}{2}$$



Diffusion Compton

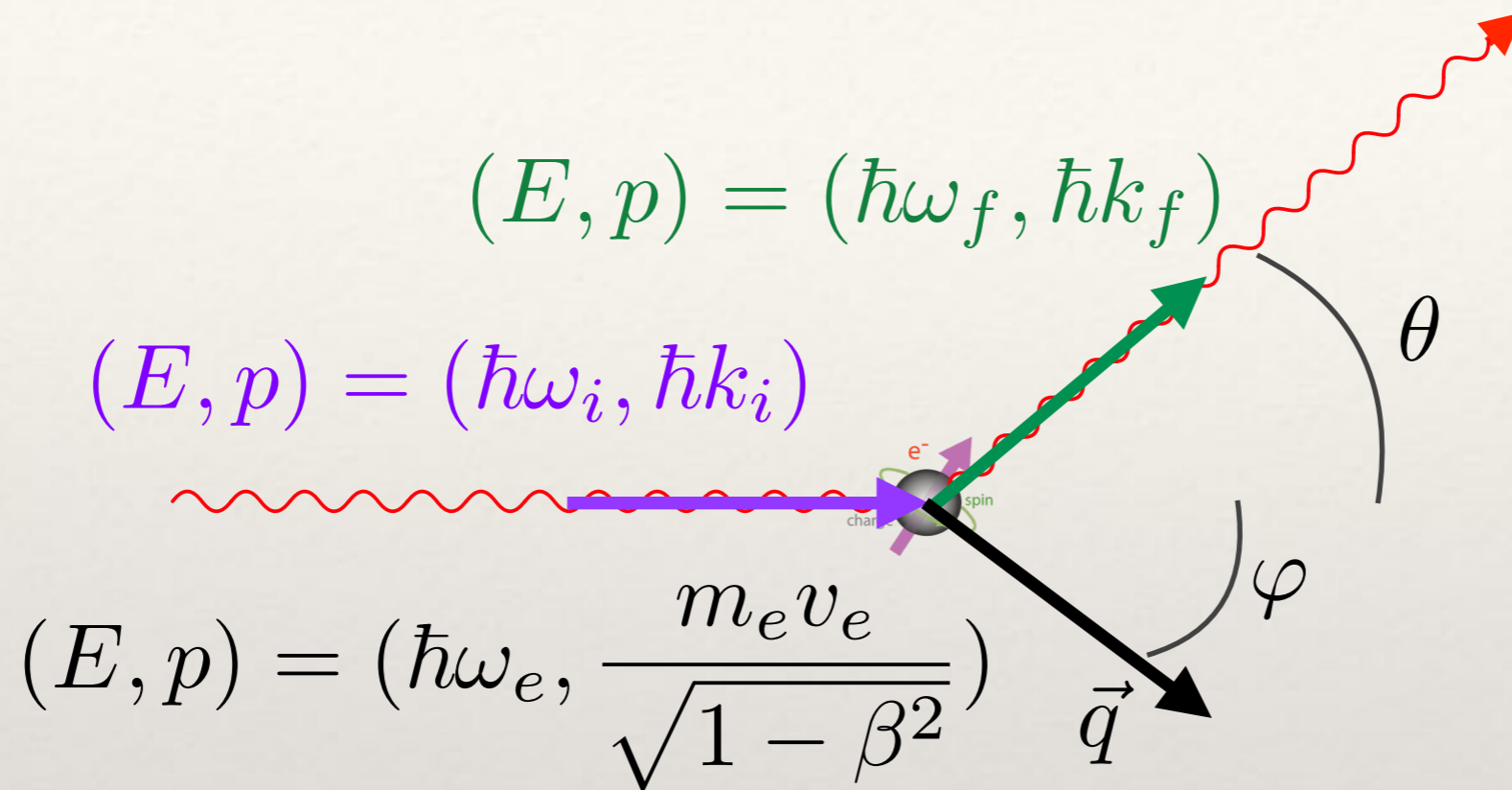


Conservation de l'énergie : $\hbar\omega_i + m_e c^2 = \hbar\omega_e + \frac{m_e c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}}$

Conservation du moment : $\hbar k_i = \hbar k_f \cos(\theta) + \frac{m_e v_e}{\sqrt{1 - \beta^2}} \cos(\varphi)$

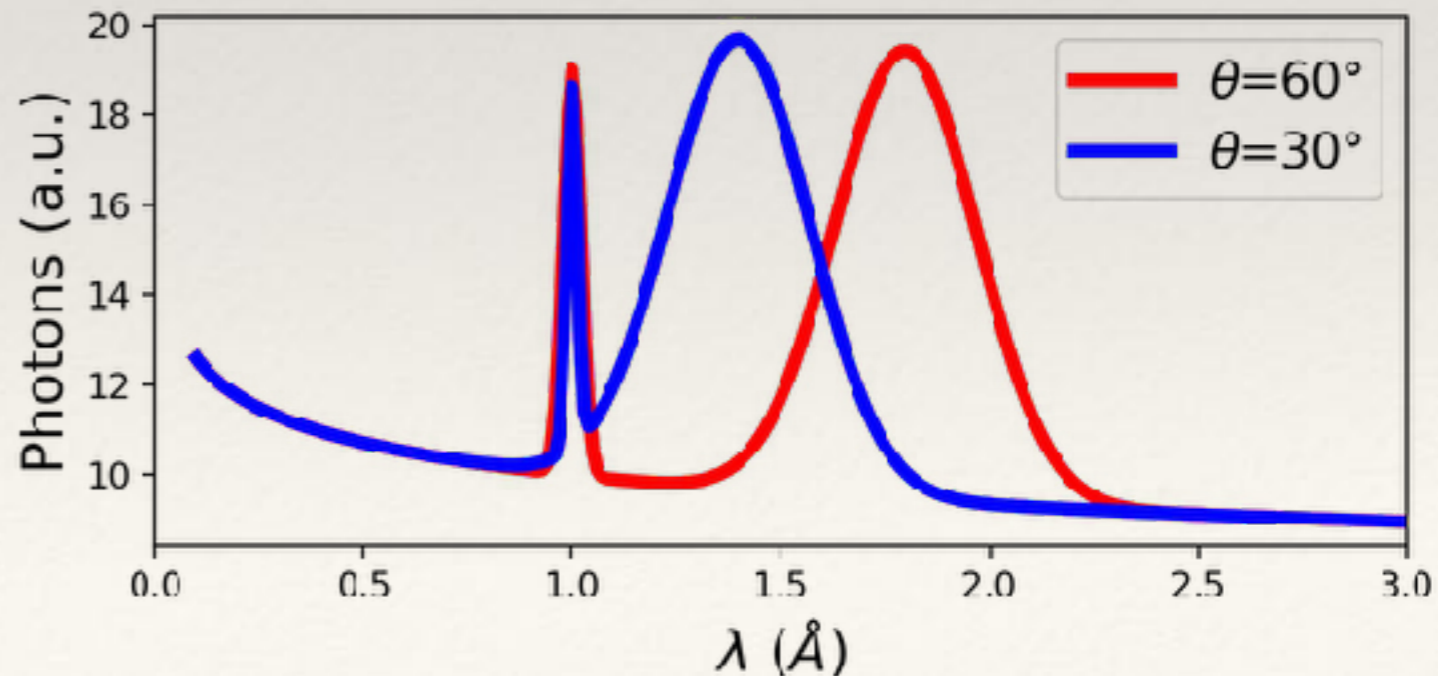
$0 = \hbar k_f \sin(\theta) + \frac{m_e v_e}{\sqrt{1 - \beta^2}} \sin(\varphi)$

Diffusion Compton



Diffusion Compton

$$\lambda_f - \lambda_i = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos(\theta))$$



Diffusion Compton

Diffusion Thomson

Élastique

Isotrope

Intensité $\propto Z^2$

Diffusion Compton

Inélastique

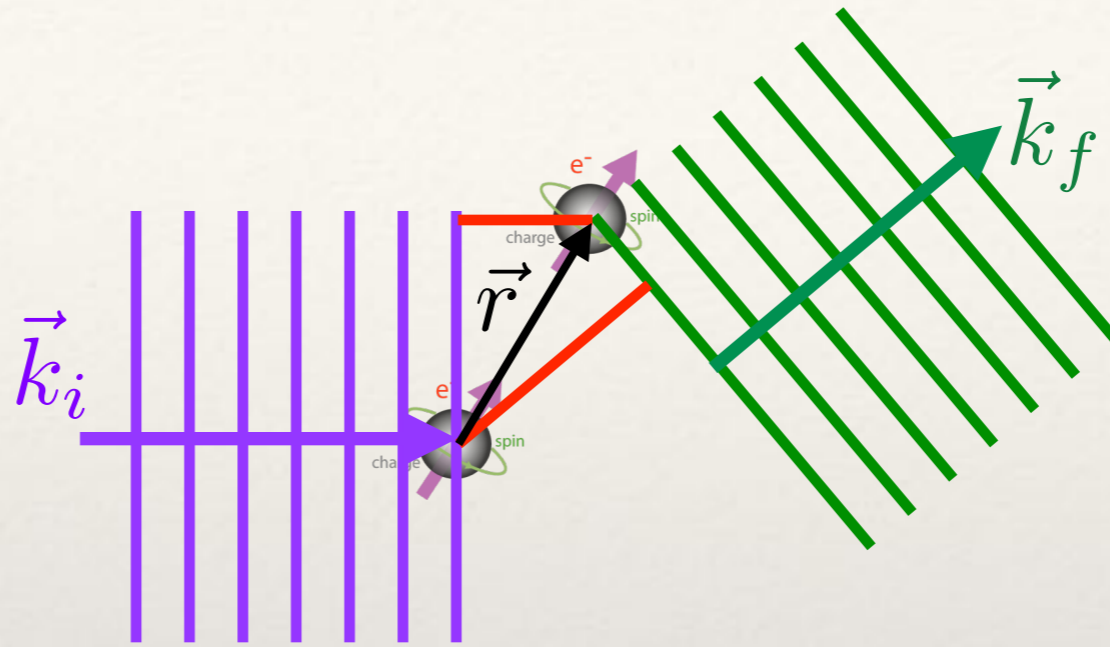
$$\lambda_f - \lambda_i = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos(\theta))$$

Intensité $\propto Z$

Partie 7 : Diffraction

- ❖ Diffusion par 2 électrons
- ❖ Diffusion par un atome
- ❖ Diffusion par une maille
- ❖ Diffusion par un cristal
- ❖ Loi de Bragg
 - ❖ Lien entre Condition de diffraction et familles de plans réticulaire

Diffusion par 2 électrons



Différence de chemin (déphasage) :

$$\Delta\varphi = \vec{k}_f \cdot \vec{r} - \vec{k}_i \cdot \vec{r} = (\vec{k}_f - \vec{k}_i) \cdot \vec{r} = \vec{q} \cdot \vec{r}$$

Avec $\vec{q} = \vec{k}_f - \vec{k}_i$, le vecteur de diffusion

$$\text{Amplitude diffusée par 2 } e^- : E_f = E_0 \frac{b_{Th}}{r} \vec{e}_i \cdot \vec{e}_f \left[1 + e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r})} \right]$$

Diffusion par un atome

Amplitude diffusée par 2 e⁻ :

$$E_f = E_0 \frac{b_{Th}}{r} \vec{e}_i \cdot \vec{e}_f \left[1 + e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r})} \right]$$

Amplitude diffusée par n e⁻ d'un atome:

$$E_f = E_0 \frac{b_{Th}}{r} \vec{e}_i \cdot \vec{e}_f \sum_i^{N_{e^-}} e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r}_i)}$$

Amplitude diffusée par un atome de densité $\rho(\vec{r})$:

$$E_f = E_0 \frac{b_{Th}}{r} \vec{e}_i \cdot \vec{e}_f \int_V e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r})} \rho(\vec{r}) d^3 r$$

Diffusion par un atome

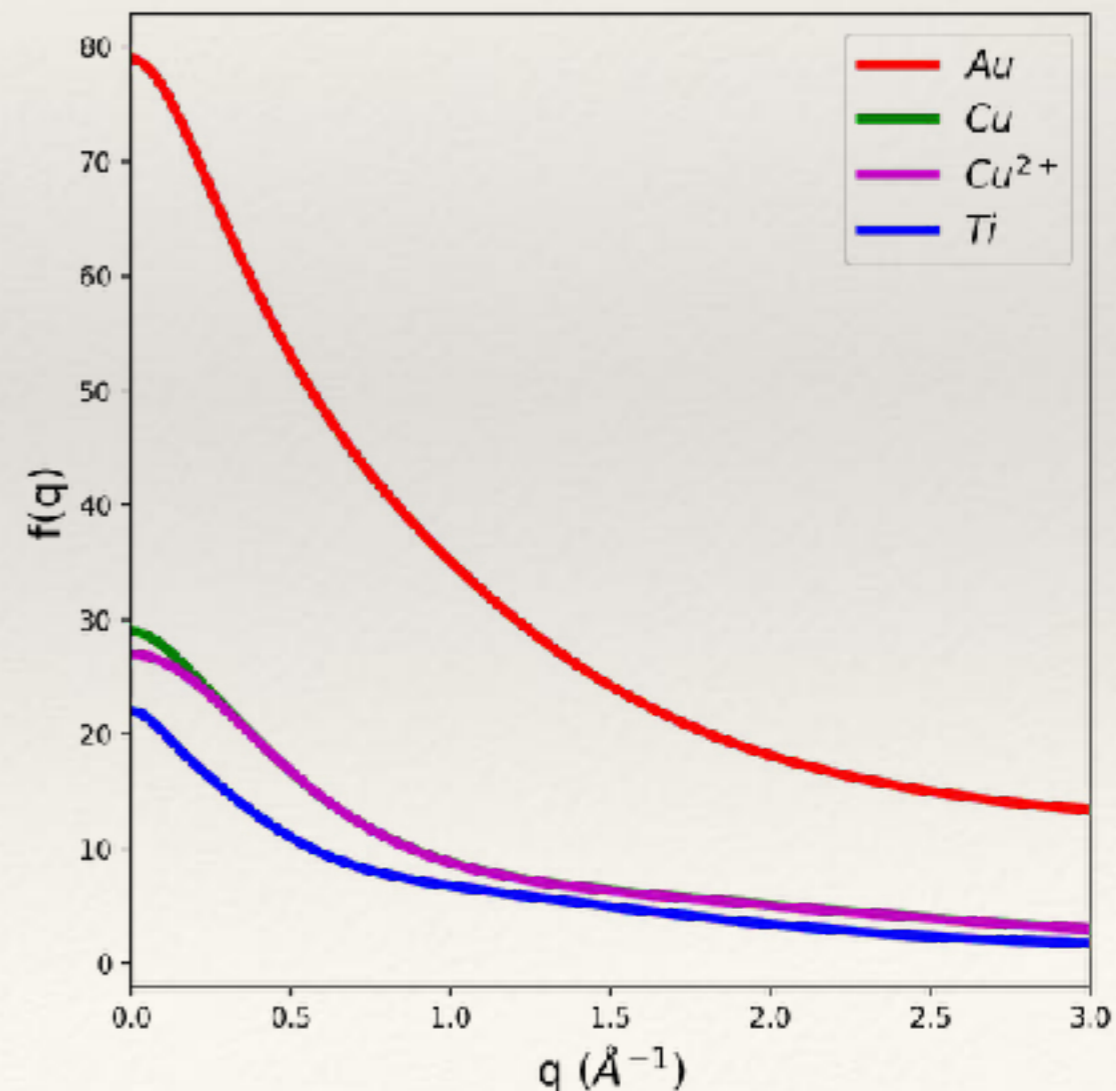
Amplitude diffusée par un atome de densité $\rho(\vec{r})$:

$$E_f = E_0 \frac{b_{Th}}{r} \vec{e}_i \cdot \vec{e}_f \int_V e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r})} \rho(\vec{r}) d^3 r$$

Facteur de diffusion atomique :

$$f(\vec{q}) = \int_V e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r})} \rho(\vec{r}) d^3 r = TF(\rho(\vec{r}))$$

$$f(0) = Z$$



Diffusion par un atome

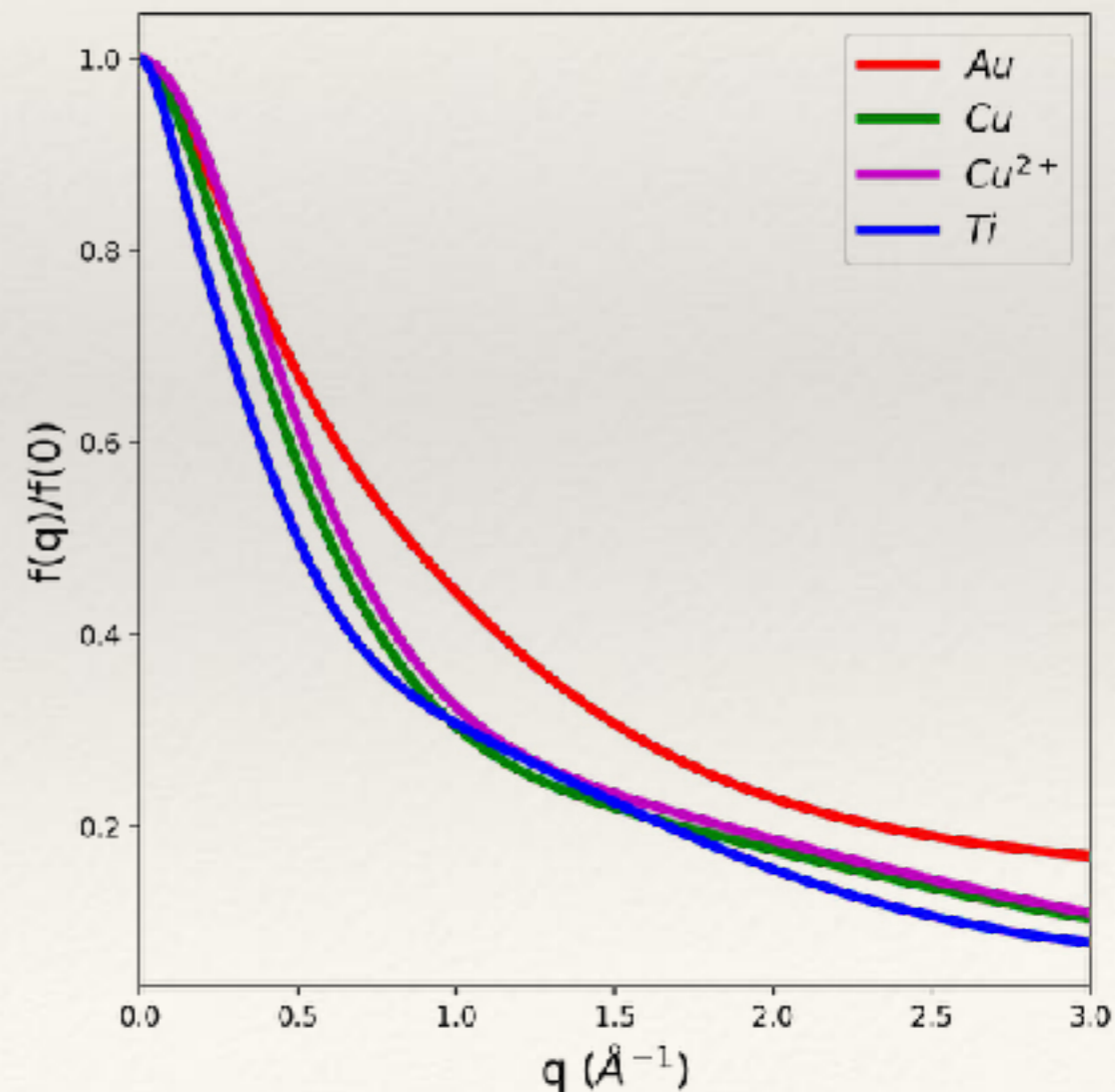
Amplitude diffusée par un atome de densité $\rho(\vec{r})$:

$$E_f = E_0 \frac{b_{Th}}{r} \vec{e}_i \cdot \vec{e}_f \int_V e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r})} \rho(\vec{r}) d^3 r$$

