

Chapitre II, le réseau réciproque

introduction le réseau réciproque $(\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*)$ est en relation directe avec le réseau direct $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$. Il permet de :

- * simplifier certains calculs cristallographiques
- ** de Formule de façon simple la diffraction des RX par les cristaux
- *** d'exprimer de façon connue d'autres propriétés des solides.

II.1 Definitions : on peut définir le réseau réciproque par deux séries d'équations

série I : $\vec{a}^* \cdot \vec{b} = \vec{a}^* \cdot \vec{c} = \vec{b}^* \cdot \vec{a} = \vec{b}^* \cdot \vec{c} = \vec{c}^* \cdot \vec{a} = \vec{c}^* \cdot \vec{b} = 0$
 $\vec{a}^* \cdot \vec{a} = \vec{b}^* \cdot \vec{b} = \vec{c}^* \cdot \vec{c} = 1$ (II.1)

série II : $\vec{a}^* = \frac{1}{V_0} \vec{b} \wedge \vec{c}$; $\vec{b}^* = \frac{1}{V_0} \vec{c} \wedge \vec{a}$; $\vec{c}^* = \frac{1}{V_0} \vec{a} \wedge \vec{b}$
 $V_0 = \vec{a} \cdot (\vec{b} \wedge \vec{c}) = \text{volume de la maille direct}$

$\vec{a} = \frac{1}{V_0^*} \vec{b}^* \wedge \vec{c}^*$; $\vec{b} = \frac{1}{V_0^*} \vec{c}^* \wedge \vec{a}^*$; $\vec{c} = \frac{1}{V_0^*} \vec{a}^* \wedge \vec{b}^*$ (II.2)

$V_0^* = \vec{a}^* \cdot (\vec{b}^* \wedge \vec{c}^*) = \text{volume de la maille réciproque}$

on voit que \vec{a}^* est \perp à \vec{b} et \vec{c} et \vec{a}
 \vec{b}^* est \perp à \vec{c} et \vec{a} et \vec{b}
 \vec{c}^* est \perp à \vec{a} et \vec{b} et \vec{c}

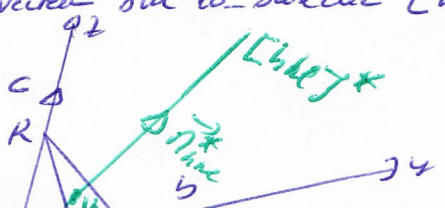
On sait que $|\vec{a}^*| = \frac{1}{|\vec{c}| \sin(\angle(\vec{a}, \vec{b}))}$; $|\vec{b}^*| = \frac{1}{|\vec{a}| \sin(\angle(\vec{b}, \vec{c}))}$ et $|\vec{c}^*| = \frac{1}{|\vec{b}| \sin(\angle(\vec{c}, \vec{a}))}$ (II.3)

II.e) Propriétés du réseau réciproque

II.e.a) Relations entre le réseau direct et le réseau réciproque

* le réseau réciproque du réseau réciproque est le réseau direct

** toute rangée du réseau réciproque est \perp au plan du réseau direct de même indice de Miller - en effet soit $\vec{n}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$ un vecteur sur la direction $[hkl]^*$ du réseau réciproque



est (hkl) le plan du réseau direct tel que $hx + ky + lz = 1$

on sait que $\vec{OP} = \vec{a} \cdot \vec{OP} = \vec{b}$

comme

$$\vec{PQ} = \vec{OQ} - \vec{OP} = \frac{a}{h} \vec{a} - \frac{b}{k} \vec{b}$$

$$\Rightarrow \vec{n}^*_{hkl} \cdot \vec{PQ} = (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \left(\frac{a}{h} \vec{a} - \frac{b}{k} \vec{b} \right) = \frac{1}{h} h \vec{a}^* \cdot \vec{a} + \frac{1}{h} k \vec{b}^* \cdot \vec{a} + \frac{1}{h} l \vec{c}^* \cdot \vec{a} - \frac{1}{k} h \vec{a}^* \cdot \vec{b} - \frac{1}{k} k \vec{b}^* \cdot \vec{b} - \frac{1}{k} l \vec{c}^* \cdot \vec{b}$$

