

LP 36 – DIFFRACTION PAR DES STRUCTURES PÉRIODIQUES

6 juin 2021

Antoine Chauchat & Valentin Dorel

Niveau : L3

Bibliographie

↗ *LP 36 2020*, Cléments de la Salle et Col-léaux

Prérequis

- diffraction de Fraunhofer

Expériences

- ☞ diffraction sur le graphite

Table des matières

1 Réseaux plans unidimensionnels	2
1.1 Généralités	2
1.2 Diffraction	3
2 Spectromètre à réseau	4
2.1 Dispersion	4
2.2 Pouvoir de résolution	5
2.3 Limitations réelles	6
3 Diffraction des rayons X par une structure cristalline	6
3.1 Rappels	6
3.2 Formulations de Bragg et von Laue	7
4 Questions et commentaires	9
4.1 Questions	9
4.2 Commentaires	9

Introduction

Cette leçon est la suite logique des leçons précédentes sur les interférences à deux ondes et la diffraction de Fraunhofer.

Mise en évidence avec un DVD

Montrer un DVD au jury. On peut voir une irisation (décomposition du spectre) de la lumière ambiante. La lumière est diffractée par les sillons gravés sur le DVD. L'ensemble de ces sillons de largeur de l'ordre du demi micron forme une structure périodique.

À travers cette observation on sait maintenant que la diffraction sur une structure périodique permet entre autre de décomposer le spectre de la lumière incidente. On peut tirer deux applications majeures de cette observation :

- La première est la *spectroscopie* : connaissant la structure diffractante on étudie le spectre de la lumière incidente. C'est l'objet de la première application étudiée dans cette leçon.
- La seconde est la *cristallographie* : en connaissant le spectre de la lumière incidente on remonte à la structure périodique de l'objet diffractant. C'est comme cela que l'on étudie notamment les cristaux. C'est ce qu'on verra dans la troisième partie.

Mais avant d'étudier les applications concrètes, étudions la physique du phénomène sur un cas simple : le *réseau plan unidimensionnel*.

1 Réseaux plans unidimensionnels

1.1 Généralités

Un réseau plan unidimensionnel est un objet diffractant dont la transmittance $\underline{t}$ (rapport du champ en 0^+ sur le champ en 0^-) est une fonction périodique. On distingue plusieurs types de réseaux : les réseaux par transmission/réflexion, les réseaux de phase et/ou d'amplitude. Ici nous nous intéresserons aux réseaux d'amplitude par transmission.

Les réseaux sont généralement fabriqués en verre sur lequel on a collé un métal rayé périodiquement par une pointe de diamant. On a ainsi une alternance de transmission et de réflexion.

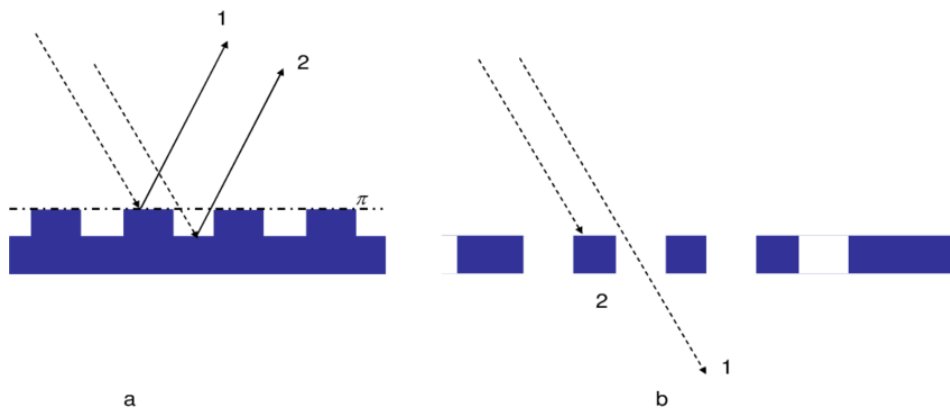


FIG. 1 : Exemples de réseaux. En a., réseau par réflexion, en b. réseau par transmission.