Facteur de diffusion atomique :

$$f(\vec{q}) = \int_V e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r})} \rho(\vec{r}) d^3 r = TF(\rho(\vec{r}))$$

$$f(0) = Z$$



Diffusion par une maille

Amplitude diffusée par un atome :

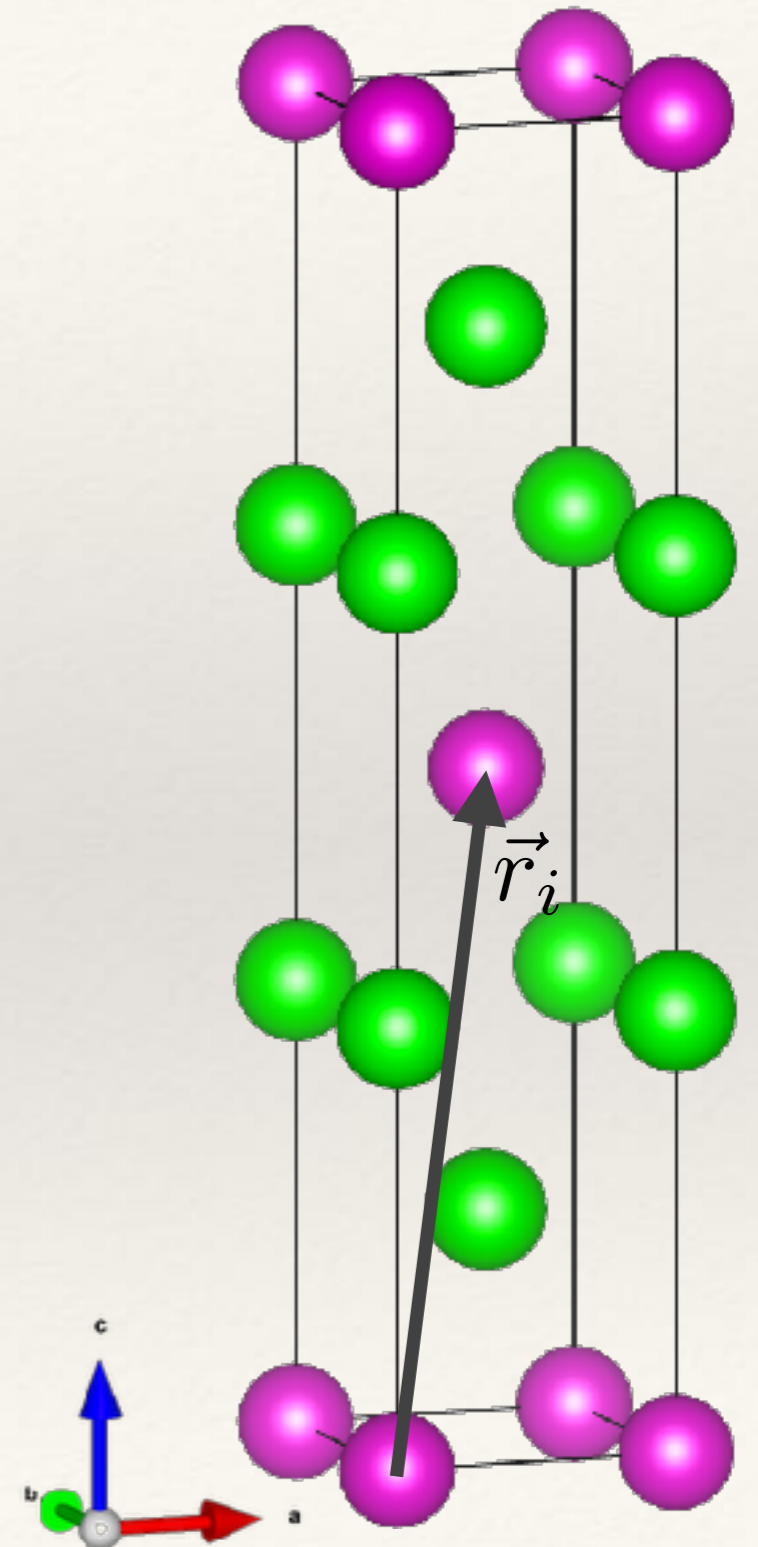
$$E_f = E_0 \frac{b_{Th}}{r} \vec{e}_i \cdot \vec{e}_f f(\vec{q})$$

Amplitude diffusée par une maille :

$$E_f = E_0 \frac{b_{Th}}{r} \vec{e}_i \cdot \vec{e}_f \sum_i^{N_{at}} f_i(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i}$$

Facteur de structure :

$$F(\vec{q}) = \sum_i^{N_{at}} f_i(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i}$$



Diffraction par un cristal

Amplitude diffusée par une maille :

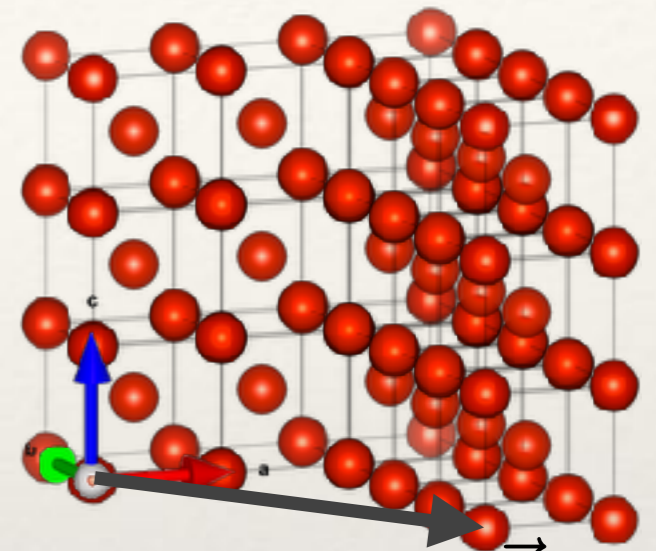
$$E_f = E_0 \frac{b_{Th}}{r} \vec{e}_i \cdot \vec{e}_f F(\vec{q})$$

Amplitude diffusée par un cristal :

$$E_f = E_0 \frac{b_{Th}}{r} \vec{e}_i \cdot \vec{e}_f F(\vec{q}) \sum_{u,v,w} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_{uvw}}$$

$$E_f = E_0 \frac{b_{Th}}{r} \vec{e}_i \cdot \vec{e}_f F(\vec{q}) \sum_{N u} e^{iu\vec{q} \cdot \vec{a}} \sum_v e^{iv\vec{q} \cdot \vec{b}} \sum_w e^{iw\vec{q} \cdot \vec{c}}$$

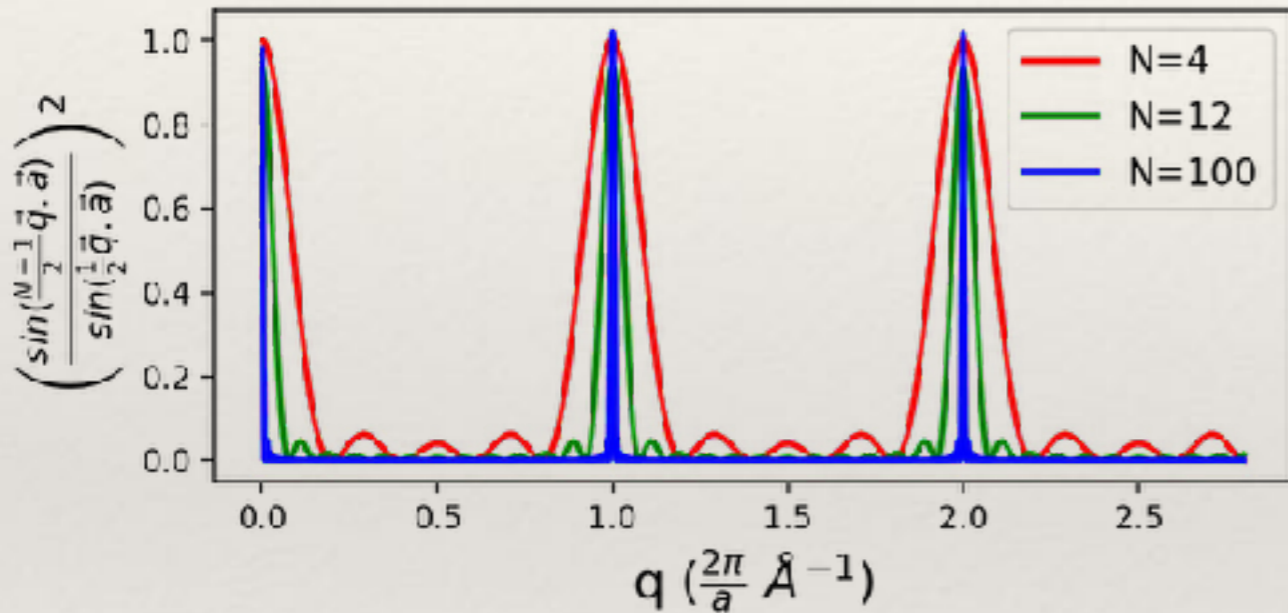
Calculons le terme : $\sum_u e^{iu\vec{q} \cdot \vec{a}}$



$$\vec{R}_{uvw} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

Diffraction par un cristal

Calculons le terme :
$$\sum_u^N e^{iu\vec{q}\cdot\vec{a}} = \sum_u^N (e^{i\vec{q}\cdot\vec{a}})^u$$



$$= \frac{1 - (e^{i\vec{q}\cdot\vec{a}})^{N+1}}{1 - e^{i\vec{q}\cdot\vec{a}}}$$

$$= \frac{e^{i\frac{N+1}{2}\vec{q}\cdot\vec{a}} \sin(\frac{N+1}{2}\vec{q}\cdot\vec{a})}{e^{i\frac{1}{2}\vec{q}\cdot\vec{a}} \sin(\frac{1}{2}\vec{q}\cdot\vec{a})}$$

Lorsque $N \rightarrow \infty$,
$$\sum_u^N e^{iu\vec{q}\cdot\vec{a}} \neq 0 \text{ si } \vec{q}\cdot\vec{a} = n2\pi$$

Diffraction par un cristal

Amplitude diffusée par un cristal :

$$\begin{aligned} E_f &= E_0 \frac{b_{Th}}{r} \vec{e}_i \cdot \vec{e}_f F(\vec{q}) \sum_u e^{iu\vec{q} \cdot \vec{a}} \sum_v e^{iv\vec{q} \cdot \vec{b}} \sum_w e^{iw\vec{q} \cdot \vec{c}} \\ &= E_0 \frac{b_{Th}}{r} \vec{e}_i \cdot \vec{e}_f F(\vec{q}) \text{ si } \vec{q} \cdot \vec{a} = n2\pi, \vec{q} \cdot \vec{b} = n2\pi \text{ et } \vec{q} \cdot \vec{c} = n2\pi \\ &= 0 \text{ sinon} \end{aligned}$$

Conditions de Laüe : \vec{q} appartient au réseau réciproque

$$\vec{q} \cdot \vec{a} = n2\pi$$

$$\vec{q} \cdot \vec{b} = n2\pi$$

$$\vec{q} \cdot \vec{c} = n2\pi$$

$$\vec{q} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

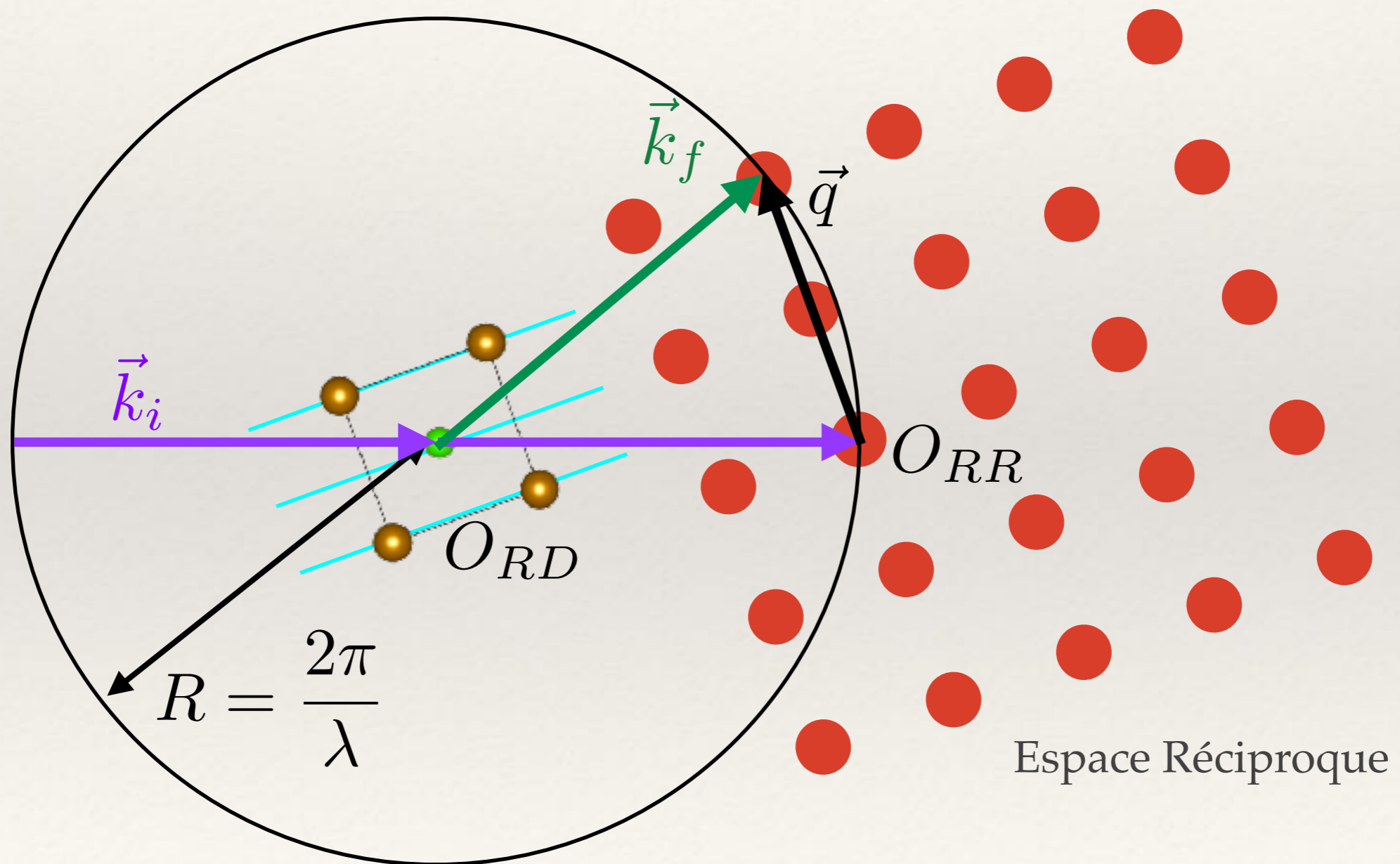
Diffraction par un cristal

Intensité diffractée :

$$I(h, k, l) \propto |F(h, k, l)|^2$$

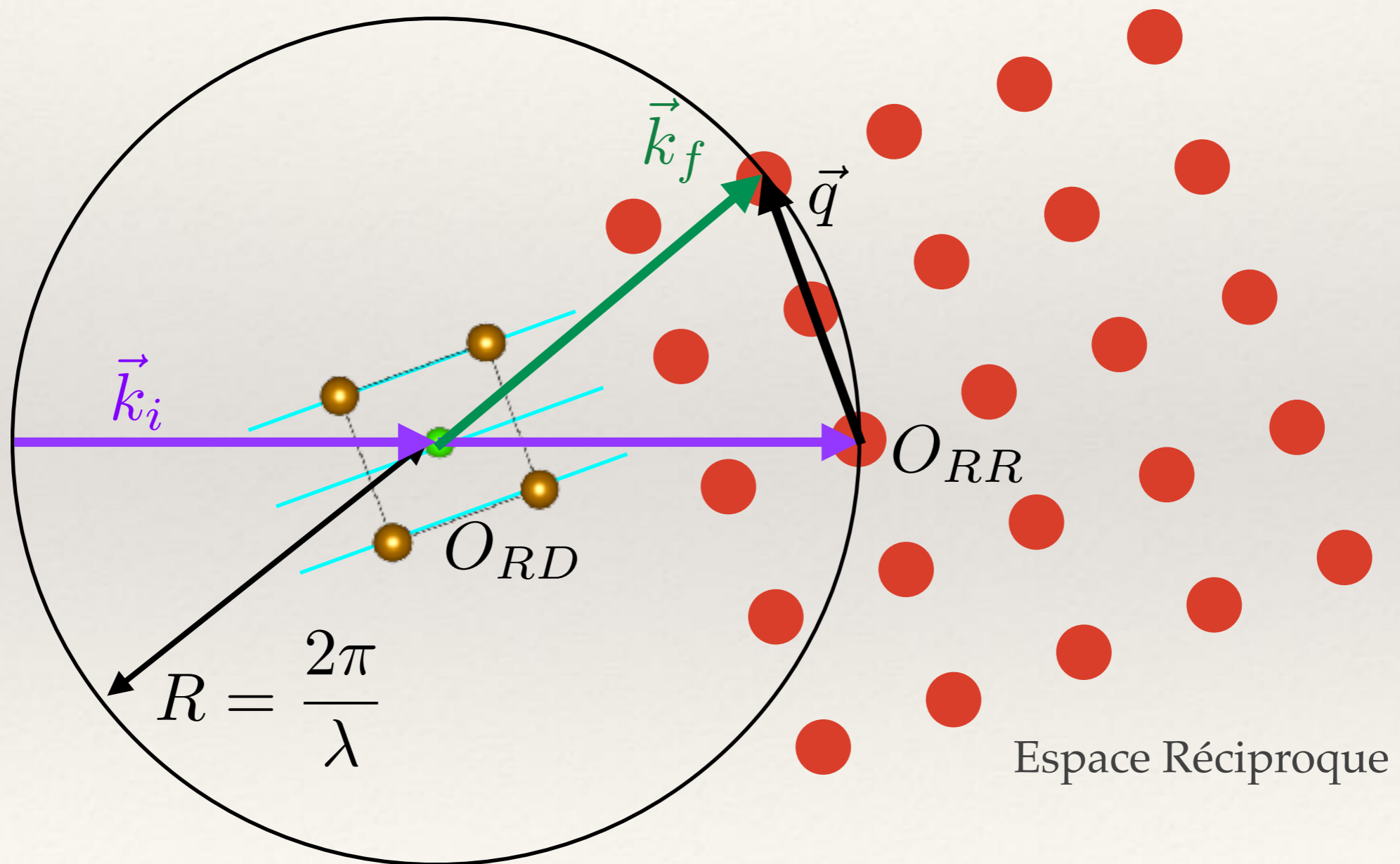
$$F(h, k, l) = \sum_i^{N_{at}} f_i(q) e^{i2\pi(hx_i + ky_i + lz_i)}$$

