

LP 36 : Diffraction par des structures périodiques

Niveau : Licence

Pré-requis :

- Diffraction (approximation de Fraunhofer)
- Interférences à deux ondes
- Cristallographie (réseau direct, réseau réciproque)

Biblio :

- Optique, fondements et applications, José-Philippe Pérez (7e édition).
- Physique de l'état solide, Charles Kittel
- <http://www.lkb.upmc.fr/cqed/%20teaching/teachingsayrin/> (TD Diffraction (1) et (2))
- https://www.unige.ch/sciences/physique/tp/tpi/Liens/Protocoles/Complements/Rayons_X_structure_cristaux.pdf
- http://olivier.granier.free.fr/cariboost_files/Tr-reseaux-PC-1213.pdf
- http://mpsn.free.fr/opt3/c_td/S3_ch5_reseaux_14.pdf
- <https://melusine.eu.org/syracuse/immae/mp/physique-chimie/electromagnetisme/21.pdf>
- http://ressources.unisciel.fr/sillages/physique/optique_ondulatoire_2a/res/reseaux.pdf
- http://www.edu.upmc.fr/physique/phys325/IMG/pdf_cours17-3.pdf
- https://www.equipes.lps.u-psud.fr/gr_15/SMPHTML/polypdf/ondchap8.pdf
- <http://www.physagreg.fr/leconagreg/physique/lecphys40.pdf> (un plan détaillé)

Introduction :

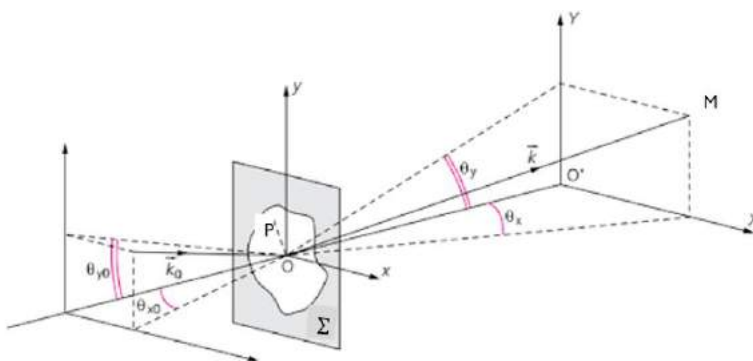
Dans une précédente leçon, nous avons étudié la diffraction en tant que phénomène physique, notamment au travers de la diffraction de Fraunhofer par une fente ou divers objets simples. On va, au travers de cette leçon, illustrer l'intérêt de multiplier le nombre de fentes. Plus particulièrement, on va s'intéresser aux structures périodiques et montrer qu'elles nous permettent d'obtenir des informations sur l'objet diffractant. Mais aussi, inversement, qu'on peut remonter à des propriétés de l'onde incidente en connaissant la structure.

En outre des propriétés sont également applicables à d'autres domaines de la physique (autre que l'optique).

Préliminaires

On rappelle le principe de Huygens-Fresnel, dans l'approximation de Fraunhofer :

(Éventuellement rappeler l'hypothèse : $D \gg \frac{\lambda^2}{\lambda}$)



Surface Σ , de transmittance $t(x, y)$. Bien insister sur la transmittance :

$$t(x, y) = \frac{A_{\text{émergent}}}{A_{\text{incident}}} \quad (\text{complexe !!})$$

M, un point d'observation

P, un point courant de Σ

$$\text{L'onde diffractée s'écrit : } s(M) = \frac{As_0}{D} \iint t(P) e^{-2i\pi(xu+yv)} dx dy$$

(avec : $u = \frac{\sin(\theta_x) - \sin(\theta_{x0})}{\lambda}$ et $v = \frac{\sin(\theta_y) - \sin(\theta_{y0})}{\lambda}$)

$$\text{Qu'on peut aussi écrire : } s(M) = \frac{As_0}{D} \int t(P) e^{-i(\rightarrow k \rightarrow k_0) \cdot \rightarrow OP} d\Sigma$$

ie **c'est une relation de TF entre $t(x, y)$ et le profil d'intensité diffracté**

On considère maintenant un ensemble de petites structures diffractantes identiques réparties dans un objet de petite dimension.

A chaque élément (j), on associe une position O_j et une transmittance $t_j(P)$

On décompose $\rightarrow OP \Rightarrow \rightarrow OO_j + \rightarrow O_j P$ et on note : $\rightarrow R_j \Rightarrow \rightarrow OO_j$.

