

LP 20 : Diffraction par des structures périodique

Nicolas Chastrette

Avril 2020

Pour nous

Rapport du jury

- **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

biblio

- Houard
- Taillet optique physique
- ashcroft physique des solides (chap 6 court et lisible))

0.1 prérequis

- Diffraction de Fraunhofer
- Fentes d'Young

Introduction

Nous avons vu dans le chapitre diffraction que ce phénomène est caractéristique de la nature ondulatoire d'un rayonnement. Il est lié à la nature de ce rayonnement et de l'objet qui le diffracte. Nous pouvons donc nous servir de ce phénomène pour étudier soit la nature d'un rayonnement en connaissant bien l'objet diffractant, soit la géométrie de l'objet en connaissant le rayonnement utilisé. Nous allons dans un premier temps étudier l'effet de juxtaposition de fentes sur le phénomène de diffraction, puis étudier l'effet dispersif d'un réseau sur la lumière et pour finir à partir d'un rayonnement connu remonter aux propriétés de l'objet connus en l'appliquant à la diffraction des rayons X par un cristal.

1 Diffraction des ondes lumineuses par un réseau

1.1 Définition d'un réseau plan

Un réseau plan est un objet diffractant dont la transmittance varie périodiquement dans l'espace. Il est constitué de N "traits" semblables parallèle distant d'un pas d , appelé pas du réseau, et possède une longueur totale L grande devant d . On distingue deux types de réseau

- les réseaux par transmission qui sont typiquement une alternance de traits transparent et opaques
- les réseaux par réflexion qui sont généralement obtenus par des gravures dans un métal

Pour pouvoir comparer deux réseaux, il faut introduire la grandeur $N_L = N/L$ le nombre de fentes par unité de longueur. De nos jours les réseaux usuels possèdent de 50 à 600 traits par mm. Les réseaux (On verra pourquoi plus tard) les plus performants ont 5000 traits par mm.

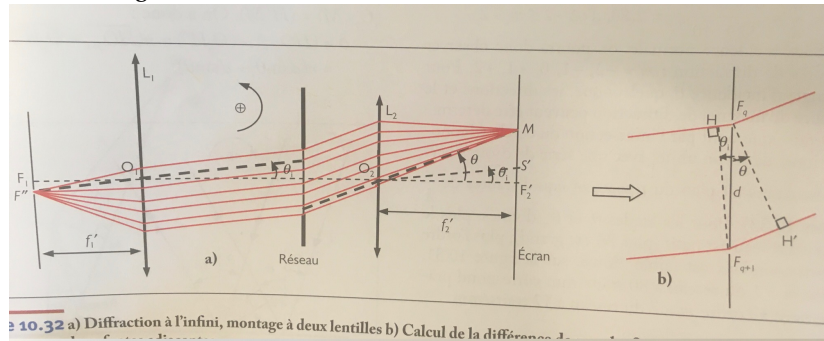
Lorsqu'on regarde un CD (dont les sillons de gravures se comportent comme des réseaux) éclairé en lumière blanche, on observe que la lumière diffractée forme des

bandes colorées. Les structures périodiques fines présentent dans les ailes de papillons ou des plumes de Paon constituent également des réseaux de diffractions qui sont responsables de changement de couleurs observé de ces animaux quand ils sont regardés sous différents angle. On va chercher maintenant à expliquer ce phénomène.

1.2 Loi des réseaux

On cherche une relation donnant le max de l'intensité lumineuse en fonction des paramètres du problème.

