Titre : LP20 Diffraction par des structures périodiques

Présentée par : Margot Lepagnol **Rapport écrit par** : Julie Seguin

Correcteur : Jean Hare **Date** : 26/01/21

Bibliographie		
Titre	**Auteurs**	**Éditeur**
Optique	Pérez	
https://femto-physique.fr/optique/interference-a-N-ondes.php		
Optique physique	Richard Taillet	
Physique du solide	Ashcroft	

Plan détaillé

(indiquer parties, sous-parties, 1 ou 2 phrases d'explications par sous-partie, et références)

Niveau choisi pour la leçon : L3

Prérequis : • Diffraction de Fraunhofer
• Interférences à N ondes
• Cristallographie : réseau de Bravais, réseau réciproque

Plan :

Introduction

Définition diffraction : phénomène d'éparpillement[1] de la lumière que l'on observe lorsqu'une onde lumineuse est matériellement limitée.
Manip introductive : Laser HeNe sur un réseau en transmission montrant un nombre significatif d'ordres

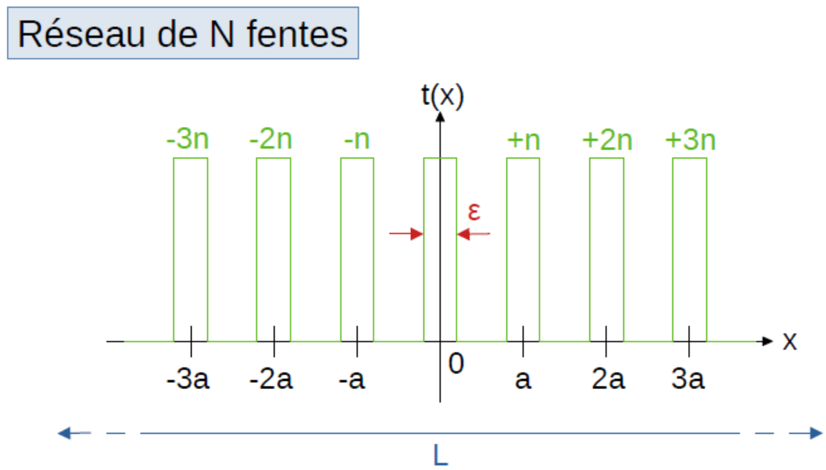
I. Cas de la diffraction par un réseau

Définition réseau : Arrangement matériel régulier qui impose à une onde plane incidente une variation périodique de son amplitude ou de sa phase, ou des deux à la fois.
Caractéristiques fondamentales :

- période (ou nombre de traits par mm) a (ce n'est pas synonyme : dimensions L et L^{-1})
- largeur de la portion éclairée L
- largeur de son motif élémentaire ε

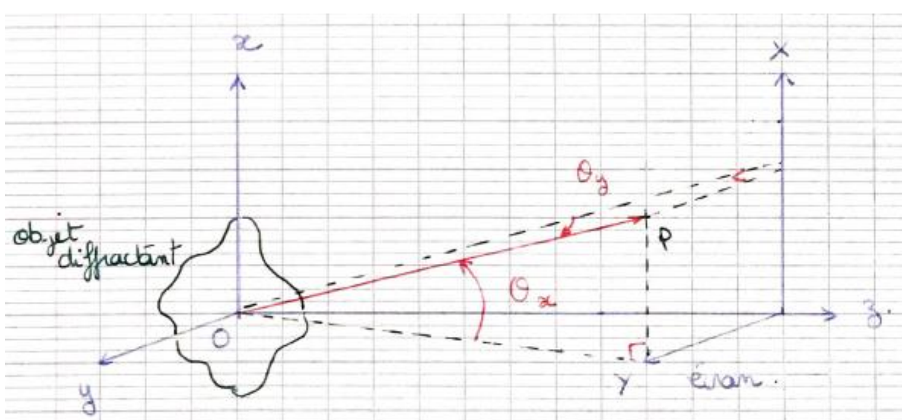
On va étudier le réseau le plus simple constitué par un ensemble de fentes parallèles réalisant une transmittance $t(x)$ périodique binaire.

[1] le mot « éparpillement » est un peu inapproprié car il renvoie & une idée de répartition désordonnée, voire aléatoire



Oui, on peut partir de là, mais alors ne pas mettre en PR « Interférences à N ondes ».
Par ailleurs, vous passez sans le dire d'un réseau de fentes 1D à un réseau à 2 dimensions, alors que le lien est relativement subtil.

