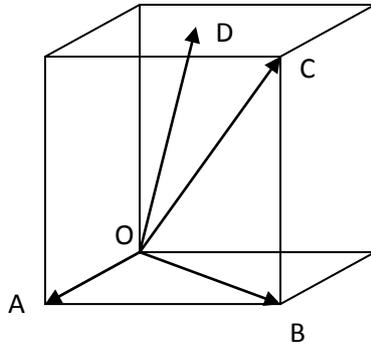


Les rayons X et la radiocristallographie

1. La notation de Miller en cristallographie

a. La notation des directions cristallographiques

Par définition, on note $[hkl]$ une direction où h , k et l sont des nombres premiers entre eux et leur valeur est proportionnelle aux coordonnées de leur vecteur directeur.



On notera donc $\overrightarrow{OA} : [100]$, $\overrightarrow{OB} : [110]$, $\overrightarrow{OC} : [111]$, $\overrightarrow{OD} : [112]$

Des vecteurs parallèles ont même notation de Miller.

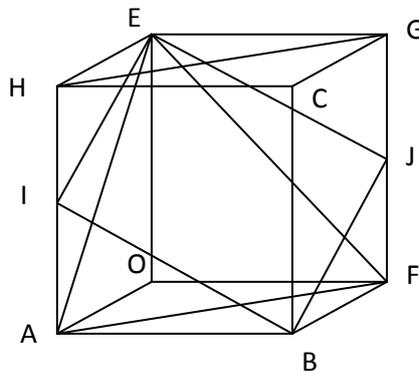
Le vecteur opposé $\overrightarrow{CO} = -\overrightarrow{OC} : [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$

Toutes les petites diagonales font partie de la même famille $\langle 110 \rangle$

Les grandes diagonales font partie de la famille $\langle 111 \rangle$

b. La notation des plans cristallographiques

Par définition, on note (hkl) un plan dont les intersections avec les axes sont : $1/h \ 0 \ 0$, $0 \ 1/k \ 0$, $0 \ 0 \ 1/l$. On note $\{hkl\}$, la famille de plans (hkl) .



Ainsi on notera les plans :

ABCH (100)

AFGH (110)

AFE (111)

BJEI (112)

On remarque que la normale au plan (hkl) et la direction $[hkl]$

ABCH a pour normale \overrightarrow{OA} donc $(100) \perp [100]$

AFE a pour normale \overrightarrow{OC} donc $(111) \perp [111]$

BJEI a pour normale \overrightarrow{OD} donc $(112) \perp [112]$

c. Angle entre 2 directions cristallographiques

L'angle est donné par la relation $\cos \alpha = \frac{\vec{u} \cdot \vec{v}}{|\vec{u}| |\vec{v}|} = \frac{hh' + kk' + ll'}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \times \sqrt{h'^2 + k'^2 + l'^2}}$

Exemple :

$[100], [110]$ donne $\cos \alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}$ d'où $\alpha = \pi / 4$ rd

$[110], [111]$ donne $\cos \alpha = \frac{2}{\sqrt{2}\sqrt{3}} = \frac{\sqrt{2}}{3}$ d'où $0,615$ rd = $35,26^\circ$

$hh' + kk' + ll' = 0$ d'où $\alpha = \pi / 2$ rd ainsi $[11\bar{2}], [111]$

2. La relation de Bragg

a. Les plans réticulaires

Une famille de plans est dite réticulaire si elle permet de décrire tous les atomes du cristal.

On considère un réseau CC.

$\{100\}$ n'est pas un plan réticulaire. L'atome central n'est pas dans ce plan.

$\{110\}$ est un plan réticulaire

$\{111\}$ n'est pas non plus pour la même raison

$\{200\}$ et $\{211\}$ sont des plans réticulaires

$\{210\}$ ne l'est pas.

On notera que les plans sont réticulaires pour un réseau CC quand $h + k + l$ est pair.