$$= \frac{1}{h} (1 - 1) = 0$$

$$\Rightarrow \vec{n}^*_{hkl} \perp \vec{PQ}$$

comme $\vec{QR} = \vec{OR} - \vec{OQ} = \left(\frac{c}{l} - \frac{b}{k} \right) \vec{c} - \frac{b}{k} \vec{b}$ $\Rightarrow \vec{n}^*_{hkl} \cdot \vec{QR} = (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \left(\frac{c}{l} \vec{c} - \frac{b}{k} \vec{b} \right) = 1 - 1 = 0$

$$\Rightarrow \vec{n}^*_{hkl} \perp \vec{QR}$$

$$\Rightarrow \vec{n}^*_{hkl} \perp \vec{PQ} \text{ et } \vec{n}^*_{hkl} \perp \vec{QR} \Rightarrow \vec{n}^*_{hkl} \text{ est } \perp \text{ au plan } PQR \Rightarrow (hkl) \perp (hkl)$$

*** calcul de la distance interréticulaire d_{hkl}

comme $d_{hkl} = OH$ or $OH = \frac{\vec{OP} \cdot \vec{n}^*}{|\vec{n}^*|} = \frac{a}{h} (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*)$

$$\Rightarrow \boxed{OH = d_{hkl} = \frac{1}{|\vec{n}^*_{hkl}|}} \quad \text{II 4}$$

**** relations entre le volume V_0 de la maille directe et le volume V_0^* de la maille réciproque

$$V_0 \cdot V_0^* = \begin{vmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \\ c_1 & c_2 & c_3 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} a_1^* & a_2^* & a_3^* \\ b_1^* & b_2^* & b_3^* \\ c_1^* & c_2^* & c_3^* \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \vec{a} \cdot \vec{a}^* & \vec{a} \cdot \vec{b}^* & \vec{a} \cdot \vec{c}^* \\ \vec{b} \cdot \vec{a}^* & \vec{b} \cdot \vec{b}^* & \vec{b} \cdot \vec{c}^* \\ \vec{c} \cdot \vec{a}^* & \vec{c} \cdot \vec{b}^* & \vec{c} \cdot \vec{c}^* \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = 1$$

$$\Rightarrow \boxed{V_0 = \frac{1}{V_0^*}} \quad \text{II 5}$$

III Applications du réseau réciproque:

IIIa) Recherche de la famille des plans réticulaires parallèles à deux rangées données

soient $[u_1, v_1, w_1]$ et $[u_2, v_2, w_2]$ deux rangées réticulaires données correspondantes à $\vec{n}_1 = u_1 \vec{a} + v_1 \vec{b} + w_1 \vec{c}$ et $\vec{n}_2 = u_2 \vec{a} + v_2 \vec{b} + w_2 \vec{c}$

comme $\vec{n}_1 \wedge \vec{n}_2 = (u_1 \vec{a} + v_1 \vec{b} + w_1 \vec{c}) \wedge (u_2 \vec{a} + v_2 \vec{b} + w_2 \vec{c}) = h \vec{a}^* + k \vec{b}^* + l \vec{c}^*$
 représente un vecteur des réseaux réciproques, il est \perp au plan (hkl) ou
 inversement \Rightarrow le plan réticulaire est $\parallel (hkl)$ et h, k, l sont
 calculés à partir de

$$\left| \frac{h}{v_1 w_2 - v_2 w_1} = \frac{k}{w_1 u_2 - u_2 u_1} = \frac{l}{u_1 v_2 - u_2 v_1} \right| \quad \text{II.6}$$

h, k et l doivent être les plus petits qui soient.

