

LP36 – DIFFRACTION PAR DES STRUCTURES PÉRIODIQUES

26 juin 2020

Aurélien Goerlinger & Yohann Faure

Commentaires du jury

- 2017 : Il faut traiter de diffraction par des structures périodiques et pas seulement d'interférences à N ondes.
- 2015 : Il est important de bien mettre en évidence les différentes longueurs caractéristiques en jeu.
- 2012, 2013, 2014 : Cette leçon donne souvent l'occasion de présenter les travaux de Bragg ; malheureusement, les ordres de grandeur dans différents domaines ne sont pas toujours maîtrisés.
- 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.
- 2008 : Diffraction par des structures périodiques dans différents domaines spectraux.
- 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.
- 2005 : On peut admettre que l'expression mathématique du principe de Huygens-Fresnel est acquise, ainsi que son application au cas d'une ouverture unique, plus particulièrement d'une fente fine.
- 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.
- 2003 : La leçon ne peut pas se limiter à une étude du réseau plan en optique. Il faut donc pouvoir dégager les idées importantes assez rapidement pour pouvoir passer à l'étude d'autres domaines.
- 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.

Niveau : L3

Bibliographie

- | | |
|--|---|
| ✦ <i>Optique Physique</i> , Taillet | → Pour la relation diffraction-TF |
| ✦ <i>Ondes mécanique et diffusion</i> , Garing | → Schéma et application à l'échographie |
| ✦ <i>Cap prépa PSI</i> , Renvoizé | → Pour une approche "classique" des réseaux |
| ✦ <i>Optique</i> , Houard | → Compléments sur les réseaux |
| ✦ <i>Physique des électrons dans les solides</i> , Alloul | → Partie Physique du solide |
| ✦ Ashcroft ou Kittel | → Si jamais le Alloul ne suffit pas |

Prérequis

- Transformée de Fourier
- Interférences
- Huygens-Fresnel et diffraction
- Réseaux cristallins

Expériences



Table des matières

1 Facteurs de forme et de structure	3
2 Réseaux plans unidimensionnels	4
2.1 Présentation et grandeurs pertinentes	4
2.2 Formule des réseaux	5
2.3 Intensité diffractée	5
3 Application à la spectroscopie	7
3.1 Dispersion	7
3.2 Pouvoir de résolution	7
3.3 Limitation réelles du spectro	9
4 Diffraction par une structure cristalline	9
4.1 Réseau de Bravais et transmission	9
4.2 Condition d'interférence : Réseau réciproque	10
4.3 Formulation de Bragg	10
4.4 Construction d'Ewald et méthode des poudres	11
4.5 Remarques diverses	11

Introduction

On a vu dans la leçon précédente que la diffraction par un objet de transmittance $t(X, Y)$ correspondait à la \mathcal{TF} en 2 dimensions de $t(X, Y)$:

$$A(u, v) = C \iint t(x, y) e^{-i2\pi(ux+vy)} dx dy$$

où $u = \frac{x}{\lambda d}$ et $v = \frac{y}{\lambda d}$ si on observe la figure de diffraction sur un écran à la distance d de l'objet (on peut également utiliser une lentille, dans ce cas on remplace d par f' la focale de la lentille dans les expressions de u et v). Or la \mathcal{TF} est un outil particulièrement adapté à l'étude de fonctions périodiques. On va donc s'intéresser dans cette leçon à la diffraction par des structures périodiques.

Il suffit de regarder un DVD pour observer les irisations à sa surface qui trahissent la décomposition spectrale de la lumière ambiante par diffraction sur les sillons gravés sur le DVD. Ainsi, la diffraction par des structures périodiques a une première application importante : la **spectroscopie**, qui consiste à étudier le spectre obtenu par diffraction sur une structure parfaitement connue et d'étudier le spectre pour remonter aux propriétés de la lumière incidente et de sa source.