Le terme $\rightarrow O_j P$ permet de se ramener à la position d'une unique structure

Ainsi l'onde diffractée en M par l'ensemble des structures s'écrit :

$$s(M) = \frac{As_0}{D} \sum \left(e^{-i(\rightarrow k \rightarrow k_0) \cdot \rightarrow R_j} \int t_j(P) e^{-i(\rightarrow k \rightarrow k_0) \cdot \rightarrow O_j P} d\Sigma \right)$$

Le terme en rouge (intégrale) est indépendant de j , car tous les motifs sont identiques

$$\text{D'où : } s(M) = \frac{As_0}{D} \sum (e^{-i(\rightarrow k \rightarrow k_0) \cdot \rightarrow R_j}) \cdot \int_{1 \text{ struct}} t_0(\delta \rightarrow r) e^{-i(\rightarrow k \rightarrow k_0) \cdot \delta \rightarrow r} d\Sigma$$

□Produit de 2 facteurs !

- $\sum (e^{-i(\rightarrow k \rightarrow k_0) \cdot \rightarrow R_j})$: **Facteur de structure S** : ne dépend que de la répartition des structures sur l'objet diffractant.
- $\int_{1 \text{ struct}} t_0(\delta \rightarrow r) e^{-i(\rightarrow k \rightarrow k_0) \cdot \delta \rightarrow r} d\Sigma$: **Facteur de forme F** : ne dépend que de la forme d'une structure unique (diffraction due à un seul motif)

Finalelement, l'intensité diffractée :

$$I \propto (S(M))^2$$

$$I = I_0 \left(\sum e^{-i(\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{r}_j} \right)^2 \cdot \left(\int_{1 \text{ struct}} t_0(\delta \rightarrow r) e^{-i(\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \delta} d\Sigma \right)^2 = I_0 (S)^2 (F)^2$$

(Donner ex de la diffraction par la poudre de lycopode)

I. Diffraction par un réseau plan

On commence par une structure diffractante simple : le réseau plan.

1) Intensité diffractée

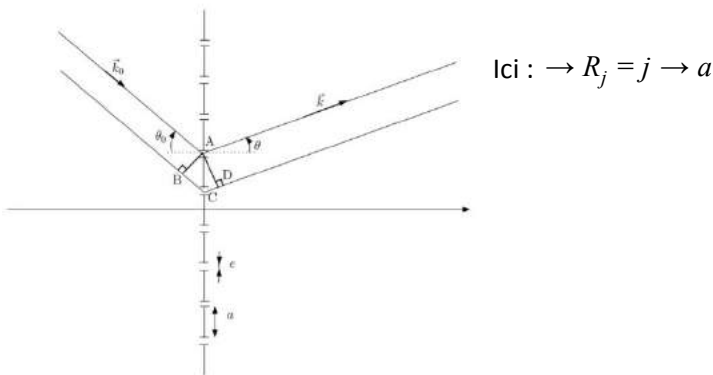
Définition : Un réseau est un dispositif périodique qui impose à une onde plane incidente, une variation périodique d'amplitude et/ou de phase

La fonction transmission $t(x)$ est périodique (convolution d'une fonction porte avec peigne de Dirac)

Ici : on considère un réseau par transmission composé de N fentes parallèles de largeur e et équidistantes, de période a .

La fonction de transmission de chaque fente est $t_0(x)$ tel que :

$$t_0(x) = \left(1, \quad -\frac{e}{2} < x < \frac{e}{2}, \quad \text{sinon} \right)$$



• Calcul du facteur de structure

On s'intéresse directement à l'expression de $(S)^2$:

$$\begin{aligned} (S)^2 &= \left(\sum e^{-i(\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{r}_j} \right)^2 \\ &= \left(\sum e^{-i(\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot j \vec{a}} \right)^2 \\ &= \left(\sum e^{-ijka(\sin\theta - \sin\theta_0)} \right)^2 \quad \square \text{ Somme d'une suite géom} \\ &= \left(\frac{1 - e^{-ijka(\sin\theta - \sin\theta_0)N}}{1 - e^{-ijka(\sin\theta - \sin\theta_0)}} \right)^2 \end{aligned}$$

Finalement,

$$(S)^2 = \left(e^{i\frac{\varphi(N-1)}{2}} \frac{\sin\left(\frac{\varphi N}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\varphi}{2}\right)} \right)^2 = N^2 \left(\frac{\sin\left(\frac{\varphi N}{2}\right)}{N \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right)} \right)^2 \quad \text{Où } \varphi = \frac{2\pi a}{\lambda}(\sin\theta - \sin\theta_0), \text{ le déphasage}$$

entre 2 rayons issus de deux fentes successives.