III.6) indice d'une rangée réticulaire parallèle à deux plans réticulaires
 $(h_1 k_1 l_1)$ et $(h_2 k_2 l_2)$

soit $[uvw]$ cette rangée ; $\vec{n}_1^* = h_1 \vec{a}^* + k_1 \vec{b}^* + l_1 \vec{c}^*$ et $\vec{n}_2^* = h_2 \vec{a}^* + k_2 \vec{b}^* + l_2 \vec{c}^*$
 2 vecteurs des réseaux réciproques et $(uvw)^*$ le plan des réseaux réciproques
 ou se ramène à $(uvw)^*$ parallèle à 2 rangées \vec{n}_1^* et \vec{n}_2^* soit

$$\left| \frac{u}{k_1 l_2 - k_2 l_1} = \frac{v}{l_1 h_2 - l_2 h_1} = \frac{w}{h_1 k_2 - h_2 k_1} \right| \quad \text{II.7}$$

où l'on choisit u, v, w les plus petits qui soient

III.7) Expression de la distance d_{hkl}

comme $d_{hkl} = \frac{1}{|\vec{n}_{hkl}^*|}$ $\vec{n}_{hkl}^* = h \vec{a}^* + k \vec{b}^* + l \vec{c}^*$

$$\Rightarrow \left| d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{(h \vec{a}^* + k \vec{b}^* + l \vec{c}^*) \cdot (h \vec{a}^* + k \vec{b}^* + l \vec{c}^*)}} \right| \quad \text{II.8}$$

pour le réseau cubique

$$\left| d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \right| \quad \text{II.9}$$

pour le réseau tétragonal simple

$$\left| d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + \frac{a^2}{c^2} l^2}} \right| \quad \text{II.10}$$

pour le réseau orthorhombique simple

$$\left| d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}} \right| \quad \text{II.11}$$

rayon hexagonal \Rightarrow

$$d_{hex} = \frac{1}{\sqrt{\frac{4}{3a^2} (h^2 + b^2 + hb) + \frac{eL}{cL}}} \quad \text{II 12}$$

Chapitre III : Propriétés fondamentales des RX

Introduction : nature des RX : ce sont des rayonnements électromagnétiques comme la lumière visible, les U.V.

si la longueur d'onde des rayonnements visible est de l'ordre de 10^{-7} m celle des RX est de l'ordre de 1 \AA (10^{-8} cm) - En radiographie, on utilise des RX de longueur d'onde $0,7 \text{ \AA} \leq \lambda \leq 2 \text{ \AA}$ - En médecine par exemple, les RX utilisées sont plus dures $0,1 \text{ \AA} \leq \lambda \leq 0,1 \text{ \AA}$