Considérons dans un premier temps que le réseau est composé de fentes infiniment fines. (la répartition angulaire associée à la diffraction est uniforme) Considérons le montage suivant



p317)

Le réseau est éclairé par une onde plane monochromatique sous l'angle d'incidence θ_i . Toutes les ondes qui interfèrent au point M émergent sous l'angle θ en sorti du réseau. La différence de marche entre deux ondes diffractées par deux fentes adjacentes du réseau est $\delta = (SF_{q+1}M) - (SF_qM) = d(\sin(\theta) - \sin(\theta_i))$. Il y a interférence constructive si $2\pi \frac{\delta}{\lambda} = 2\pi m$, soit si

$$\sin \theta_m = \sin \theta_i + \frac{m\lambda}{d} \quad (1)$$

avec m entier relatif. m est appelé ordre de diffraction (le cas $m = 0$ correspond à l'image géométrique de la fente source par le réseau). En pratique il y a une limite sur m entier relatif la fonction sinus étant bornée par $[-1, 1]$, les ordres de diffractions sont en nombre limités. Ils doivent respecter :

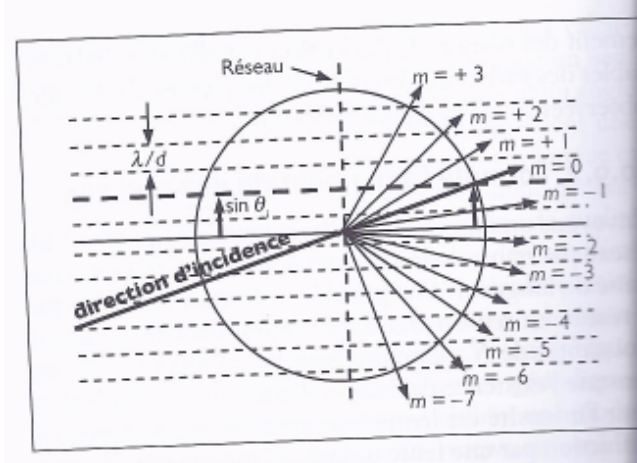
$$\left| \sin \theta_i + m \frac{\lambda}{a} \right| \leq 1 \quad (2)$$

Ordres de grandeur : incidence normale

- $N_L = 300 \text{ traits/mm}$
- $\lambda = 532 \text{ nm}$ (laser vert)

$$\Rightarrow m_{max} = \frac{1}{N_L \lambda} = 6.3 \rightarrow 13 \text{ tâches de diffraction.}$$

La représentation graphique de ces solutions est donnée par



On voit ici qu'un réseau disperse la lumière. (Un angle d'observation une longueur d'onde \Rightarrow les ailes du papillon changent de couleur quand on bouge la tête) Maintenant que nous avons montré l'existence de maxima d'intensité que se passe-t-il entre les différents maxima ?

2 Intensité diffractée

2.1 expression dans le cas des fentes infiniment fines

R. Taillet Optique physique, p103,

Le champ diffracté par la q^{ieme} fente du réseau est

$$A_q = A_0 e^{i\delta\phi_q}$$

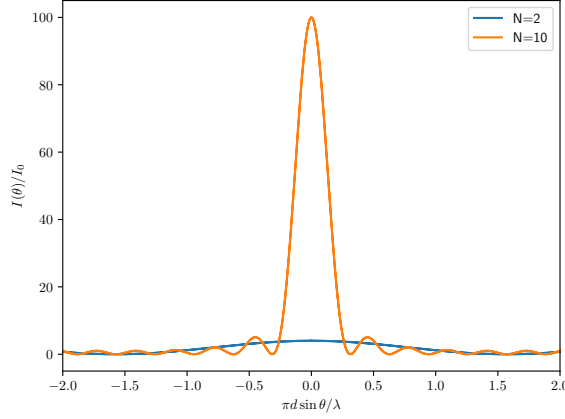
où $\delta\phi_q$ est la différence de marche entre le q^{ieme} et le 1^{er} , $\delta\phi_q = (q-1)d(\sin\theta + \sin\theta_i)$, ce qui correspond à un déphasage $\Delta\phi_q = k\delta\phi_q = (q-1)\frac{2\pi d}{\lambda}(\sin\theta - \sin\theta_i)$