Qu'on peut aussi écrire : $(S)^2 = N^2 \left(\frac{\sin(N\pi u a)}{N \sin(\pi u a)} \right)^2$

Avec $u = \frac{\sin\theta - \sin\theta_0}{\lambda}$

• **Calcul du facteur de forme**

On s'intéresse directement à l'expression de $(F)^2$:

$$\begin{aligned} (F)^2 &= \left(\int_{1 \text{ fente}} t_0(x) e^{-i(\rightarrow k - \rightarrow k_0) \cdot \delta \rightarrow r} dx \right)^2 \\ &= \left(\int_{1 \text{ fente}} t_0(x) e^{-i\frac{2\pi}{\lambda}(\sin\theta - \sin\theta_0)x} dx \right)^2 \\ &= \left(\int e^{-i2\pi u x} dx \right)^2 \quad \square \text{ TF d'une porte, déjà vu !!} \end{aligned}$$

Finalement,

$$(F)^2 = e^2 \text{sinc}^2(\pi u e)$$

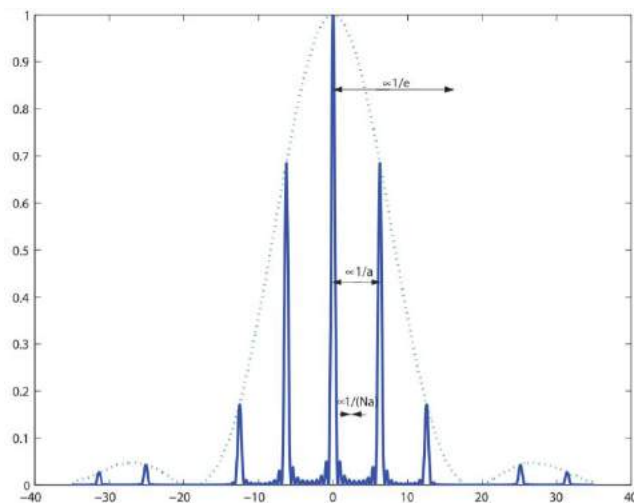
Enfin l'intensité diffractée s'écrit :

$$I = I_0 N^2 \left(\frac{\sin(N\pi u a)}{N \sin(\pi u a)} \right)^2 \text{sinc}^2(\pi u e)$$

Programme Python :

Influence des paramètres Na , a et e sur la figure de diffraction

- La largeur des maxima est inversement proportionnelle à Na : + N est grand, + les maxima sont étroits et intenses
- L'espacement angulaire entre les maxima est donné par $\frac{1}{a}$
- Intensité des pics (ie la position de l'annulation de $(F)^2$), est déterminée par $\frac{1}{e}$



Transition : On a vu comment déterminer les maxima du réseau (qui sont très bien localisés quand N devient grand)

Mais la longueur d'onde intervient également dans la formule (car $u = \frac{\sin\theta - \sin\theta_0}{\lambda}$)
Cela nous amène à la spectrométrie avec un réseau.

2) Utilisation d'un réseau en spectrométrie

En effet, chaque longueur d'onde donnera une figure de diffraction différente.
Ainsi, pour une lumière polychromatique, on peut disperser les différentes longueurs d'onde et déduire la composition de son spectre.

Formule des réseaux :

On a vu que : $\varphi = \frac{2\pi a}{\lambda} (\sin\theta - \sin\theta_0)$ (déphasage entre 2 rayons issus de 2 fentes successives)

Pour que les rayons interfèrent de façon constructive, on veut $\varphi = 2\pi m$ (
 $m \in \mathbb{Z}$: l'ordre du réseau)

Ainsi, on déduit :

$$\frac{a}{\lambda} (\sin\theta_m - \sin\theta_0) = m \Rightarrow \sin\theta_m = \sin\theta_0 + m \frac{\lambda}{a}$$

□ L'écart angulaire θ_m dépend de la longueur d'onde.