Sur un réseau d'amplitude par transmission on peut définir plusieurs grandeurs pertinentes :

- L longueur éclairée du réseau, OdG $L \sim 1$ cm.
- N le nombre de fentes éclairées, OdG $N \simeq 100 \rightarrow 10000$
- a le pas du réseau, OdG $a 1 \rightarrow 100 \mu\text{m}$
- $n = 1/a$ le nombre de traits par mm, OdG $n 10 \rightarrow 1000$ traits/mm

1.2 Diffraction

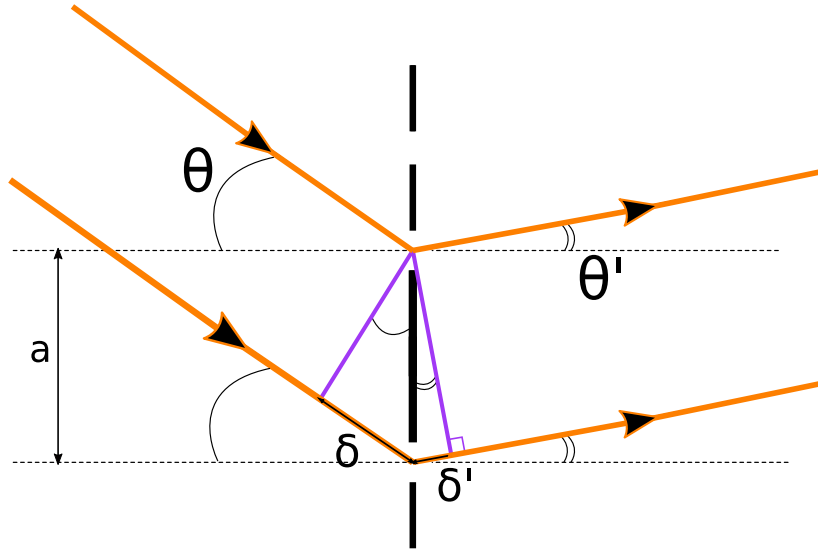


FIG. 2 : Configuration étudiée. Le faisceau incident arrive avec un angle θ sur le réseau vertical.

La différence de marche totale entre les deux faisceaux diffractés distants de a s'écrit :

$$\delta_{\text{tot}} = \delta' + \delta = a(\sin \theta' - \sin \theta) \quad (1.1)$$

(car attention $\theta < 0$)

D'où la condition d'interférences constructives dite de Bragg :

$$a(\sin \theta' - \sin \theta) = p\lambda \quad p \in \mathbb{Z} \quad (1.2)$$

On peut également l'écrire avec les vecteurs d'onde :

$$\vec{a} \cdot (\vec{k}' - \vec{k}) = p\lambda \quad (1.3)$$

Animation sympa qui permet de visualiser cette condition et permet également de voir la limitation des ordres observables. Par exemple en incidence normale on a :

$$\sin \theta' = \frac{p\lambda}{a} \implies |p| < \frac{a}{\lambda} = \frac{1}{\lambda n} \quad (1.4)$$

OdG : avec $\lambda = 500 \times 10^{-9}$ m et $n = 500$ traits/mm on obtient $|p| < 4$.

Maintenant déterminons l'intensité diffractée. On rappelle le calcul de l'amplitude ψ de l'onde réfractée dans une direction θ' pour une onde incidente selon θ . Le principe de Huygens Fresnel donne, dans l'approximation de Fraunhofer :

$$\psi(u) = \underline{K} \int \underline{T}(x) \exp(-2i\pi ux) dx \quad \text{avec} \quad u = \frac{1}{\lambda}(\sin \theta' - \sin \theta) \quad (1.5)$$

Dans le cas d'un réseau de pas a la transmittance $\underline{T}(x)$ s'écrit :

$$\underline{T}(x) = \sum_{m=0}^{N-1} \underline{t}(x - ma) \quad (1.6)$$

On a donc :

$$\psi = \underline{K} \sum_{m=0}^{N-1} \int \underline{t}(x - ma) \exp(-2i\pi ux) dx \quad (1.7)$$

Et en faisant le changement de variable $X = x - ma$:

$$\psi = \underline{K} \underbrace{\left(\sum_{m=0}^{N-1} \exp(2i\pi uma) \right)}_{S(u)} \cdot \underbrace{\int \underline{t}(X) \exp(-2i\pi uX) dX}_{f(u)} \quad (1.8)$$

Le terme $f(u)$ provient de la diffraction par une fente c'est le *facteur de forme*. $S(u)$ traduit les interférences à N ondes c'est le *facteur de structure*.