On se place dans le cadre de la diffraction de Fraunhofer.
On prendra les notations suivantes :



$$\alpha = \sin(\vartheta_x) \approx \frac{x}{|\overrightarrow{OP}|} \qquad et \qquad \beta = \sin(\vartheta_y) \approx \frac{y}{|\overrightarrow{OP}|}$$

Fréquences spatiales : $u = \frac{\alpha}{\lambda}$ $\quad et \quad$ $v = \frac{\beta}{\lambda}$

1. Rappel : diffraction par une fente

Cas d'une fente de largeur ε
◦ La transmittance pour une fente est :

$$t_{fente}(x) = \begin{cases} 1 \; si \; |x| < \frac{\varepsilon}{2} \\ 0 \; sinon \end{cases}$$

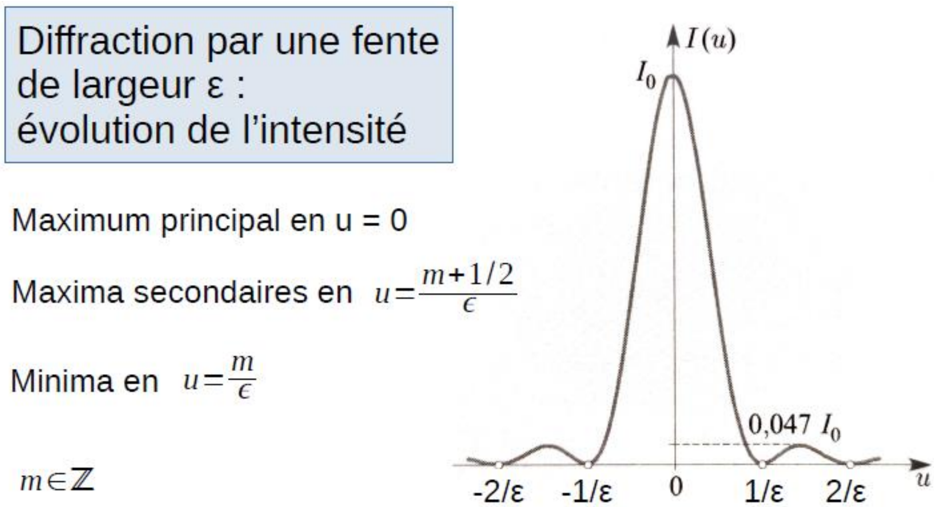
◦ L'amplitude pour une fente (calcul supposé fait dans un chapitre antérieur) est [2] :

$$S_{fente}(u) = \int_{-\frac{\varepsilon}{2}}^{\frac{\varepsilon}{2}} \exp(-i2\pi u x)\, dx = \varepsilon sinc(\pi u \varepsilon)$$

[2] Il doit manquer ici un facteur $2/\pi$

◦ Intensité :

$$I(u) = \left|S_{fente}(u)\right|^2 = \varepsilon^2 sinc^2(\pi u \varepsilon) = I_0 sinc^2(\pi u \varepsilon)$$



2. Calculs pour le réseau de fentes (Optique, Pérez p355)

◦ La transmittance du réseau est :

$$t_{réseau}(x) = \sum_{m=-n}^{n} t_{fente}(x - x_m)$$

avec $x_m = ma$, coordonnée de la fente de rang m

◦ On en déduit l'amplitude du réseau :

$$S_{réseau}(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} t_{réseau}(x) \exp(-i2\pi ux)\, dx$$

$$S_{réseau}(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{m=-n}^{n} t_{fente}(x - x_m) \exp(-i2\pi ux)\, dx$$

On pose $X = x - x_m$

$$S_{réseau}(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{m=-n}^{n} t_{fente}(X) \exp(-i2\pi uX) \exp(-i2\pi ux_m)\, dX$$

$$S_{réseau}(u) = \sum_{m=-n}^{n} \exp(-i2\pi uma) \int_{-\infty}^{+\infty} t_{fente}(X) \exp(-i2\pi uX)\, dX$$