La seconde lentille recombine tous les rayons, l'amplitude totale vaut alors,

$$A = \sum_{q=1}^N A_0 e^{i\delta\phi_q} = A_0 \sum_{q=1}^N \left(e^{2\pi i d(\sin\theta - \sin\theta_i)/\lambda} \right)^{(q-1)} = A_0 \frac{1 - \exp(2\pi i N d(\sin\theta - \sin\theta_i)/\lambda)}{1 - \exp(2\pi i d(\sin\theta - \sin\theta_i)/\lambda)} \quad (3)$$

L'intensité vaut alors

$$I = A \cdot A^* = I_0 \frac{\sin^2(N\pi d(\sin\theta - \sin\theta_i)/\lambda)}{\sin^2(\pi d(\sin\theta - \sin\theta_i)/\lambda)} \quad (4)$$



On représente cette fonction sur la figure. On remarque que plus N est élevé, plus

- pics plus fins
- d'amplitude plus élevée
- avec moins d'oscillations entre pics

D'après l'équation 4, I est maximal quand son dénominateur s'annule, soit quand $\pi d(\sin \theta - \sin \theta_i)/\lambda = p\pi$ ce qui nous permet de retrouver la formule des réseaux en transmission. Les pics sont donc espacés de $\Delta\theta = \lambda/d$

Proche des pics $\sin(\pi d(\sin \theta - \sin \theta_i)/\lambda) \approx (\pi d(\sin \theta - \sin \theta_i)/\lambda)$, donc l'équation 4 devient $I = I_0 N^2 \text{sinc}^2(\pi d(\sin \theta - \sin \theta_i)/\lambda)$. Donc dans le cas N grand la largeur du pic est $\delta\theta \sim \frac{\lambda}{Nd}$.

On définit la finesse comme $\mathcal{F} = \frac{\delta\theta}{\Delta\theta} = \mathcal{N}$. On retrouve ici que plus N est grand plus les pics sont fins.

2.2 Cas d'un réseau constitué de fente de largeur a

[approche que j'aime bien sinon taitel p153](#) Un réseau de traits d'épaisseur a a une transparence en amplitude qui s'exprime comme le produit de convolution de la transparence du réseau de traits infiniment minces par une fonction porte de largeur a que nous noterons. L'amplitude diffractée par ce réseau est donc le produit des transformées de Fourier de chaque terme :

$$A = A_0 a \text{sinc}\left(\pi a \frac{\sin \theta - \sin \theta_i}{\lambda}\right) \frac{1 - \exp(2\pi i N d(\sin \theta - \sin \theta_i)/\lambda)}{1 - \exp(2\pi i d(\sin \theta - \sin \theta_i)/\lambda)}$$

d'où

$$I = I_0 a^2 \text{sinc}^2\left(\pi a \frac{\sin \theta - \sin \theta_i}{\lambda}\right) \frac{\sin^2(N\pi d(\sin \theta - \sin \theta_i)/\lambda)}{\sin^2(\pi d(\sin \theta - \sin \theta_i)/\lambda)} \quad (5)$$

On retrouve alors l'expression du réseau de fente fines 4 modulée par un terme en sinus cardinal prenant en compte la largeur finie des fentes. ([si temps petit script python](#))

- d contrôle le nombre de pics
- a contrôle l'enveloppe (diffraction par une fente en sinc)
- N contrôle le profil des pics : fins, d'amplitude élevée et sans oscillations entre lorsque N augmente

On remarque dans la formule des réseaux que l'angle du maximum d'intensité dépend de la longueur d'onde. On peut alors se servir de cette propriété pour mesurer une longueur d'onde.

3 Spectrométrie

3.1 Mesure de la position du doublet du sodium

[Sextant pour manip avec étalonnage p222 schéma manip p216](#) On mesure au régle y_k la position de chaque raie. D distance écran-réseaux. $\tan \theta_m \simeq \sin \theta_m = \frac{y_k}{D} = \frac{m\lambda_k}{d}$ en incidence normale. d'où $\lambda_k = d \frac{y_k}{Dm}$

Quelles sont les limitations d'un spectromètre ?

