LP36 – Diffraction par des structures périodiques dans différents domaines de la physique

21 novembre 2016

Thomas Vernaudon & Guillaume Mugnier

Vous savez, le principe de Huygens, bon, voilà...
Joël Bellessa

Niveau : L3

Commentaires du jury

- **2009, 2010** : La notion de facteur de forme peut être introduite sur un exemple simple. L'influence du nombre d'éléments diffractants doit être discutée.
- **2007** : Le jury souhaite que la diffraction d'ondes autres que les ondes électromagnétiques soit envisagée. C'est pourquoi l'intitulé 2008 précise dans différents domaines de la physique.
- **2004** : Il faut veiller au bon équilibre de l'exposé : il est inutile de faire l'étude de la diffraction de Fraunhofer qui doit être supposée connue et il est souhaitable de consacrer plus de cinq minutes à l'étude de la diffraction des rayons X par les cristaux par exemple.
- **2002** : Cette leçon doit être illustrée expérimentalement de manière efficace. Le pouvoir de résolution d'un réseau est toujours présenté, mais la détermination de son expression théorique pose systématiquement des problèmes aux candidats.

Bibliographie

✍ *Optique*, **Pérez**
✍ *Optique*, **Houard**
✍ *Optique physique*,**Taillet**

✍ *Ashcroft*, **Physique des solides**

⟶ La base concernant les réseaux.
⟶ Pouvoir de résolution d'un réseau
⟶ Calculs d'intensité plus élégants qu'ailleurs (on notera la petite folie du titre)
⟶ Pour la formulation de Von Laue de la diffraction dans des cristaux, et une explication de la méthode des poudres

Prérequis

➢ Interférences, fentes de Young
➢ Principe de Huygens-Fresnel (H-F) et diffraction
➢ Cristallographie : réseaux cristallins

Expériences

- Figure de diffraction d'une fente par un réseau
- Mise en évidence du doublet jaune du mercure à l'aide d'un filtre blazé
- Calcul des paramètres de maille du graphite à l'aide de la méthode des poudres de Debye

Table des matières

1 Formalisme et propriétés du réseau plan **2**
1.1 Présentation et grandeurs utiles . . . 2
1.2 Formule des réseaux et commentaires . . . 3
1.3 Calcul de l'intensité diffractée . . . 4

2 Usage en spectroscopie : remonter aux propriétés de la source **5**
2.1 Pouvoir de résolution d'un réseau . . . 5
2.2 Principe et utilité des filtres blazés . . . 6

3 Usage en cristallographie : remonter aux propriétés du réseau diffractant **6**
3.1 Modélisation d'un cristal par un réseau plan . . . 6
3.2 Formulation de Von Laue de la diffraction par un cristal . . . 7
3.3 Détermination des paramètres de maille . . . 8

Introduction

On a vu dans des leçons précédentes les phénomènes d'interférences entre deux ondes, par exemple à travers des fentes de Young, et de diffraction lorsqu'une onde rencontre un surface de taille plus petite que sa longueur d'onde. Dans cette leçon nous allons voir ce qui se passe lorsqu'une onde est envoyée sur un assemblage périodique de telles surfaces, comment le phénomène qui en résulte mêle diffraction et interférences, et quelles applications pratiques on peut en tirer.

1 Formalisme et propriétés du réseau plan

1.1 Présentation et grandeurs utiles

Définition : Un *réseau plan* est un objet diffractant plan dont la transmittance varie de manière périodique dans l'espace.

Bien qu'il y existe des exemples plus spécifiques, les réseaux les plus simples sont constitués d'une alternance de fentes ou de miroirs (transmittance de 1) et de pleins (transmittance de 0). Le choix des fentes ou des miroirs conditionne si le réseau fonctionne *par transmission* ou *par réflexion*. On se concentrera dans la suite sur les réseaux par transmission, sachant que ceux par réflexion suivent le même formalisme à un facteur -1 près sur l'angle en sortie.