- **Pouvoir dispersif du réseau, à l'ordre m , autour de la longueur d'onde λ_0 :**

$$\gamma_d(\lambda_0, m) = \left(\frac{d\theta_m}{d\lambda} \right) \quad \text{où } \theta_m(\lambda) \text{ est la direction du maximum de diffraction à l'ordre } m$$

Avec la formule des réseaux $\sin\theta_m = \sin\theta_0 + m \frac{\lambda}{a}$, dérivée par rapport à λ :

$$\cos\theta_m \cdot \gamma_d(\lambda_0, m) = \frac{m}{a} \Rightarrow \gamma_d(\lambda_0, m) = \frac{m}{a \cos\theta_m} \approx \frac{m}{a}$$

Il n'y a pas de dispersion à l'ordre 0.

Le pouvoir dispersif est d'autant + important que l'ordre est important et que a est petit.

Attention : + m est élevé, + l'intensité de diffraction est faible

Compromis nécessaire entre pouvoir de dispersion et intensité (Ex : réseaux « blazés » qui permettent de déplacer le maximum d'intensité sur un ordre de diffraction non nul pour avoir la dispersion)

- **Pouvoir de résolution autour d'une longueur d'onde λ :**

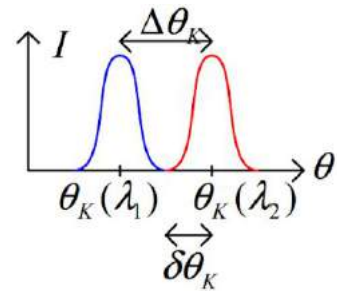
$$\gamma_r = \frac{\lambda}{\Delta\lambda} \quad \text{où } \Delta\lambda \text{ est la + petite variation de longueur d'onde que l'on peut résoudre avec le réseau}$$

Pour déterminer son expression, on rappelle le critère de Rayleigh :

Deux pics, correspondant à deux longueurs d'onde distinctes, sont distinguables, quand le maximum de l'un se trouve sur (ou au-delà) de la première annulation de l'autre.

Ainsi, l'écart angulaire entre les maxima principaux doit être

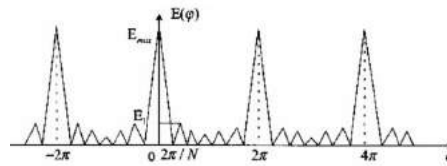
supérieure la demi-largeur angulaire d'un pic principal : $\Delta\theta_m > \delta\theta_m$



Détermination de la demi-largeur angulaire $\delta\theta_m$:

En reprenant le facteur de structure $(S)^2$:

$(S)^2 = 0$ pour $\sin\left(\frac{N\phi}{2}\right) = 0 \Rightarrow \Delta\phi = \frac{2\pi}{N}$ (si on se place à n'importe quel max, et qu'on fait $\pm\frac{2\pi}{N}$, on tombe sur une annulation)



On a vu que : $\phi = \frac{2\pi a}{\lambda}(\sin\theta_m - \sin\theta_0)$

On différencie par rapport à θ_m

$$\Rightarrow \Delta\phi = \frac{2\pi a}{\lambda}(\delta\theta_m \cos\theta_m) = \frac{2\pi}{N} \Rightarrow \delta\theta_m = \frac{\lambda}{N a \cos\theta_m}$$

Détermination de l'écart angulaire entre les maxima principaux $\Delta\theta_m$:

Pour avoir des interférences constructives : Formule des réseaux $\sin\theta_m - \sin\theta_0 = \frac{m\lambda}{a}$

On différencie par rapport à $\lambda \Rightarrow \Delta\theta_m = \frac{m\Delta\lambda}{a \cos\theta_m}$

Finalemnt,

On se place à la limite de résolution : $\Delta\theta_m = \delta\theta_m$ (critère de Rayleigh)

$$\Rightarrow \frac{\lambda}{Na} = \frac{m\Delta\lambda}{a} \Rightarrow \frac{\lambda}{\Delta\lambda} = \gamma_r = mN$$

Le pouvoir de résolution d'un réseau est d'autant plus important que l'ordre de diffraction est élevé, ou que le nombre de figures diffractantes éclairées est important.

Exemple du doublet de sodium :

$$\lambda_1 = 5890 \text{ \AA} \quad \text{et} \quad \lambda_2 = 5896 \text{ \AA}$$

On a $\gamma_r \sim 1000$ donc on veut que $mN \geq 1000$.