On reconnait $S_{fente}(u)$ et on pose $\Phi = 2\pi ua$ et $\mathrm{N} = 2\mathrm{n} + 1$

$$S_{réseau} = S_{fente}(u) \sum_{m=-n}^{n} \exp(-im\Phi)$$

$$S_{réseau} = S_{fente}(u) \exp(in\Phi) \frac{1 - \exp(-i\Phi)^{2n+1}}{1 - \exp(-i\Phi)}$$

$$S_{réseau} = S_{fente}(u) \exp(in\Phi) \frac{1 - \exp(-iN\Phi)}{1 - \exp(-i\Phi)}$$

$$S_{réseau} = S_{fente}(u)\exp(in\Phi)\frac{\exp\left(-iN\frac{\Phi}{2}\right)\left(\exp\left(iN\frac{\Phi}{2}\right) - \exp\left(-iN\frac{\Phi}{2}\right)\right)}{\exp\left(-i\frac{\Phi}{2}\right)\left(\exp\left(i\frac{\Phi}{2}\right) - \exp\left(-i\frac{\Phi}{2}\right)\right)}$$

$$S_{réseau} = S_{fente}(u)\exp(in\Phi)\exp\left(-i(N-1)\frac{\Phi}{2}\right)\frac{\sin\left(N\frac{\Phi}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\Phi}{2}\right)}$$

$$S_{réseau} = S_{fente}(u)\frac{\sin(N\pi ua)}{\sin(\pi ua)}$$

$$S_{réseau} = N\varepsilon sinc(\pi u\varepsilon)\frac{\sin(N\pi ua)}{N\sin(\pi ua)}$$

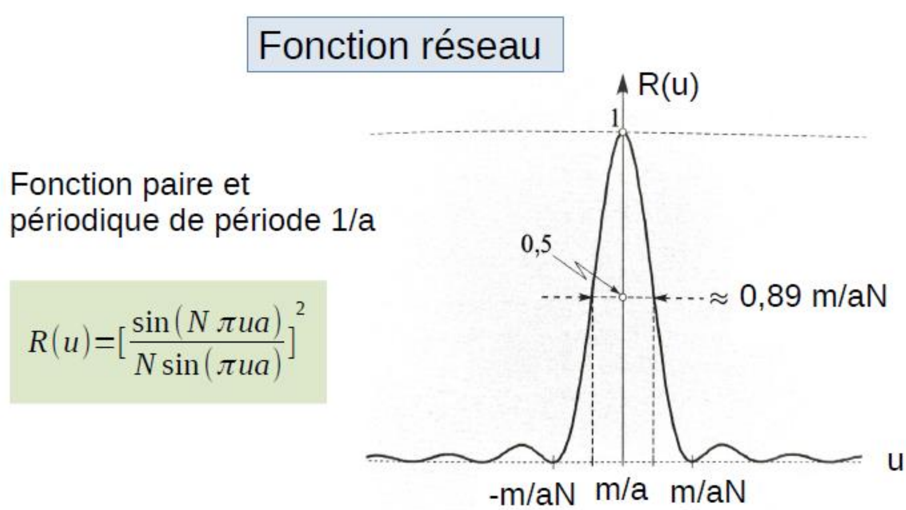
◦ On en déduit l'intensité :

$$I = N^2\varepsilon^2 sinc^2(\pi u\varepsilon)R(u)$$

$$avec\ R(u) = \frac{sin^2(N\pi ua)}{N^2 sin^2(\pi ua)}$$

En bleu le facteur de forme et en jaune le facteur de structure.[3]

On appelle cette fonction $R(u)$ la fonction réseau :

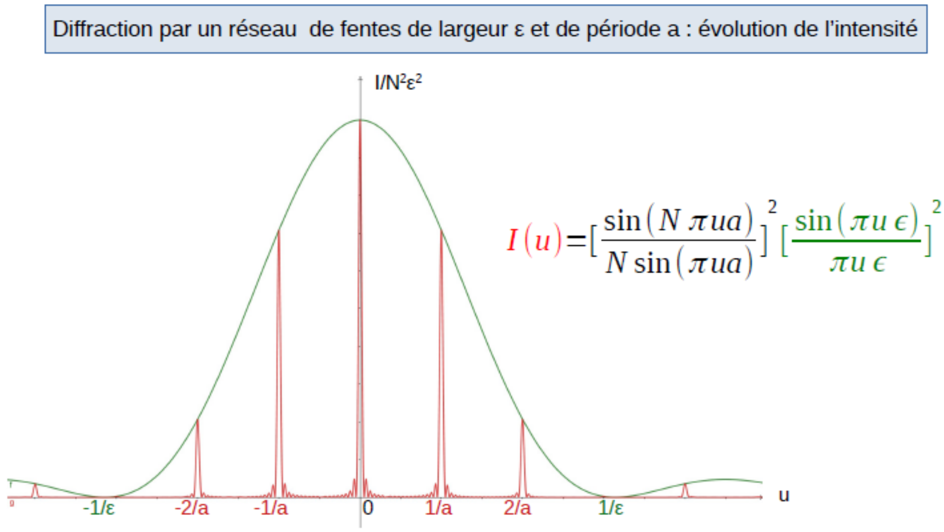


Ici il faudrait :

