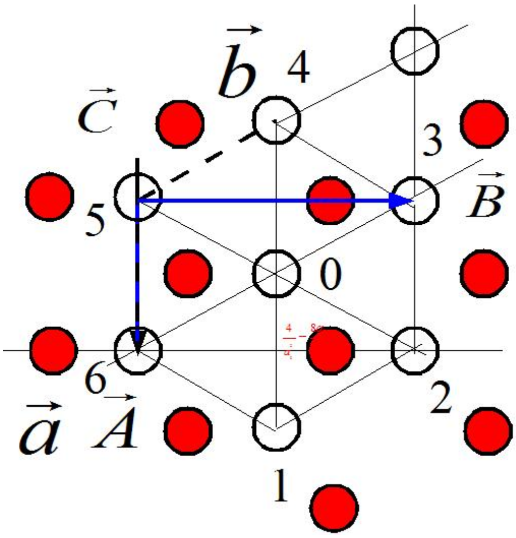
T10_04AA : Maille ortho hexagonale

PARTIE A : Description ortho hexagonale

A 1 : Projection sur le plan dense (a,b) de l'empilement compact.



AAA

Figure, T10_04A : empilement …A,B,A,B…**idéal**

Projection sur un plan dense (a, b)

-- les cercles colorés en rouge représentent les atomes situés à la cote + - 1/2 .

a,b,c : maille hexagonale

A,B,C : maille orthohexagonale,

Origine sur un atome quelconque

Soit (P) la matrice de changement de maille :

$$(\vec{A},\vec{B},\vec{C}) = (\vec{a},\vec{b},\vec{c})(P) \quad (P) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \det(P) = 2$$

Nombre d'atomes dans la nouvelle maille : 4 $(\,(2 \times \det(P) = 4\,)$

Décompte : $\frac{8}{8} + \frac{2}{2} + \frac{2}{2} + \frac{1}{1} = 4$

A2 - : Le tenseur métrique associé à la maille ortho hexagonale (G_O) est le transformé du tenseur métrique (G_H) associé à la maille hexagonale par la relation : $(G_O) = (P)^t (G_H)(P)$.

On obtient , par identification, les paramètres de la maille ortho hexagonale :

$$A = a, \quad B = A\sqrt{3}, \quad C = c$$

X Y Z et x,y z sont , respectivement, les coordonnées d'un atome dans la base de réseau orthorhombique et hexagonal, Fig. T10_04A :

$$\begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix} = (P)^{-1} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \qquad (P)^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

C'est-à-dire :

$$\begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/6 \\ 1/2 \end{pmatrix} = (P)^{-1} \begin{pmatrix} 2/3 \\ 1/3 \\ 1/2 \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} 0 \\ 2/3 \\ 1/2 \end{pmatrix} = (P)^{-1} \begin{pmatrix} 2/3 \\ 4/3 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

Motif de la maille orthohexagonale : $0, 0, 0\ ;\ 1/2, 1/6, 1/2$

L'origine des axes A,B de la maille est prise sur un atome quelconque de la couche A, par exemple l'atome 5, Fig. T10_04A .

Les coordonnées sont rapportées à la base hexagonale et ortho hexagonale, l'origine des 2 maille est commune (point 5) :

N°	Hexagonale	Ortho hexagonale
0	1, 1, 0	1/2, 1/2, 0
1	2, 1, 0	3/2, 1/2, 0
2	2, 2, 0	1, 1, 0
3	1, 2, 0	0, 1, 0
4	0, 1, 0	-1/2, 1/2, 0
5	0, 0, 0	0, 0, 0
6	1, 0, 0	1, 0, 0

L'atome '' 0 '' , situé en $0, 0, 0$, est au centre d'un hexagone régulier de coté égal à **a**

Les distances D (0N) N de 1 à 6 , sont toutes égales à **a**

Par exemple D01 = $\left\| \overrightarrow{-1/2, 1/2, 0} \right\| = \sqrt{\frac{A^2}{4} + \frac{B^2}{4}} = A \quad si \quad \frac{B}{A\sqrt{3}} = 1$

L'hexagone de sommets numérotés de 1 à 6, Fig. T10_04A, est régulier.