Avec $m = 1$, il suffit de 2mm de réseau avec 500 fentes par mm.

+ Donner des ODG de différents réseaux + discuter de leur qualité selon a , N , ...

Le fait qu'un réseau disperse les différentes longueurs d'onde d'une source est utilisé dans de nombreux instruments. Par exemple, le monochromateur.

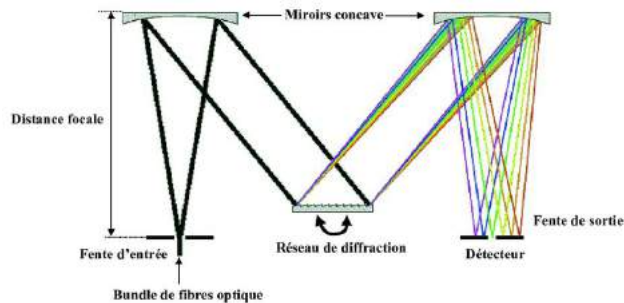
Application : Le monochromateur

Il permet la sélection d'une unique longueur d'onde.

Principe : On envoie une lumière sur un réseau (via des miroirs plan et concave).

Pour une position donnée du réseau, on a un certain angle du faisceau diffracté correspondant à un angle d'incidence. Selon la formule du réseau, cela correspond à une certaine λ en sortie (du fait de la dispersion).

Grâce à une tourelle motorisée, le réseau peut tourner autour de son axe ce qui permet de faire varier l'angle d'incidence et ainsi l'angle du faisceau diffracté. On fait donc défiler les différentes longueurs d'onde et on en sélectionne une en sortie.



Transition : On va maintenant utiliser les propriétés de la diffraction par des structures périodiques à un autre domaine de la physique : la cristallographie.

On va voir que son application va nous permettre d'étudier la matière.

II. Diffraction par des structures cristallines

1) Position du problème

Rappel : Un cristal est un solide dans lequel les atomes sont ordonnés de façon périodique dans les 3 dimensions de l'espace.

Un réseau est décrit par des vecteurs définissant des opérations le laissant invariant

Pour avoir une figure de diffraction notable, il faut :

$\lambda \sim d_{\text{atome-atome}}$ pour avoir des angles de diffraction notables.

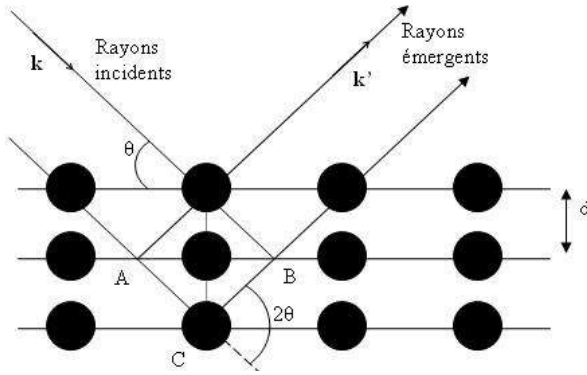
Dans un cristal : $d_{\text{atome-atome}} \sim \text{quelques } \text{\AA}$

On prend donc $\lambda \sim 1 \text{\AA}$, ce qui correspond aux rayons X ($\nu \sim 10^{18} \text{ Hz}$)

2) Formulations de Bragg et de Von Laue

On simplifie le problème en considérant un cristal parfait : il est formé d'un alignement de plans équidistants, de périodicité d , et que ces plans réfléchissent la lumière.

Ainsi, deux plans successifs forment un système équivalent à une lame d'air.



Pour les rayons lumineux réfléchis entre les 2 plans successifs : $\delta = 2d \sin \theta$

Les interférences sont constructives dans la direction où :

$$2d \sin \theta = n \lambda \quad \text{Condition de Bragg}$$

La répartition des pics de diffraction permet de remonter à d . Pour cela, on peut faire varier la longueur d'onde λ ou l'angle d'incidence θ .

Cas d'un cristal de $N \times N \times N$ mailles contenant chacune un atome diffractant de position $\rightarrow R_{u,v,w} = u \rightarrow a + v \rightarrow b + w \rightarrow c$. ($\rightarrow a$, $\rightarrow b$, $\rightarrow c$) est la base du réseau direct.