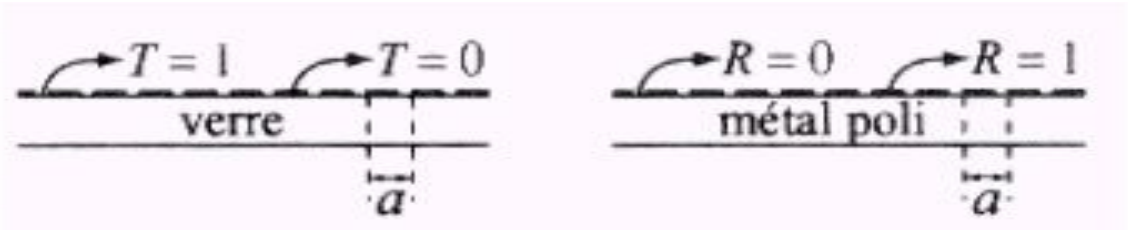

FIGURE 1 – À gauche : réseau par transmission ; à droite : réseau par réflexion.

Que se passe-t-il ? Chaque motif diffracte l'onde incidente (principe de H-F) et les ondes diffractées par différents motifs interfèrent entre elles.

Grandeurs utiles :

- Période spatiale a du réseau (appelée "pas"), généralement de l'ordre de quelques micromètres ;
- Largeur ϵ d'une fente, plus petite qu'un micromètre ;
- Nombre de traits par millimètres n, lié à a par la relation $n = \frac{1}{1000\,a}$ (pour les réseaux usuels, n est de l'ordre de quelques centaines) ;
- Largeur L de la portion du réseau éclairée par le faisceau incident et le nombre $N = nL$ de traits éclairés (généralement de l'ordre de quelques milliers).

Réseau typique

Montrer un réseau 300 traits utilisé en TP ; commenter le fait que le pas du réseau soit indiscernable à l'oeil.

Remarque

La longueur des fentes est considérée très grande devant ϵ, de sorte qu'il n'y ait pas de diffraction dans cette direction.

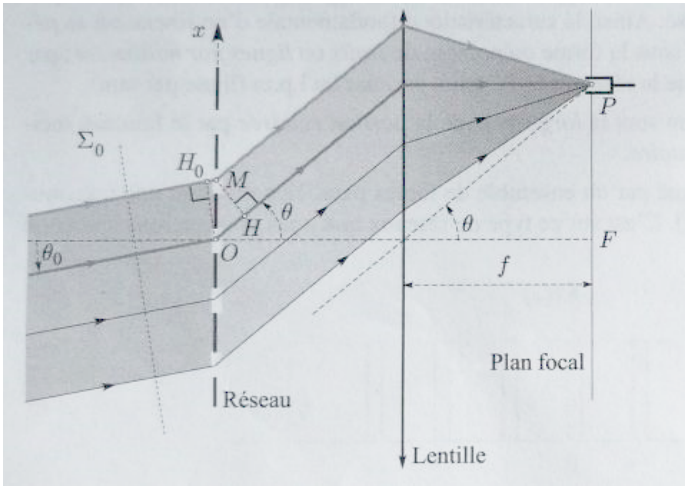

FIGURE 2 – Schéma de la diffraction de Fraunhoffer, extrait du Pérez p.356

1.2 Formule des réseaux et commentaires

On se place dans le cadre, déjà vu, de la diffraction de Fraunhoffer, et on regarde l'intensité diffractée dans une direction caractérisée par un angle de sortie θ. Pour observer expérimentalement cette intensité, on projette le faisceau parallèle de direction θ sortant du réseau sur un écran placé au plan focal image d'une lentille convergente.

Dans un premier temps, on ne s'intéresse qu'aux directions θ pour lesquelles on observe un maximum d'intensité diffractée. Celle-ci est maximale lorsque les ondes diffractées dans la direction θ par deux motifs successifs présente une différence de marche multiple de la longueur d'onde ; toutes les ondes interfèrent alors constructivement.