III.1) Production des RX

III.1.a) Principe du tube à RX

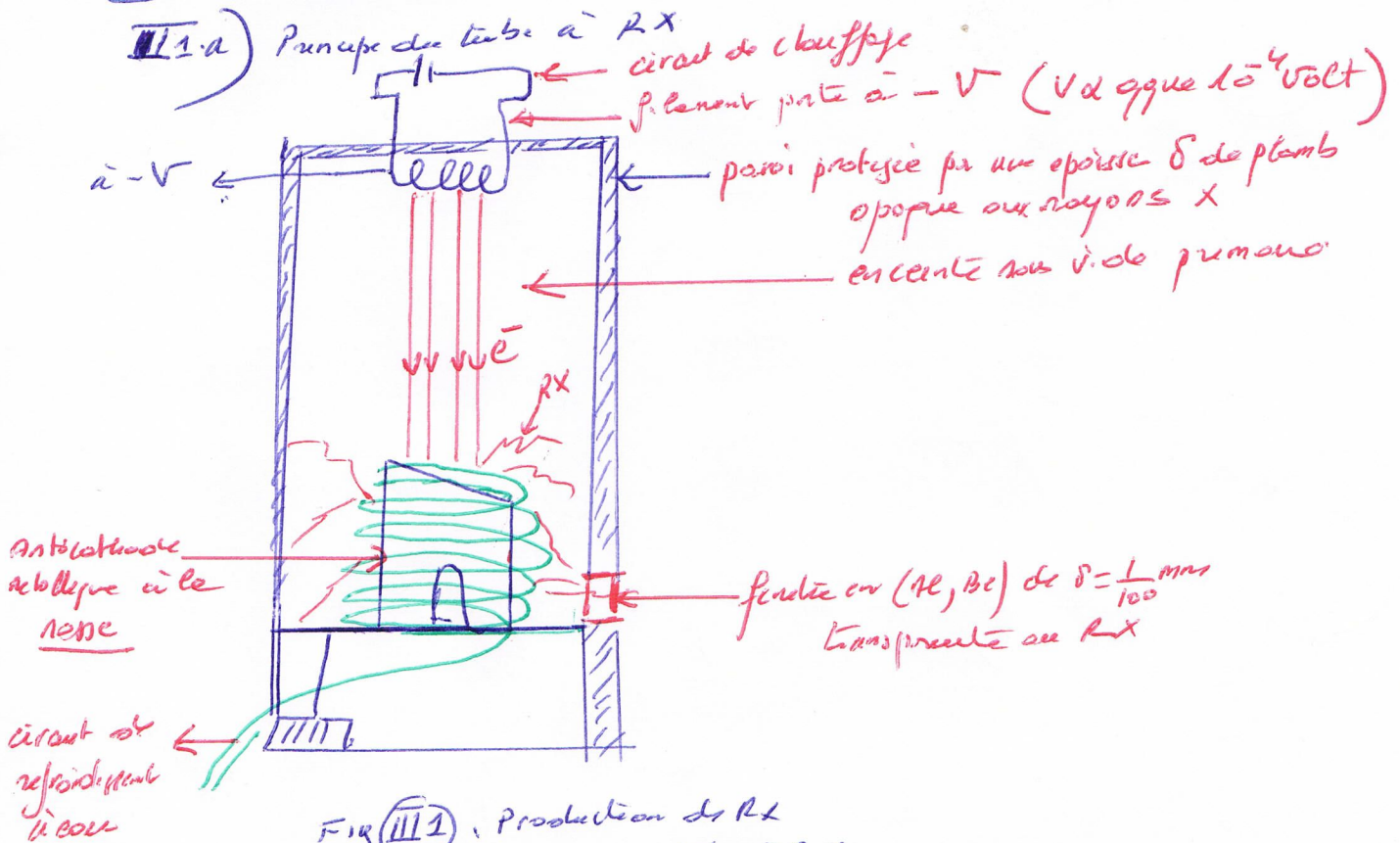


Fig (III.1) Production des RX
principe du tube à RX

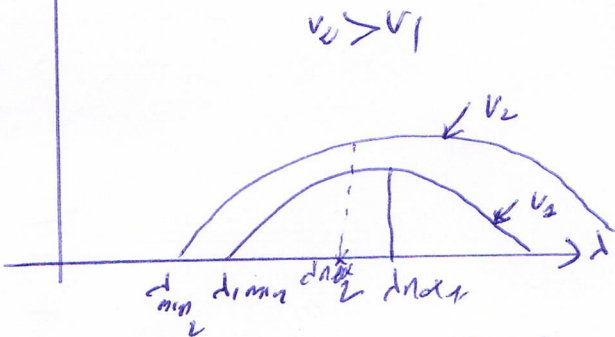
Dans une enceinte sous vide primaire, on met un filament chauffé à un potentiel négatif $-U$ (-10 kV à -40 kV) par rapport à un anticathode à la norme $U=0$

Les électrons sortant du filament chauffé par effet photoélectrique sont accélérés avec la tension appliquée à l'ensemble de la cathode.

ce bombardement va produire des RX que l'on recueille à l'aide d'une fente de $\frac{1}{100}$ mm d'épaisseur dans un récepteur léger qui se du beryllium ou de l'aluminium.
Comme l'anticathode métallique chauffe, on la refroidit à l'aide d'un circuit de refroidissement à eau.

III.2) Spectre des rayonnements X sortant d'un tube

III.2a) la spectre continu : c'est une fonction continue de la fame (Fig III.2) qui représente l'intensité sortante en fct de la longueur d'onde - Or l'a tracé pour 2 tensions d'accélération V_1 et V_2 telles que $V_2 > V_1$



courbe (III.2) : spectre continu $I = f(\lambda)$ de RX sortant du tube

pour une tension d'accélération V donnée, $I = 0$ si $\lambda \leq \lambda_{min}$; pour $\lambda > \lambda_{min}$ on a un spectre continu \Rightarrow le rayonnement est polychromatique.