(1) Montrer la structure globale (donc la périodicité)
(2) Bien insister, avec des notations rigoureuses, sur la distinction entre le nombre de fentes (est-ce N, m, ou n ?) et l'ordre d'interférence, qui semble être m sur la figure ci-dessus
(3) Sur la figure d'une période, insister sur le fait que la hauteur des minima secondaires est d'autant plus faible que le nombre de fentes est élevé.

---

[3] Je persiste à affirmer que c'est le contraire : le facteur de *structure* est associé à la *structure de la maille*, c'est à dire ici celle la transmittance individuelle de la fente, et le facteur de *forme* est celui caractéristique du réseau de Bravais et de la *forme* du cristal (qui impacte le nombre de mailles). Il y a cependant une ambiguité venant de ce que, dans la cadre (exclusif) des rayons X, il est fâcheusement usuel d'appeler « facteur de forme » la transformée de Fourier de la densité électronique d'un atome, ce qui fait que le facteur de structure (de la maille) s'écrit en fonction de cette version du facteur de forme des atomes qui la composent.



Utilisation script python pour montrer influence des paramètres a et ε.

II. Propriétés

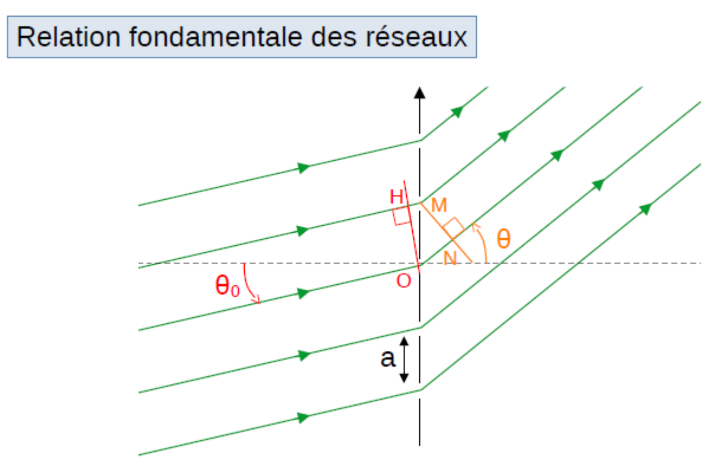
1. Pouvoir dispersif (Optique, Pérez p357)

Rappel : Relation fondamentale des réseaux en incidence oblique (Optique, Pérez p353)

$$m\lambda = a(sin\theta - sin\theta_0)$$

Avec θ_0 l'angle d'incidence et θ l'angle des rayons diffractés.

Faire le lien avec l'approche précédente, et insister sur le fait que l'expression des fréquences spatiales dans le I était une approximation, et que la prise en compte de sin $x \neq x$ conduit à un nombre *fini* d'ordres d'interférence possibles, et seulement m=0 si a<λ/2.



Supposons deux ondes planes de longueur d'onde voisine λ et $\lambda + d\lambda$ qui interceptent un réseau avec le même angle d'incidence.

Alors : $$acos\theta d\theta = md\lambda$$

Soit la formule de la dispersion angulaire

$$\frac{m}{acos\theta} = \frac{d\theta}{d\lambda} = D_a$$

Remarques :

◦ D_a est d'autant plus grand que l'ordre est élevé (m grand) et que le réseau est serré (a petit).

◦ Les ondes de grandes longueurs d'onde sont plus dispersées que celles de petites longueurs d'onde. (à justifier)

2. Pouvoir de résolution (site internet femto-physique)

Définition pouvoir de résolution : capacité à séparer deux longueurs d'onde différentes.

Il est mesuré par la quantité : $R = \frac{\lambda}{\delta\lambda_{min}}$

Avec $\delta\lambda_{min}$ la différence minimale entre deux longueurs d'onde que le système arrive à séparer.

Critère de Rayleigh : 2 pics d'interférence A et B associés aux longueurs d'onde λ et $\lambda + \delta\lambda$ seront résolus si leur séparation angulaire vérifie :

$$\theta_{\lambda+\delta\lambda} - \theta_\lambda > \frac{\delta\theta}{2}$$

Avec $\delta\theta$ la largeur angulaire du pic d'interférence.