On reconnaît en $f(u)$ la TF de t en u .

Pour calculer $S(u)$ on reconnaît la somme de termes d'une suite géométrique de raison inférieure à 1. Ainsi :

$$S(u) = \frac{1 - \exp(2i\pi uNa)}{1 - \exp(2i\pi ua)} = \frac{\exp(i\pi uNa)}{\exp(i\pi ua)} \frac{\sin(N\pi ua)}{\sin(\pi ua)} = \exp(i\pi u(N-1)a) \frac{\sin(N\pi ua)}{\sin(\pi ua)} \quad (1.9)$$

Ainsi si on calcule l'intensité observée à l'écran :

$$I(u) = \underbrace{\psi\psi^* |\text{TF}[t](u)|^2}_{R(u)} \left(\frac{\sin N\pi ua}{\sin \pi ua} \right)^2 \quad (1.10)$$

Étudions le facteur $R(u)$:

- Maximum lorsque $\sin \theta' - \sin \theta = \frac{p\lambda}{a}$
- En incidence normale et pour $\theta' \sim 0$ on a $R \sim N^2$.

On peut maintenant prendre en compte le terme en TF. Pour des fentes de largeur e et en incidence normale on a vu l'expression de la TF dans un cours précédent. On a ainsi l'expression complète de $I(\theta)$:

$$I(u) = I_0 \text{sinc}^2 \left(\frac{\pi e}{\lambda} \right) \left(\frac{\sin N\pi ua}{\sin \pi ua} \right)^2 \quad (1.11)$$

À l'aide de l'animation GeoGebra et de ce tableau bien faire le lien entre les paramètres du réseau et la figure de diffraction :

Largeur d'un trou b	→	Taille de la figure $\propto 1/b$
Distance entre deux trous a	→	Distance entre deux pics $\propto 1/a$
Taille du réseau Na	→	Largeur d'un pic $\propto 1/Na$

Diffraction de la lumière d'un lampe Hg par un réseau.

Faire l'image d'une fente fine sur un écran de telle sorte à avoir une image assez grande. Placer un filtre interférentiel pour sélectionner une raie du mercure. Placer le réseau après la fente, montrer les différents ordres observables. Enlever le filtre et montrer que le phénomène est bien dispersif. On peut noter que le rouge est plus dispersé que le bleu à l'inverse du prisme.

↓ Maintenant que nous avons vu la théorie passons aux applications, en commençant par le spectromètre à réseau.

2 Spectromètre à réseau

Grâce à la condition de Bragg nous avons vu que l'angle de diffraction dépendait de la longueur d'onde. Ainsi en connaissant toutes les caractéristiques du réseau diffractant nous pouvons déterminer les longueurs d'ondes présentes en étudiant la figure de diffraction.

2.1 Dispersion

À virer si manque de temps.

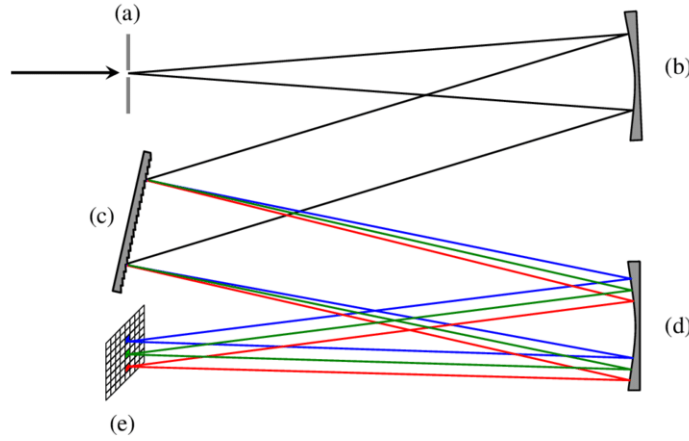


FIG. 3 : Schéma d'un spectro à réseau à réflexion

Pour quantifier la dispersion d'un objet on définit le pouvoir de dispersion $D = \frac{d\theta'}{d\lambda}$. Pour un réseau, on trouve pour un ordre p donné :