cette fame de courbe se faule à interpréter physiquement - si on fait le bilan entre l'énergie W des électrons et du photon ($h\nu$) on a

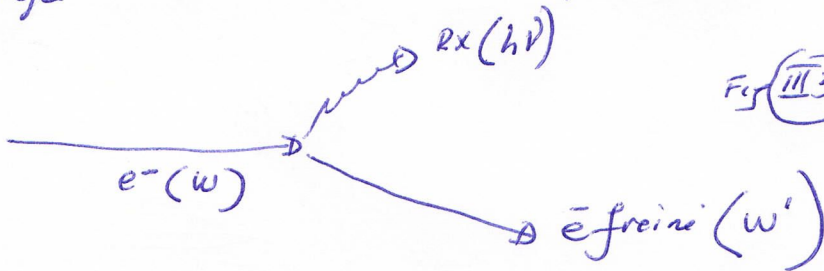


Fig (III.3) : Principe de production des RX.

le bilan énergétique est $W = W' + h\nu \Rightarrow h\nu = \frac{hc}{\lambda} = W - W'$

$\Rightarrow \lambda = \frac{hc}{W - W'}$ (III.1)

$W - W'$ pour λ max que $W \Rightarrow$ cela correspond à λ_{min} que W

$\lambda_{min} = \frac{hc}{W} = \frac{hc}{eV}$ (III.2)

si on calcule λ_{min} en Å, et V en volt $\Rightarrow \lambda_{min} = \frac{12400}{V}$ (III.3)

on voit que d_{max} est inversement proportionnelle à v , ce qui a vérifié dans la courbe (III 2). La courbe (III 2) est difficile à calculer théoriquement, on sait par contre que d_{max} vaut

$$d_{max} \approx \frac{3}{2} d_{min}$$

d_{max} représente la valeur de d ou maximum de I

III 2 b Le spectre de raies des rayons X sortant d'un tube

Au spectre continu on superpose un ensemble de raies formé des raies plus ou moins fines que l'on appelle le spectre de raies comme le montre la figure (III 4) - l'intensité d'une raie par rapport au fond continu peut varier d'un facteur supérieur à 1000.

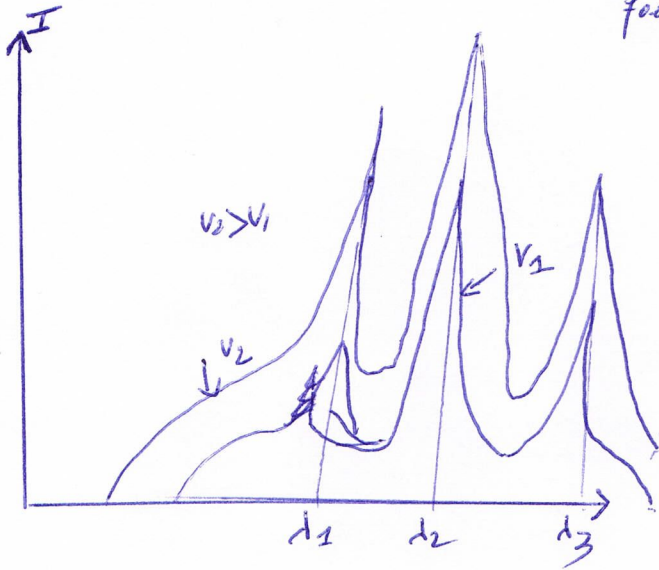


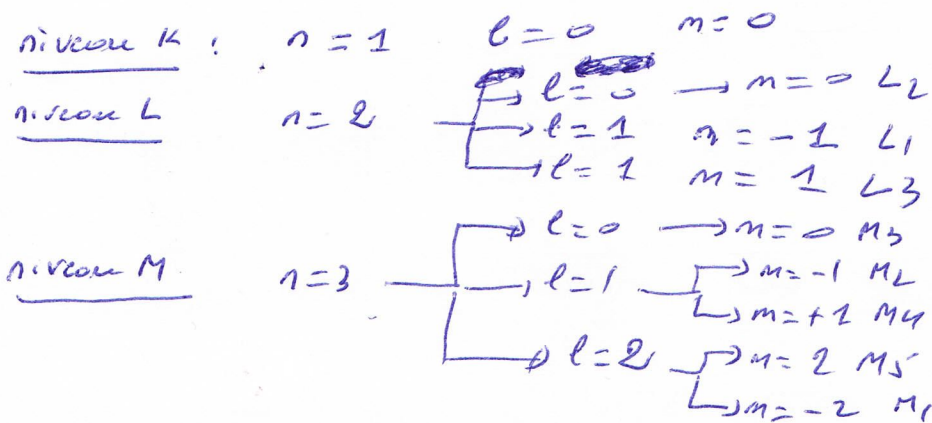
Fig III 4 : spectre de raies du rayonnement sortant d'un tube