A3 - : De la relation entre indices (H,K,L) =(h, k, l) (P) , il vient : H = h ; K = h+2k ; L = l ou encore : H + K = 2(h + k) .

La somme H + K étant paire, **la base C** est **centrée** (ou les faces A,B)

PARTIE B : Fractionnement des raies :

Soit V le volume de la maille orthogonale de paramètres $A\,B\,C$:

$$V = A\,B\,C\,; \quad \frac{dV}{V} = \frac{dA}{A} + \frac{dB}{B} \qquad (\frac{dC}{C} = 0) \quad \frac{dV}{V} = \alpha + \beta = 0$$

Composantes : $\pm(200)$: $\dfrac{1}{D^2} = \dfrac{4}{A^2} = \dfrac{4}{a_0^2}(1-2\alpha)$ au premier ordre

Composantes : $\pm(130)\,;\ \pm(1-30)$: $\dfrac{1}{D^2} = \dfrac{1}{A^2} + \dfrac{9}{B^2} = \dfrac{4}{a_0^2}(1+\alpha)$ au premier ordre

B1 - : Dénombrement des plans (1, 1, 0) ayant la même distance D_{hkl}

h k l	1 1 0	1-2 0	-2 1 0	*1*	-1-1 0	-1 2 0	2 -1 0
H K L	**1 3 0**	**1 -3 0**	**-2 0 0**	*2*	**-1 -3 0**	**-1 3 0**	**2 0 0**
$\dfrac{1}{D_{hkl}^2}$	$\dfrac{4}{a_0^2}$	$\dfrac{4}{a_0^2}$	$\dfrac{4}{a_0^2}$	*3*	$\dfrac{4}{a_0^2}$	$\dfrac{4}{a_0^2}$	$\dfrac{4}{a_0^2}$
$\dfrac{1}{D_{hkl}^2}$	$\dfrac{4}{a_0^2}+\dfrac{4\alpha}{a_0^2}$	$\dfrac{4}{a_0^2}+\dfrac{4\alpha}{a_0^2}$	$\dfrac{4}{a_0^2}-\dfrac{8\alpha}{a_0^2}$	*4*	$\dfrac{4}{a_0^2}+\dfrac{4\alpha}{a_0^2}$	$\dfrac{4}{a_0^2}+\dfrac{4\alpha}{a_0^2}$	$\dfrac{4}{a_0^2}-\dfrac{8\alpha}{a_0^2}$
2θ	$26,00°$	$26,00°$	$26,54°$	*5*	$26,00°$	$26,00°$	$26,54°$

Ligne 1 : indices h k l rapportés à la maille hexagonale

Ligne 2 : indices **H K L** rapportés à la maille orthohexagonale

Ligne 3 : distance inter réticulaire **sans déformation**

Ligne 4 : distance inter réticulaire **avec déformation :** éclatement de la raie sans déformation

