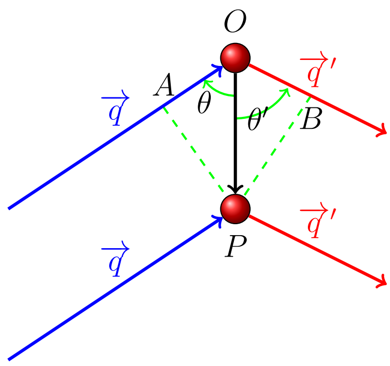
Diffraction de rayons X par un cristal : On considère un cristal éclairé par un rayonnement X incident caractérisé par une onde plane monochromatique, de vecteur d'onde $\overrightarrow{q}$ et d'amplitude A_q. Le facteur de diffusion atomique $f_Y(\overrightarrow{q}, \overrightarrow{q}')$ d'un élément chimique Y est défini par $A_{q'} = f_Y(\overrightarrow{q}, \overrightarrow{q}')A_q$. Dans la suite, on considèrera que la diffusion est élastique de sorte que la diffraction par le cristal se ramène à l'étude d'interférence entre les ondes planes monochromatiques diffusées par les atomes de la structure cristalline.

Déphasage entre deux ondes diffusées : On considère deux atomes situés en O et P, interagissant avec l'onde incident de vecteur d'onde $\overrightarrow{q}$ et émettant chacun une onde de vecteur d'onde $\overrightarrow{q}'$.



La différence de marche entre les deux ondes diffusées par O et P est $\delta = AO + OB$. On a alors la relation suivante :

$$\delta = OP\cos(\theta) + OP\cos(\theta') = \overrightarrow{OP}.\frac{\overrightarrow{q}}{\|\overrightarrow{q}\|} - \overrightarrow{OP}.\frac{\overrightarrow{q}'}{\|\overrightarrow{q}'\|} \tag{1}$$

Or, on sait que $\|\overrightarrow{q}\| = \|\overrightarrow{q}'\| = \frac{2\pi}{\lambda}$ où λ est la longueur d'onde. On en déduit l'expression du déphasage :

$$\Delta(\varphi) = \|\overrightarrow{q}\|\delta = \overrightarrow{OP}.(\overrightarrow{q} - \overrightarrow{q}') = \overrightarrow{OP}.\overrightarrow{K} \tag{2}$$

On note $\overrightarrow{K} = \overrightarrow{q} - \overrightarrow{q}'$.

Diffraction par un cristal parfait : On considère un cristal caractérisé par un motif contenant M atomes, dont les positions sont déterminées par $\overrightarrow{OP} = \overrightarrow{T} + \overrightarrow{\rho} = \sum_i n_i \overrightarrow{a_i} + (\alpha \overrightarrow{a_1} + \beta \overrightarrow{a_2} + \gamma \overrightarrow{a_3})$, où les $\overrightarrow{a_i}$ forment une base adaptée au réseau de Bravais, les n_i sont des coefficients entiers, et α, β et γ sont des coefficients réels. Le cristal est de dimension $N_i|\overrightarrow{a_i}|$ pour $i = 1, 2, 3$. L'amplitude totale diffractée par le cristal est la somme des amplitudes des ondes émises par chaque atome du cristal.

$$A_{tot}(\overrightarrow{K}) = A_q \sum_{j=1}^{M} f_{Y_j}(\overrightarrow{q}, \overrightarrow{q}') e^{i\overrightarrow{\rho}_j.\overrightarrow{K}} \sum_{n_1=1}^{N_1} \sum_{n_2=1}^{N_2} \sum_{n_3=1}^{N_3} e^{i(n_1\overrightarrow{a_1}.\overrightarrow{K} + n_2\overrightarrow{a_2}.\overrightarrow{K} + n_3\overrightarrow{a_3}.\overrightarrow{K})} \tag{3}$$

On rappelle que l'intensité totale est $I_{tot} = A_{tot}.A^*_{tot}$. D'après ce qui précède, on voit que l'intensité totale peut s'écrire sous la forme suivante :

$$I_{tot}(\overrightarrow{K}) = I_{motif}(\overrightarrow{K}).I_{reseau}(\overrightarrow{K}) \tag{4}$$

En effet, dans l'expression de l'amplitude, le premier facteur caractérise le motif, et on peut donc poser :

$$I_{motif}(\overrightarrow{K}) = \left| A_q \sum_{j=1}^{M} f_{Y_j}(\overrightarrow{q}, \overrightarrow{q}') e^{i\overrightarrow{\rho}_j.\overrightarrow{K}} \right|^2 \tag{5}$$

De plus, l'autre membre de l'expression de l'amplitude dépend uniquement du réseau de Bravais. On écrira alors :

$$I_{reseau}(\overrightarrow{K}) = \left| \sum_{n_1=1}^{N_1} \sum_{n_2=1}^{N_2} \sum_{n_3=1}^{N_3} e^{i(n_1\overrightarrow{a_1}.\overrightarrow{K} + n_2\overrightarrow{a_2}.\overrightarrow{K} + n_3\overrightarrow{a_3}.\overrightarrow{K})} \right|^2 \tag{6}$$

$$= \left| \prod_{i=1}^{3} e^{i(\frac{N_i}{2}\overrightarrow{a_i}.\overrightarrow{K})} \frac{\sin(\frac{N_i+1}{2}\overrightarrow{a_i}.\overrightarrow{K})}{\sin(\frac{1}{2}\overrightarrow{a_i}.\overrightarrow{K})} \right|^2 \tag{7}$$

On en déduit alors immédiatement que l'intensité est maximale lorsque $\overrightarrow{a_i}.\overrightarrow{K} = 2n\pi$, avec $n \in \mathbb{N}$ (condition de *Leau*). En particulier, cette condition peut s'écrire sous la forme suivante :

$$e^{\overrightarrow{T}.\overrightarrow{K}} = 1 \tag{8}$$

Ce résultat signifie que l'intensité est maximale lorsque $\overrightarrow{K}$ appartient au réseau réciproque du cristal. En particulier, on retrouve bien le fait que l'intensité est maximale lorsque $\overrightarrow{q} = \overrightarrow{q}'$