$$D = \frac{p}{a \cos \theta'_p} \quad (2.1)$$

Pour de faibles angles θ'_p on a $D = \frac{p}{a}$ la différence de déviation est alors proportionnelle à la différence de longueurs d'onde.

2.2 Pouvoir de résolution

On suppose ici une source infiniment fine, ainsi que la seule limite de résolution provient de la diffraction.

Le critère de Rayleigh stipule que l'on ne peut séparer deux tâches de diffraction qui si le maximum de l'un correspond (dans le cas limite) au minimum de l'autre.

Déterminons ainsi $PR = \frac{\Delta\lambda}{\lambda}$ qui correspond, à λ fixé au plus petit $\Delta\lambda$ tel que λ et $\lambda + \Delta\lambda$ soient séparées par le réseau.

Le maximum du pic principal d'ordre p est observé pour $\sin \theta'_p = \sin \theta + p \frac{\lambda}{a}$.

Autour de ce pic, la première annulation correspond donc à :

$$N\pi u a = (p + 1)\pi \quad (2.2)$$

L'écart en variable $\sin \theta'_p$ entre le max et le premier min vaut donc :

$$\Delta_1(\sin \theta'_p) = \frac{\lambda}{Na} \quad (2.3)$$

La relation de Bragg donne par ailleurs que l'écart entre les deux maxima correspondant à λ et $\lambda + \Delta\lambda$ est :

$$\Delta_2(\sin \theta'_p) = p \frac{\Delta\lambda}{a} \quad (2.4)$$

Les raies sont séparées si : $\Delta_2(\sin \theta'_p) > \Delta_1(\sin \theta'_p)$ i.e. :

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} > \frac{1}{pN} = \frac{\Delta\lambda_{\min}}{\lambda} \quad (2.5)$$

On a donc :

$$PR = \frac{\lambda}{\Delta\lambda_{\min}} = pN \quad (2.6)$$

OdG :

Pour l'ordre $p = 1$, $L = 20$ mm et $n = 500$ traits/mm on a $N = 1 \times 10^4$ ainsi $PR = 1 \times 10^4$.

2.3 Limitations réelles

- En pratique si on monte trop haut dans les ordres d'interférence on peut observer un recouvrement des spectres d'ordre p et $p + 1$.
- L'effet de la diffraction fait que la majorité de la lumière va dans l'ordre 0 qui lui ne présente pas de dispersion. On manque donc de résolution dans les modes d'intérêt. Pour palier à ça on utilise des réseaux blazés (en réflexion) qui sont une suite de marches d'angle ajustables permettant de définir l'angle de luminosité maximale.

On vient de voir que la diffraction permettait de remonter aux caractéristiques de la lumière incidente. On va maintenant faire le raisonnement inverse.

3 Diffraction des rayons X par une structure cristalline

L'idée est de maintenant étudier une figure de diffraction en connaissant la lumière incidente afin d'obtenir des informations sur le réseau diffractant. C'est un moyen utilisé pour sonder la matière cristalline.

En ordre de grandeur, la distance inter atomique dans un cristal est de $1 \text{ \AA}$. Il faut donc choisir une onde incidente dont la longueur d'onde est inférieure, on choisit donc des rayons X.

3.1 Rappels

Quelques rappels de cristallographie parce que c'est super (non).

On définit le *réseau de Bravais* $\vec{R}$ tel que $\vec{R} = n_1\hat{a}_1 + n_2\hat{a}_2 + n_3\hat{a}_3$ avec $\hat{a}_1, \hat{a}_2, \hat{a}_3$ une base de l'espace on recouvre ainsi tout l'espace.