Dans notre cas : $\delta\theta = \frac{2\lambda}{Na\cos(\theta)}$

Donc pour un réseau éclairé en incidence normale, on a :

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

En utilisant la formule de la dispersion angulaire :

$$\theta_{\lambda+\delta\lambda} - \theta_\lambda = \frac{\delta\lambda}{a\cos(\theta)} > \frac{\lambda}{Na\cos(\theta)}$$

$$\delta\lambda > \frac{\lambda}{m} = \delta\lambda_{min}$$

Donc pour notre réseau $R = mN$

Le pouvoir de résolution théorique augmente avec le nombre de traits éclairés et avec l'ordre d'interférence. Il ne dépend pas du pas a.[4]

Ordre de grandeurs :
◦ Prisme $R = 500$
◦ Réseau $R = 5000$
◦ Réseau blasé $R = 50000$

Exemple : Quel pouvoir de résolution pour séparer les deux raies du doublet du sodium ?

$$\lambda_1 = 589{,}0 \text{ nm} \quad \text{et} \quad \lambda_2 = 589{,}6 \text{ nm}$$

$$\text{soit} \quad \lambda = \frac{\lambda_1+\lambda_2}{2} = 589{,}3 \text{ nm} \quad \text{et} \quad \delta\lambda = 0{,}6 \text{ nm}$$

$$\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = 982 = mN$$

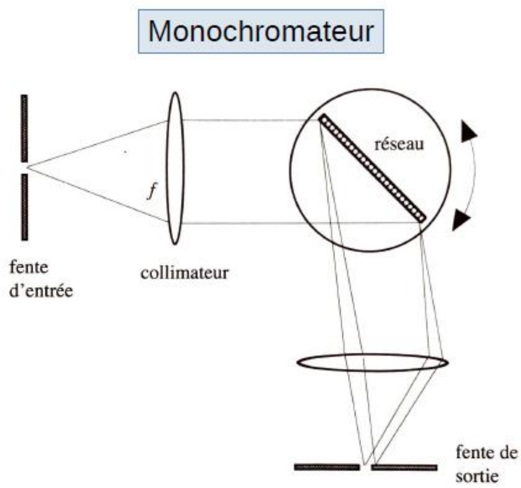
$N \approx 1000$ fentes pour l'ordre 1 du réseau.

Animation de la résolution du doublet du sodium en fonction de l'ordre (site femto-physique).

3. Application : les monochromateurs (Optique physique, Richard Taillet p105)

[4] Oui, mais dans la vraie vie on choisit *a* le plus petit possible pour une gamme de longueur d'onde donnée, pour minimiser cos θ ; en effet pour maximiser D_a il est préférable de jouer sur ce facteur que sur l'ordre d'interférences *m*, car pour *m* grand l'intensité est très faible, et on utilise systématiquement m=1 ou -1.

Les réseaux sont utilisés dans les monochromateurs afin d'étudier la composition spectrale des ondes émises par les sources réelles. Ils remplacent les prismes aujourd'hui car ils ont un meilleur pouvoir dispersif et de résolution.



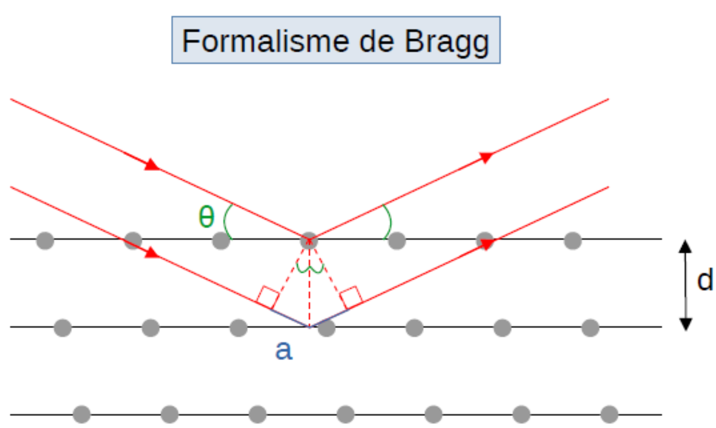
Oui, mais d'une part il s'agit un réseau en réflexion, pour lequel $m\lambda = a(sin\theta + sin\theta_0)$. D'autre art il serait utile d'évoquer ici les réseaux en échelette, ou réseaux blazés, pour justifier, même de façon qualitative, l'utilité de la notion de facteur de structure. De plus les réseaux de monochromateurs sont toujours blazés.