On considère un réseau CFC

$\{100\}, \{110\}$ ne sont pas des plans réticulaires

$\{111\}, \{200\}, \{220\}, \{311\}, \{222\}$ sont des plans réticulaires

On notera que les plans sont réticulaires pour un réseau CFC quand h, k et l sont de même parité.

b. La distance interréticulaire

La distance entre les plans est $d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$

Exemple : $d = \frac{a}{\sqrt{2}}$ pour les plans $\{110\}$ et $d = \frac{a}{\sqrt{3}}$ pour les plans $\{111\}$

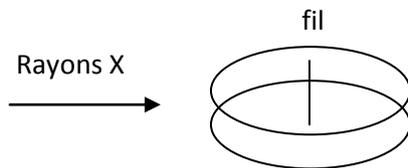
c. La relation de Bragg

La diffraction des rayons sur les atomes d'un réseau cristallin donnera :

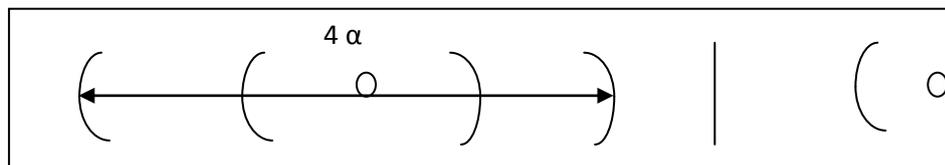
$2 d \sin \alpha = n \lambda$ avec $d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$ et n entier relatif.

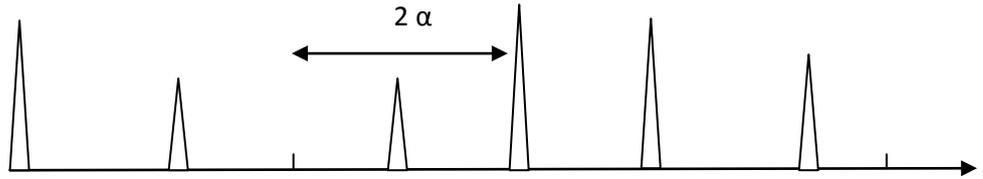
3. La méthode de Debye et Scherrer

Un cristal tournant ou de la poudre de cristal donnera les différents angles de diffraction.



On récupère sur le film ou le capteur les raies de diffraction.





On note que la distance angulaire est 2α et la distance sur le film $L = 2\alpha$ ou 4α en mm car en général la circonférence du film est $c = 2\pi R = 360$ mm, ce qui permet le passage direct des distances en angle en $^\circ$.

On commence par s'occuper de la 2^{ème} raie. Quelque soit le réseau, elle correspond à un plan réticulaire {200}.

$2d \sin \alpha = n\lambda$ avec $a = \frac{\lambda \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}{2 \sin \alpha} = \frac{\lambda}{\sin \alpha}$. On obtient ainsi une valeur de a .

Pour la 1^{ère} raie, on a $\sqrt{h^2 + k^2 + l^2} = \frac{2a \sin \alpha}{\lambda}$. La valeur est de l'ordre de $\sqrt{2}$ ou $\sqrt{3}$. On sait ainsi si le réseau est CC ou CFC. La raie la plus éloignée, l'angle le plus élevé permet de déterminer plus précisément la valeur de a .

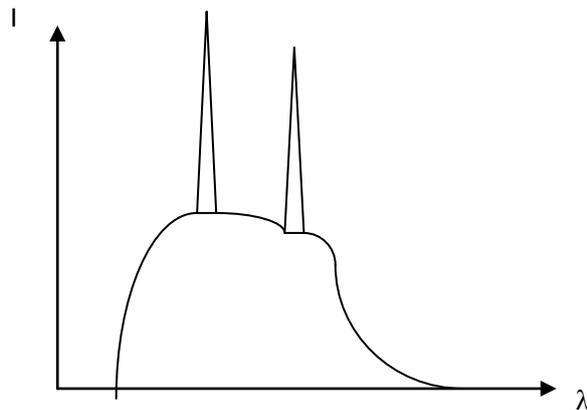
4. La production des rayons X

a. Spectre continu et spectre de raies

Lorsqu'un faisceau d'électrons heurte un métal, les électrons peuvent se réfléchir, ce sont les électrons rétrodiffusés. Ils peuvent aussi arracher des électrons au métal, ce sont les électrons secondaires.

