Corrigé du TD N° III

Exo I : 1°) air ⟺ mélange $75,5\%$ de N_2

$23,2\%$ de O_2 — utilisant $N_2 = 28g$, $O_2 = 32g$, $Ar \simeq 40$ — utilisant le fait

$1,3\%$ d'Ar

qu'une mole d'air a un volume $V_M = 22,4\,\ell$ on peut calculer

$$\boxed{\rho = 0,0013\,g/cm^3}$$

2°) $$\mu_{air} = \frac{8,5 \times 75,5 + 12,7 \times 23,2 + 113 \times 1,3}{100} = 10,8\ cm^2/g$$

$$\Rightarrow \mu \times e = 10,8 \times 0,0013 = 0,014\,/cm \Rightarrow \frac{I}{I_0} = e^{-0,14} = 0,87$$

$$\boxed{I = 0,87\,I_0}$$

13% de I_0 sont absorbés.

Exo II : 1°) $\frac{I}{I_0} = \alpha$ si $x = a$ $\quad \frac{I}{I_0} = e^{-\mu \rho x}$ si $x = a$

$\alpha = e^{-\mu \rho a}$ $\quad$ si $x = 2a$ $\quad \frac{I}{I_0} = e^{-\mu \rho 2a} = \left(e^{-\mu \rho a}\right)^2 = \alpha^2$

$$x = 2a \Rightarrow \boxed{\frac{I}{I_0} = \alpha^2}$$

2°) $$\mu_{BaTiO_3} = \frac{Ba \times \mu_{Ba} + Ti \times \mu_{Ti} + 3\,O \times \mu_O}{Ba + Ti + 3 \times O} = \frac{359 \times 137 + 204 \times 48 + 3 \times 12,7 \times 16}{137 + 48 + 3 \times 16}$$

$$\boxed{\mu_{BaTiO_3} = 256\ cm^2/g}$$

$$I/I_0 = e^{-\mu \rho x} = e^{-256 \times 6,05 \times 0,005} = 0,00045$$

$$\boxed{I/I_0 = 0,00045} \Rightarrow \text{Absorption considérable}$$

Exo III : 1°) a) potentiel minimum $V_{L_{III}}$ est tel $\quad e V_{L_{III}} \geq h\nu_{L_{III}} = \frac{hc}{\lambda_{L_{III}}}$

$$\Rightarrow V_{L_{III}} \geq \frac{hc}{e\lambda_{L_{III}}} \Rightarrow V_{L_{III}} \geq \frac{12400}{17,48} = 708\ \text{volts}$$

$$\boxed{V_{L_{III}} = 708\ \text{volts}}$$

b) pour la raie K $\Rightarrow V_K \geq \frac{12400}{\lambda_K} = \frac{12400}{1,74} = 7110\ \text{volts}$

$$\boxed{V_K = 7110\ \text{volts}}$$

2°) $$\frac{hc}{\lambda_{K\alpha}} = \frac{hc}{\lambda_K} - \frac{hc}{\lambda_L} \Rightarrow \frac{1}{\lambda_{K\alpha}} = \frac{1}{\lambda_K} - \frac{1}{\lambda_L} = \frac{1}{1,74} - \frac{1}{17,48} \Rightarrow \boxed{\lambda_{K\alpha} = 1,94\,\text{Å}}$$

3) [illegible] l'énergie d'ionisation K

corrigé TD N° 4 : diffusion - diffraction des RX

Exo I : 1) C.C. $\Rightarrow \boxed{F_{hkl} = f\left(1 + e^{i2\pi\left(\frac{h+k+l}{2}\right)}\right)} \Rightarrow F_{hkl} = 0 \Rightarrow \pi(h+k+l) = (2n+1)\pi$

$\Rightarrow \boxed{(h+k+l) \text{ impair}}$

2) C.F.C. $\Rightarrow F_{hkl} = f\left[1 + e^{i2\pi\left(\frac{h+k}{2}\right)} + e^{i2\pi\left(\frac{h+l}{2}\right)} + e^{i2\pi\left(\frac{k+l}{2}\right)}\right]$

$\boxed{F_{hkl} = f\left[1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)}\right]} \Rightarrow F_{hkl} = 0 \Rightarrow 1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)} = 0$

cette condition est réalisée que si h, k, l sont de $\boxed{\text{parités différentes}}$