III. Cas de la diffraction par des solides cristallins

Pour diffracter, il faut que le rayonnement ait une longueur d'onde du même ordre de grandeur que les longueurs caractéristiques de l'objet.

1. Formulation de Bragg (Physique du solide, Ashcroft p112)

Hypothèses : ◦ Le cristal est composé de plans d'ions parallèles séparés par une distance d.
◦ Les rayons X doivent être réfléchis comme dans un miroir par des ions dans chaque plan.
◦ Les rayons réfléchis par des plans successifs interfèrent de manière constructive.



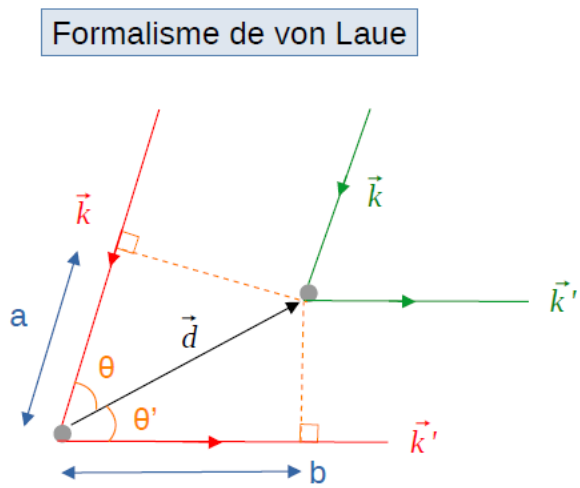
Différence de marche : $\delta = 2a$ et $\sin\theta = \frac{a}{d}$

Condition de Bragg :
$\delta = 2d\ \sin\theta = n\lambda$ (avec n un entier naturel =ordre d'interférence) pour avoir des interférences constructives.

Donner des ordres de grandeur

2. Formulation de von Laue (Physique du solide, Ashcroft p113)

Aucune hypothèse particulière.
Le cristal est composé d'objets microscopiques identiques placés sur les sites d'un réseau de Bravais chacun pouvant réémettre le rayonnement incident dans toutes les directions.
On considère 2 centres incidents séparés par un vecteur $\vec{d}$.



On a

$$cos\theta = \frac{a}{d} \text{ et } cos\theta' = \frac{b}{d}$$

Rayon incident : vecteur d'onde $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{n}$
Puis diffusé avec $\vec{k}' = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{n}'$

Différence de marche :

$$\delta = a + b$$
$$\delta = dcos\theta + dcos\theta'$$
$$\delta = \vec{d}(\vec{n} - \vec{n}')$$

Donc la condition pour avoir des interférences constructives est :
$\vec{d}(\vec{n} - \vec{n}') = p\lambda$ (avec p un entier naturel)
Soit :

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

Considérons maintenant un ensemble de centres diffuseurs sur les sites d'un réseau de Bravais. Puisque les sites du réseau sont décalés les uns des autres par les vecteurs de Bravais $\vec{R}$, la condition pour que tous les rayons interfèrent de manière constructive est que la condition soit valable simultanément pour tous les $\vec{d}$, soit pour tous les vecteurs du réseau de Bravais.
Soit :

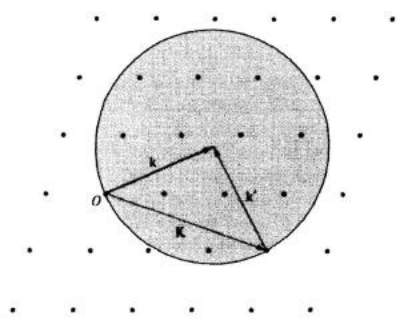
$$\vec{R}(\vec{k} - \vec{k}') = 2\pi p \quad \text{c'est-à-dire} \quad \exp\left(i\vec{R}(\vec{k} - \vec{k}')\right) = 1$$
$$\text{soit } \exp(i\vec{K}.\vec{R}) = 1 \quad \text{avec} \quad \vec{K} = \vec{k} - \vec{k}'$$

L'interférence est constructive si la variation du vecteur d'onde $\vec{K}$ est un vecteur du réseau réciproque.
Il faut absolument faire le lien entre les deux approches : un ensemble de plan réticulaire parallèles et équidistants sont définis par un (unique) vecteur du réseau réciproque et réciproquement !!