(Onde diffractée à l'infini :

$$S_{\infty} \propto \sum e^{-i(\rightarrow k \rightarrow k_0) \cdot \rightarrow R_{u,v,w}} \int_{1 \text{ motif}} t(x,y,z) e^{-i(\rightarrow k \rightarrow k_0) \cdot \rightarrow OP} d \rightarrow OP$$

On s'intéresse directement au facteur de structure S (F pourrait être calculé, mais pas intéressant car c'est la répartition des atomes qui est intéressante + calcul compliqué donc ne pas l'évoquer pendant la leçon)

$$S = \sum \sum \sum e^{-i(\rightarrow k \rightarrow k_0) \cdot (u \rightarrow a + v \rightarrow b + w \rightarrow c)} = \sum (e^{-i(\rightarrow k \rightarrow k_0) \cdot \rightarrow a})^u \sum (e^{-i(\rightarrow k \rightarrow k_0) \cdot \rightarrow b})^v \sum (e^{-i(\rightarrow k \rightarrow k_0) \cdot \rightarrow c})^w$$

$$S = S_0 \frac{\sin(\frac{\Delta \rightarrow k \rightarrow a}{2} N) \cdot \sin(\frac{\Delta \rightarrow k \rightarrow b}{2} N) \cdot \sin(\frac{\Delta \rightarrow k \rightarrow c}{2} N)}{\sin(\frac{\Delta \rightarrow k \rightarrow a}{2}) \cdot \sin(\frac{\Delta \rightarrow k \rightarrow b}{2}) \cdot \sin(\frac{\Delta \rightarrow k \rightarrow c}{2})}$$

D'après la formule, on obtient un pic de diffraction dès que les conditions de Laue sont vérifiées :

$$(\Delta \rightarrow k \cdot \rightarrow a = 2\pi n_1 \quad \Delta \rightarrow k \cdot \rightarrow b = 2\pi n_2 \quad \Delta \rightarrow k \cdot \rightarrow c = 2\pi n_3) \quad (n_1, n_2, n_3) \in \mathbb{Z}^3$$

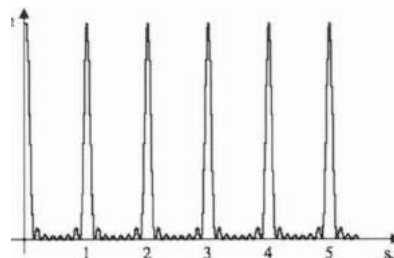
On écrit les coordonnées de $\Delta \rightarrow k$ dans la base réciproque :

On a $\Delta \rightarrow k = Q_x \cdot \rightarrow a^* + Q_y \cdot \rightarrow b^* + Q_z \cdot \rightarrow c^*$ ($\rightarrow a^*$, $\rightarrow b^*$, $\rightarrow c^*$) sont les vecteurs de base du réseau réciproque

On peut réécrire :

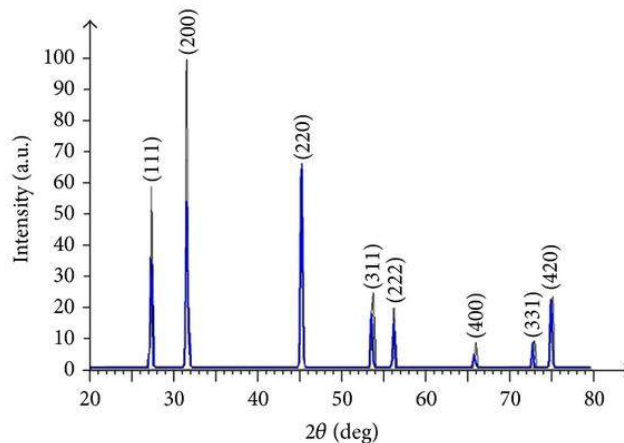
$$S = S_0 \frac{\sin(\pi N Q_x) \cdot \sin(\pi N Q_y) \cdot \sin(\pi N Q_z)}{\sin(\pi Q_x) \cdot \sin(\pi Q_y) \cdot \sin(\pi Q_z)}$$

L'intensité atteint sa valeur maximale lorsque Q_x , Q_y , Q_z prennent des valeurs entières, ie lorsque $\Delta \rightarrow k$ appartient au réseau réciproque.