Cependant, on peut raisonner dans l'autre sens : si on connaît parfaitement la lumière incidente et son spectre, alors l'étude de la figure de diffraction permet de remonter aux propriétés de la structure diffractante. Si l'objet étudié est un cristal, on parle de **cristallographie**.

Dans cette leçon, on va donc commencer par le cas simple d'un réseau unidimensionnel pour ensuite parler de spectroscopie et finir sur la cristallographie.

1 Facteurs de forme et de structure

On se place dans les conditions de Fraunhofer, pour une lumière monochromatique, et on s'intéresse au dispositif des trous d'Young. On les a déjà étudié dans la leçon sur les interférences à division du front d'onde mais on peut également le faire du point de vue de la diffraction dans les conditions de Fraunhofer.

On peut décrire les trous d'Young de façon idéale par un objet de transmittance $t_{\text{struct}}(X, Y) = \delta(X - \frac{a}{2})\delta(Y) + \delta(X + \frac{a}{2})\delta(Y)$ en notant X l'axe reliant les trous, Y l'axe vertical et a la distance entre les trous. Le principe de Huygens-Fresnel dans les conditions de Fraunhofer permet alors d'écrire l'amplitude de l'onde diffractée sous la forme

$$A(u, v) \propto \mathcal{TF}[t_{\text{struct}}(X, Y)](u, v) \propto \cos \pi a u$$

avec $u = \frac{x}{\lambda d}$ et $v = \frac{y}{\lambda d}$. L'intensité diffractée vaut alors

$$I(u, v) = I(x, y) \propto \cos^2 \left(\frac{\pi a x}{\lambda d} \right)$$

Sachant que $2 \cos^2(\theta) = 1 + \cos(2\theta)$, on peut donc écrire I sous la forme

$$I(x, y) = I_0 \left[1 + \cos \left(\frac{2\pi}{\lambda} \frac{ax}{d} \right) \right] \quad (1)$$

On retrouve bien la formule des interférences avec $\delta = \frac{ax}{d}$. Cependant, on n'a jamais des trous idéaux. En effet, les trous ont toujours un rayon b et auraient donc chacun, en étant centré en $(0,0)$, une transmittance définie comme

$$t_{\text{forme}}(X, Y) = \begin{cases} 1 & \text{si } \sqrt{X^2 + Y^2} \leq b \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

La transmission des trous d'Young vaut alors

$$t(X, Y) = \begin{cases} 1 & \text{si } \sqrt{\left(X \pm \frac{a}{2}\right)^2 + Y^2} \leq b \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

On peut alors l'écrire sous la forme d'un produit de convolution :

$$t(X, Y) = (t_{\text{struct}} \otimes t_{\text{forme}})(X, Y) \quad (2)$$

où t_{struct} est le **facteur de structure** et t_{forme} est le **facteur de forme**. On dit alors que l'objet forme un réseau d'amplitude. L'amplitude de l'onde diffractée s'écrit donc sous la forme

$$A(u, v) \propto \mathcal{TF}[t_{\text{struct}}] \mathcal{TF}[t_{\text{forme}}]$$

où le premier terme correspond à des raies d'interfrange $\frac{\lambda d}{a}$ et le second terme correspond à une tache d'Airy. L'intensité diffractée s'écrit donc

$$I(u, v) \propto I_{\text{struct}}(u, v) \cdot I_{\text{forme}}(u, v)$$

I_{struct} rend compte de la structure de l'objet tandis que I_{forme} rend compte de sa forme. pour les trous d'Young,

$$\begin{cases} I_{\text{struct}} \propto \left[1 + \cos \left(\frac{2\pi}{\lambda} \frac{ax}{d} \right) \right] \\ I_{\text{forme}} \propto \text{sinc}^2 \left(\frac{\pi bx}{\lambda d} \right) \end{cases} \quad (3)$$

2 Réseaux plans unidimensionnels

2.1 Présentation et grandeurs pertinentes

Un réseau plan unidimensionnel est un objet diffractant dont la transmittance 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 ou réflexion ainsi que les réseaux de phase et/ou d'amplitude. Ici nous nous intéresserons **aux réseaux d'amplitude par transmission**.