Le spectre des photons superpose un spectre de raies à un spectre continu.

Dans le cas des électrons secondaires, on obtient parallèlement, des photons de longueur d'onde parfaitement bien définie correspondant à la restabilisation du noyau. D'où on observe un spectre de raies.



Le spectre continu correspond lui à la variation d'énergie cinétique des électrons rétrodiffusés :

$$\Delta E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

Si les électrons perdent la totalité de leur énergie cinétique, on $\Delta E = E_c = \frac{1}{2}mv^2 = eU = \frac{hc}{\lambda}$.

C'est la longueur minimale du spectre.

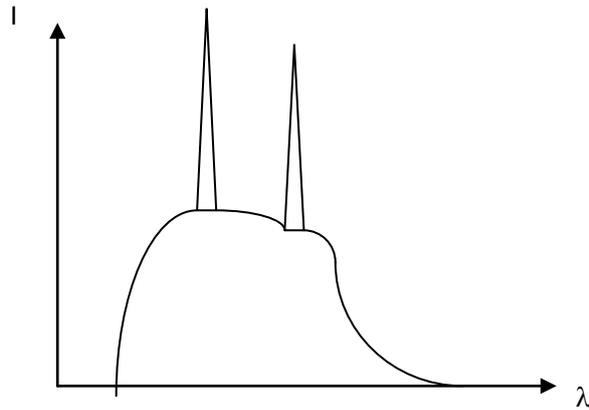
Le spectre de raie correspond aux états d'énergie des électrons expulsés. Ici, ce sont les électrons des couches les plus profondes $1s^1$ et $1s^2$.

b. Absorption des rayons X

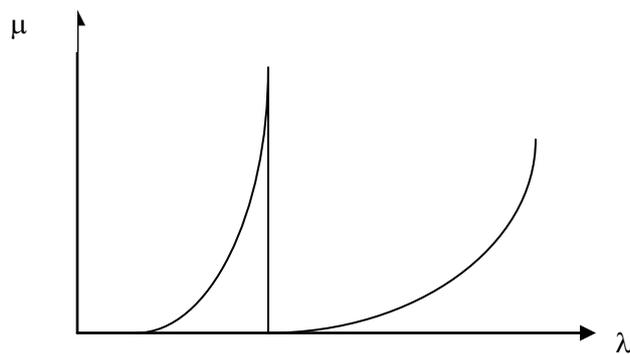
Les rayonnements sont absorbés suivant la loi de Beer-Lambert. Ainsi, $dI = -\mu I dx$, d'où $I = I_0 e^{-\mu x} = I_0 e^{-\frac{\mu}{\rho} \rho x}$ où μ est le coefficient d'absorption en m^{-1} , μ / ρ est le coefficient d'absorption volumique en $kg^{-1} \cdot m^2$.

On notera que certains filtres sont sélectifs en longueur d'onde et présentent des ruptures d'absorption.

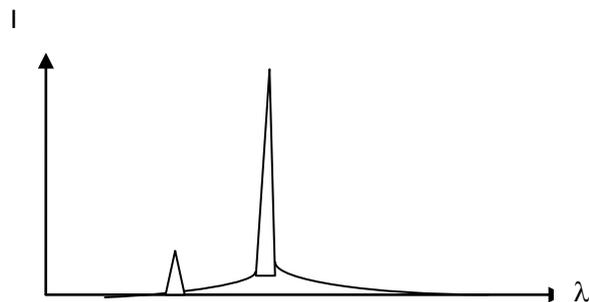
Exemple du cuivre :



On a les 2 raies $K_{\alpha 1}$ 0,15405 nm, $K_{\alpha 2}$ 0,15443 nm et K_{β} 0,1392 nm



Le filtre en nickel a une rupture pour la longueur d'onde 0,1488 nm



Il ne reste que le doublet K_{α} .