On peut écrire : $\Delta \rightarrow k = h \cdot \rightarrow a^* + k \cdot \rightarrow b^* + l \cdot \rightarrow c^*$, (h, k, l) étant des entiers
 Où (h, k, l) sont les indices de Miller, ils définissent le plan cristallographique.

On peut alors aboutir à ce genre de spectre :



Un pic de diffraction est donc généré par une famille de plan d'indice (hkl) ;
 Ainsi, en appliquant les formules de la diffraction, on peut associer chaque pic à une famille de plan et on peut retrouver la distance inter réticulaire avec la loi de Bragg.

Conclusion :

La formule de Fraunhofer nous a permis de conclure sur la figure de diffraction ; on a ainsi pu mettre en évidence le facteur de structure et le facteur de forme qui nous permettent d'obtenir des informations sur la répartition et la forme des motifs diffractants.

Si cela est connu, on peut conclure sur des propriétés de l'onde incidente.

La diffraction par des structures périodiques trouvent son utilité dans de nombreuses applications, on a vu la cristallographie, mais il y'a également l'échographie avec l'utilisation de réseaux acoustiques.

Ce genre d'étude ne se restreint pas aux structures périodiques, on pourrait aussi s'intéresser à des structures réparties aléatoirement.

Remarques et questions :

- Dans I.1) Que se passe-t-il si N était infini ?
 → On aurait eu un peigne de Dirac (les pics auraient été infiniment fins)
- Dans I.1) on aurait pu faire tous nos calculs directement en TF si on préfère
- Réseau de réflexion/Réseau en transmission, quel est le mieux ?
 → Le réseau en réflexion car on évite les pertes par transmission + les problèmes d'hétérogénéité(?)
- Comment fabriquer un réseau ?

Voir dans le Sextant Optique expérimentale, ou dans une question suivante pour le réseau blazé.

- Quand on parle du pouvoir de résolution, on peut aussi évoquer que la résolution de notre figure est limitée par la géométrie du montage optique.
- Savoir ce qu'est une mire sinusoïdale
- Savoir ce qu'est un réseau blazé.

→ Réseau à échelle

- Si on a le temps dans le II- : on peut parler de la diffraction par des ondes de matière (électrons et neutrons) avec λ_{DB} .

(voir :

http://www.lkb.upmc.fr/cqed/wp-content/uploads/sites/14/2019/10/optique_TD_diffraction_2_corrige.pdf p7-8 + Kittel)

- Partie cristallographie : Évoquer aussi sphère d'Ewald
- Approximation de Fraunhofer ?

Diffraction à l'infini, on éclaire notre objet diffractant par une onde plane et on observe à l'infini. On se met à l'infini, les ondes sphériques en ondes planes

- Pourquoi on fait un calcul unidimensionnel pour le réseau, à quelle approximation cela revient dans la direction verticale ?

Ca revient à considérer que les fentes sont infiniment longues, ce qui semble vérifié si l'on compare les deux longueurs.

- Pourquoi historiquement on a continué à utiliser des prismes alors que les réseaux existaient encore ?

Aucune idée, peut être le coût/la difficulté de fabrication ?

- Comment fabrique-t-on un réseau blazé ?

Diapo 9 : http://olivier.granier.free.fr/cariboost_files/Tr-reseaux-PC-1213.pdf

- Réalisation précise d'un émetteur ultrasonore utilisé pour l'échographie ?

L'élément de base de l'échographie est généralement une **céramique piézoélectrique (PZT)**, située dans la sonde, qui, soumise à des impulsions électriques, vibre générant des **ultrasons**. Les échos sont captés par cette même céramique, qui joue alors le rôle de récepteur : on parle alors de transducteur ultrasonore.

Un échographe est muni d'une sonde échographique, nommée barrette échographique, pourvue à l'origine de 64, 96 voire 128 transducteurs ultrasonores en ligne. Les sondes des échographes modernes possèdent aujourd'hui jusqu'à 960 éléments. En échographie cardiaque le nombre d'éléments est amené à 3 000 éléments. L'émission se fait de manière successive sur chaque transducteur.

- Dans quelle démarche épistémologique s'inscrit l'expérience de Davisson et Germer (diffraction d'électrons en 1925) ?

C'était une expérience pionnière de la mécanique quantique : en bombardant un cristal de Nickel avec des électrons de vitesse connue, ils parviennent à vérifier la relation de De Broglie pour la longueur d'onde, à partir de la figure de diffraction obtenue !