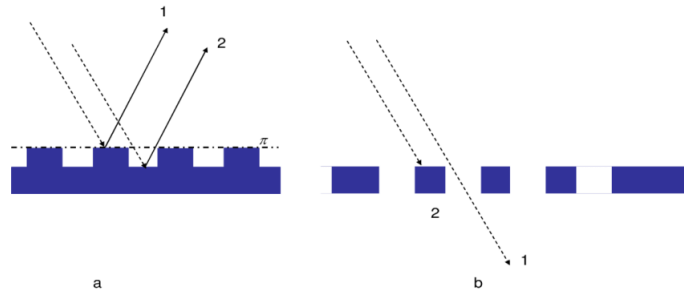
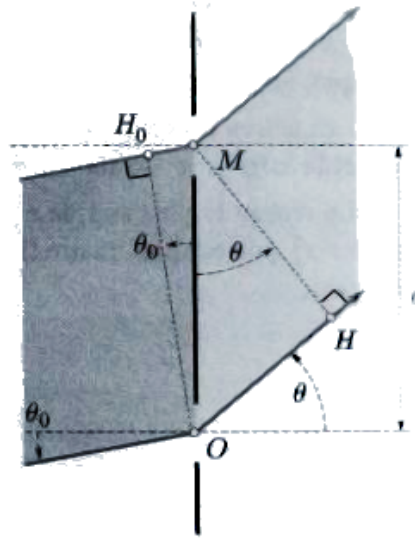


FIGURE 1 – (a) Réseau en réflexion. (b) Réseau par transmission.

Les réseaux sont souvent fabriqués en verre, sur lesquels on a "collé" un métal rayé périodiquement avec une pointe en diamant pour ainsi avoir une alternance de transmission et de réflexion. On peut alors définir plusieurs grandeurs pertinentes :

- la longueur éclairée du réseau $L \simeq 1 \text{ cm}$
- le nombre de fentes éclairées $N \simeq 10-100$
- le pas de réseau $a \simeq 1-10 \text{ } \mu\text{m}$
- le nombre de traits par mm $n = \frac{1}{a} \simeq 50-600 \text{ traits/mm}$

2.2 Formule des réseaux



Considérons un faisceau de rayons incidents parallèles faisant un angle θ_0 avec l'horizontale, et on note θ l'angle que fait le faisceau diffracté avec l'horizontale. La différence de marche entre 2 rayons passant par 2 fentes côte à côte :

$$\delta = (OH) - (H_0M) = a(\sin \theta - \sin \theta_0) \quad (4)$$

On a donc des interférences constructives si θ satisfait la **condition de Bragg** :

$$a(\sin \theta - \sin \theta_0) = p\lambda \quad \text{avec } p \in \mathbb{Z} \quad (5)$$

Cette condition peut être réécrite sous la forme :

$$\vec{a} \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0) = 2p\pi \quad \text{avec } p \in \mathbb{Z} \quad (6)$$

Remarque

On peut visualiser cette condition sur Geogebra.

Cette condition impose une **limitation des ordres disponibles**. Par exemple, en incidence normale, $\sin \theta_0 = 0$ et $\sin \theta = p \frac{\lambda}{a}$. Or le sinus ne peut avoir que des valeurs entre -1 et 1 donc $|p| < \frac{a}{\lambda} < \frac{1}{\lambda n}$.

Ordre de grandeur

Pour $\lambda = 500 \text{ nm}$ et $n = 500 \text{ traits/mm}$, on a $|p| < 4$.