3.2 Pouvoir dispersif

[Houard](#) Effet de la position des raies : On définit $\mathcal{D} = \frac{d\theta_m}{d\lambda}$. À partir de la formule des réseaux on montre $\cos \theta_m d\theta_m = \frac{m}{d} d\lambda$, d'où

$$\mathcal{D} = \frac{m}{d \cos \theta_m} \simeq \frac{m}{d}$$

. (il faut alors que l'angle soit faible ce qui est vrai pour des ordres 1 ou 2)

Pour augmenter \mathcal{D} il faut

- augmenter l'ordre de diffraction mais à ce moment là on risque de ne plus être dans la partie linéaire.
- diminuer d (pas trop faut rester dans la zone linéaire du sinus)

Si réseau de 300 fentes par mm et ordre 1 (comme ça on est linéaire): $\mathcal{D} = 300000 \text{ rad/m}$ (soit 1/3 du pouvoir dispersif du commerce.)

3.3 Pouvoir de résolution

Le critère de Rayleigh dit que deux longueurs d'onde proche sont résolues si pour un ordre donné, la largeur des franges est inférieure à leur séparation, c'est-à-dire $\delta\theta \sim \theta_1 - \theta_2$ soit

$$\frac{\bar{\lambda}}{Nd} \sim \leq \frac{m\lambda_1}{d} - \frac{m\lambda_2}{d}$$

où $\bar{\lambda}$ est la longueur d'onde moyenne. On définit le pouvoir de résolution

$$R = \frac{\bar{\lambda}}{\Delta\lambda}$$

($\Delta\lambda$ différence de longueur d'onde)

$$R = Np$$

Le pouvoir de résolution ne dépend pas du pas d du réseau. Si l'on veut augmenter la résolution du spectroscope, il faut augmenter l'ordre de diffraction ou le nombre de fentes éclairées (par la diminution du pas du réseau ou l'augmentation de la largeur du réseau éclairée)

Ordre de grandeur : Un réseau de 300 traits/mm éclairé sur 1 cm possède : 3000 traits donc utilisé à l'ordre 1 $R = 3000$ (à comparer avec ceux du commerce valant 10^4), permet de mesurer à 589 nm $\delta\lambda \sim 0,2$ nm, donc de résoudre le doublet du sodium.

Dans cette partie nous nous sommes servis des propriétés connues du réseau pour pouvoir étudier les propriétés de la source lumineuse. Nous allons maintenant voir comment l'étude d'un motif de diffraction permet de remonter aux propriétés de la matière.

4 Application à l'étude de la matière

4.1 Rappels de cristallographie

Les solides cristallins sont des arrangements organisés d'atomes ou d'ions, Ils forment des réseaux périodiques tridimensionnels, construits sur la base d'une structure élémentaire appelée maille primitive, qui se répète dans toutes les directions de l'espace pour former le cristal. Cette maille primitive est caractérisée par un atome/ion de référence O et trois vecteurs de base indépendants $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$. Il est alors possible de repérer n'importe quel atome X dans l'espace en réalisant des combinaisons linéaires de chaque vecteur de base. Les atomes sont alors présents sur les nœuds d'un réseau appelé réseau de Bravais, de base $(0, \vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$: $\vec{r}(X) = n_a \vec{a} + n_b \vec{b} + n_c \vec{c}, n_a, n_b, n_c \in \mathbb{Z}^3$

Les distances interatomiques typiques dans les cristaux sont de l'ordre de l'angström. Pour réaliser de la diffraction sur de telles structures, il faut alors utiliser des longueurs d'onde du même ordre de grandeur : cela correspond au domaine des rayons X.