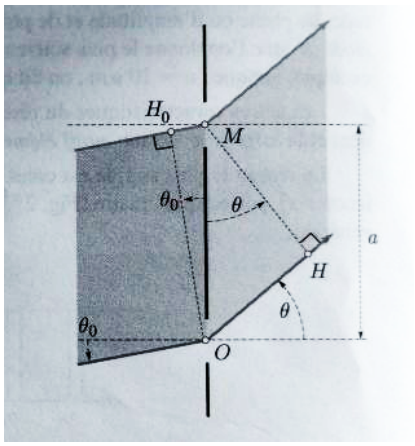

FIGURE 3 – Zoom sur deux motifs successifs, extrait du Pérez p.356

Avec les notations du schéma, on a alors :

$$OH - H_0M = p\,\lambda \quad \text{avec } p \text{ entier}$$

et donc :

$$\boxed{\sin(\theta) - \sin(\theta_0) = \frac{p\,\lambda}{a}}$$

Cette formule porte de nom de *formule des réseaux*. On voit apparaître dans celle-ci le facteur $\frac{\lambda}{a}$ caractéristique de la diffraction. On constate également que les pics de diffraction pour différentes valeurs de λ sont différents, et donc que le phénomène est dispersif, ce sur quoi on reviendra plus tard.

1.3 Calcul de l'intensité diffractée

On va maintenant calculer plus précisément l'intensité diffractée en fonction de la direction θ. Pour simplifier les calculs, on se place dans le cas d'une incidence nulle ($\theta_0 = 0$). On a vu avec la formule des réseaux que le déphasage entre deux ondes diffractées dans la direction θ par deux motifs successifs était $\phi_1 = \frac{2\pi a}{\lambda}\sin(\theta)$, donc le déphasage entre le rayon numéroté 0 et le q-ième est :

$$\phi_q = q\frac{2\pi a}{\lambda}\sin(\theta)$$

L'amplitude envoyée en θ est alors :

$$A(\theta) = \sum_{i=0}^{N-1} A_0\, f(\theta)\ \mathrm{e}^{q\frac{2\pi a}{\lambda}\sin(\theta)}$$

où $A_0\, f(\theta)$ est l'amplitude diffractée par une fente. Le facteur d'amplitude $f(\theta)$ ne dépend que de la géométrie d'une fente et pas du reste du réseau. On a vu dans le cours sur la diffraction par une fente que celui-ci s'écrit :

$$f(\theta) = \mathrm{sinc}\left(\frac{\pi\,\epsilon\,\sin(\theta)}{\lambda}\right)$$

On a alors pour A :

$$A(\theta) = A_0\ \mathrm{sinc}\left(\frac{\pi\,\epsilon\,\sin(\theta)}{\lambda}\right)\ \frac{1-\mathrm{e}^{\frac{2i\pi Na}{\lambda}}}{1-\mathrm{e}^{\frac{2i\pi a}{\lambda}}}$$

et finalement pour l'intensité :

$$\boxed{I(\theta) = I_0\ \mathrm{sinc}^2\left(\frac{\pi\,\epsilon\,\sin(\theta)}{\lambda}\right)\ \frac{\sin^2(\frac{\pi Na}{\lambda})}{\sin^2(\frac{\pi a}{\lambda})}}$$

On identifie dans cette formule un *facteur de forme* (le sinus cardinal carré) ne dépendant que des caractéristiques géométrique d'un motif, et un *facteur de structure* (le rapport des sinus) dépendant des paramètres caractéristiques du réseau a et N. Sur l'allure de $I(\theta)$ ci-dessous, le facteur de forme est l'enveloppe de la courbe.