Construction d'Ewald

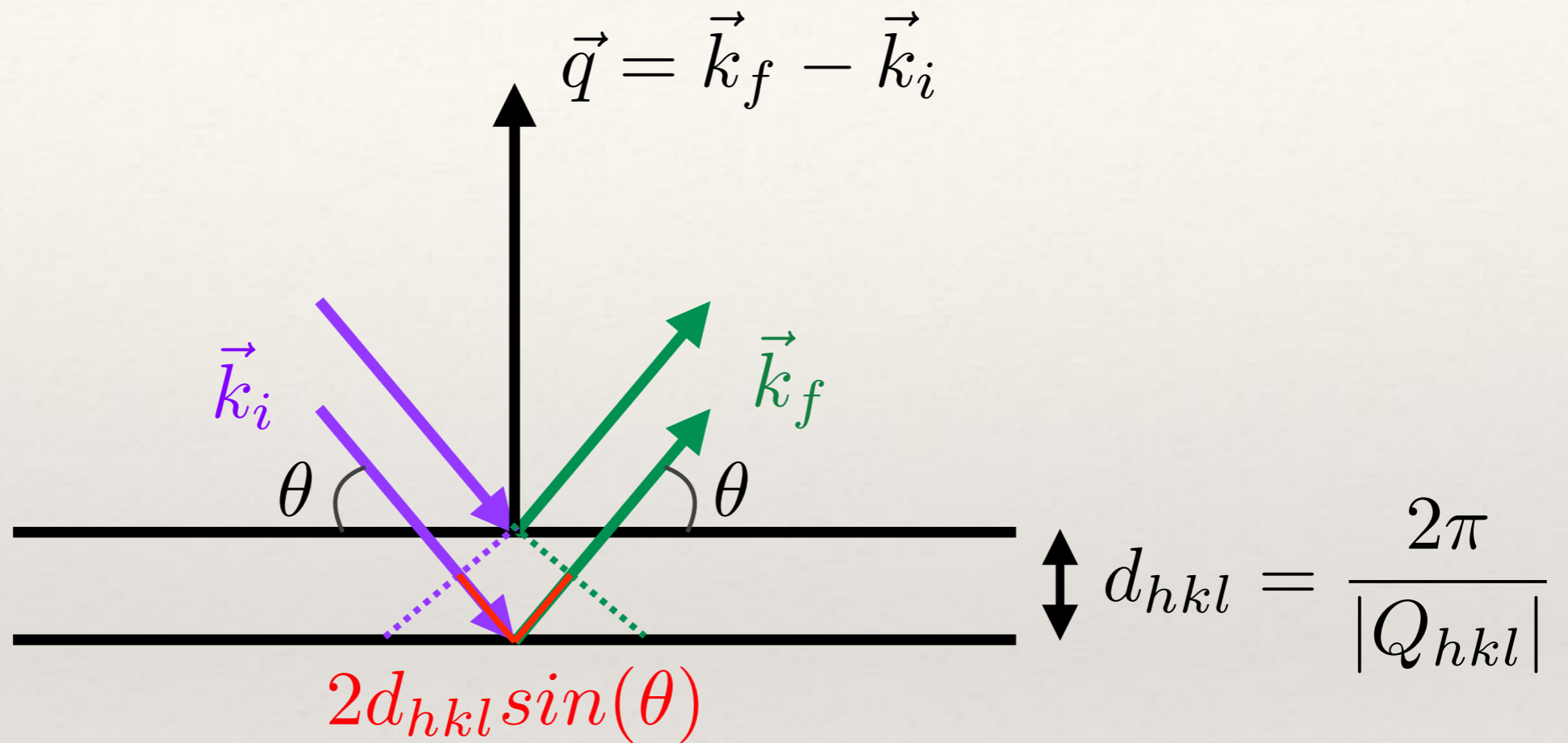


Construction d'Ewald

Représentation graphique des conditions de Laue

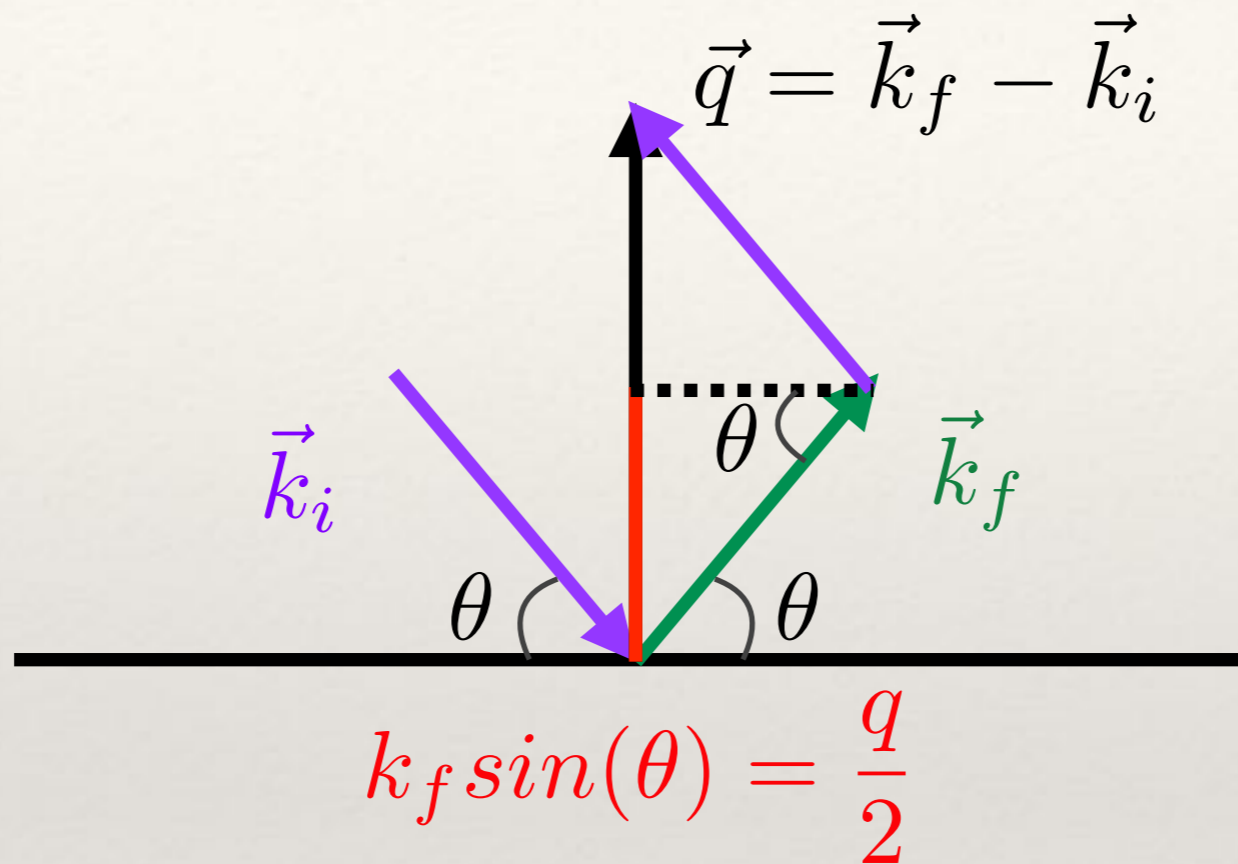


Loi de Bragg



$$2d_{hkl} \sin(\theta) = n\lambda$$

Loi de Bragg



$$\frac{4\pi}{\lambda} \sin(\theta) = q$$

Partie 8 : Diffraction de poudre

- ❖ Intérêt des poudres
- ❖ Réseau réciproque d'une poudre
- ❖ Géométrie d'expérience
- ❖ Diffractogramme
- ❖ Indexation des raies
- ❖ Calcul d'intensité
 - ❖ Facteur de Polarisation
 - ❖ Facteur de Lorentz
 - ❖ Facteur de structure
 - ❖ Multiplicité

Intérêt des poudres



Cosmétique



Pharmaceutique



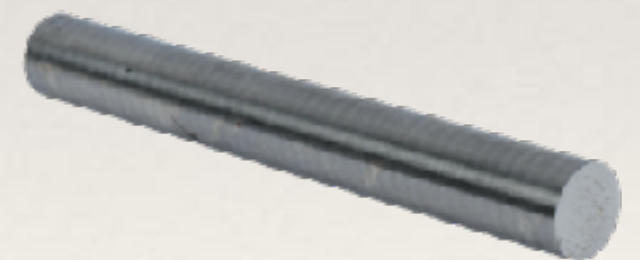
Naturelle



Cuivre

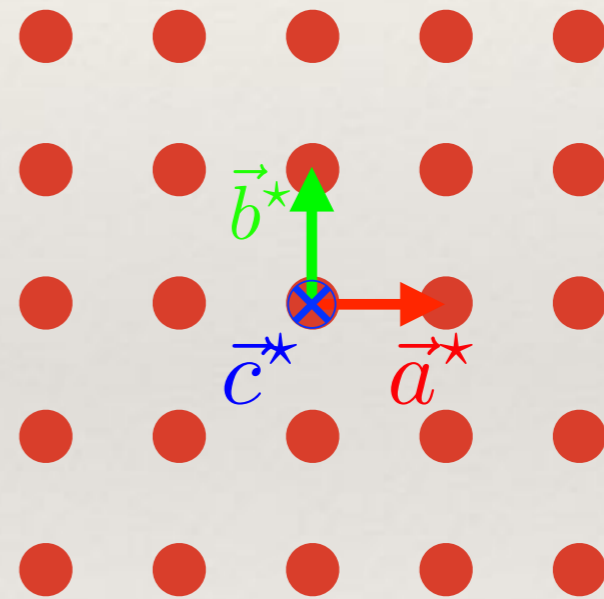
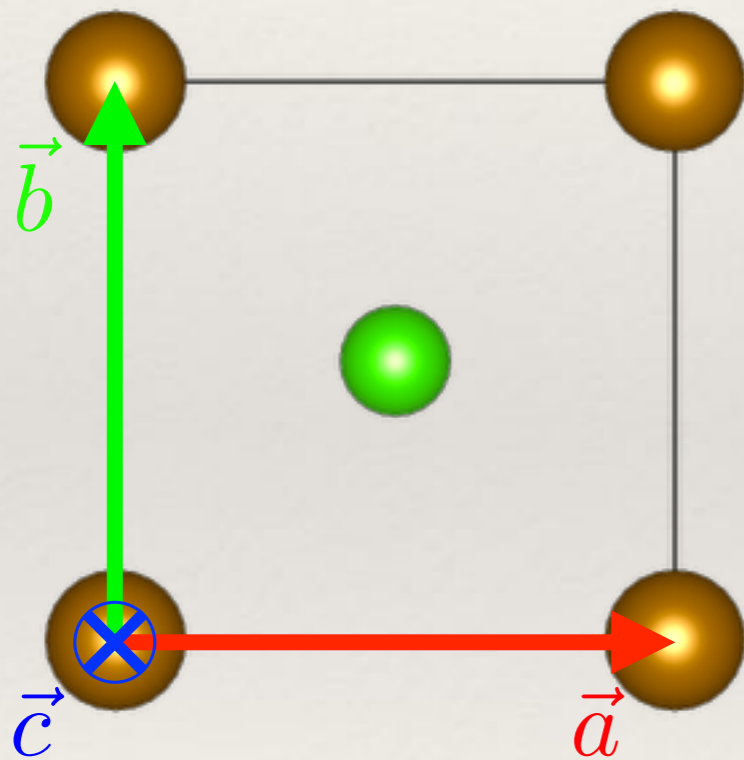


Aluminium

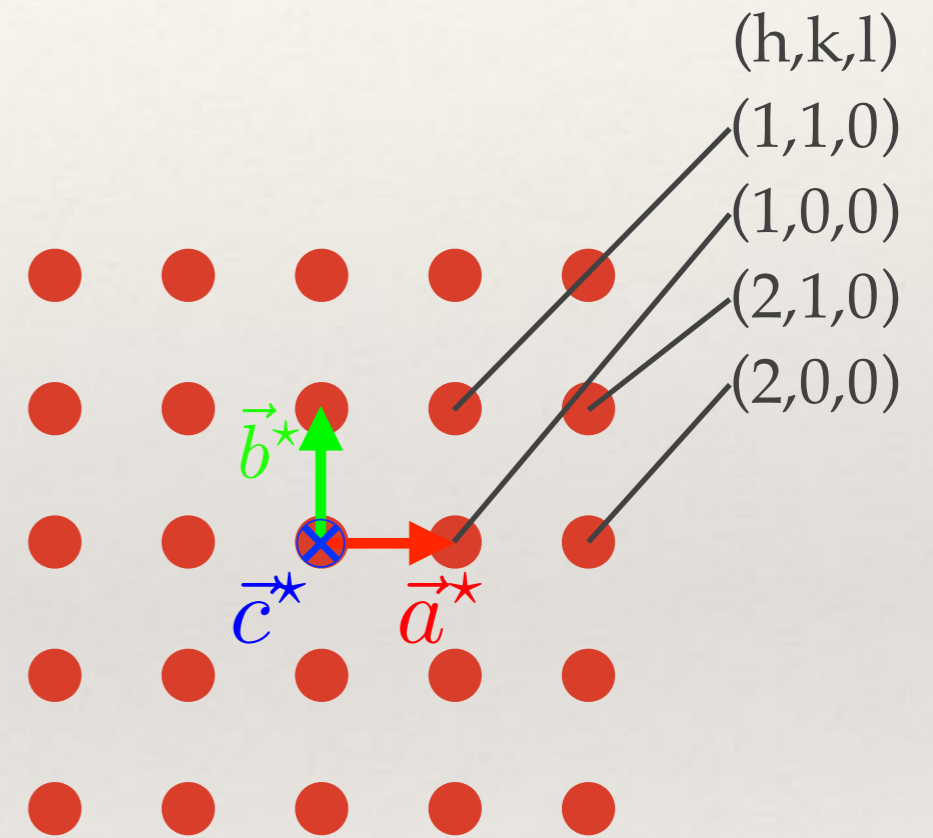
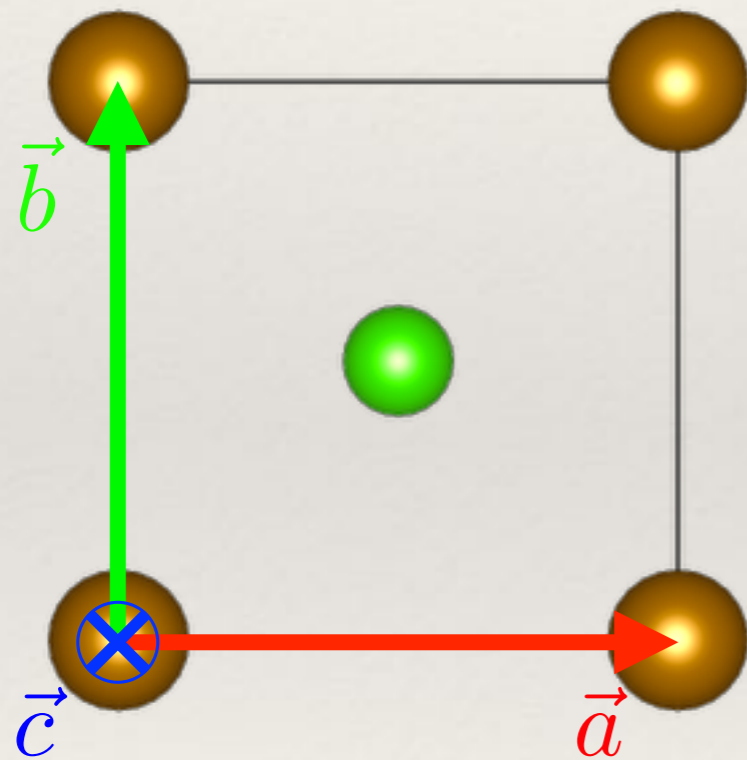