On définit le *réseau réciproque* (RR) $\vec{G}$ tel que $\exp(i\vec{G} \cdot \vec{R}) = 1$ avec $\vec{G} = m_1\hat{b}_1 + m_2\hat{b}_2 + m_3\hat{b}_3$.

On a la relation $\hat{a}_i \cdot \hat{b}_j = \delta_{ij}$.

Enfin on définit les plans réticulaires comme les familles de plans parallèles équidistants contenant tous les points du réseau. $\vec{G} \in \text{RR}$ définit la normale à ces plans. Si $\vec{G}$ est de norme minimale alors $|\vec{G}| = \frac{2\pi}{a}$ et $\vec{G} = h\hat{b}_1 + k\hat{b}_2 + l\hat{b}_3$ et on appelle (h, k, l) les indices de Miller.

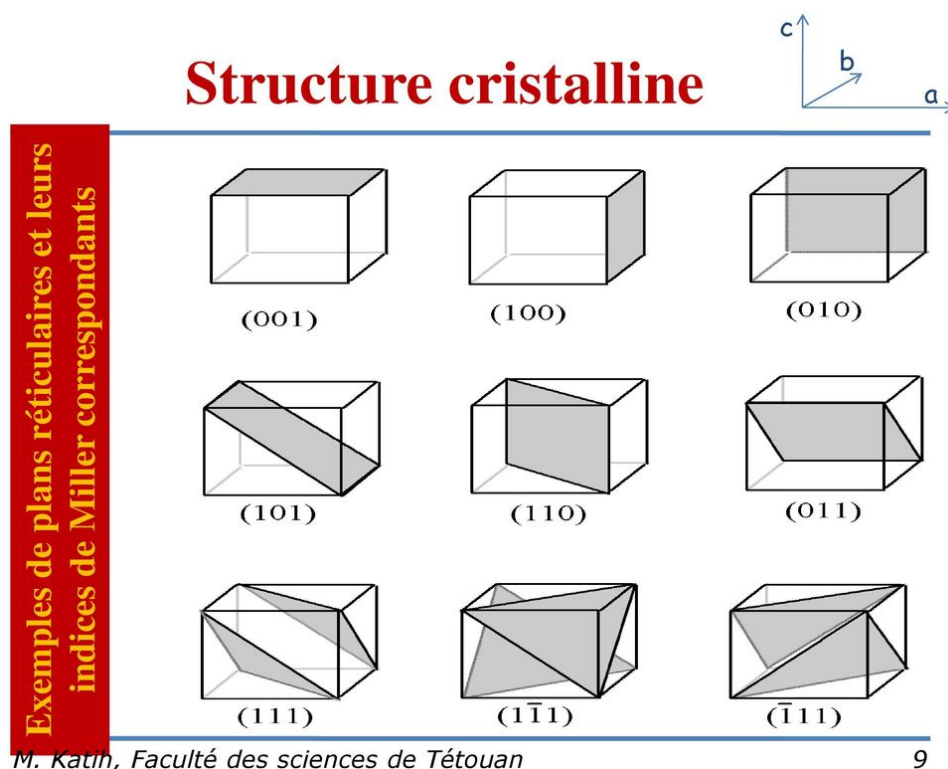


FIG. 4 : Exemples de plans réticulaires et indices de Miller associés.

3.2 Formulations de Bragg et von Laue

Bragg en 1915 suppose que la lumière incidente se réfléchit sur les plans réticulaires.