2.3 Intensité diffractée

Intéressons-nous maintenant à l'intensité diffractée par le réseau *unidimensionnel*. D'après le principe de Huygens-Fresnel dans les conditions de Fraunhofer, l'amplitude de l'onde diffractée dans une direction θ pour une onde incidente selon θ_0 vaut :

$$A = K \int t_{\text{réseau}}(X) e^{-i2\pi u X} dX \quad \text{avec } u = \frac{1}{\lambda}(\sin \theta - \sin \theta_0) \quad (7)$$

Pour un réseau unidimensionnel de pas a , la transmittance vaut

$$t_{\text{réseau}}(X) = \sum_{m=0}^{N-1} t_{\text{fente}}(X - ma) = t_{\text{fente}}(X) \otimes \sum_{m=0}^{N-1} \delta(X - ma)$$

donc

$$\begin{aligned}
 A &= K \int t_{\text{fente}}(X) \otimes \sum_{m=0}^{N-1} \delta(X - ma) e^{-i2\pi u X} dX \\
 &= K \left(\sum_{m=0}^{N-1} \int \delta(X - ma) e^{-i2\pi u X} dX \right) \times \left(\int t_{\text{fente}}(X) e^{-i2\pi u X} dX \right) \\
 &= K \left(\sum_{m=0}^{N-1} e^{i2\pi u ma} \right) \times \mathcal{TF}[t(X)](u)
 \end{aligned} \tag{8}$$

Pour calculer l'intensité diffractée, il faut prendre le module au carré de A . Pour le terme de structure, on reconnaît une somme géométrique et on obtient

$$I(u) = I_0 |\mathcal{TF}[t_{\text{fente}}(X)](u)|^2 \times \left(\frac{\sin(N\pi ua)}{\sin \pi ua} \right)^2 = \text{facteur de forme} \times \text{facteur de structure} \tag{9}$$

Pour une fente de largeur b , on sait que $|\mathcal{TF}[t_{\text{fente}}(X)](u)|^2 = \text{sinc}^2(\pi bu)$.

Correspondance paramètres du réseau \leftrightarrow figure de diffraction :

Largeur b de la fente	\leftrightarrow	Taille $\propto \frac{1}{b}$
Distance a entre 2 fentes	\leftrightarrow	Distance $\propto \frac{1}{a}$ entre 2 pics
Taille Na du réseau	\leftrightarrow	Largeur $\propto \frac{1}{Na}$ d'un pic

On peut soit illustrer ça sur Géogebra ou bien s'amuser à faire la manip.

Remarque

On peut aussi faire le raisonnement avec les interférences à N ondes comme vu dans la leçon sur les interférences. Pour rappel, cette méthode consiste à exprimer l'onde diffractée par la fente $n + 1$ en fonction de l'onde diffractée par la fente n via la différence de marche $\delta = a(\sin \theta - \sin \theta_0)$. On peut alors exprimer l'onde diffractée par la fente n en fonction de celle diffractée par la première fente pour obtenir une somme géométrique et *in fine* la formule pour l'intensité de structure.

On note $S(u) = \left(\frac{\sin(N\pi ua)}{\sin \pi ua} \right)^2$ le facteur de structure dans l'intensité. Alors en incidence normale :

- $S(u) = S(\theta)$ est maximal pour $\sin \theta = \frac{\lambda p}{a}$
- $S(\theta) = 0$ pour $\sin \theta = \frac{\lambda p}{Na}$
- $S(\theta = 0) = N^2$

On peut de nouveau voir ça sur Géogebra.



Diffraction de la lumière d'une lampe Hg par un réseau de traits



Faire l'image d'une fente (assez fine mais pas trop pour avoir de la lumière) sur le mur ou sur un écran par une lentille convergente de focale adaptée : pas besoin d'une image de 3 m de haut, mais pas de 2 cm non plus. Placer un filtre interférentiel sur le faisceau de la lampe à Hg afin de ne sélectionner qu'une seule raie. Nous avons choisi la raie verte car c'est ce que nous préférons mais vous pouvez choisir le doublet jaune ou la raie bleu (mais moins

lumineuse).