Acier

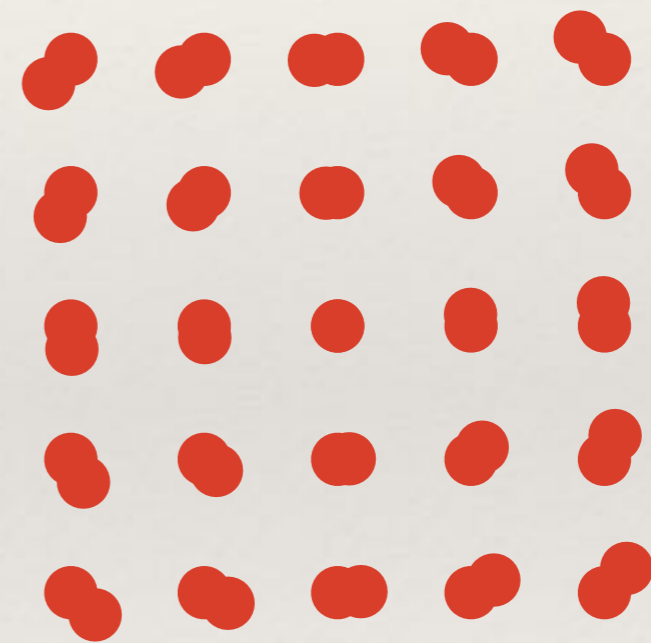
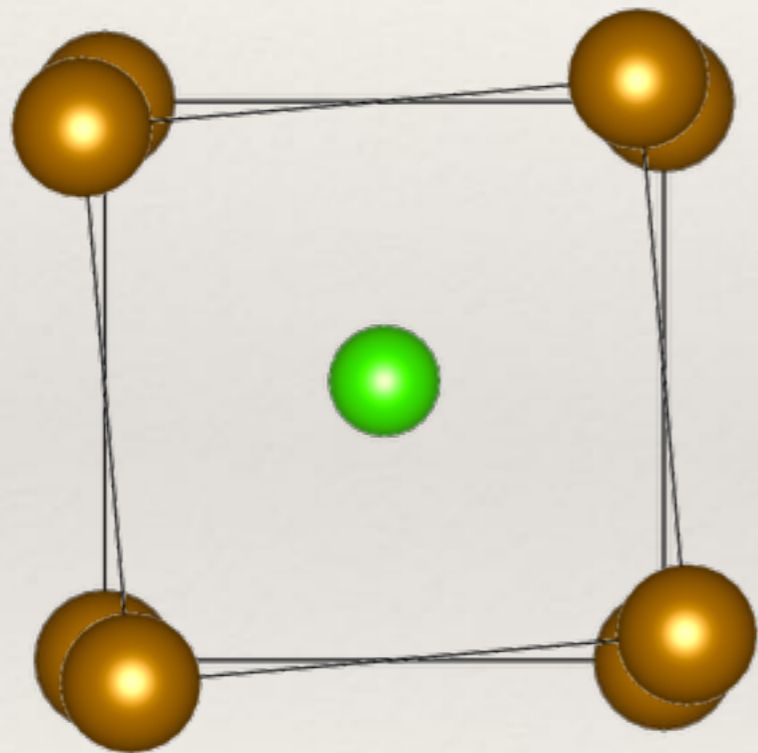
Réseau réciproque d'une poudre



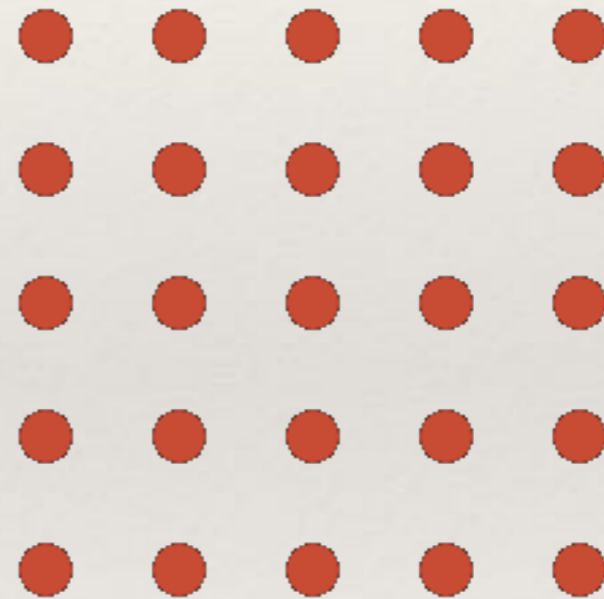
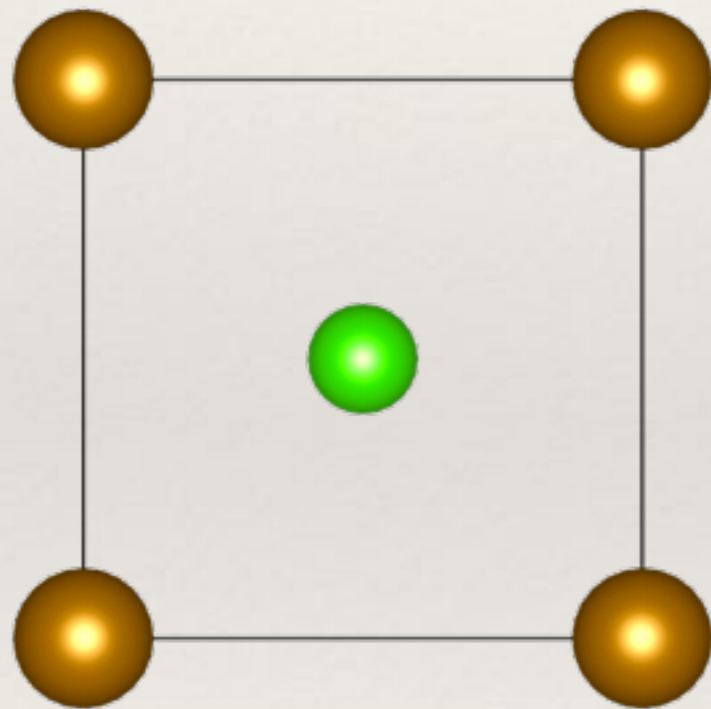
Réseau réciproque d'une poudre



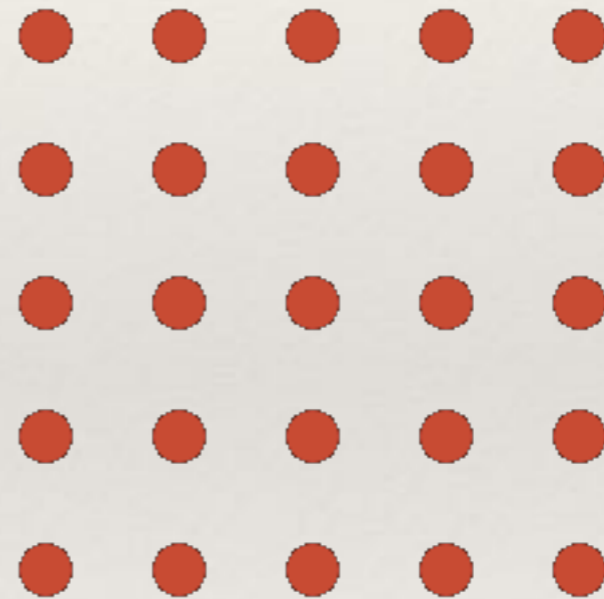
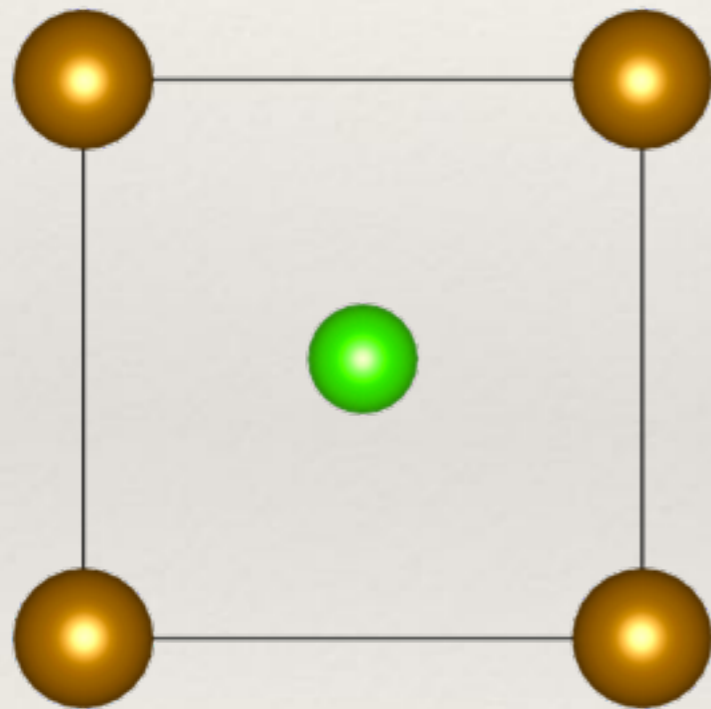
Réseau réciproque d'une poudre



Réseau réciproque d'une poudre



Réseau réciproque d'une poudre

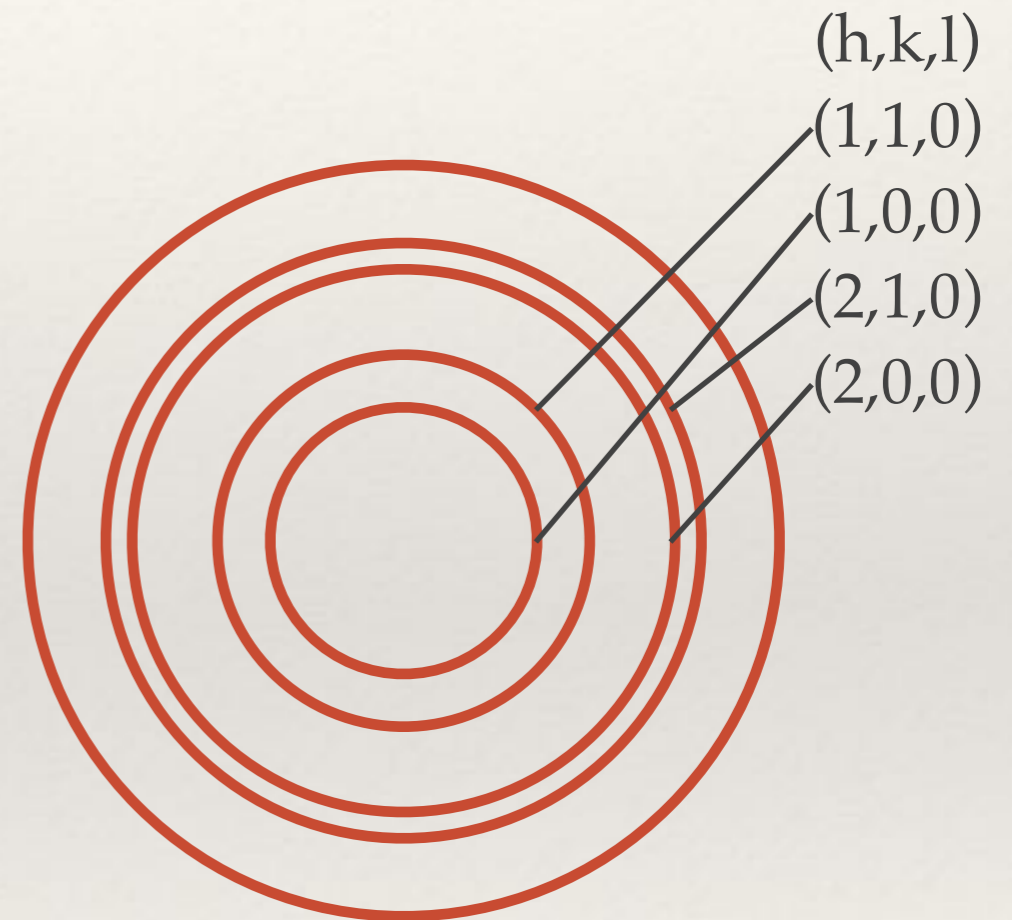


Réseau réciproque d'une poudre



À 2 dimensions, le réseau réciproque d'une poudre est formé de cercles concentriques

Réseau réciproque d'une poudre



À 2 dimensions, le réseau réciproque d'une poudre est formé de cercles concentriques
À 3 dimensions, le réseau réciproque d'une poudre est formé de sphère concentriques

Géométrie de l'expérience



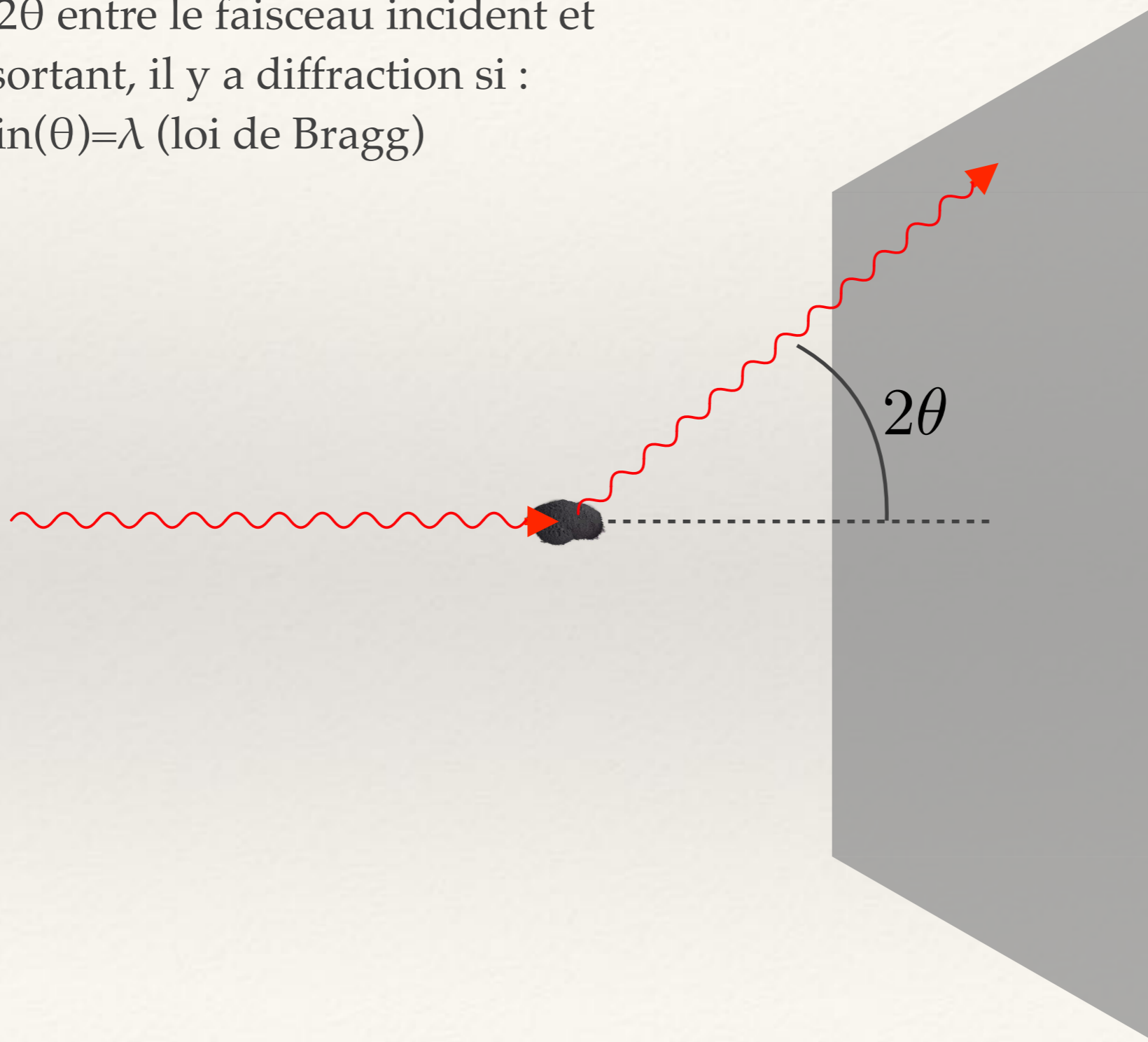
Géométrie de l'expérience



Géométrie de l'expérience

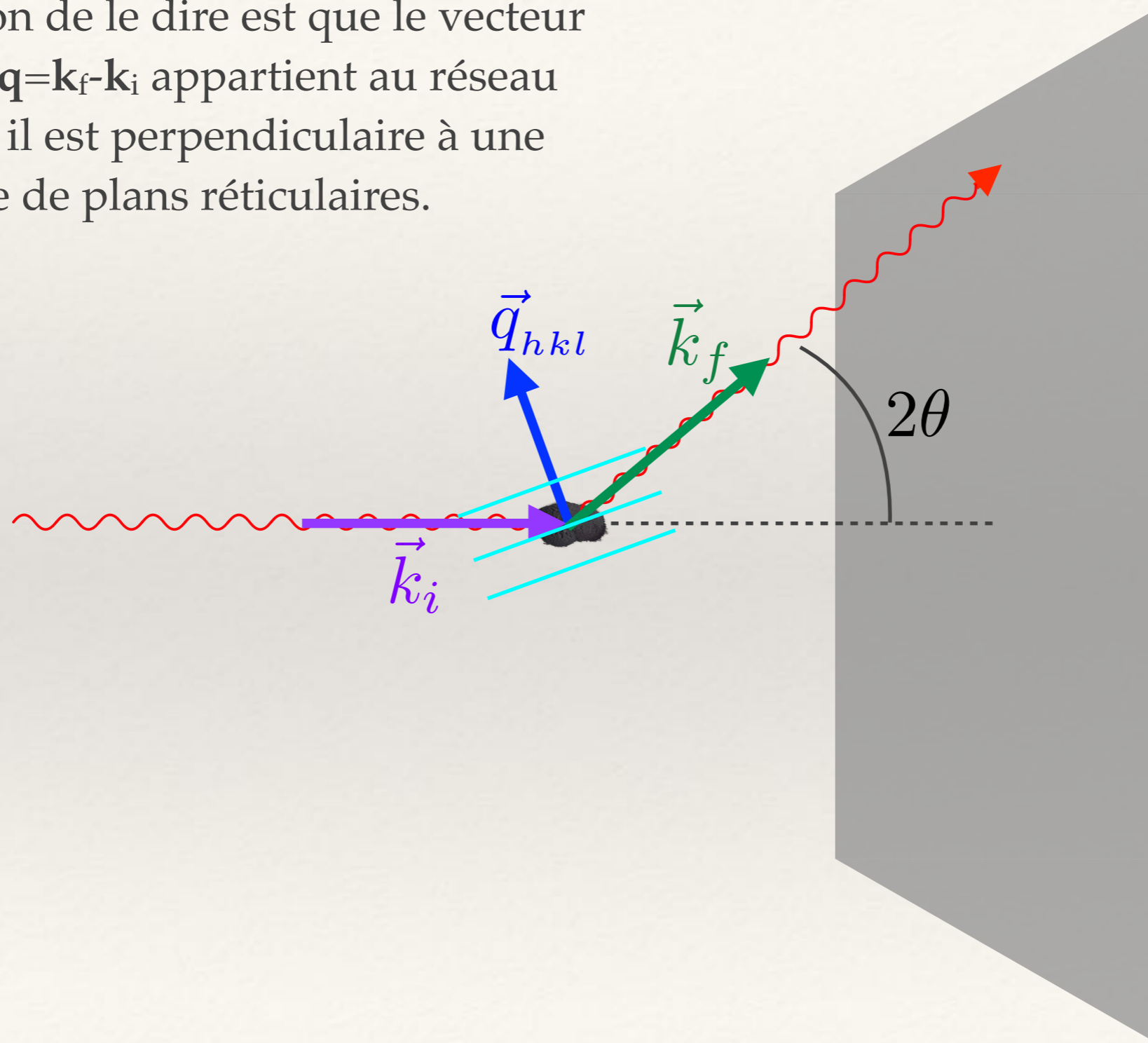
Pour un angle 2θ entre le faisceau incident et le faisceau sortant, il y a diffraction si :