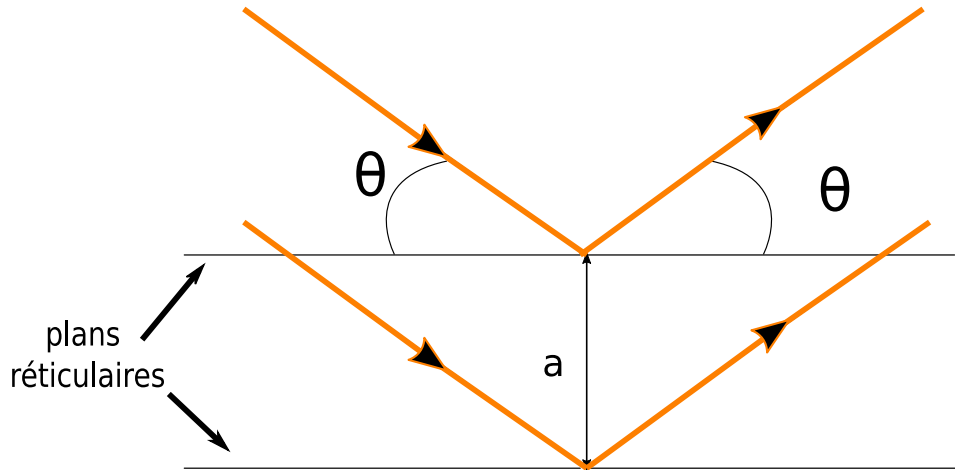


FIG. 5 : Schéma du problème

La différence de marche entre deux faisceaux issus de réflexion sur des plans successifs distants de a s'écrit :

$$\delta = 2a \sin \theta \quad (3.1)$$

Avec θ l'angle d'incidence sur le cristal. On reconnaît la formule du réseau avec $\theta' = -\theta$ comme on est passé d'un réseau en transmission à un réseau en réflexion. Notons qu'on peut la généraliser à tout réseau en réflexion.

Von Laue raisonne différemment et ne fait pas d'hypothèse sur les plans réticulaires mais stipule que deux atomes voisins vont réfléchir l'onde incidente. La condition vectorielle d'interférences constructives est alors :

$$\vec{a} \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0) = \delta \frac{\pi}{\lambda} \quad (3.2)$$

Où on a noté $\vec{a}$ le vecteur reliant deux atomes voisins, $\vec{k}$ et $\vec{k}_0$ les vecteurs d'onde correspondant aux ondes incidente et réfléchie.

Or $\vec{a}$ appartient au réseau direct, on peut étendre cette relation pour n'importe quel vecteur du réseau direct :

$$\vec{R} \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0) = p\pi \quad \text{avec } p \text{ l'ordre d'interférence} \quad (3.3)$$

On reconnaît la définition du réseau réciproque ainsi :

$$(\vec{k} - \vec{k}_0) = \vec{G} \in \text{RR} \quad (3.4)$$

C'est la condition de Von Laue. (elle découle de la règle d'or de fermi, dites le si vous êtes forts)

On peut l'interpréter graphiquement avec la sphère d'Ewald [Figure 6](#).

