

# La diffraction des rayons X

Les rayons X sont des rayonnements électromagnétiques dont les longueurs d'onde sont de l'ordre de  $1 \text{ \AA} (= 10^{-10} \text{ m})^*$ . La figure 7.25 montre la production de rayons X lorsque des électrons qui s'échappent d'un filament chauffé  $F$  sont accélérés par une différence de potentiel  $V$  et frappent une cible métallique  $M$ .

Un réseau de diffraction optique conventionnel ne permet pas de faire la distinction entre des longueurs d'onde de l'ordre de celles des rayons X. Dans le cas où  $\lambda = 1 \text{ \AA} (= 0,1 \text{ nm})$  et  $d = 3\,000 \text{ nm}$ , par exemple, l'équation 7.22 indique que le maximum de premier ordre se produit à

$$\theta = \sin^{-1} \frac{m\lambda}{d} = \sin^{-1} \frac{(1)(0,1 \text{ nm})}{3\,000 \text{ nm}} = 0,0019^\circ.$$

Cet écart avec le maximum central est trop petit pour être discernable. Un réseau où  $d = \lambda$  serait idéal, mais comme les longueurs d'onde des rayons X sont approximativement égales aux diamètres atomiques, il est impossible de construire un tel réseau de façon mécanique.

En 1912, le physicien allemand Max von Laue constata qu'un solide cristallin, composé d'un réseau régulier d'atomes, pouvait former un « réseau de diffraction » tridimensionnel pour les rayons X. Ce phénomène est dû au fait que, dans un cristal comme le chlorure de sodium (NaCl), un motif d'atomes de base (nommé *maille élémentaire*) se répète dans l'ensemble du réseau. Dans le NaCl, quatre ions de sodium

\* L'angström ( $\text{\AA}$ ) est une unité de longueur utilisée en physique atomique.

et quatre ions de chlore sont associés à chaque maille élémentaire. La figure 7.26 a) représente une coupe transversale d'un cristal de NaCl qui permet de distinguer cette unité de base. La maille élémentaire forme un cube mesurant  $a_0$  de chaque côté.

Lorsqu'un faisceau de rayons X entre dans un cristal comme le NaCl, les rayons sont *dispersés* – c'est-à-dire qu'ils sont dirigés dans toutes les directions par la structure du cristal. Dans certaines directions, les ondes « redirigées » subissent une interférence destructive, qui produit les minima d'intensité; dans d'autres directions, l'interférence est constructive, ce qui produit les maxima d'intensité. Ce processus de dispersion et d'interférence constitue une forme de diffraction, même si cette dernière diffère de la diffraction de la lumière sortant d'une fente ou rencontrant un obstacle, dont on a discuté précédemment.

Même si le processus de diffraction des rayons X dans un cristal est complexe, les maxima se trouvent dans les directions où les rayons X agissent *comme* s'ils étaient réfléchis par un ensemble de *plans réfléchissants* parallèles (ou *plans cristallins*) qui seraient créés par les atomes dans les cristaux et qui comporteraient des réseaux réguliers d'atomes. (Les rayons X ne sont pas réellement réfléchis; on utilise ces plans fictifs pour simplifier l'analyse du véritable processus de diffraction.)

La figure 7.26 b) montre trois ensembles de plans, ayant un *espacement interplanaire*  $d$ , sur lesquels les rayons incidents illustrés sont censés être réfléchis. Les rayons 1, 2 et 3 sont respectivement réfléchis sur le premier, le deuxième et le troisième plan. Relativement à chaque réflexion, l'angle d'incidence et l'angle de réflexion sont représentés par  $\theta$ . Contrairement à ce qui est habituellement admis en optique, ces angles sont définis par rapport à la *surface* du plan réfléchissant, et non par rapport à la normale de cette surface. Dans la figure 7.26 b), l'espacement interplanaire est égal à la maille élémentaire de dimension  $a_0$ .

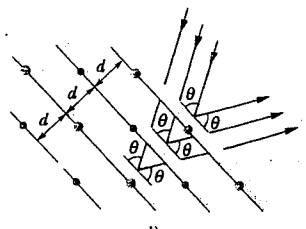
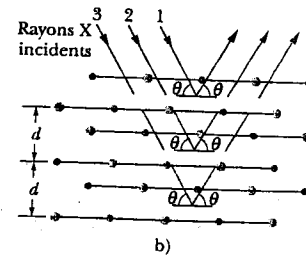
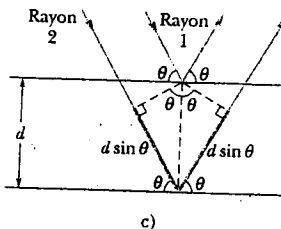
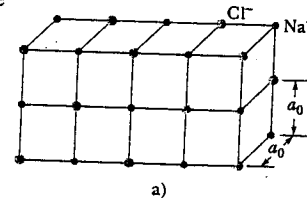
La figure 7.26 c) montre une vue de côté de la réflexion sur deux plans adjacents. Les ondes des rayons 1 et 2 sont en phase lorsqu'elles atteignent le cristal. Après leur réflexion, elles doivent être encore en phase, puisque les réflexions et les plans réfléchissants ont été définis uniquement pour expliquer les maxima d'intensité dans la diffraction des rayons X par un cristal. Contrairement aux rayons lumineux, les rayons X

