

LSM 5.504 / PCMC 7.702

Diffusion des Rayons X - Diffraction

TD n°2 : Facteur de forme - Facteur de structure

I - Facteur de diffusion atomique

- 1) Commenter la formule de Thomson :
$$\tilde{E} = qE_0 \frac{r_e}{R} \sin \alpha e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{R})}$$

Définir les quantités q , E_0 , r_e , R , α , K , ω
Quel est l'ordre de grandeur de r_e ?

- 2) Un faisceau de rayons X monochromatique et polarisé se propageant dans le vide rencontre un atome d'hydrogène ($Z = 1$ électron) de rayon L et de densité électronique $\rho(r)$. L'onde incidente est alors diffusée partiellement par cet atome, qu'on considère comme sphérique.
Par référence à l'intensité diffusée par un électron ponctuel placé au centre de l'atome, donner l'amplitude df de l'onde diffusée par l'atome d'hydrogène dans la direction \vec{u} .
- 3) Dédurre de la question précédente l'expression du facteur de diffusion (ou "facteur de forme") de l'atome d'hydrogène.

II - Réseau hexagonal : Structure du graphite

Le graphite cristallise dans le système hexagonal ($a = 2,45\text{Å}$, $c = 6,70\text{Å}$).

Les atomes de carbone dans la maille ont les coordonnées suivantes :

$$\begin{array}{ll} C_1: 0, 0, 0 & ; \quad C_2: 2/3, 1/3, 0 \\ C_3: 0, 0, 1/2 & ; \quad C_4: 1/3, 2/3, 1/2 \end{array}$$

- 1) Calculer les paramètres réciproques.
- 2) Représenter dans le plan (\vec{a}, \vec{b}) la structure du graphite en utilisant la périodicité de la maille.
Montrer que les atomes de carbone se trouvent au sommet d'hexagones.
Calculer la distance $C_1 - C_2$.
- 3) Donner l'expression du facteur de structure $F(h, k, l)$.
Discuter les valeurs de $F(h, k, l)$ en fonction de la parité de l et de relations impliquant $h - k$ (ou $h + 2k$, ou $k - h$).
- 4) On réalise une expérience de diffraction sur le graphite avec la radiation $K\alpha$ du cuivre ($\lambda = 1,54 \text{Å}$). Si on explore l'espace réciproque selon la direction $(0, 0, l)$, quelles réflexions de Bragg seront observées ?
- 5) Donner les deux réflexions de Bragg les plus fortes dans la direction $(h, 0, 0)$.