Montrer la diffraction (en monochromatique grâce au filtre) et montrer les ordres 0, +1, -1 etc...

Enlever le filtre et montrer que le phénomène est dispersif : les raies de la lampe à vapeur de mercure ne sont pas diffractées avec le même angle. Si vous voulez voir les deux raies de Hg dans l'UV, placer une feuille blanche sur l'écran/mur.

Noter que le rouge est plus dispersé que le bleu, c'est le contraire du prisme.

3 Application à la spectroscopie

Grâce à la condition de Bragg, nous avons vu que l'angle de diffraction dépendait de la longueur d'onde utilisée. Ainsi, en connaissant par ailleurs toutes les caractéristiques du réseau diffractant, nous pouvons déterminer les λ présents dans un rayonnement en étudiant la figure de diffraction. C'est le principe d'un spectromètre à réseau ! On en profite aussi pour montrer un magnifique goniomètre et/ou l'intérieur d'un vrai spectro !

3.1 Dispersion

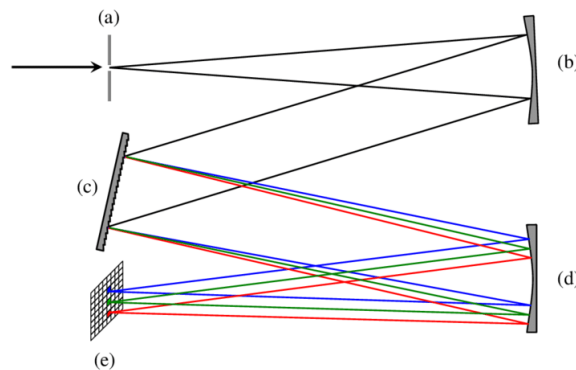


FIGURE 2 – Principe d'un spectromètre à réseau à réflexions

Pour un réseau éclairé en incidence normale, on a $\sin \theta_p = \frac{p\lambda}{a}$ et pour les premiers pics on a directement $\theta_p = \frac{p\lambda}{a}$. On a donc une relation **linéaire** entre l'angle de déviation et λ . On rappelle que pour le prisme c'est loin d'être le cas puisque $n(\lambda) = A + \frac{B}{\lambda^2}$ (loi de Cauchy).

De plus, contrairement au prisme, le réseau possède plusieurs ordres et dévie plus le rouge que le bleu.

Pour quantifier la dispersion d'un réseau on définit le **pouvoir de dispersion** : $D = \frac{d\theta}{d\lambda}$. Pour un réseau on a

$D = \frac{p}{a \cos \theta_p}$ pour un ordre p donné. Pour des angles faibles on a $D = \frac{p}{d} = cst$. La déviation est alors proportionnelle à la longueur d'onde, ce qui est bien pour faire les mesures. On parle de **spectre normal**. D augmente avec p et diminue avec a .

3.2 Pouvoir de résolution

On suppose ici une fente source infiniment fine, ainsi seule la seule limite de diffraction est due à la diffraction. Le critère de Rayleigh stipule que l'on ne peut séparer deux tâches de diffractions (ici de signaux qui n'interfèrent pas) que si le maximum de l'un correspond, au plus proche, au minimum de l'autre.

Le **pouvoir de résolution** $PR = \frac{\lambda}{\Delta\lambda}$ correspond au plus petit écart de longueur d'onde mesurable par le spectromètre (normalisé of course).