ne sont pas réfractés en entrant dans le cristal; de plus, on n'a pas spécifié d'indice de réfraction pour cette situation. Il s'ensuit donc que la phase relative entre les ondes des rayons 1 et 2 au moment où ils sortent du cristal est uniquement déterminée par la différence de marche entre ces rayons. Pour que ces rayons soient en phase, la différence de marche doit être égale à un multiple entier de la longueur d'onde  $\lambda$  des rayons X. Le tracé des perpendiculaires (les lignes pointillées) de la figure 7.26 c) indique que la différence de marche est  $2d \sin \theta$ . En fait, cela s'applique à toute paire de plans adjacents dans l'ensemble de plans représenté dans la figure 7.26 b). On arrive donc au critère suivant relativement aux maxima d'intensité dans la diffraction des rayons X:

$$2d \sin \theta_m = m\lambda, \quad \text{lorsque } m = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{la condition de Bragg}). \quad (7.31)$$

où  $m$  est l'ordre d'un maximum d'intensité.

Figure 7.26 a) La structure cubique du cristal NaCl, qui montre les ions de sodium et de chlore, et une maille élémentaire (colorée). b) Les rayons X incidents sont diffractés par la structure de a). Les rayons X sont diffractés comme s'ils étaient réfléchis par un ensemble de plans parallèles, suivant un angle de réflexion égal à l'angle d'incidence, les deux angles étant mesurés par rapport aux plans (et non par rapport à une normale, comme c'est le cas en optique). c) La différence de marche entre les ondes effectivement réfléchies par deux plans adjacents est  $2d \sin \theta$ . d) Une orientation différente des rayons X incidents par rapport à la structure. Un autre ensemble de plans parallèles réfléchit maintenant effectivement les rayons X.



Syllabus n°:

D'après: "Physique"  
Halliday, Resnick, Walker  
Dunod

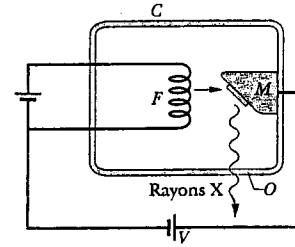


Figure 7.25 Des rayons X sont générés lorsque des électrons qui s'échappent du filament chauffé  $F$  sont accélérés par une différence de potentiel  $V$  et frappent une cible métallique  $M$ . L'ouverture  $O$  dans la chambre à vide  $C$  laisse passer les rayons X.

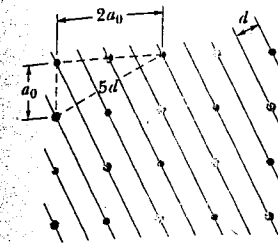


Figure 7.27 Un ensemble de plans dans la structure de la figure 7.26 a), et une technique permettant de relier la longueur du côté  $a_0$  d'une maille élémentaire à l'espacement interplanaire  $d$ .

L'équation 7.31 se nomme la **condition de Bragg** en l'honneur du physicien britannique William Lawrence Bragg, qui fut le premier à la dériver. (Lui et son père William Henry Bragg ont partagé le prix Nobel en 1915 pour leur usage des rayons X dans l'étude des structures cristallines.) Dans l'équation 7.31, l'angle d'incidence et de réflexion se nomme *angle de Bragg*. Peu importe l'angle auquel des rayons X entrent dans un cristal, il y a toujours un ensemble de plans sur lesquels ils sont réfléchis, et on peut donc appliquer la condition de Bragg. Notez que, dans la figure 7.26 d), la structure de cristal a la même orientation que dans la figure 7.26 a), mais l'angle auquel le faisceau entre dans cette structure diffère de celui illustré dans la figure 7.26 b). Ce nouvel angle doit impliquer la création d'un nouvel ensemble de plans réfléchissants, comportant un espacement interplanaire  $d$  différent et un angle de Bragg différent, si on veut expliquer la diffraction des rayons X par la condition de Bragg.