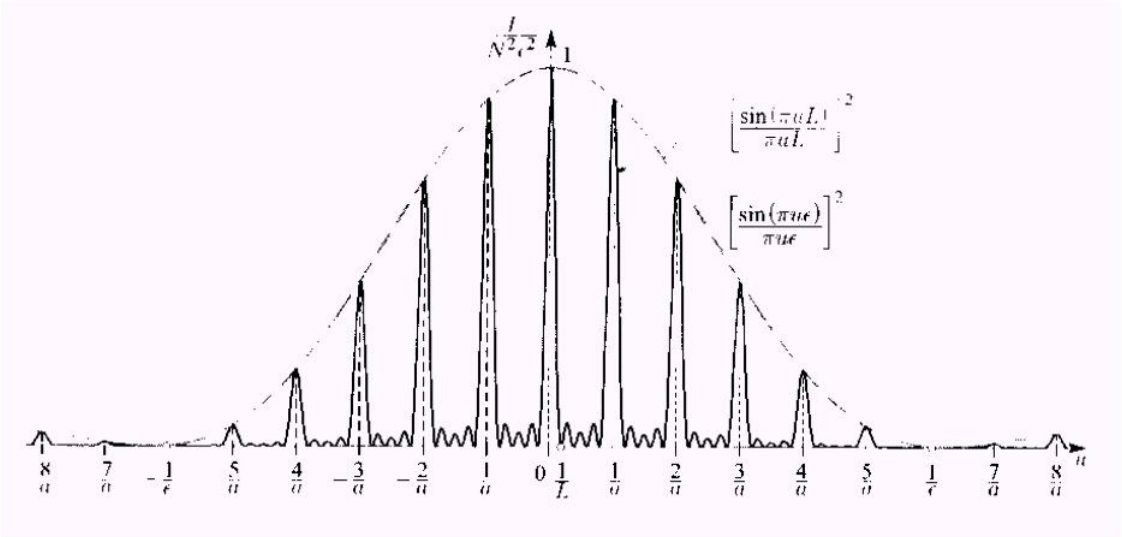

FIGURE 4 – Intensité diffractée selon la direction θ en incidence normale.

Figure de diffraction par un réseau 300 traits

Faire la figure de diffraction d'une lampe à mercure par un réseau 300 traits/mm. Commenter le fait que les ordres croissants perdent de l'intensité, et attirer l'attention sur la dispersion.

On voit avec la lampe à mercure que la diffraction par un réseau est dispersive : les différentes longueurs d'ondes (couleurs) ont une figure de diffraction différente. Voyons maintenant comment tirer parti de ce phénomène dans le cadre de la spectroscopie.

2 Usage en spectroscopie : remonter aux propriétés de la source

2.1 Pouvoir de résolution d'un réseau

L'utilité d'un réseau en spectroscopie est directement lié à sa capacité à séparer les pics de diffraction correspondant à deux longueurs d'onde proches λ et $\lambda + \mathrm{d}\lambda$. Cette capacité est mesurée par le *pouvoir de résolution* du réseau $R = \frac{\lambda}{\mathrm{d}\lambda_{min}}$, où $\mathrm{d}\lambda_{min}$ est la différence de longueur d'onde minimale discernable par le réseau. Dans cette partie, nous allons déterminer l'expression de R en fonction des paramètres du réseau, et en profiter pour montrer que R ne dépend pas de λ.

On va se servir du *critère de Rayleigh* : la limite à laquelle on peut séparer deux pics d'intensité est lorsque le maximum du premier correspond au 1er minimum du second.

On a le maximum du pic principal d'ordre m pour :

$$\Delta\phi = \frac{2\pi}{\lambda} a(\sin(\theta) - \sin(\theta_0)) = 2\pi\, m$$

donc pour :

$$\sin(\theta) = \sin(\theta_0) + \frac{m\,\lambda}{a}$$

De même, le premier minimum de ce pic est tel que :

$$\Delta\phi = \frac{2\pi}{\lambda}\, a\, (\sin(\theta + \mathrm{d}\theta) - \sin(\theta_0)) = 2\pi\, m \pm \frac{2\pi}{N}$$

donc pour :

$$\sin(\theta + \mathrm{d}\theta) = \sin(\theta_0) + \frac{m\,\lambda}{a} \pm \frac{\lambda}{a\,N} = \sin(\theta) \pm \frac{\lambda}{a\,N}$$

L'écart entre le maximum du pic d'ordre m pour λ et son premier minimum est donc :

$$\delta_1(\sin(\theta)) = \frac{\lambda}{a\,N}$$

Par ailleurs, les maxima des pics pour λ et $\lambda + \mathrm{d}\lambda$ vérifient respectivement :

$$\sin(\theta)(\lambda) = \sin(\theta_0) + \frac{m\,\lambda}{a} \quad \text{et} \quad \sin(\theta)(\lambda + \mathrm{d}\lambda) = \sin(\theta_0) + \frac{m\,\lambda}{a} + \frac{m\ \mathrm{d}\lambda}{a}$$