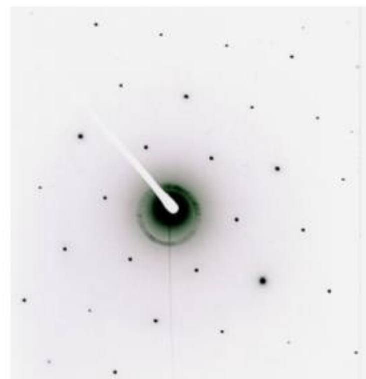
Il faut aussi reparler ici du facteur de structure, qui est responsable de distribution d'intensité des différents « pics » de diffraction.

Pour déduire la structure du cristal à partir des pics observés on utilise la construction d'Ewald

Construction d'Ewald



Diffraction d'électrons par du graphite



Conclusion :

Recap + ouverture sur Ewald si non traité en fin de partie 3.

Questions posées par l'enseignant (avec réponses)

(l'étudiant liste les questions posées, ainsi que les réponses données par l'enseignant. Si certaines réponses manquent, l'enseignant pourra compléter le document)

• Vous dites que la transmittance peut être affectée en amplitude ou en phase, mais on ne parle que d'amplitude vu qu'elle est réelle dans la première partie de votre leçon. Quel effet cela a d'influencer sur la phase et comment on peut le faire ?
→ Le t de chaque fente est multiplié par un nombre complexe $\exp(i\,\alpha\,x)$
Un facteur $\exp(i\,\alpha\,x)$ translate simplement la TF de α.

• A quoi cela pourrait-il servir de changer la phase ? C'est quoi un réseau blasé ? Vous pouvez faire un petit dessin ? → Presque toujours des réseaux en réflexion. Décalage sur enveloppe pas centrée en zéro. On va favoriser un angle de réflexion pour un ordre donné alors que par défaut l'ordre 1 est trop loin pour avoir une efficacité en réflexion. (expliquer les réseaux en échelette, plus intuitif en reflexion, mais plus facile mathématiquement en transmision)

• Comment on fait ça ? Pas plus facile à faire en réflexion le même effet ?
→ Si c'est fait en réflexion en pratique
• Ça donne une phase différente de zéro en sortie ? → Oui.

• Dans votre deuxième partie on fait varier la phase pourtant, dans la formule des réseaux les θ_0 induisent une phase non nulle… Explication ? C'est absolument général dans la théorie de la diffraction en incidence oblique : le phase de la source secondaire (ici la fente) est égale à celle de l'onde incidente (dépendant de x par in facteur lié à $\sin\ \theta_0$)

• Dans la première partie le calcul intégral donne un spectre que vous avez représenté. Ensuite dans un deuxième temps vous faites un calcul de différence de marche, c'est quoi le lien entre les deux ? Il semble que ce soit la même physique, pourquoi pas le même formalisme ?
→ Le θ de la formule des réseaux c'est le θ dans le u de la première partie.

• Même maximas par exemple entre formule des réseaux et calcul de l'intensité dans la première partie ? Si la réponse est non pourquoi ?

• Le 0,047 c'est intrinsèque ou c'est avec les conditions de tracé de la figure ?

• Dans la première partie m c'était indice de la fente, ensuite le m de la diapo diffraction par une fente, est-ce le même ? → Non (Attention aux notations !)

• Combien y a-t-il de maximas ? → Dépend de largeur de la fente.
Pas vraiment ! Dans le modèle du I, il y a toujours une infinité de « pics », car on a fait $\sin\theta = \theta$, même si ils sont l'intensité décroissante. Par contre dans le II, on a gardé le sin, donc il y a un nombre fini de pics dépendant de a et aussi de θ_0.

• Supposons fente infiniment fine, alors ? Supposez que λ soit notablement supérieur au pas du réseau, qu'est ce qu'on va voir ?
→ Plus de diffraction.
Notamment en réflexion, on retrouve seulement la solution où l'ordre d'interférence est nul : $\theta_0 = -\theta$, c'est la réflexion spéculaire.