Si on fait quelques calculs, on a, avec N le nombre de traits et L la longueur, et n la densité de trait :

Le maximum du pic principal d'ordre p est observé pour $\sin \theta'_p = \sin \theta + p \frac{\lambda}{a}$. La première annulation de l'amplitude correspond à $\sin(\theta'_p + \epsilon) = \sin \theta'_p \simeq \frac{\lambda}{aN}$. L'écart, en variable $\sin \theta'_p$ entre le max et le premier min vaut donc en valeur absolue $\delta_1(\sin \theta'_p) = \frac{\lambda}{aN}$. La relation de Bragg donne par ailleurs

$$\sin \theta'_p(\lambda) = \sin \theta + p \frac{\lambda}{a} \quad \text{et} \quad \sin \theta'_p(\lambda + \Delta\lambda) = \sin \theta + p \frac{\lambda + \Delta\lambda}{a}$$

Pour un ordre p l'écart en variable $\sin \theta'_p$ entre les max de λ et $\lambda + \Delta\lambda$ vaut donc $\delta_2(\sin \theta'_p) = p \frac{\Delta\lambda}{a}$. En comptant tout positif, les raies de λ et $\lambda + \Delta\lambda$ sont séparées si

$$\delta_2(\sin \theta'_p) > \delta_1(\sin \theta'_p) \iff p \frac{\Delta\lambda}{a} > \frac{\lambda}{aN} \iff \frac{\Delta\lambda}{\lambda} > \frac{1}{pN} = \frac{\Delta\lambda_{min}}{\lambda}$$

On aboutit finalement à l'expression du pouvoir de résolution :

$$\boxed{PR = pN = pLn} \quad (10)$$



Animation géogebra



La taille d'un pic est $\frac{2\lambda}{Na}$, donc la largeur à mi hauteur peut être prise à $\frac{\lambda}{Na}$. La distance entre les maxima à λ et à $\lambda + \Delta\lambda$ est de $\frac{m}{a}\Delta\lambda$ à l'ordre m , et le critère de Rayleigh donne

$$\frac{m}{a}\Delta\lambda > \frac{\lambda}{Na} \Rightarrow \frac{\lambda}{\Delta\lambda} < mN \quad (11)$$

On définit alors le pouvoir de résolution comme $PR = nM$.

OdG : Pour l'ordre $p = 1$, $L = 20\text{cm}$, $n = 500$ traits/cm, on a $N = 10^4$ et $RP=10^4$, soit 0.06 nm pour une longueur d'onde de 600. On est large pour le double du Sodium.



Doublet du sodium au spectro/au Gognio

☞ Sextant



Montrer que le doublet est résolu.

Cependant, avec une résolution aussi bonne, on se doute bien que cette résolution n'est que théorique. En effet, ce calcul est mené pour une fente infiniment fine donc ne laissant passer aucune lumière. Un système réel possède des fente de largeur finie et le pouvoir de résolution diminue. Le pouvoir de résolution réel reste tout de même supérieur à celui d'un prisme.

3.3 Limitation réelles du spectro

- En pratique, si on monte trop haut dans les ordres d'interférences, on peut observer un **recouvrement des spectres**. Cela arrive lorsque $\theta_{p+1}^{\text{bleu}} < \theta_p^{\text{rouge}}$. En pratique on le voit entre l'ordre 2 et 3 ou 3 et 4
- Comme on le voit sur GéoGebra avec { diffractions + interférences }, la majorité de la luminosité est contenue dans l'ordre 0 qui, par définition, ne présente pas de décomposition du spectre.. On manque de luminosité dans les modes d'intérêt (p non nul). Pour pallier à ça on utilise des réseaux en réflexion **blazés**, qui sont une suite de "marches" dont l'angle définit l'angle de luminosité maximale. Un autre intérêt, c'est que comme on a pu le voir le pouvoir de résolution est meilleur pour les grands ordres... On peut donc diriger toute la lumière dans un ordre supérieur pour faciliter la mesure.

En effet, pour un réseau de fentes de largeur b et de pas a , Le facteur de forme intervenant dans l'intensité vaut $\text{sinc}^2(\pi bu)$. Cependant, le sinus cardinal est une fonction qui décroît rapidement dont le premier zéro est en $u = \frac{1}{b}$ (donc $x = \frac{\lambda f'}{b}$). Avec le facteur de structure, on a ainsi des pics en $x_p = pf' \frac{\lambda}{a}$ donc la hauteur suit la courbe du sinus cardinal. Le pic le plus intense est donc en $x = 0$, *i.e.* l'intensité est concentrée en $x = 0$ qui n'est pas vraiment un zone intéressante.

