

2 Diffraction par un réseau périodique

Dans cet exercice, on se propose d'étudier le spectre de diffraction du fer.

2.1 Structure, maille directe conventionnelle et réciproque.

Le fer cristallise dans les conditions normales de température et de pression dans un réseau de Bravais cubique centré de paramètre a .

1. Donner les positions des atomes en coordonnées réduites dans la maille conventionnelle cubique.
2. Sur la base des vecteurs générateurs du cube $(\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3)$, donner les vecteurs de la maille réciproque $(\vec{b}_1^*, \vec{b}_2^*, \vec{b}_3^*)$.

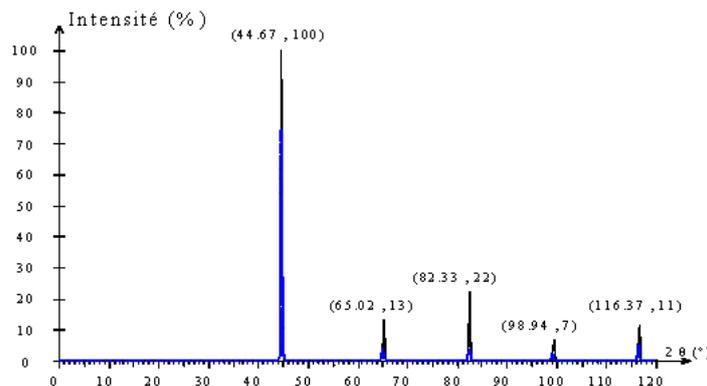
2.2 Facteur de structure. Extinctions.

On envoie sur le cristal une onde électromagnétique de vecteur d'onde \vec{k}_i et fréquence dans le domaine des rayons X. On enregistre l'intensité de l'onde diffusée suivant une direction portée par \vec{k}_d . Soit $f(q)$ le facteur de diffusion atomique du fer, où $\vec{q} = \vec{k}_d - \vec{k}_i$.

1. Rappeler la condition de diffraction, c'est-à-dire, la condition pour que l'intensité de l'onde diffusée soit non nulle.
2. En utilisant les positions des atomes de la question précédente, donner alors l'expression du facteur de structure $F(\vec{q})$ du fer.
3. Quelle est la condition supplémentaire sur \vec{q} pour que le facteur de structure soit non nul ?

2.3 Détermination expérimentale du paramètre de maille du fer.

Le spectre de diffraction d'une plaque poly-cristalline de fer est donné sur la figure ci-dessous. Peut-on en déduire une valeur approximative du paramètre de maille a ?



Les rayons X incidents sont produits par la fluorescence du cuivre : $\lambda = 1,54056 \text{ \AA}$.

2.4 De l'importance de choisir une maille primitive.

On va montrer dans cette partie que les extinctions du facteur de structure sont dues au fait que la maille cubique utilisée est multiple.

1. Donner l'expression des vecteurs $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)$ de la maille primitive du fer en fonction des vecteurs générateurs du cube $(\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3)$. Quels sont alors les nouveaux vecteurs du réseau réciproque $(\vec{a}_1^*, \vec{a}_2^*, \vec{a}_3^*)$?
2. Soient (H, K, L) et (h, k, l) les coordonnées d'un vecteur \vec{G} du réseau réciproque, respectivement dans les bases $(\vec{a}_1^*, \vec{a}_2^*, \vec{a}_3^*)$ et $(\vec{b}_1^*, \vec{b}_2^*, \vec{b}_3^*)$. Proposer, à partir des relations entre ces indices, une explication des extinctions systématiques du facteur de structure trouvées à la question 2.3.

3 Oxydation de la surface d'un monocristal de nickel

On analyse la surface d'un cristal métallique, ici du nickel, à l'aide d'un faisceau d'électrons. Ces électrons sont accélérés par un faible potentiel (156 V), et sont donc peu énergétiques. On parle d'électrons lents, qui pénètrent très peu dans la matière, pratiquement une seule couche atomique. La diffraction des électrons lents permet donc d'observer la surface du cristal. Le but de l'exercice est l'étude par cette méthode de l'oxydation de la surface d'un monocristal de nickel. Le nickel cristallise dans le système cubique à faces centrées ($a = 0.352$ nm), chaque atome occupant un nœud du réseau.

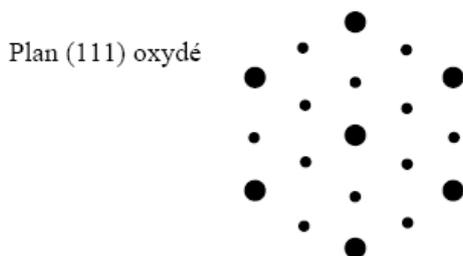
1. Quelle est la longueur d'onde associée au faisceau électronique? La comparer au paramètre de maille.
2. Représenter le réseau bidimensionnel de la surface du nickel suivant que cette face est le plan $(1, 1, 1)$ le plan $(1, 0, 0)$ ou le plan $(1, 1, 0)$. Précisez dans chaque cas la nature du réseau plan.
3. Un nœud (h, k, l) du réseau réciproque est repéré par le vecteur \vec{G}_{hkl} . La condition de diffraction indique que chacun de ces nœuds est associé à une tache de diffraction telle que $\Delta\vec{K} = \vec{K}_d - \vec{K}_i = \vec{G}_{hkl}$, où \vec{K}_d et \vec{K}_i sont les vecteurs d'onde des faisceaux diffracté et incident. On peut donc obtenir une image de diffraction qui soit une représentation homothétique du réseau réciproque de la surface.

Montrer que les images de diffraction (c'est-à-dire le réseau réciproque) obtenues en analysant les plans (111) et (100) sont les suivantes :



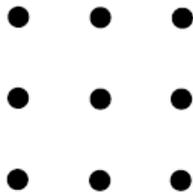
Dessiner également l'image de diffraction d'un plan (110) .

4. Les images précédentes ont été obtenues sous vide poussé, sur des surfaces cristallines propres. L'introduction d'une très faible pression d'oxygène permet l'adsorption d'oxygène atomique. Pour une surface (111) , l'image de diffraction ci-dessus à gauche est modifiée de la façon suivante :

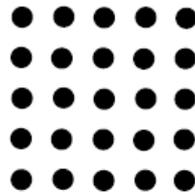


Par quelle nouvelle maille élémentaire peut-on décrire la surface? Proposer un modèle géométrique de l'adsorption de l'oxygène atomique (répartition, taux de recouvrement).

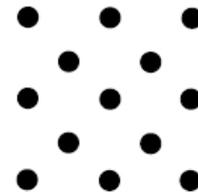
5. On réalise la même expérience d'adsorption avec une face (100). On observe deux modifications successives de l'image de diffraction :



Plan (100) : propre



exposé à O₂



exposition prolongée

Déterminer, pour les deux étapes de l'oxydation, le réseau réciproque et le réseau direct, et proposer un arrangement des atomes adsorbés.