Et donc l'écart entre les maximums des deux pics vérifie :

$$\delta_2(\sin(\theta)) = \frac{m\,d\lambda}{a}$$

Ainsi, le critère de Rayleigh implique que les deux pics sont résolus si $\frac{m\ \mathrm{d}\lambda}{a} > \frac{\lambda}{a\,N}$, donc si $\frac{\lambda}{\mathrm{d}\lambda} < m\,N$. Le pouvoir de résolution est donc :

$$\boxed{R = m\,N}$$

Remarque

R dépend uniquement de l'ordre observé et du nombre de traits éclairés N, et non directement du pas du réseau.

2.2 Principe et utilité des filtres blazés

On a vu avec la figure de diffraction que l'ordre le plus lumineux était l'ordre 0, et que les ordres suivants devenaient rapidement trop peu lumineux pour être visibles. Cependant, l'ordre 0 n'étant pas dispersif, il n'est d'aucune utilité en spectroscopie. Pour pouvoir observer la dispersion aux ordres 1 ou 2, on se sert alors de *réseaux blazés* caractérisés par leur capacité à envoyer le maximum d'intensité ailleurs que dans la direction incidente θ_0. Ces réseaux sont fabriqués de la manière suivante :

- **pour un réseau par transmission :** on place des prismes très fins derrière chaque fente pour dévier tous les rayons sortant d'un angle θ_b ;
- **pour un réseau par réflexion :** on oriente légèrement les miroirs d'un angle θ_b.

Le facteur de forme de la figure de diffraction est alors translaté horizontalement de θ_b tandis que le facteur de structure n'est pas modifié. Par cette méthode, on peut obtenir des ordres 2 ou 3 bien plus visibles.

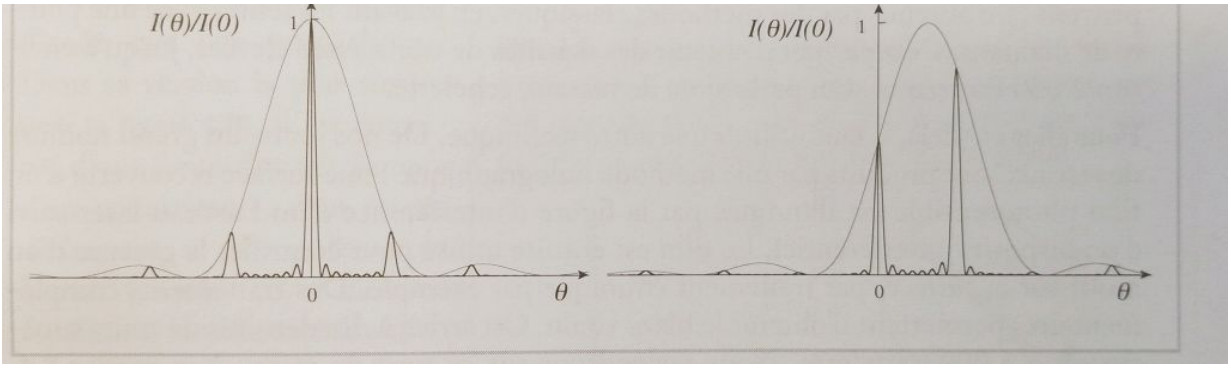

FIGURE 5 – Comparaison de $I(\theta)$ pour un réseau normal et un blazé, extrait du Taillet

Mise en évidence du doublet jaune du mercure

Le spectre d'émission de la lampe à mercure utilisé précédemment présente un doublet jaune à 577 et 579,1 nm, qu'il est possible de distinguer avec un filtre d'au moins 300 traits/mm. On utilise ici un réseau blazé pour avoir plus d'intensité à l'ordre 1 (il n'y a pas de réseau blazé à l'ordre 2 dans la collection, malheureusement), bien que ce ne soit pas absolument nécessaire pour observer le doublet. Facultativement, on peut faire varier le nombre de traits du réseau pour montrer que le doublet n'est plus visible à 100 traits/mm.