$$2d_{hkl} \sin(\theta) = \lambda \text{ (loi de Bragg)}$$



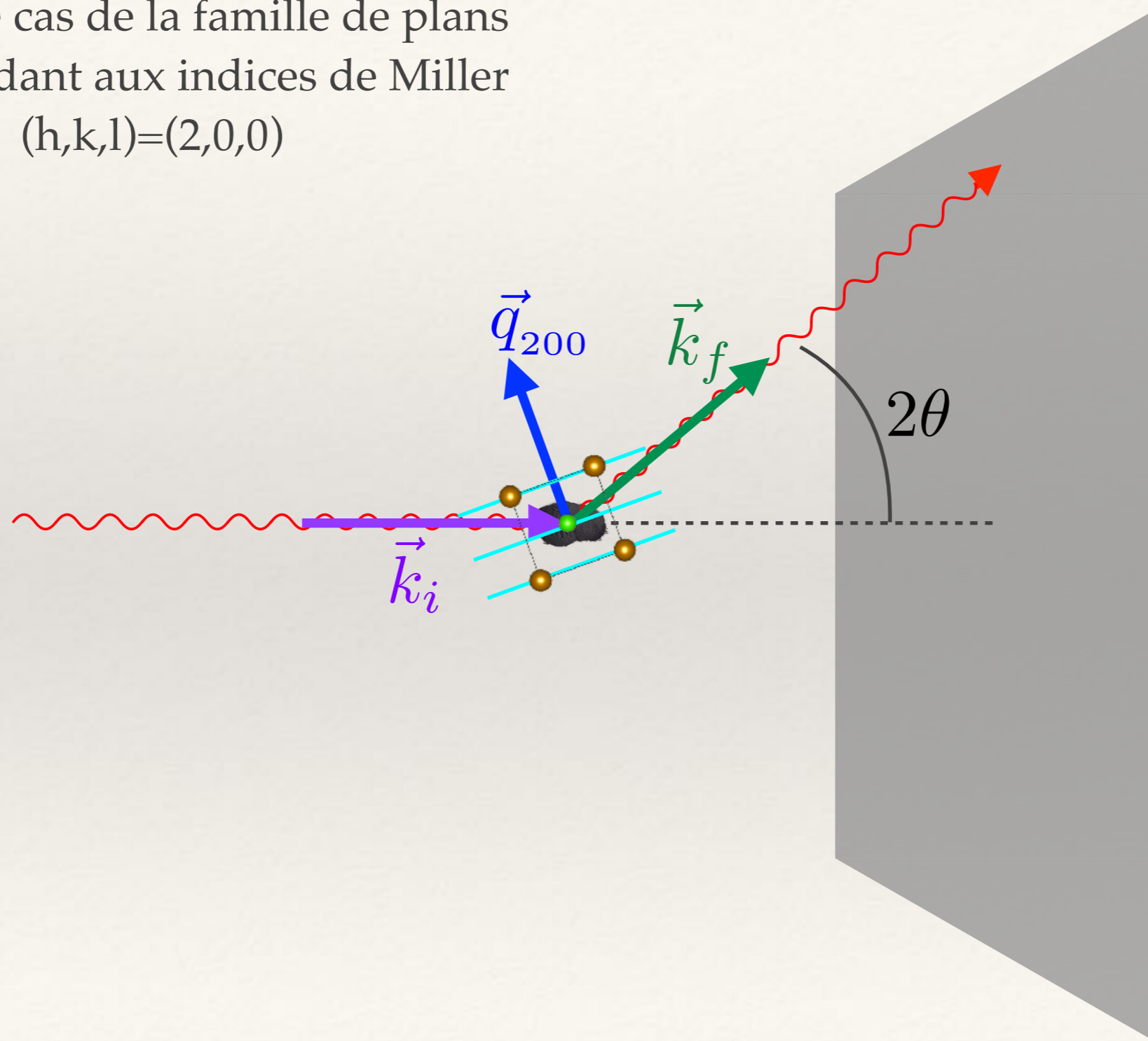
Géométrie de l'expérience

Une autre façon de le dire est que le vecteur de diffusion $\mathbf{q} = \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i$ appartient au réseau réciproque : il est perpendiculaire à une famille de plans réticulaires.



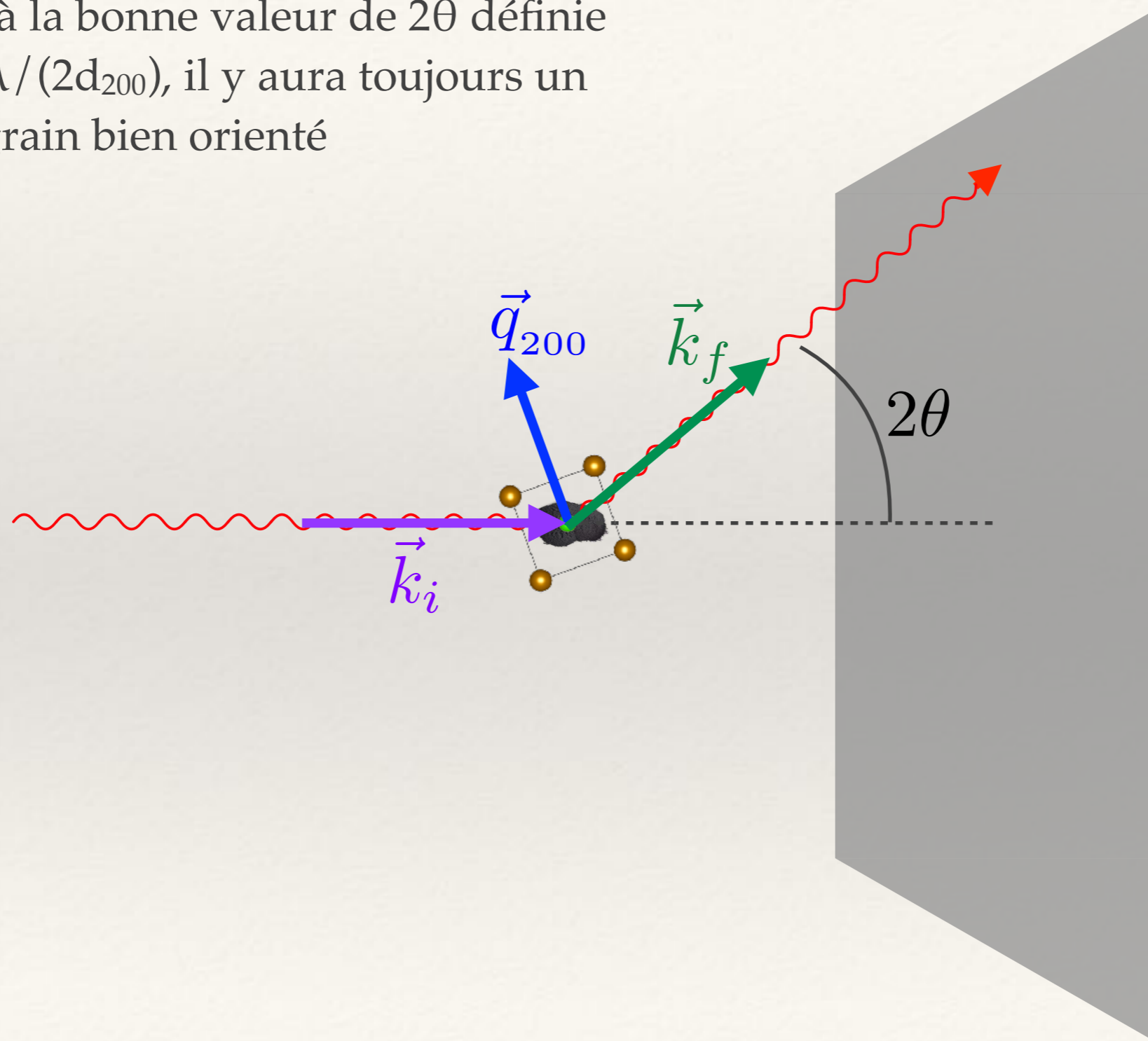
Géométrie de l'expérience

Prenons le cas de la famille de plans
correspondant aux indices de Miller
 $(h,k,l)=(2,0,0)$



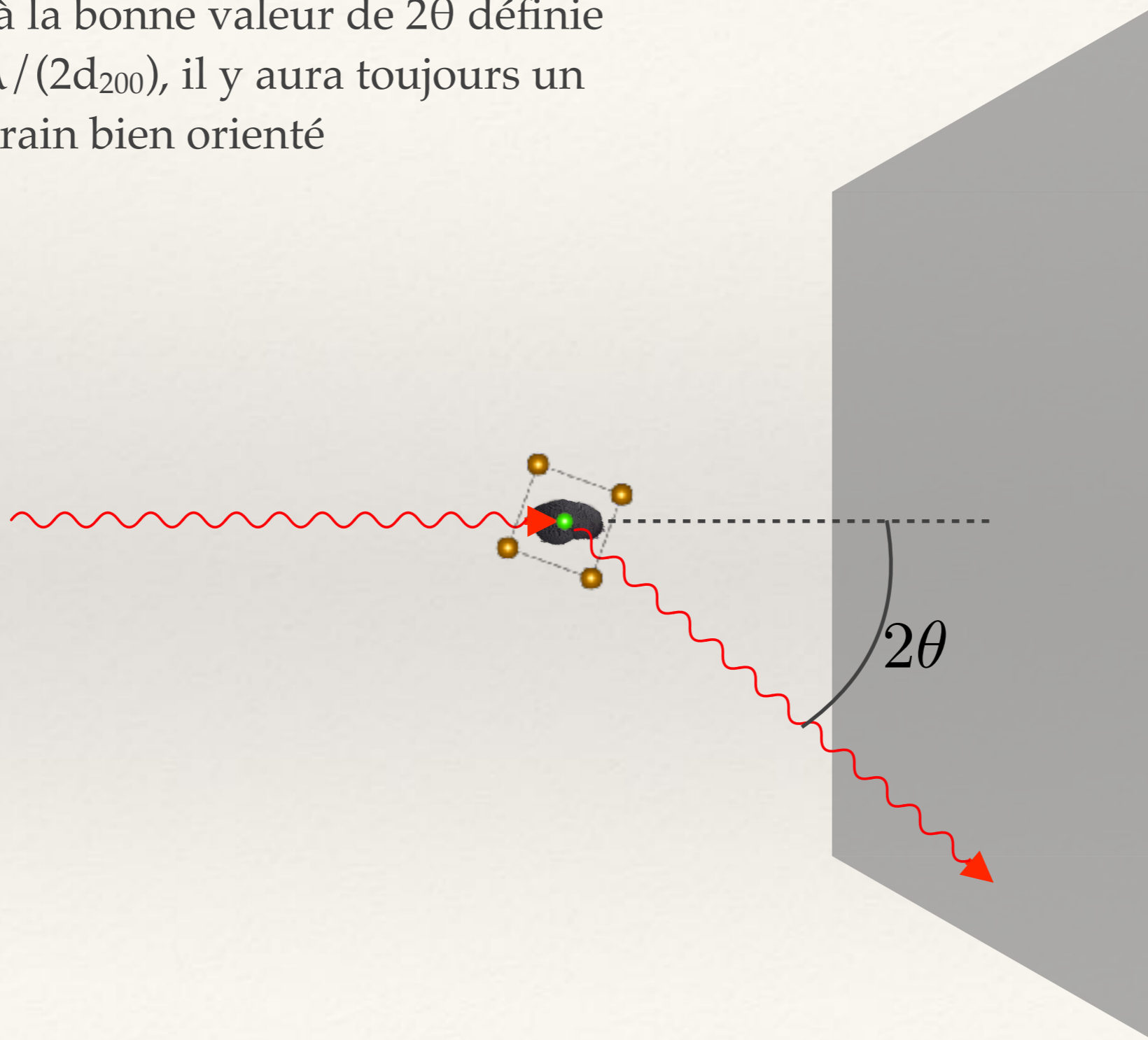
Géométrie de l'expérience

Si l'on regarde à la bonne valeur de 2θ définie par $\sin(\theta_{200}) = \lambda / (2d_{200})$, il y aura toujours un grain bien orienté



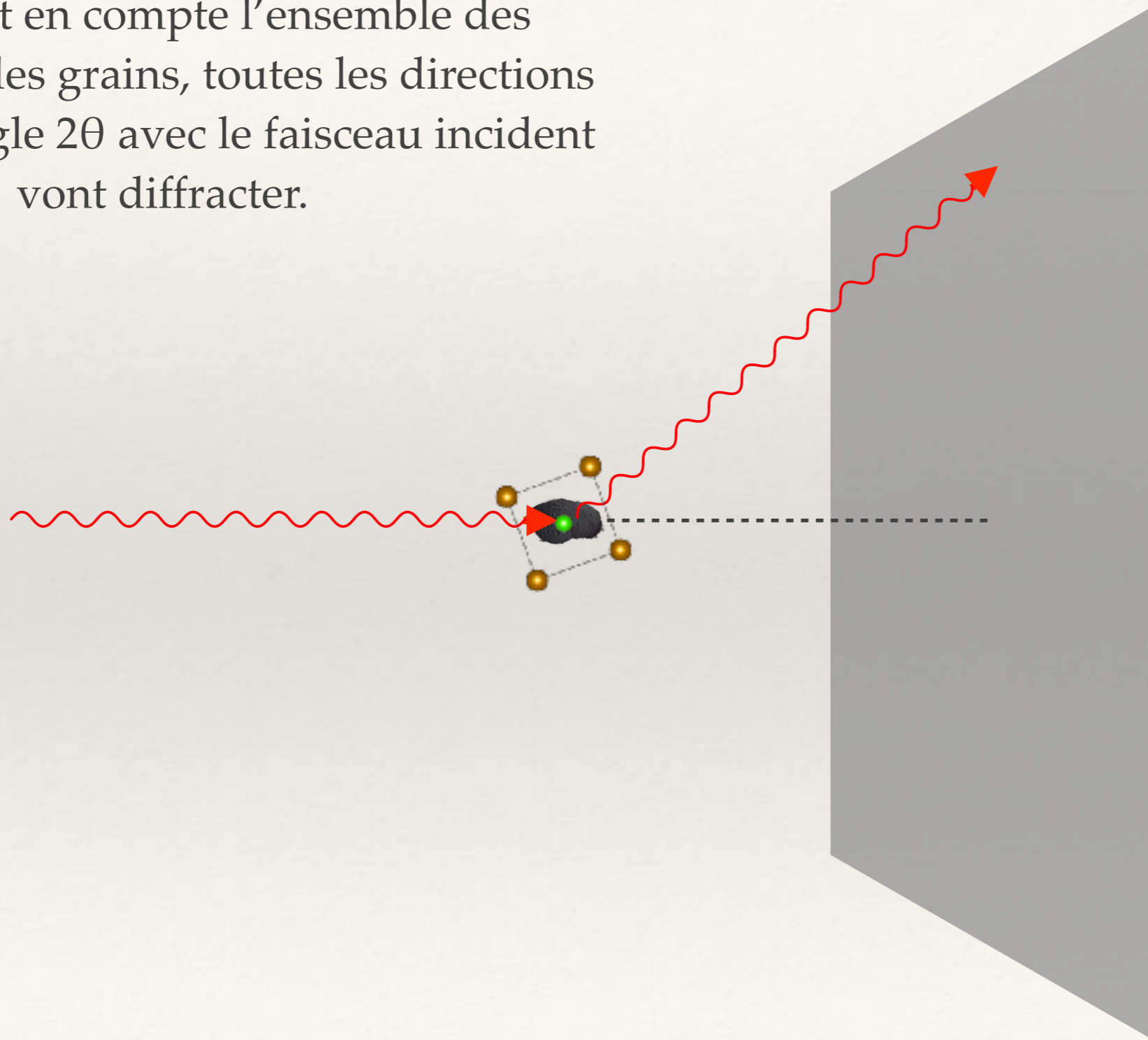
Géométrie de l'expérience

Si l'on regarde à la bonne valeur de 2θ définie par $\sin(\theta_{200}) = \lambda / (2d_{200})$, il y aura toujours un grain bien orienté



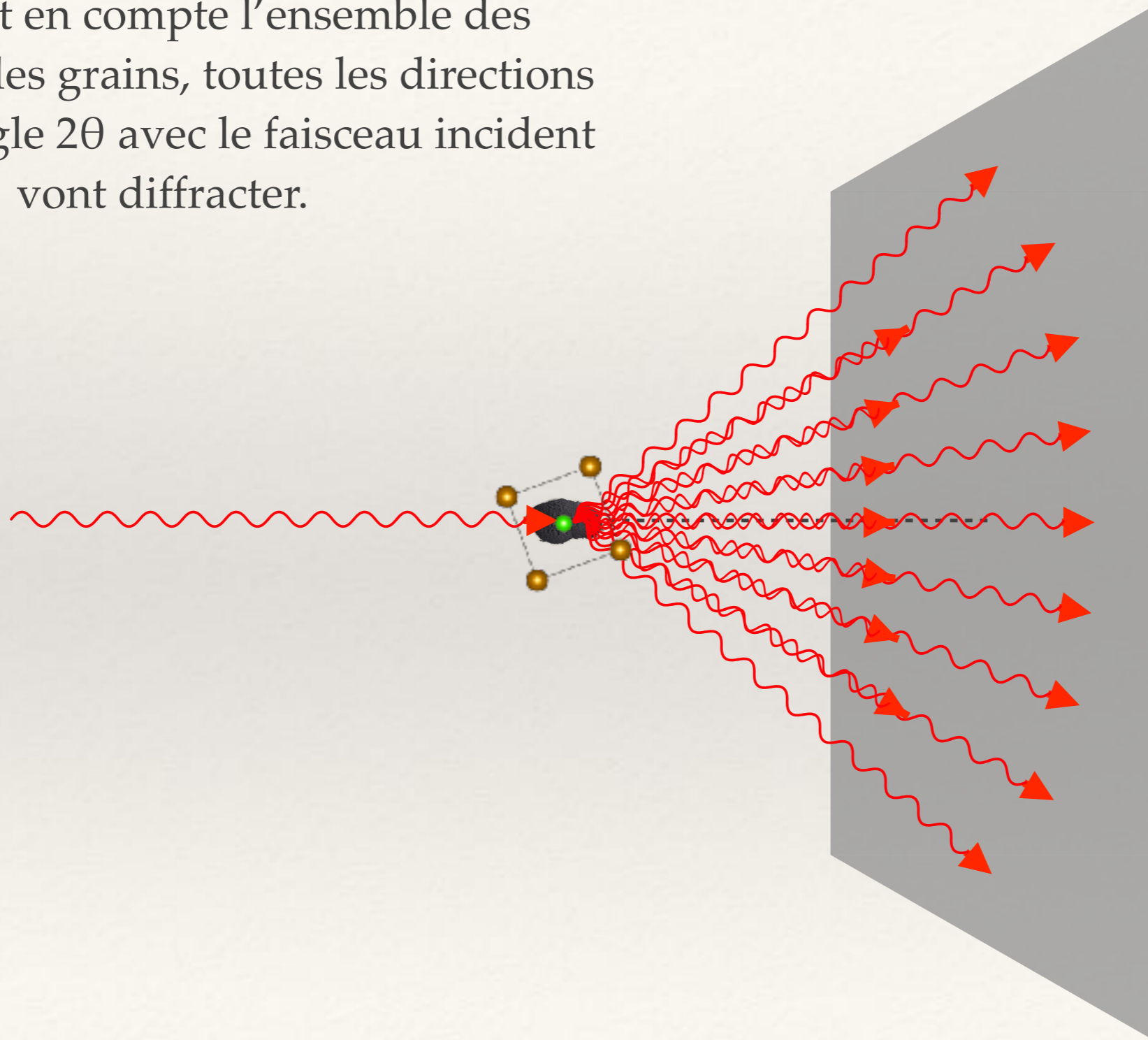
Géométrie de l'expérience

En prenant en compte l'ensemble des orientations des grains, toutes les directions faisant un angle 2θ avec le faisceau incident vont diffracter.