• Vous avez un epsilon carré dans l'intensité de la fente pourquoi ? → Intensité = amplitude carré.
• Cela vous permet de conserver de l'énergie cette formule de l'intensité ?
• Que faudrait-il faire pour répondre à cette question ? → Calcul intégral.
• Intégrale de quoi ?
La réponse à cet ensemble de questions relève de la théorie générale de la diffraction. Il faut bien que l'énergie électromagnétique de conserve, et donc que la totalité de l'intensité (*stricto sensu* composante du vecteur de Poynting parallèle à l'axe optique) recueillie sur l'écran soit la même que celle qui a traversé la pupille. Par exemple, elle doit notamment être proportionnelle au nombrte de fentes et à la largeur de celles-ci. L'expression générale de la formule de Huygens-Fresnel fait apparaitre un facteur 1/λ (en fait $-i/\lambda$) comme on peut l'établir avec la théorie rigoureuse de la diffraction (cf Born&Wolf ou Jackson, ou poly de J.M. Raimond) ou plus simplement en regardant l'expression du propagateur de Fresnel. Ce facteur, en tenant compte en outre du fait que les ondes secondaires sont ondes sphériques (dont l'amplitude décroit en $1/r$) permet de vérifier la conservation de l'énergie. En tout cas, l'expression de l'intensité maximale ne peut se réduire sans dsicussion à $N^2\varepsilon^2$.

• Vous discutez pour la résolution en nombre de traits : mais quand on résonne pour les appareils c'est en nombre de traits par unité de longueur. Elle est où l'unité de longueur ? Ne joue aucun rôle ?
Nombre de trait par mm = fréquence spatiale du réseau =$1/a$ où a est en mm

• On trouve une condition de Bragg qui ressemble beaucoup à la formule des réseaux sauf qu'au lieu d'avoir des cos on a des sin… Commentaire ? Dans la formule des réseaux, l'angle est mesuré par rapport à la normale. Dans la version de la loi de Bragg présentée, l'angle est mesuré par rappost au plans réticulaires

• Y a-t-il un rapport entre Bragg et von Laue ? cf ci-dessus : c'est la même chose !

Commentaires lors de la correction de la leçon

(l'étudiant note les commentaires relatifs au contenu de la leçon : niveau, sujets abordés, enchaînement, réponses aux questions, etc. L'enseignant relit, et rectifie si besoin)

Dans la définition de la diffraction vous parlez d'éparpillement mais ensuite dans les calculs on parle de pic, pourrait peut-être être reformulée.
Dans cette leçon on peut parler d'autres domaines de la diffraction et ne pas se limiter à des ondes électromagnétiques.
Leçon correcte pour faire une bonne leçon en dire plus sur les cristaux, sur les applications et évoquer les autres domaines en réduisant les calculs en passant par la TF pour les calculs du début.

Partie réservée au correcteur

Avis général sur la leçon (plan, contenu, etc.) :
Ve qui eest fait est à peu près correct, mais il il faut prêter attention aux points délicats qui sont commentés (en Times-Roman bleu) dans le CR ci-dessus.
Il faudrait toutefois arriver à en dire un peu plus sur la diffraction à 3D et peut être aussi s'affranchir du nombre fini de traits .
En revanche, la méthode d'Edwald (pour la reconstruction du réseau) me semble hors sujet et on n'a de toute façon pas le temps d le faire bien.

Notions fondamentales à aborder, secondaires, délicates :
Il fait prêter attention aux multiples entiers (muets ou non) qui jalonnent la leçon : nom, rôle, notation
Il serait aussi utile de savoir discuter l'intensité totale (ne pas mettre dans la leçon mais avoir des réponses correctes pour les questions,) le nombre fini ou infini de modes (à discuter impérativement dans la leçon.
Pour traiter les choses plus formellement et plus efficacement dès le II, on pourrait utiliser les théorèmes sur la transformée de Fourier d'un produit de convolution qui permet de traiter en bloc les cas 1D à 3D et de mieux mettre en exergue les rôles des facteurs de structure et de forme. Pour ce faire on peut admettre la « formule de Poisson » (TF d'un peigne de Dirac= peigne de Dirac) ou l'inférer de l'étude des N fentes (consulter n'importe quel livre traitant de l'optique de Fourier).
Enfin il me semble indispensable d'évoquer (au minimum en intro ou en conclusion) la diffraction des ondes « de matière » (électrons et neutrons notamment).

Expériences possibles (en particulier pour l'agrégation docteur) :
On peut montrer l'exerience diffraction des électrons a une poudre (la diffraction cristalline donne des pics dans des directions discrètes (sélectionnées par la construction de von Laue) et l'orintation aléatoire des cristallites fait « tourner » les pics autour de l'axe sonnant lieu à des anneaux
(seule une fraction des cristallites a une orienation succrptible donnert leieu à une diffraction, les autres transmettent seulement le flux incident). d' une symétrie de révolutioj à l'ensemble.

Bibliographie conseillée :