on s'aperçoit que la position des raies est indépendante de V , mais cette position dépend de la nature de l'anode: Fe, Cu, Mo, Al, ... la position ou fréquence d'une raie est donnée par la loi de Moseley

$$\sqrt{\nu} = C(Z - \sigma) \quad \text{(III 4)} \quad \text{ou } \sigma = \text{cte} \approx 1$$

et C une constante dépendant de la raie j . Z étant le numéro atomique de l'atome.

on peut expliquer le spectre de raies en regardant les niveaux d'énergie électronique des Atomes - ces niveaux sont ils ?



si on le trace en énergie (couches et sous-couches) on a la figure (III.5)

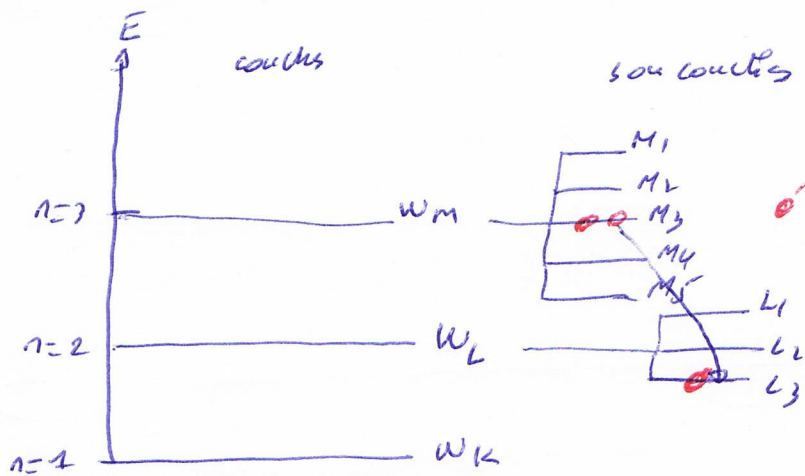


Fig III.5 Disposition en énergie des niveaux (couches) et des sous-niveaux (sous-couches) pour les électrons Atomes

Lorsqu'une électon arrive à proximité d'un Atome, il peut le briser un sous-niveau (qui ne peut contenir que 2 e-) - il est avec un sous-niveau non plein et un état transitoire (10⁻¹² seconde) - l'atome revient à sa configuration initial en libérant un photon hν tel que

$$h\nu_{if} = W_i - W_f \quad \text{(III.5)}$$

si l'électon descend de L à K il libère $W_K - W_L = h\nu_{KX} \quad \text{(III.6)}$

la raie L_{Kα} est en fait un doublet correspondant

$$\begin{aligned} h\nu_{K\alpha 1} &= W_K - W_{LII} \\ \text{et} \\ h\nu_{K\alpha 2} &= W_K - W_{LIII} \end{aligned} \quad \text{(III.7)}$$

la transition L₁ → K est interdite par les règles de sélection.

Remarquons que nous n'observerons la raie K que si eV > W_K - pour observer les raies L, on doit ajouter V à $\frac{3W_K}{e}$

si V augmente, on voit que la position de la raie se déplace vers une valeur voisine - Par contre cette position varie avec la nature de l'anticathode.

III.3 interaction des RX avec la lumière

III.3) a) MECANISMES d'interaction des RX avec la lumière

a1) la réflexion plane: on sait qu'une onde lumineuse visible subit le phénomène de réflexion entre 2 milieux d'indice de réfraction différents $\Rightarrow n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2$