Ligne 5 : angles de Bragg des composantes

B 2 - : Eclatement des composantes provoquée par la déformation de la maille

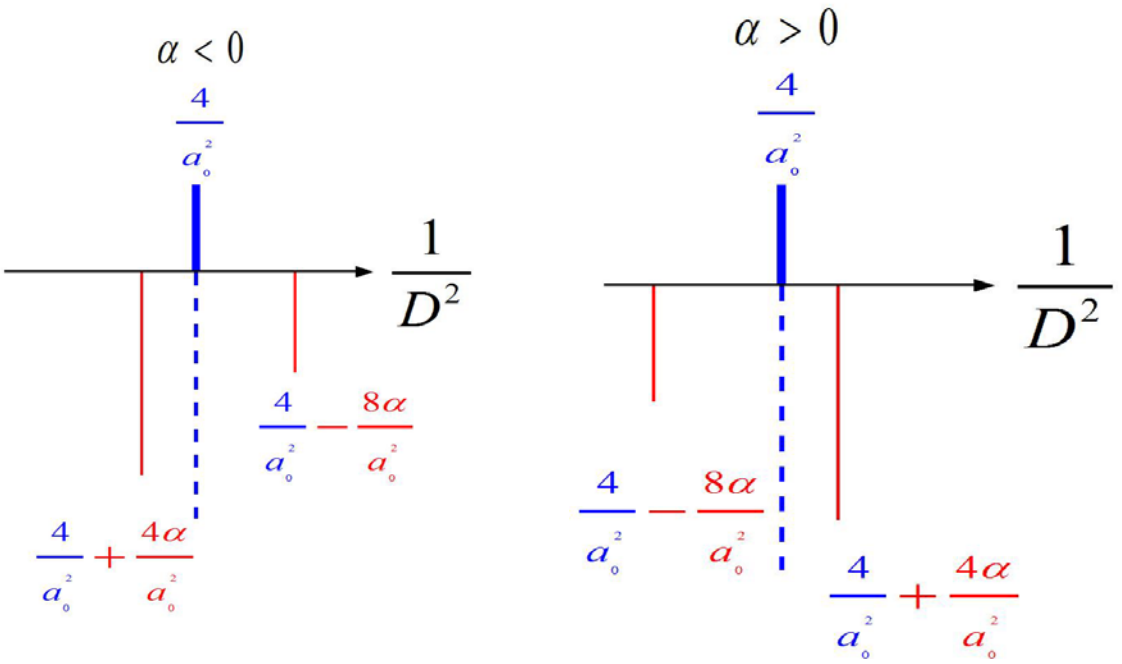


Figure T10_04B : Décomposition de la réflexion d'indices 1 1 0 (hexagonaux)-
En bleu (en pointillé) : composantes non résolues, résolues en rouge
Schéma de la décomposition pour α > 0 et pour α < 0 .
La déformation fait éclater la raie unique en 2 composantes dans le rapport d'intensité 2/1

Noter que la composante $\pm(130)$ est 2 fois plus intense que la composante $\pm(200)$

$$Si\ \alpha < 0 : \quad \frac{1}{D_{130}^2} < \frac{4}{a_0^2} \qquad \frac{1}{D_{200}^2} > \frac{4}{a_0^2} \ ;$$

$$Si\ \alpha > 0 : \quad \frac{1}{D_{130}^2} > \frac{4}{a_0^2} \qquad \frac{1}{D_{200}^2} < \frac{4}{a_0^2}$$

B 3 - : Application numérique :

Pour tout angle θ de diffraction : $\frac{1}{D^2} = \frac{4\sin^2\theta}{\lambda^2}$

En prenant la dérivée logarithmique , il vient :

$$\frac{\delta(1/D^2)}{1/D^2} = \frac{\delta(\sin^2\theta)}{\sin^2\theta} = \frac{2\delta\theta}{tg\theta}$$

A l'écart angulaire $\delta(2\theta)$ relevé sur le diagramme de diffraction, correspond une variation $\delta(1/D^2)$ de part et d'autre de la valeur de $1/D^2$ égale à $\frac{4}{a_0^2}$

Fig. T10_04B : Signe de α : négatif ; l'angle 2θ de la composante **intense** est , en effet , inférieur à celui de la raie sans déformation.

$$\delta(1/D^2) = -12\alpha / a_0^2 \ ; \ 1/D^2 = 4/a_0^2 \qquad \frac{\delta(1/D^2)}{1/D^2} = -3\alpha$$

$$\delta(2\theta) = 0{,}54^\circ \quad 2\theta = 26{,}00^\circ + \frac{2}{3}(0{,}54^\circ) = 26{,}36^\circ$$

$$\frac{\delta(1/D^2)}{1/D^2} = -3\alpha = \frac{0{,}54^\circ/57}{tg(13{,}18^\circ)}$$

Finalement : $\alpha = -\,0{,}0135 \quad (-1{,}35\%)$