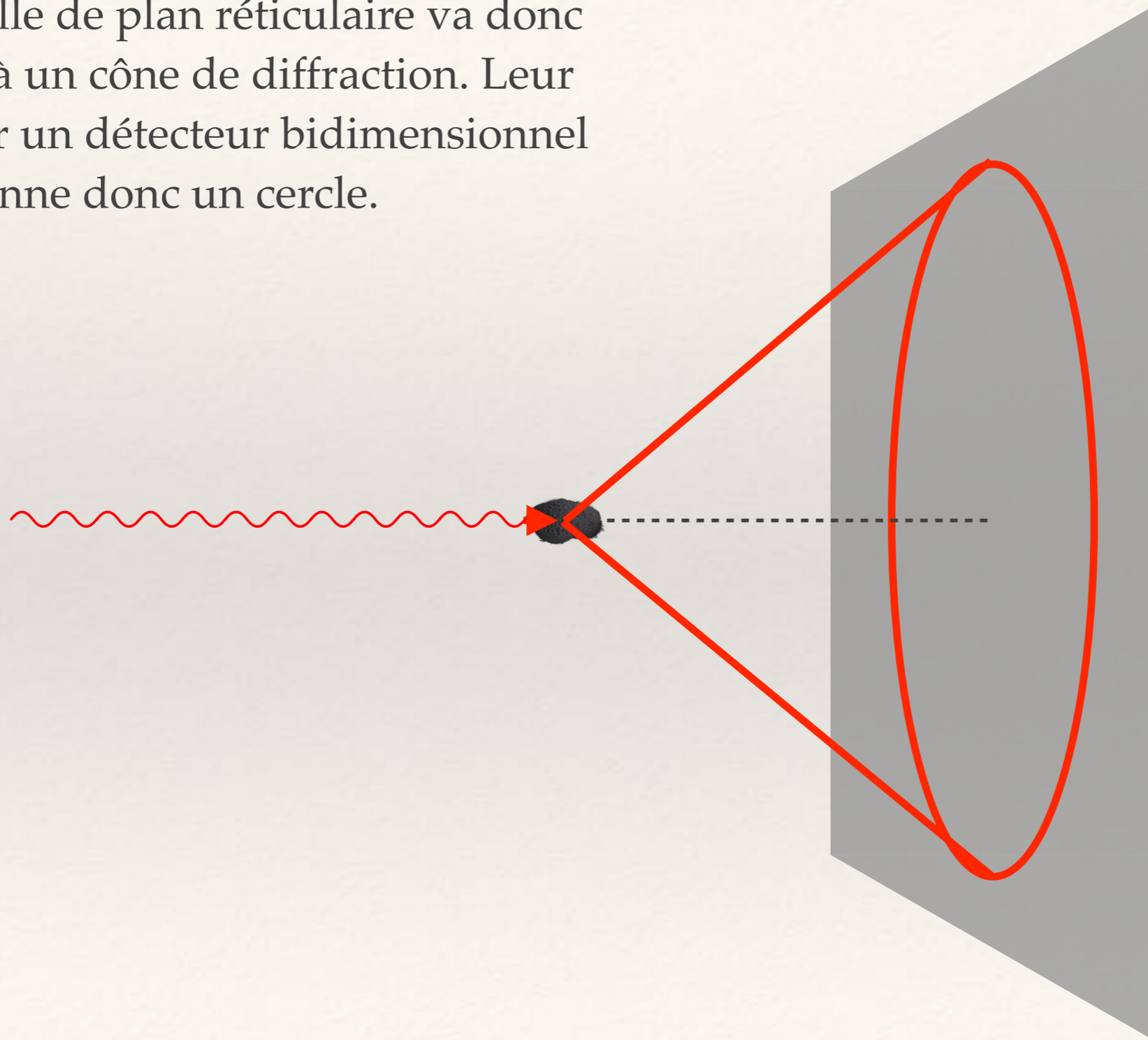
Géométrie de l'expérience

En prenant en compte l'ensemble des orientations des grains, toutes les directions faisant un angle 2θ avec le faisceau incident vont diffracter.



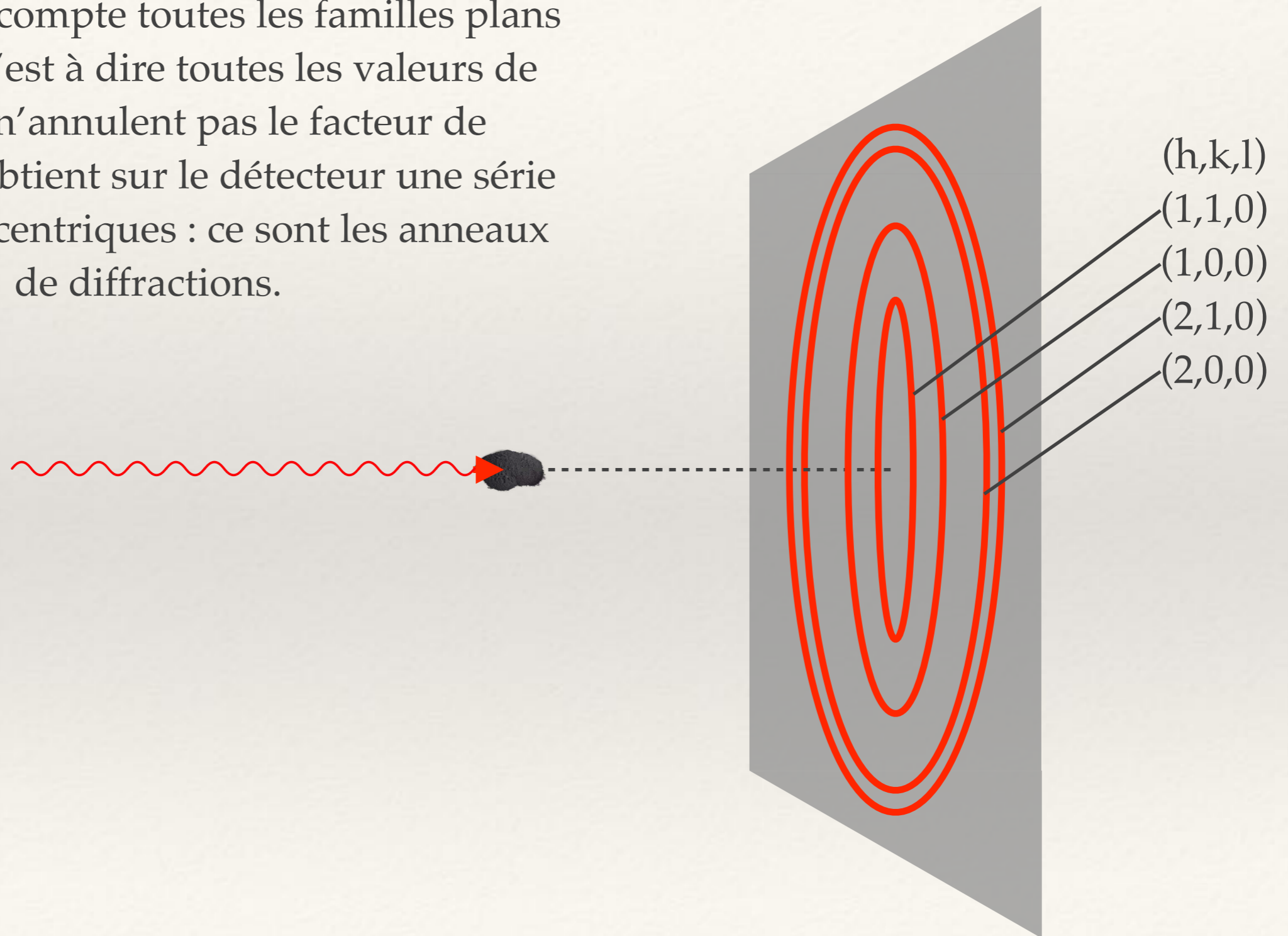
Géométrie de l'expérience

Chaque famille de plan réticulaire va donc donner lieu à un cône de diffraction. Leur projection sur un détecteur bidimensionnel donne donc un cercle.



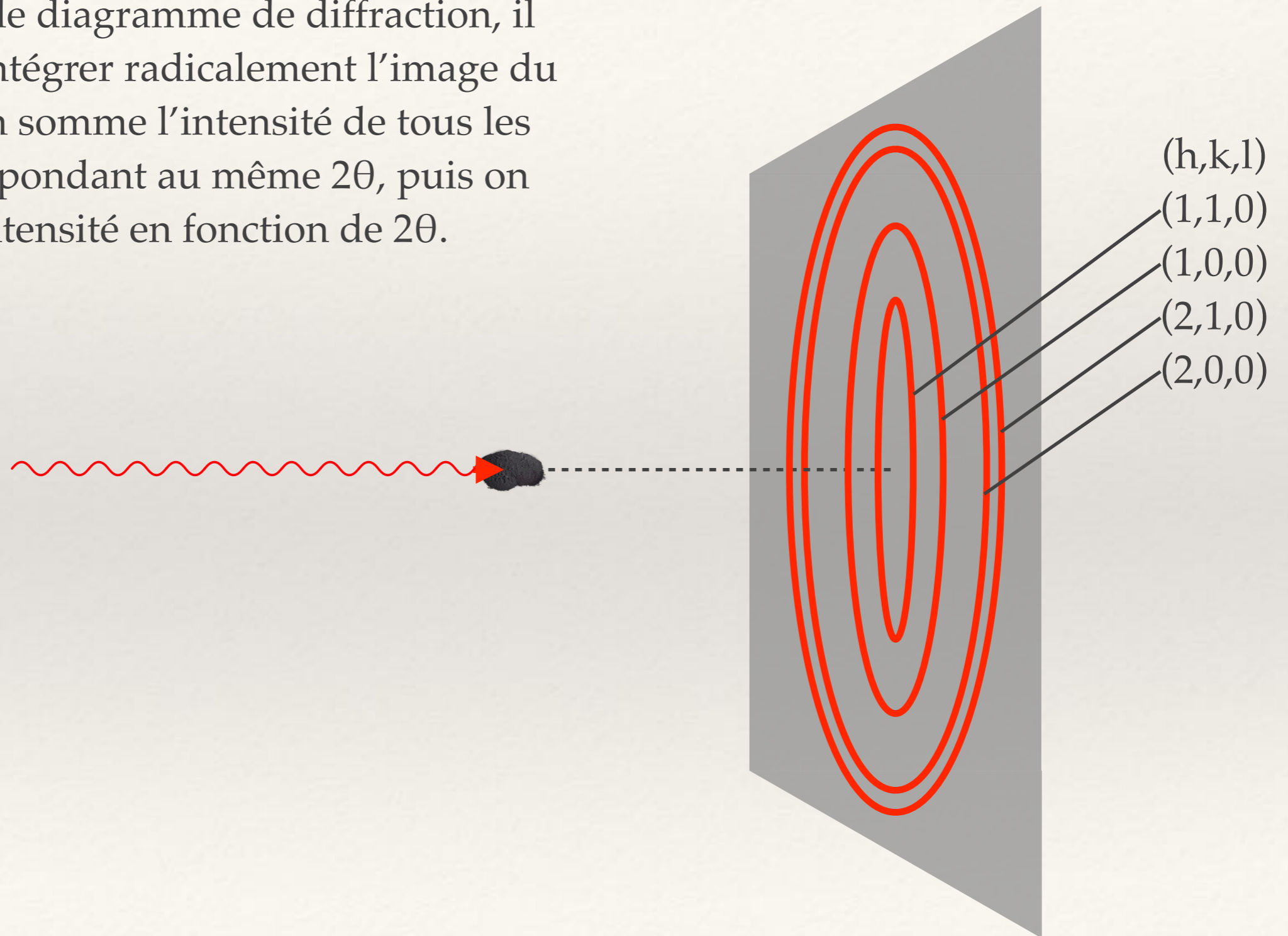
Géométrie de l'expérience

En prenant en compte toutes les familles plans réticulaires, c'est à dire toutes les valeurs de (h,k,l) qui n'annulent pas le facteur de structure, on obtient sur le détecteur une série de cercles concentriques : ce sont les anneaux de diffractions.



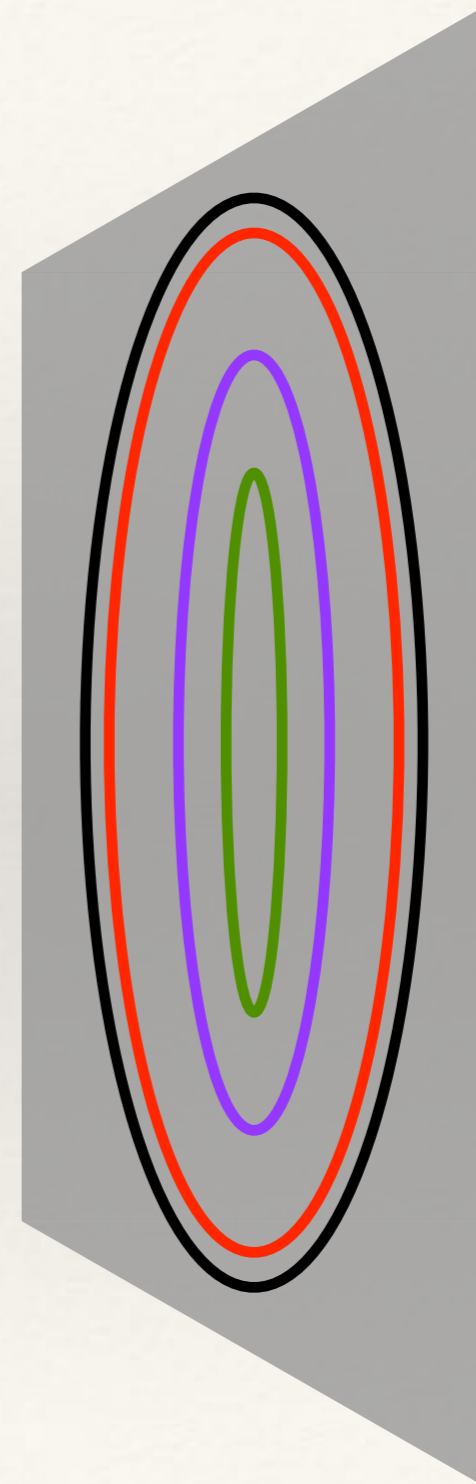
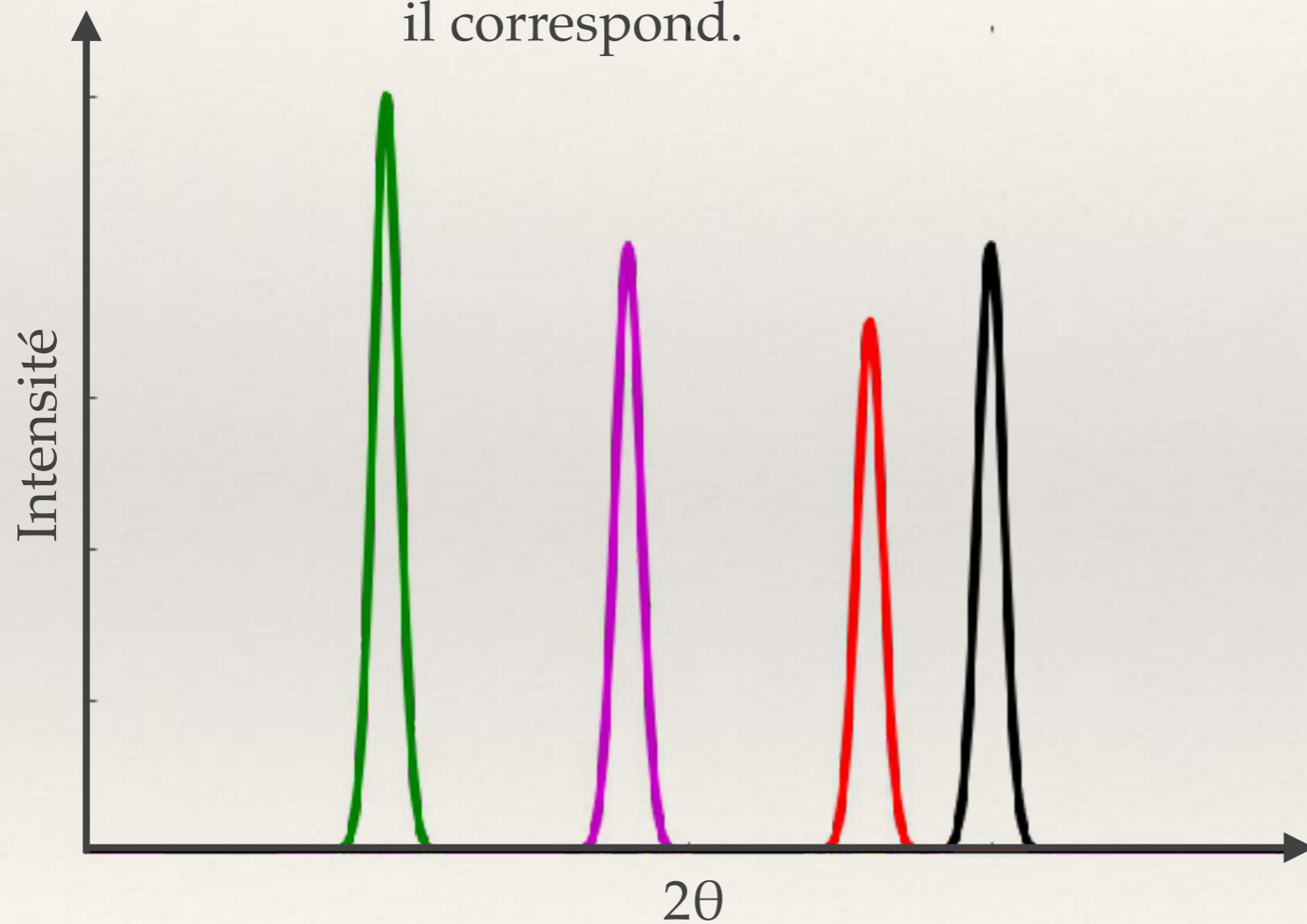
Diffractogramme

Pour obtenir le diagramme de diffraction, il suffit alors d'intégrer radicalement l'image du détecteur : on somme l'intensité de tous les points correspondant au même 2θ , puis on trace l'intensité en fonction de 2θ .