La figure 7.27 illustre de quelle façon l'espacement interplanaire  $d$  peut être relié à la dimension de la maille élémentaire  $a_0$ . Pour l'ensemble de plans illustré ici, le théorème de Pythagore donne

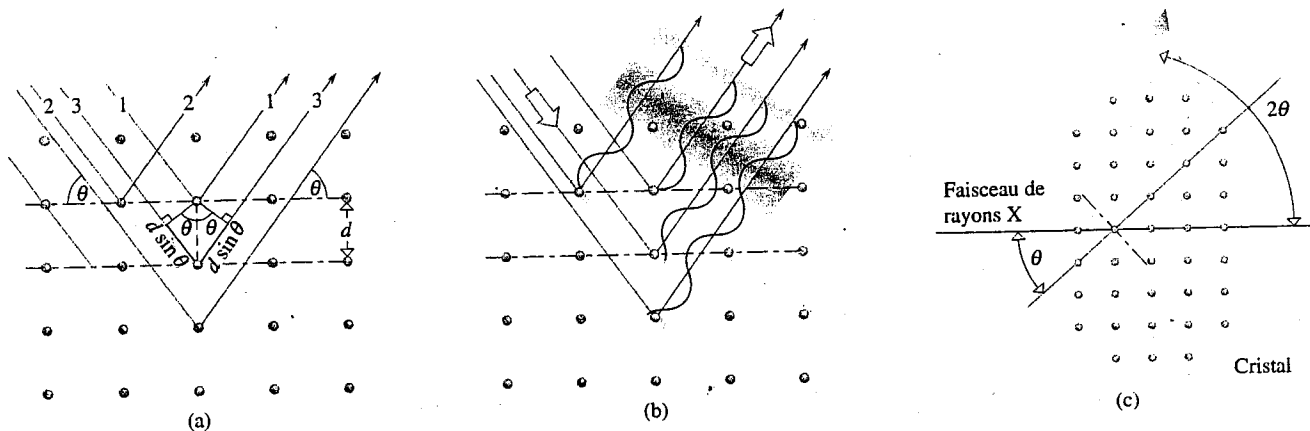
$$5d = \sqrt{5}a_0,$$

ou

$$d = \frac{a_0}{\sqrt{5}}. \quad (7.32)$$

La figure 7.27 indique de quelle façon on peut trouver les dimensions de la maille élémentaire, une fois que l'espacement interplanaire a été mesuré par la diffraction des rayons X.

La diffraction des rayons X est un outil important dans l'étude des spectres de rayons X et de l'agencement des atomes dans les cristaux. Pour étudier les spectres, on choisit un ensemble particulier de plans dans le cristal, séparés par un espacement  $d$  connu. Ces plans réfléchissent effectivement différentes longueurs d'onde à différents angles. Un détecteur pouvant effectuer des mesures à différents angles peut alors servir à déterminer la longueur d'onde des rayons X qui l'atteignent. Le cristal lui-même peut être étudié à l'aide d'un faisceau monochromatique de rayons X, lequel permet de déterminer non seulement l'espacement entre les différents plans du cristal, mais aussi la structure de la maille élémentaire.



**Figure 29.9** Un tube moderne de rayons X: Un faisceau d'électrons entre en collision avec une cible métallique et produit des rayons X.

**Exemple 29.2** Un faisceau de rayons X presque monochromatique de longueur d'onde 0,15 nm tombe sur un cristal. Quelle est la distance entre deux plans atomiques si le maximum de diffraction du premier ordre a lieu pour  $\theta_1 = 16,0^\circ$  ?

**Solution :** [Données :  $\lambda = 0,15$  nm,  $m = 1$ , et  $\theta_1 = 16,0^\circ$ . À trouver :  $d$ ]. L'équation de Bragg donne :

$$d = \frac{m\lambda}{2 \sin \theta_m} = \frac{(1)(0,15 \text{ nm})}{2 \sin 16,0^\circ} = \boxed{0,27 \text{ nm}}$$

✓ **Vérification rapide :** La réponse a le bon ordre de grandeur (quelques dixièmes de nanomètres).  $2d \sin \theta_m = 1,49 \times 10^{-10} \text{ m} = m\lambda$ .

Les rayons X sont produits lorsque des électrons de grande vitesse viennent frapper une cible matérielle et décélèrent rapidement en émettant de l'énergie rayonnante (rayonnement de freinage). Dans un tube moderne de rayons X (Fig. 29.9) les électrons sont émis par un filament chauffé en un processus appelé *émission thermoionique* (découvert par Edison pendant qu'il travaillait avec des ampoules électriques). Ces électrons sont ensuite accélérés dans le vide sous une différence de potentiel allant de  $10^4$  V à  $10^6$  V, avant de venir frapper une anode métallique, décélérer et émettre des rayons X.

La diffraction des rayons X est devenue une technique courante pour étudier la structure des cristaux. Elle est devenue aussi un outil puissant d'étude des molécules, surtout dans le cas de grandes configurations répétitives comme les protéines et l'ADN. Ainsi ce fut grâce aux rayons X que J. D. Watson et F. H. C. Crick purent déterminer en 1953 la structure en double hélice de l'ADN.