Exo II : 1) Réseau H.C. atomes (000) et $\left(\frac{1}{3}\,\frac{2}{3}\,\frac{1}{2}\right) \Rightarrow F_{hkl} = f\left[1 + e^{i2\pi\left(\frac{h}{3} + \frac{2k}{3} + \frac{l}{2}\right)}\right]$

$$F_{hkl} = f\left[1 + e^{i2\pi\left(\frac{h+2k}{3} + \frac{l}{2}\right)}\right] = f\left[1 + e^{i2\pi\left(\frac{h-k+3k}{3} + \frac{l}{2}\right)}\right]$$

$$= f\left[1 + e^{i2\pi\frac{(h-k)}{3}}\, \underbrace{e^{i2\pi k}}_{=1}\, e^{i2\pi\frac{l}{2}}\right] = f\left[1 + e^{i2\pi\left(\frac{h-k}{3} + \frac{l}{2}\right)}\right]$$

$$\boxed{F_{hkl} = f\left[1 + e^{i2\pi\left(\frac{h-k}{3} + \frac{l}{2}\right)}\right]}$$

$F_{hkl} = 0 \Rightarrow \boxed{h - k = 3n \text{ et } l = 2p+1}$ règle d'extinction

2)

$h-k$	l	$\lvert F_{hkl}\rvert$
$3n$	pair	$2f$
$3n$	impair	0
$3n\pm1$	pair	f
$3n\pm1$	impair	$\sqrt{3}f$

ce tableau peut être établi par le calcul de $I \propto F_{hkl} \times F^*_{hkl} = |F_{hkl}|^2$

I = intensité du faisceau de RX

Exo III : maille diamant : motif : (000) et $\left(\frac{1}{4}\,\frac{1}{4}\,\frac{1}{4}\right)$ + maille CFC $\Rightarrow$

maille contient les atomes : $(000)\left(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,0\right)\left(\frac{1}{2}\,0\,\frac{1}{2}\right),\left(0\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{4}\,\frac{1}{4}\,\frac{1}{4}\right)\left(\frac{3}{4}\,\frac{3}{4}\,\frac{1}{4}\right)\left(\frac{3}{4}\,\frac{1}{4}\,\frac{3}{4}\right)\left(\frac{1}{4}\,\frac{3}{4}\,\frac{3}{4}\right)$

$$\Rightarrow F_{hkl} = \left[1 + e^{i2\pi\left(\frac{h+k}{2}\right)} + e^{i2\pi\left(\frac{h+l}{2}\right)} + e^{i2\pi\left(\frac{k+l}{2}\right)} + e^{i2\pi\left(\frac{h+k+l}{4}\right)} + e^{i2\pi\left(\frac{3h+3k+l}{4}\right)} + e^{i2\pi\left(\frac{3h+k+3l}{4}\right)} + e^{i2\pi\left(\frac{h+3k+3l}{4}\right)}\right]$$

$$F_{hkl} = \left[1 + e^{i2\pi\left(\frac{h+k}{2}\right)} + e^{i2\pi\left(\frac{h+l}{2}\right)} + e^{i2\pi\left(\frac{k+l}{2}\right)}\right] + e^{i2\pi\left(\frac{h+k+l}{4}\right)}\left[1 + e^{i2\pi\left(\frac{2h+2k}{4}\right)} + e^{i2\pi\left(\frac{2h+2l}{4}\right)} + e^{i2\pi\left(\frac{2k+2l}{4}\right)}\right]$$

$$= \left[1 + e^{i2\pi\left(\frac{h+k}{2}\right)} + e^{i2\pi\left(\frac{h+l}{2}\right)} + e^{i2\pi\left(\frac{k+l}{2}\right)}\right]\left[1 + e^{i2\pi\left(\frac{h+k+l}{4}\right)}\right]$$

$\Rightarrow \boxed{F_{hkl} = F\,(CFC)\left[1 + e^{i\pi\frac{(h+k+l)}{2}}\right]}$

Exo IV 1°) multiplicité de (hkl) dans le réseau hexagonal : $d_{hkl} = \dfrac{a}{\sqrt{h^2+k^2+\frac{l^2a^2}{c^2}}}$

$hkl \quad \bar h \bar k l \quad hk\bar l \quad \bar h \bar k \bar l$

$\bar h kl \quad h\bar k l \quad \bar h k\bar l \quad h\bar k\bar l$ donne la même d_{hkl} => multiplicité $\boxed{16}$

$\bar k hl \quad k\bar h l \quad \bar k h\bar l \quad k\bar h\bar l$

$khl \quad \bar k\bar h l \quad kh\bar l \quad \bar k\bar h\bar l$

2°) cas $hk0$

$hk0 \quad \bar h\bar k0 \quad \bar h k0$

$\bar h k0 \quad h\bar k0$ => donne la même d_{hkl} => multiplicité de 8

$\bar k h0 \quad k\bar h0$

$\bar k\bar h0$

3°) cas $hh0$; $hh0 \quad \bar h\bar h0$ => donne la même d_{hkl} => multiplicité de 4

$\bar h h0 \quad h\bar h0$