On veut donc décaler le sinus cardinal pour que l'intensité soit concentrée sur les pics qui nous intéressent, c'est-à-dire on veut un facteur de forme pour l'amplitude de l'onde diffractée de la forme $\text{sinc}(\pi b(u - u_0))$. Ce retard dans l'espace de Fourier se traduit par une modulation dans le domaine spatial : il faut donc

$$t_{\text{forme}}(X) = t_{\text{fente}}(X)e^{iX u_0}$$

Concrètement, ça se traduit par la réalisation d'un déphasage $\propto X$: c'est un réseau **blazé**, donc le motif ressemble à une lame de cutter avec une hauteur de la forme $h(X) = h_0 + X \tan(\alpha)$ où α et h_0 sont des constantes. On a alors $u_0 = \frac{2\pi \Delta n \tan \alpha}{\lambda}$.

4 Diffraction par une structure cristalline



Diffraction des électrons sur le graphite

⚡ MP26



On sort la démonstration au graphène, et on montre ce qu'il se passe. On fera les mesures à la fin de la leçon.

4.1 Réseau de Bravais et transmission

La structure en 3D d'un cristal est décrite par :

- **Un motif** : une maille élémentaire, ce qui va se répéter dans l'espace (plusieurs choix, maille conventionnelle, de Wigner-Seitz, etc.). On la décrit par des vecteurs $\vec{\delta}_i$ par rapport à un noeud du réseau
- **Un réseau** : comment se répète le motif, c'est l'expression de la périodicité, qui relie les noeuds du réseau. On le décrit par les vecteurs de base et alors

$$\vec{R}_{n_1, n_2, n_3} = \vec{R}_i = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad n_j \in \mathbb{Z}$$

On nomme les \vec{a}_j les vecteurs primitifs du réseau. Il n'existe que 14 types de réseaux de Bravais à 3D, 5 à 2D.

Pour reconstituer un cristal, on place une origine, on forme ensuite les noeuds du réseau par translation de vecteur \vec{R}_i puis on place le motif $\vec{\delta}_i$ sur tous les noeuds. On peut finalement écrire les positions de notre cristal.

On peut écrire, si on nomme t_{motif} la transmission d'un motif :

$$t = t_{\text{motif}} \otimes \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{R}_i)$$

4.2 Condition d'interférence : Réseau réciproque

On cherche une conditions d'interférences constructives. Pour ce faire, on calcule la distribution de lumière. On a naturellement par transformée de fourier, avec $\vec{\Delta k} = \vec{k} - \vec{k}'$, où \vec{k} est le vecteur d'onde de l'onde incidente et \vec{k}' celui de l'onde diffractée :

$$A = A_0 \mathcal{TF}(t_{\text{motif}}) \sum_i e^{-i\vec{\Delta k} \cdot \vec{R}_i} \quad (12)$$

On a donc interférence constructive dans la direction portée par $\vec{\Delta k}$ si et seulement si

$$\exists p \in \mathbb{Z} / \vec{\Delta k} \cdot \vec{R}_i = 2p\pi \quad (13)$$

On défini alors le réseau réciproque \mathcal{G} comme l'ensemble des vecteurs \vec{G} tels que

$$\forall \vec{G} \in \mathcal{G}, \exists p \in \mathbb{Z} / \vec{G} \cdot \vec{R} = 2p\pi \quad (14)$$

La condition d'interférence est donc $\vec{\Delta k} \in \mathcal{G}$.

