

## Série 4: Détermination des structures cristallines par diffraction des rayons X

### Exercice 3 : Diffraction par les neutrons lents Cas du silicium

**1. En supposant qu'il n'y a aucune interaction entre les neutrons ceux-ci possèdent une énergie cinétique :**

$$E_c = \frac{3}{2} k_B T$$

$$E_c = 6,2159 \times 10^{-21} \text{ J} = 6,2 \times 10^{-21} \text{ J}$$

**2. La vitesse quadratique moyenne:**

$$v_{qm} = \sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{\frac{2E_c}{m_n}} \quad \text{On a: } V_m = \sqrt{8K_B T / \pi m}$$

$$v_{qm} = 2,7243 \times 10^3 \text{ m.s}^{-1} = 2,7 \times 10^3 \text{ m.s}^{-1}$$

**D'après la théorie cinétique des gaz (cours de thermodynamique statistique):**

$$v_m = 0,921 \cdot v_{qm}$$

$$v_m = 2,5091 \times 10^3 \text{ m.s}^{-1} = 2,5 \times 10^3 \text{ m.s}^{-1}$$

Cette vitesse est très inférieure à la vitesse de la lumière ce qui justifie le terme « neutrons lents ».

3. On a:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$

$$E = \frac{p^2}{2m_n} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n} = \frac{\hbar^2 4\pi^2}{2m_n \lambda^2} = \frac{h^2}{2m_n \lambda^2}$$

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{3k_B T m_n}} = 1,4529 \times 10^{-10} \text{ m} = 1,5 \text{ \AA}$$

#### 4. Commentaire 1: Comparaison des angles

Dans la diffraction des neutrons les raies sont déplacées vers les angles de Bragg  $\theta_n$  plus faible, en effet :

$$\theta = \sin^{-1} \left( \frac{\lambda}{2 \cdot d(hkl)} \right)$$

La fonction arcsinus étant croissante sur  $[0, \pi/2]$ , puisque:

$$\lambda_{\text{neutrons}} < \lambda_{\text{rayons X}}$$

pour un même plan  $(hkl)$  l'angle de diffraction par les neutrons est inférieur à celui des rayons X.

#### Commentaire 2: Comparaison du nombre de raies

La dernière raie qui apparaît dans le spectre diffraction des rayons X de l'exercice 2. est la (444).

$h^2+k^2+l^2$	3	8	11	16	19	24
$(hkl)$	(111)	(220)	(311)	(400)	(331)	(422)
$h^2+k^2+l^2$	27	32	35	40	43	48
$(hkl)$	(333)	(440)	(531)	(620)	(533)	(444)

Cherchons les indices  $(hkl)$  de la 13<sup>ème</sup> raie dans le spectre de diffraction des neutrons. On cherche  $(hkl)$  tous les trois pairs ou impairs tel que:

$$\begin{cases} h^2 + k^2 + l^2 > 48 \\ \theta_{(hkl)} < 90^\circ \end{cases}$$

La valeur qui vérifie ce critère est (624).

En effet :

$$6^2 + 2^2 + 4^2 = 56 > 48$$

$$\sin(\theta_{(624)}) = 0,995 < 1$$

$$\theta_{(624)} = 84,6^\circ < 90^\circ$$

La raie (624) ne peut pas apparaître pas dans le spectre de rayons X. Supposons que cette raie puisse apparaître dans ce spectre alors sa position déterminée par l'angle  $\theta_{(624)}$  tel que:

$$\frac{2d \sin \theta_{(624)}}{2a} = \lambda_X$$

$$\frac{\sin \theta_{(624)}}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = \lambda_X$$

$$\sin \theta_{(624)} = \frac{\lambda_X \times \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}{2a}$$

$$\sin \theta_{(624)} = 1,0573 \text{ ce qui est impossible!!!!}$$