Diffractogramme

Maintenant que l'on a le diffractogramme, il faut indexer toutes les raies, c'est à dire donner pour chaque pic, les valeurs de (h,k,l) auxquels il correspond.

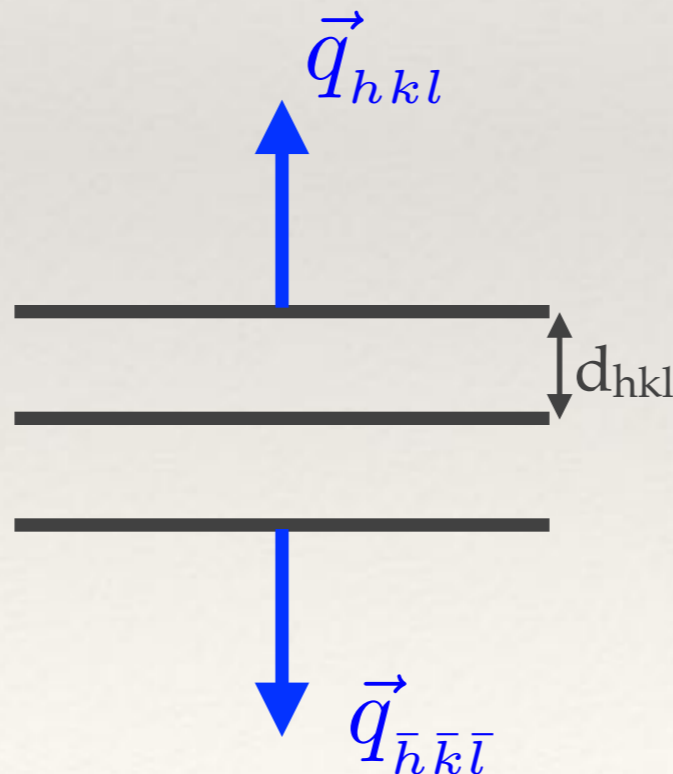


Raies équivalentes : multiplicité

Des raies sont dites équivalentes si elles correspondent à des familles de plans réticulaires équivalentes par symétrie et donc au même d_{hkl} .

On définit alors la multiplicité d'une raie par le nombre de familles équivalentes, ou encore comme le nombre de vecteurs de diffusion \mathbf{q}_{hkl} équivalents.

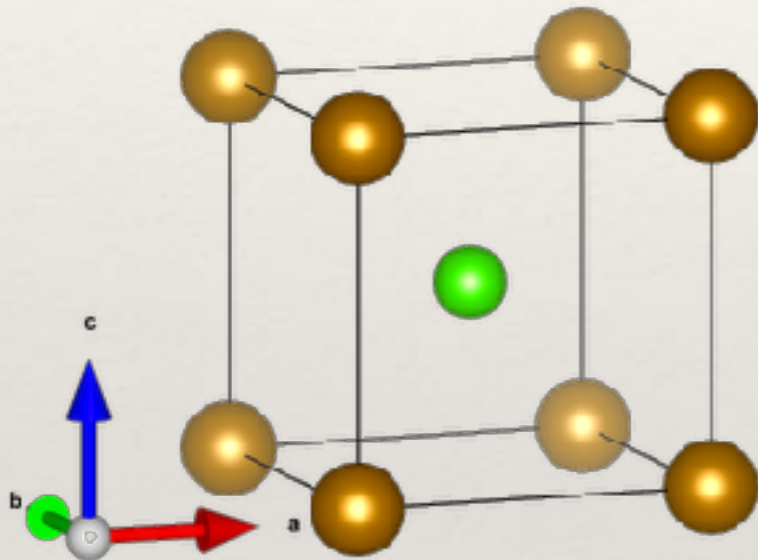
On peut facilement voir que la multiplicité est au minimum égale à 2



Raies équivalentes : multiplicité

Prenons l'exemple d'un cristal cubique primitif.

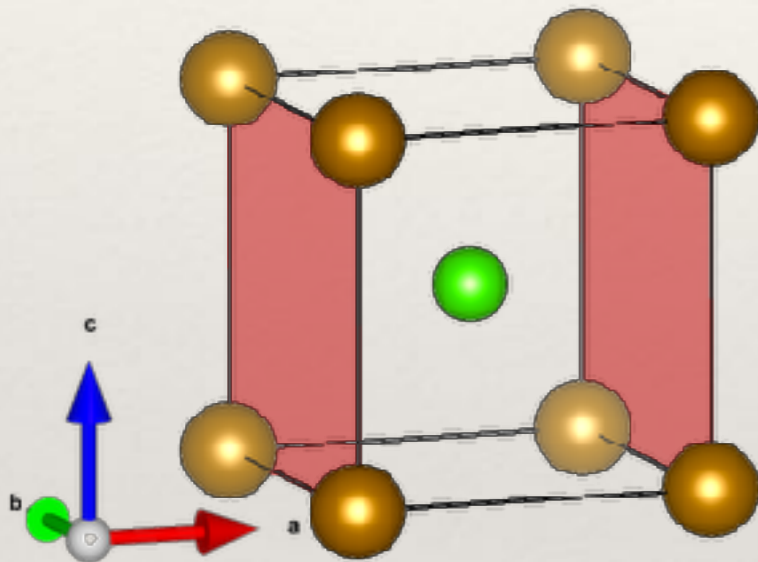
Regardons la multiplicité de la raie $(1,0,0)$



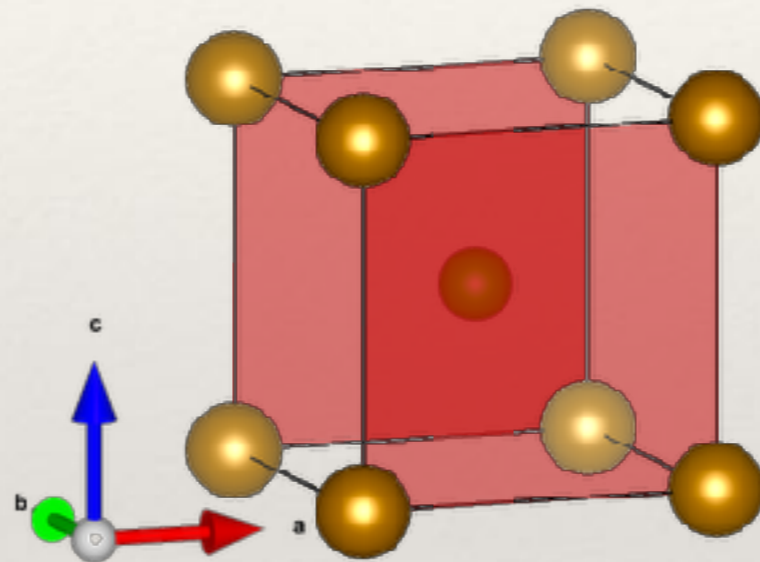
Raies équivalentes : multiplicité

Prenons l'exemple d'un cristal cubique primitif.

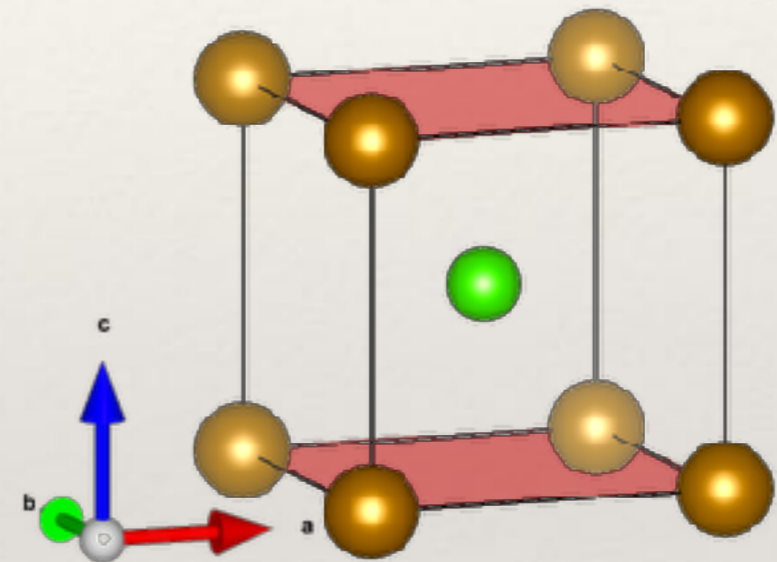
Regardons la multiplicité de la raie $(1,0,0)$



$$\begin{pmatrix} 1, 0, 0 \\ \bar{1}, 0, 0 \end{pmatrix}$$



$$\begin{pmatrix} 0, 1, 0 \\ 0, \bar{1}, 0 \end{pmatrix}$$

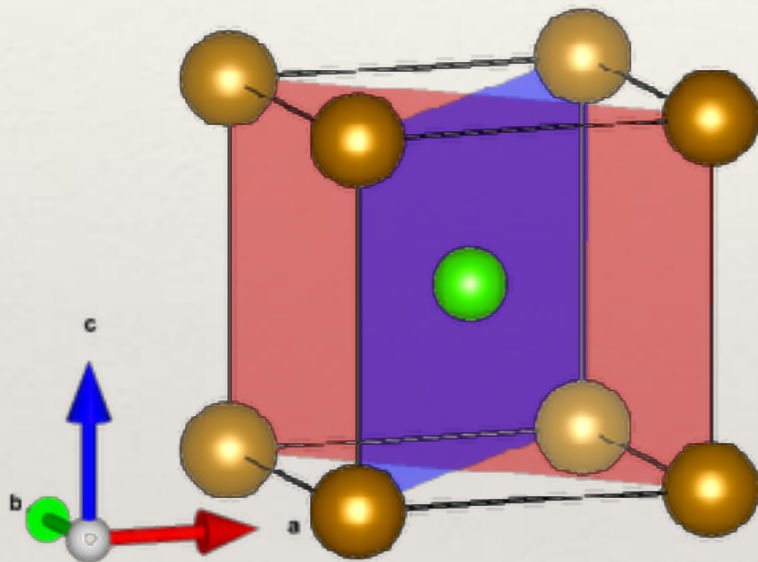


$$\begin{pmatrix} 0, 0, 1 \\ 0, 0, \bar{1} \end{pmatrix}$$

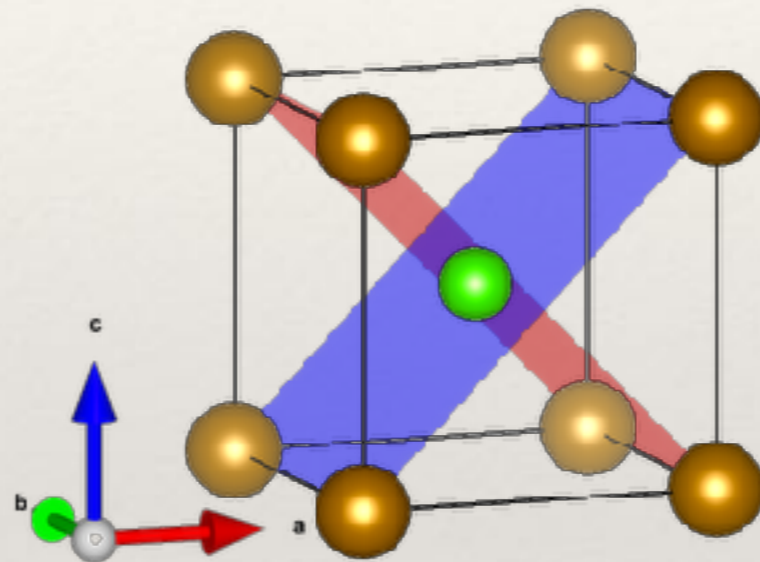
La multiplicité de la raie $(1,0,0)$ est donc 6.

Raies équivalentes : multiplicité

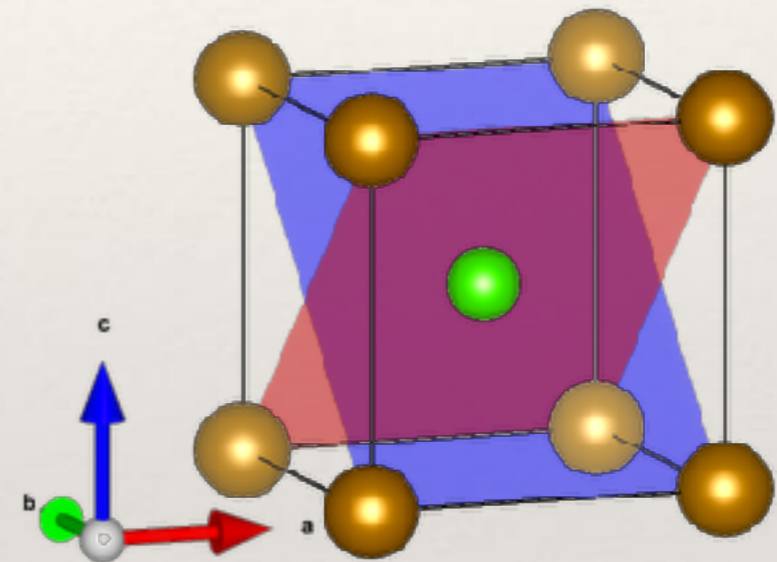
Toujours dans le cas d'un cristal cubique primitif, regardons la multiplicité de la raie $(1,1,0)$



$$\begin{aligned} &(1, 1, 0)(1, \bar{1}, 0) \\ &(\bar{1}, \bar{1}, 0)(\bar{1}, 1, 0) \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} &(1, 0, 1)(1, 0, \bar{1}) \\ &(\bar{1}, 0, \bar{1})(\bar{1}, 0, 1) \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} &(0, 1, 1)(0, 1, \bar{1}) \\ &(0, \bar{1}, \bar{1})(0, \bar{1}, 1) \end{aligned}$$

La multiplicité de la raie $(1,1,0)$ est donc 12.

Raies équivalentes : multiplicité

Méthode générale

Permutation des axes équivalents ($a=b=c$ pour un cubique)

Distribution

du signe

$(0, 1, 2)$	$(0, 2, 1)$	$(1, 0, 2)$	$(1, 2, 0)$	$(2, 0, 1)$	$(2, 1, 0)$
$(0, \bar{1}, 2)$	$(0, \bar{2}, 1)$	$(\bar{1}, 0, 2)$	$(\bar{1}, 2, 0)$	$(\bar{2}, 0, 1)$	$(\bar{2}, 1, 0)$
$(0, 1, \bar{2})$	$(0, 2, \bar{1})$	$(1, 0, \bar{2})$	$(1, \bar{2}, 0)$	$(2, 0, \bar{1})$	$(2, \bar{1}, 0)$
$(0, \bar{1}, \bar{2})$	$(0, \bar{2}, \bar{1})$	$(\bar{1}, 0, \bar{2})$	$(\bar{1}, \bar{2}, 0)$	$(\bar{2}, 0, \bar{1})$	$(\bar{2}, \bar{1}, 0)$

La multiplicité de la raie $(0,1,2)$ est donc 24 pour un cubique.

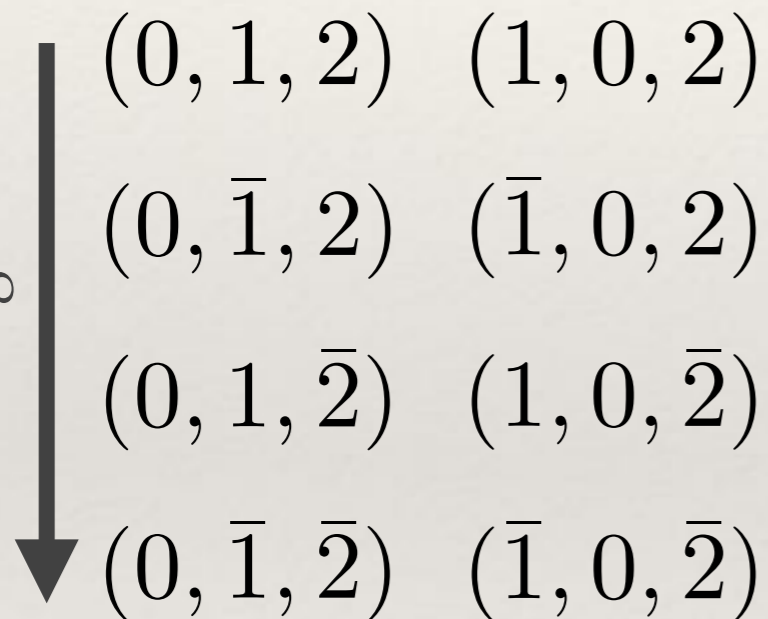
Raies équivalentes : multiplicité

Méthode générale

Permutation des axes équivalents ($a=b \neq c$ pour un tétragonal)

Distribution

du signe



$(0, 1, 2)$	$(1, 0, 2)$
$(0, \bar{1}, 2)$	$(\bar{1}, 0, 2)$
$(0, 1, \bar{2})$	$(1, 0, \bar{2})$
$(0, \bar{1}, \bar{2})$	$(\bar{1}, 0, \bar{2})$

La multiplicité de la raie $(0,1,2)$ est donc 8 pour un tétragonal.