On vient de voir le cas où l'on cherche à remonter aux propriétés de la source en connaissant celles du réseau utilisé. Nous allons maintenant faire l'inverse : déterminer des propriétés d'un réseau, dans notre cas le paramètre de maille d'un réseau cristallin, en connaissant celles des ondes envoyées dessus.

3 Usage en cristallographie : remonter aux propriétés du réseau diffractant

3.1 Modélisation d'un cristal par un réseau plan

Rappel de cristallographie : un cristal est modélisé par un motif (souvent un atome, parfois un ensemble d'atomes) répété en tous les points d'un réseau $\vec{R} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$, où n_1, n_2 et n_3 sont des entiers relatifs. Un même réseau peut être généré par plusieurs triplets $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$. Les normes des $\vec{a}$, $\vec{b}$ et $\vec{c}$ "minimaux" engendrant le réseau sont appelées paramètres de maille du réseau cristallin.

Lorsqu'une onde est envoyée sur la surface (plane) du cristal, les premières couches d'atomes se comportent comme des réseaux plans 2D par réflexion. La figure de diffraction est déterminée uniquement par la configuration de la première couche d'atomes ; les suivantes ne font que modifier la valeur du maximum d'intensité diffractée. La taille des atomes (les éléments diffractants) étant de l'ordre de l'ångström, les ondes qu'il est possible d'utiliser pour sonder des cristaux sont :

– les ondes électromagnétiques : $\frac{hc}{\lambda} \simeq hc\ 10^{10} \simeq 10^4\ eV$. On est dans le domaine des rayon X.

– les faisceaux d'électrons : longueur d'onde de de Broglie $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e eV}} \simeq 10^{-10}\ m$ donc accélérés par une tension $V \simeq 100V$.

– les faisceaux de neutrons : longueur d'onde de de Broglie $\lambda = \frac{h}{\sqrt{3M_n k_B T}} \simeq 10^{-10}\ m$ ce qui correspond à une température d'environ 400 K.

3.2 Formulation de Von Laue de la diffraction par un cristal

On considère une onde incidente décrite par son vecteur d'onde $\vec{k}$ touchant deux atomes du réseau séparés spatialement par le vecteur $\vec{d}$. On considère l'intensité diffractée dans la direction $\vec{k'}$.

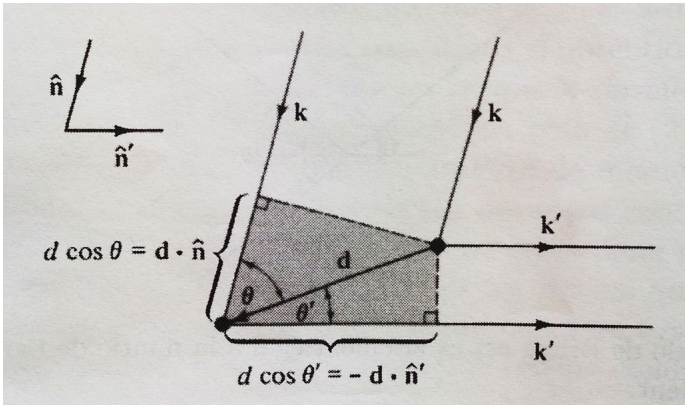

FIGURE 6 – Diffraction de Bragg, extrait du Ashcroft

Comme précédemment, les ondes interfèrent constructivement lorsque la différence de marche en sortie est un multiple de la longueur d'onde :

$$\cos(\theta') + \cos(\theta) = \vec{d} \cdot (\vec{n} - \vec{n'}) = m\,\lambda$$

donc lorsque :

$$\vec{d} \cdot (\vec{k} - \vec{k'}) = 2\pi m$$

Ainsi, on a interférences constructives à l'échelle du réseau lorsque pour tout vecteur $\vec{R}$ décrivant la postion d'un atome dans le réseau, $\vec{R} \cdot (\vec{k} - \vec{k'}) = 2\pi\, m$, donc lorsque pour tout $\vec{R}$ du réseau :