La structure de \mathcal{G} est aussi celle d'un réseau cristallin

En effet on peut aussi lui trouver des vecteurs de base grâce à l'habile formule suivante :

$$\vec{b}_i = 2\pi \frac{\vec{a}_j \wedge \vec{a}_k}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)} \quad \text{et } \forall \vec{G} \in \mathcal{G}, \exists (m_1, m_2, m_3) \in \mathbb{Z}^3 / \vec{G} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 + m_3 \vec{b}_3 \quad (15)$$

On a parlé des conditions de diffraction, mais pour cela il faut en premier lieu qu'il y ait diffraction, or la distance interatomique est de l'ordre de 1 Å donc il faut des rayons X (ou des électrons) pour pouvoir diffracter.

4.3 Formulation de Bragg

Bragg (PN 1915) suppose en 1913 que la lumière incidente se réfléchit sur les plans réticulaires. La différence de marche entre deux faisceaux issus de réflexions sur des plans successifs (on a ici un réseau par réflexion mais on continuera à noter a la distance entre deux plans) s'écrit, dans le cadre d'interférences constructives

$$\delta = 2a \sin \theta \quad (16)$$

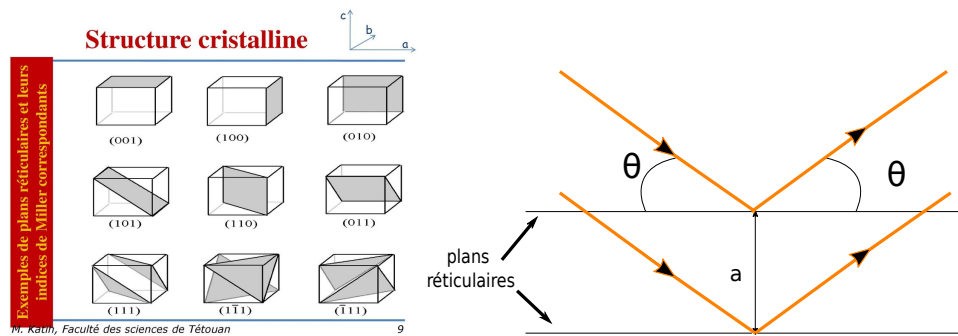


FIGURE 3 – On considère le cristal comme une succession de plans réticulaires séparés de a , c'est à dire un réseau en réflexion.

4.4 Construction d'Ewald et méthode des poudres

Nous, ce que l'on veut faire, c'est remonter à la structure d'un cristal à partir de sa figure de diffraction. C'est utile car cela permet de mieux comprendre ses propriétés physicochimiques.

Le sens forme théorique du réseau \rightarrow construction du réseau réciproque peut se faire, par exemple, avec la méthode de la sphère d'Ewald :

https://fr.wikipedia.org/wiki/Sphère_d'Ewald

Le sens inverse se fait généralement par la méthode de la poudre : on concasse en poudre le solide à étudier, de façon à ce que l'orientation des grains soit parfaitement aléatoire. On envoie alors un rayon incident selon la direction \vec{k} , créant ainsi une symétrie cylindrique. La figure de diffraction est alors naturellement un ensemble de cercles, comme dans l'expérience introductive du graphène.

On détermine le réseau réciproque par énumération des réseaux de bravais, et on en déduit le réseau réel.



Banc hyperfréquences et diffraction sur un réseau



Montrer la forme de la diffraction des ondes centimétriques sur un réseau de démonstration, comme par exemple les modèles moléculaires de CFC de la collection.

4.5 Remarques diverses

Couleur et interférences :

les opales doivent leur couleur à la diffraction sur le réseau qu'elles contiennent. Il en va de même pour certains papillons.

Prix nobels :

Von Laue et Bragg en 1914 et 1915, Röntgen en 1901 pour les rayons X.

exemple sur la CFC :

$$\text{CuZn, } \vec{k} = \frac{2\pi}{a}(h\vec{x} + k\vec{y} + l\vec{z}).$$

$$A(\vec{k}) = f_{\text{Cu}} + (-1)^{h+k+l} f_{\text{Zn}} \quad \text{Dans le cas ordonné}$$

On fait intervenir une permutation et une probabilité x si on est désordonné.