Raies équivalentes : multiplicité

Attention pour les angles différents de 90° !

Pour un cristal monoclinique ($a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta \neq 90^\circ$)

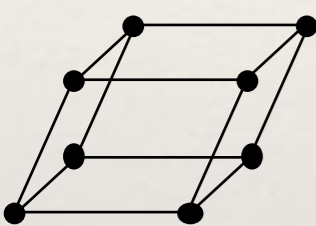
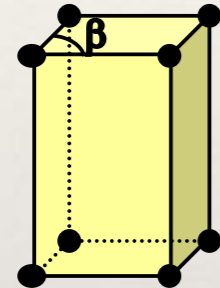
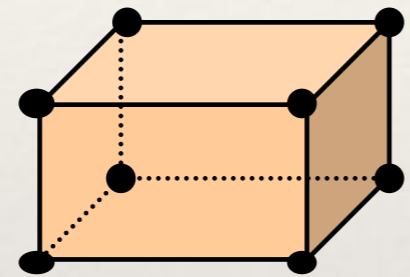
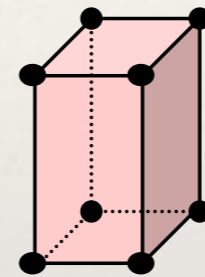
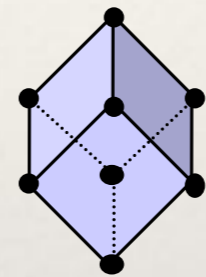
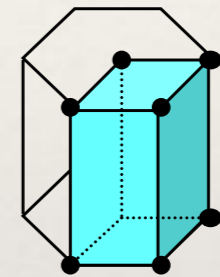
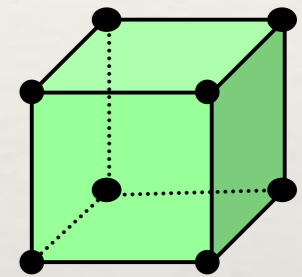
(h, k, l) (\bar{h}, k, \bar{l}) (h, \bar{k}, l) $(\bar{h}, \bar{k}, \bar{l})$ sont équivalents

(h, k, l) (\bar{h}, k, l) ne sont équivalents car $\beta \neq 90^\circ$

Pour un cristal triclinique ($a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$)

(h, k, l) $(\bar{h}, \bar{k}, \bar{l})$ sont les seules raies équivalents : multiplicité = 2

Raies équivalentes : multiplicité

Triclinique	Monoclinique	Orthorhombique	Tetragonal	Trigonal	Hexagonal	Cubique
						
hkl : 2	hkl : 4 h0l : 2 0k0 : 2 ($\beta \neq 90^\circ$)	hkl : 8 0kl : 4 h0l : 4 hk0 : 4 h00 : 2 0k0 : 2 00l : 2	hkl : 16 hhl : 8 h0l : 8 hk0 : 8 hh0 : 4 h00 : 4 00l : 2	hkl : 24 hhl : 12 h0l : 12 hk0 : 12 hh0 : 6 h00 : 6 00l : 2	hkl : 24 hhl : 12 h0l : 12 hk0 : 12 hh0 : 6 h00 : 6 00l : 2	hkl : 48 hhl : 24 h0l : 24 hh0 : 12 hh0 : 8 h00 : 6

Indexation des raies

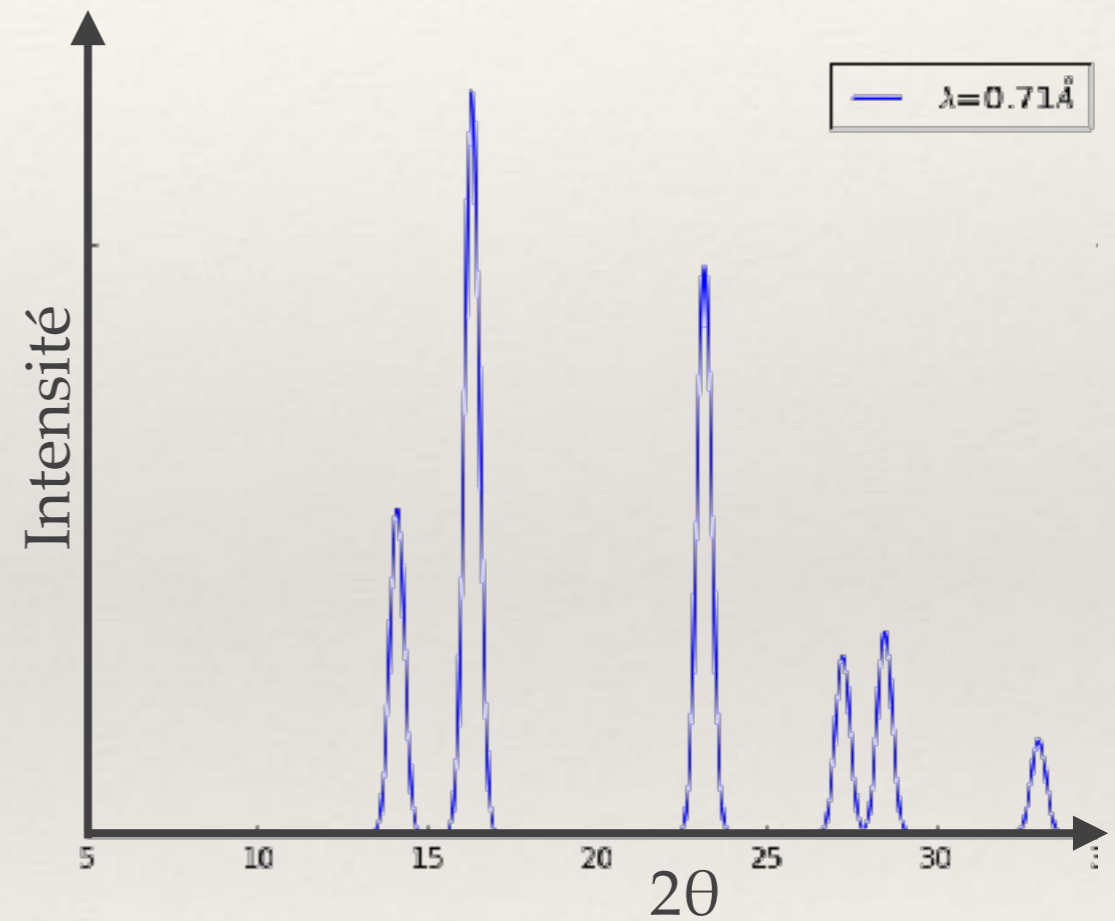
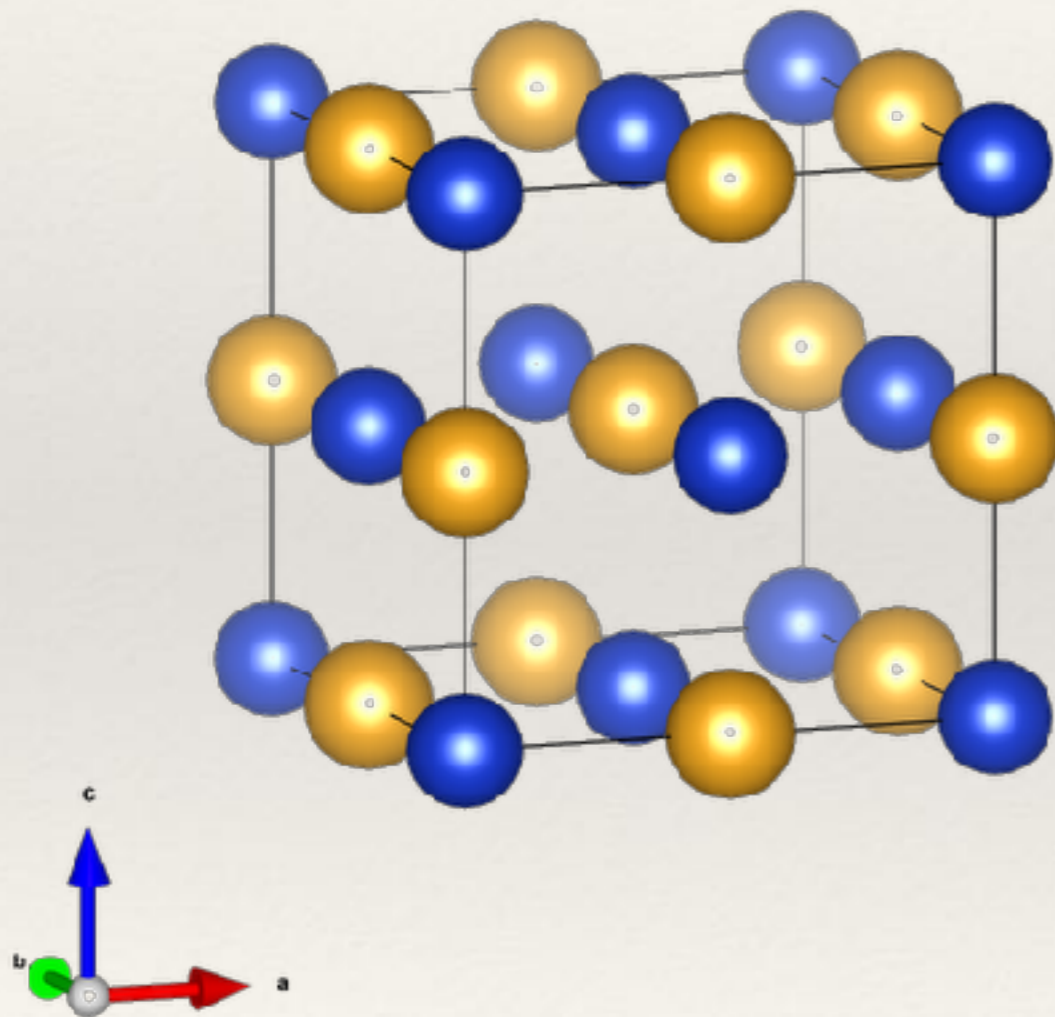
Méthode générale

- 1 - Lister les raies (h,k,l) qui ne sont pas équivalentes
- 2 - Supprimer les raies interdites à cause du mode de réseau (et parfois du motif)
- 3 - Donner la multiplicité des raies (pas utile pour indexer mais pour l'intensité)
- 4 - Calculer pour chaque raie d_{hkl} en fonction de a,b,c et α, β, γ .
- 5 - Trier par d_{hkl} décroissant
- 6 - Connaissant la loi de Bragg, on sait que le premier pic, correspondant au 2θ le plus petit est associé à la distance d_{hkl} la plus grande :
$$\sin(\theta_{hkl}) \propto 1 / d_{hkl}$$

Le second pic est associé au second d_{hkl} le plus grand etc...

Indexation des raies

Application au cubique face centré F



Indexation des raies

Application au cubique face centré F

1 - Lister les raies (h,k,l) qui ne sont pas équivalentes

(h, k, l)

$(1, 0, 0)$

$(1, 1, 0)$

$(1, 1, 1)$

$(2, 0, 0)$

$(2, 1, 0)$

$(2, 1, 1)$

$(2, 2, 0)$

$(2, 2, 1)$

$(2, 2, 2)$

Indexation des raies

Application au cubique face centré F

2 - Supprimer les raies interdites à cause du mode de réseau

(h, k, l)

$(1, 1, 1)$

$(2, 0, 0)$

$(2, 2, 0)$

$(2, 2, 2)$

$(3, 1, 1)$

Indexation des raies

Application au cubique face centré F
3 - Donner la multiplicité des raies

(h, k, l)	<i>Multiplicité</i>
(1, 1, 1)	8
(2, 0, 0)	6
(2, 2, 0)	12
(2, 2, 2)	8
(3, 1, 1)	24

Indexation des raies

Application au cubique face centré F

4 - Calculer pour chaque raie d_{hkl} en fonction de a, b, c et α, β, γ .

(h, k, l)	<i>Multiplicité</i>	d_{hkl}
(1, 1, 1)	8	$\frac{a}{\sqrt{3}}$
(2, 0, 0)	6	$\frac{a}{\sqrt{4}} = \frac{a}{2}$
(2, 2, 0)	12	$\frac{a}{\sqrt{8}}$
(2, 2, 2)	8	$\frac{a}{\sqrt{12}}$
(3, 1, 1)	24	$\frac{a}{\sqrt{11}}$

Pour un cubique :

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

Indexation des raies

Application au cubique face centré F

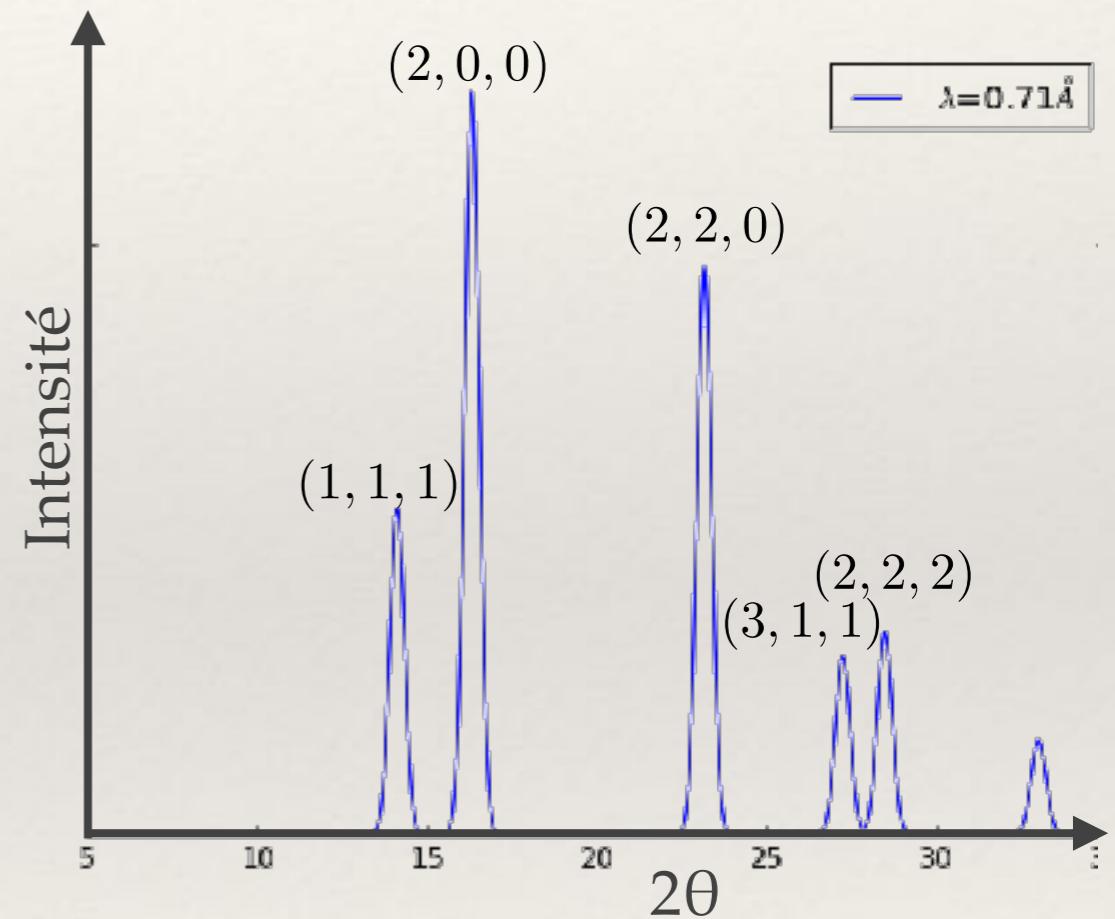
5 - Trier par d_{hkl} décroissant

(h, k, l)	<i>Multiplicité</i>	d_{hkl}
(1, 1, 1)	8	$\frac{a}{\sqrt{3}}$
(2, 0, 0)	6	$\frac{a}{\sqrt{4}} = \frac{a}{2}$
(2, 2, 0)	12	$\frac{a}{\sqrt{8}}$
(3, 1, 1)	24	$\frac{a}{\sqrt{11}}$
(2, 2, 2)	8	$\frac{a}{\sqrt{12}}$

Indexation des raies

Application au cubique face centré F
6 - Indexer le diffractogramme

(h, k, l)	<i>Multiplicité</i>	d_{hkl}
$(1, 1, 1)$	8	$\frac{a}{\sqrt{3}}$
$(2, 0, 0)$	6	$\frac{a}{\sqrt{4}} = \frac{a}{2}$
$(2, 2, 0)$	12	$\frac{a}{\sqrt{8}}$
$(3, 1, 1)$	24	$\frac{a}{\sqrt{11}}$
$(2, 2, 2)$	8	$\frac{a}{\sqrt{12}}$



Calcul d'intensité

Monocristal

Poudres

$$I \propto P(\theta)L(\theta)|F(h, k, l)|^2$$

$$I \propto P(\theta)L(\theta)|F(hkl)|^2 m_{hkl}$$

$I_0 N r_e^2 \lambda^3$ Rapport de proportionnalité

$$F(h, k, l) = \sum_i^{N_{atomes}} f_i(q) e^{i2\pi(hx_i + ky_i + lz_i)}$$

Facteur de structure

$$P(\theta) = \frac{1 + \cos^2(2\theta)}{2}$$

Facteur de polarisation (faisceau non polarisé)

$$L(\theta) = \frac{1}{\sin(2\theta)} \quad \text{ou} \quad L(\theta) = \frac{1}{\sin^2(\theta)\cos(\theta)}$$

Facteur de Lorentz : lié à la géométrie

m_{hkl} Multiplicité de la raie hkl