$$\boxed{e^{i\vec{R} \cdot (\vec{k} - \vec{k'})} = 1}$$

Cette formule est un équivalent de la formule des réseaux de la première partie. Déterminons maintenant l'amplitude et l'intensité diffractées pour $\vec{K} = \vec{k} - \vec{k'}$ quelconque. Comme précédemment, l'amplitude diffractée par un unique atome s'écrit $A(\vec{K}) = A_0\, f(\vec{K})$ où $f(\vec{K})$ est un facteur d'amplitude ne dépendant que de la taille de l'atome. Le déphasage entre les ondes diffractées par les motifs i et j s'écrit :

$$\Delta\phi = \vec{K} \cdot (\vec{d_j} - \vec{d_n})$$

En prenant l'origine sur l'un des atomes, l'amplitude diffractée est donc :

$$A(\vec{K}) = A_0\, f(\vec{K}) \sum_j e^{i\vec{K} \cdot \vec{d_j}}$$

et l'intensité diffractée est donc :

$$\boxed{I(\vec{K}) = I_0\, (f(\vec{K}))^2 (\sum_j e^{\vec{K}.\vec{d_j}})^2}$$

On reconnaît le formalisme introduit dans la partie I : f est le facteur de forme (qui vaut 1 lorsque le motif diffractant est un atome simple), et la somme est le facteur de structure dépendant des paramètres du réseau.

3.3 Détermination des paramètres de maille

Plusieurs méthodes existent pour réaliser la figure de diffraction d'un cristal. On présente ici la méthode des poudres de Debye. Les grains d'une poudre de cristal solide sont petits à l'échelle macroscopique mais restent très gros à l'échelle atomique ; chaque grain constitue donc un cristal orienté différemment des autres. La figure de diffraction produite par la poudre est donc la superposition des figures de diffraction obtenables à partir de toutes les orientations possibles du cristal.

On montre alors que dans ce cas, on obtient des cônes de rayonnement d'angle ϕ pour chaque $\vec{K}$ appartenant au réseau, vérifiant :

$$K = 2\,k\,\sin(\phi/2)$$

Les premiers maxima correspondent alors aux paramètres de maille du réseau :

$$\boxed{d = \frac{4\pi}{\lambda}\,\sin(\phi/2)}$$

Détermination des paramètres de maille du graphite

On se sert de la machine-qui-fait-tout présente dans la collection (P93.1 et P96.6, alimentés par l'alimentation P43.10), qu'il faut prendre garde à brancher correctement. On voit apparaître deux cercles, correspondant aux deux paramètres de maille différents du graphite. La mesure du diamètre de ces cercles nous permet de remonter aux paramètres de maille par la formule précédente.

Facultatif : on peut mentionner, dans l'hypothèse optimiste où il resterait du temps, l'expérience de Davisson et Germer, qui a permis de valider l'hypothèse de de Broglie selon laquelle un faisceau d'électrons se comporterait comme une onde : encore une utilisation des propriétés de la diffraction par des structures périodiques.

Conclusion

On a vu que la diffraction par des structures périodiques avait des propriétés fort utiles :

- en connaissant les propriétés du réseau utilisé, on peut déduire de la figure de diffraction des propriétés de la source lumineuse, l'intérêt de cette méthode étant son pouvoir de résolution potentiellement très élevé ;
- en connaissant les caractéristiques de l'onde envoyée sur la structure diffractante, on peut en déterminer des propriétés structurelles qu'il est difficile d'obtenir par d'autres moyens ; d'ailleurs, la diffraction par des rayons X est longtemps restée la méthode privilégiée pour sonder la matière solide.

On a vu dans cette leçon des ondes électromagnétiques et des faisceaux d'électrons, mais les phénomènes dégagés sont applicables à d'autres types d'ondes : on pense notammment à l'échographie qui fait intervenir la diffraction d'ondes acoustiques dans le corps humain.

Notes, etc