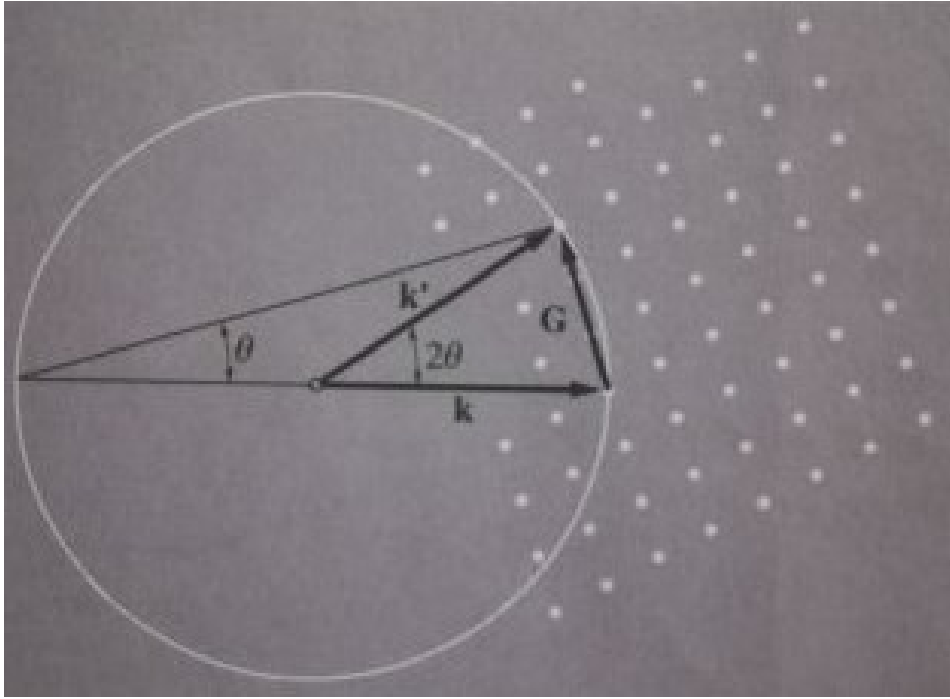


FIG. 6 : Sphère d'Ewald. Les points blancs sont des noeuds dans le RR du cristal. On place l'extrémité du vecteur d'onde incident $\vec{k}_0$ sur l'un des noeuds. On trace une sphère de rayon $2\pi/\lambda$ autour de l'origine de $\vec{k}_0$. Si le cercle intercepte un autre noeud du RR alors on peut définir un $\vec{k}$ respectant la condition de Von Laue.

Ainsi avec les mains on peut dire que : quand on observe un pic de diffraction on a donc interférences constructives. En connaissant $\vec{k}_0$ le faisceau incident, la direction de diffraction nous donne $\vec{k}$ et en utilisant la condition de Von Laue on peut donc en déduire des informations sur le réseau réciproque donc la structure cristalline.

Pour une portion de TF en plus on peut regarder la leçon des Cléments, à base de facteur de forme et de facteur de structure.

Pour visualiser la diffraction il existe plusieurs méthodes :

- La méthode de Von Laue : On fait varier λ , on augmente le rayon de la sphère d'Ewald et on intercepte plusieurs points du RR.
- La méthode du cristal tournant : on fait tourner le cristal sur un axe ce qui revient à faire tourner le RR sur un axe et on obtient ainsi plusieurs pics.
- La méthode des poudres (Debye-Scherrer) : statistiquement toutes les orientations sont représentées. Cela revient à faire parcourir à $\vec{G}$ une sphère de centre O et de rayon $\vec{G}$. L'interaction de cette sphère avec celle d'Ewald donne toutes les directions de diffraction, on obtient un cône d'angle 4θ .

Mesure du paramètre de maille a par la méthode de Debye-Scherrer

On utilise la manip toute prête. C'est dans le poly de TP.

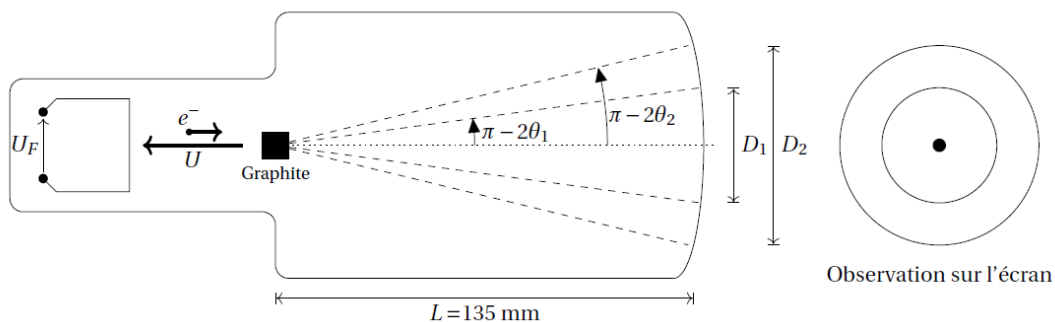


FIG. 7 : Dispositif expérimental

Conclusion

Dans cette leçon on a mis en évidence le comportement des structures périodiques vis à vis de la diffraction. On a notamment vu que cela permettait de remonter à des propriétés fondamentales comme le spectre d'une source ou la structure cristalline d'une poudre.

La spectroscopie et la détermination de la longueur d'onde précise de raies permet notamment en astrophysique de déterminer la composition de nuages de gaz lointains ou encore de mesurer un décalage doppler dit *redshift* lié à l'éloignement de l'objet.

4 Questions et commentaires

4.1 Questions

-

4.2 Commentaires

-