Une telle périodicité, dans le cas d'un cristal sans défaut de structure ou de composition, met en évidence des rangées d'atomes alignés équidistants et des plans contenant trois atomes non alignés, ou plans réticulaires. On parle de famille de plans réticulaires lorsque ces plans sont tous parallèles entre eux, et si tous les atomes du cristal sont définis dans cette famille.

4.2 Formulations de Bragg et de Von Laue

L'utilisation des rayons X pour sonder les cristaux remonte au début du XX^e siècle, avec Max Von Laue qui obtint le prix Nobel de Physique en 1914 pour avoir été le

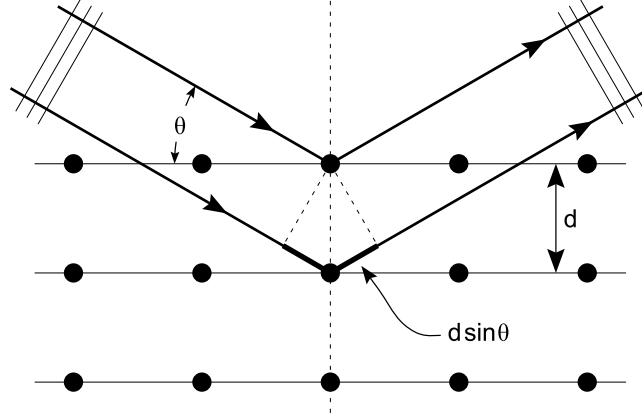
premier à avoir abordé ce principe. En parallèle, William Henry Bragg et William Lawrence Bragg (père et fils) ont également réalisé des travaux similaires, et ont obtenus le prix Nobel de Physique en 1915 pour leur technique de cristallographie à rayons X permettant de déterminer les structures de nombreux composés. M. V. Laue imagina que les atomes d'un cristal se comportaient de manière analogue vis-à-vis d'un rayonnement X que les fentes d'un réseau. Chacun de ces atomes diffuse le rayonnement incident de vecteur d'onde \vec{k}_0 dans toutes les directions. Puisqu'un cristal est un agencement régulier d'atomes, il se produit des interférences entre les ondes diffusées de vecteurs d'onde \vec{k} par tous les atomes du cristal, la figure ainsi obtenue est directement liée à la structure interne du cristal. Les conditions d'interférences constructives font alors intervenir la structure de la maille cristalline via les conditions de Von Laue :

$$\vec{K} \cdot \vec{a} = 2\pi m_a$$

$$\vec{K} \cdot \vec{b} = 2\pi m_b$$

$$\vec{K} \cdot \vec{c} = 2\pi m_c$$

Avec $\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}_0$ et $(m_a, m_b, m_c) \in \mathbb{Z}^3$. On peut montrer que ces conditions conduisent à différentes relations faisant intervenir les différents angles / distances caractéristiques du cristal, mais nous allons plutôt utiliser la formulation de Bragg sur les interférences des rayons X, qui est équivalente à celle de Von Laue, (Ashcroft) puisqu'elle part des mêmes considérations physiques d'interférences constructives.



Bragg a montré qu'on pouvait ramener le problème de diffusion sur chaque atome du réseau comme un problème de réflexion sur les plans réticulaires d'une même famille. Les vecteurs d'ondes \vec{k}_0 et \vec{k} doivent être de même norme et symétrique par rapports aux plans réticulaires. En outre, il apparaît clairement par symétrie que deux rayons « réfléchis » par le même plan réticulaire n'ont aucune différence de marche l'un avec l'autre. Seuls les rayons réfléchis par des plans réticulaires différents vont pouvoir interférer ($\vec{K} \cdot (\vec{r} - \vec{r}_0) = 0$ selon Von Laue). Sur la figure, il apparaît que les deux rayons réfléchis par les deux plans successifs ont une différence de marche $\delta = 2d \sin \theta$ (en considérant le milieu d'indice unité). Les conditions

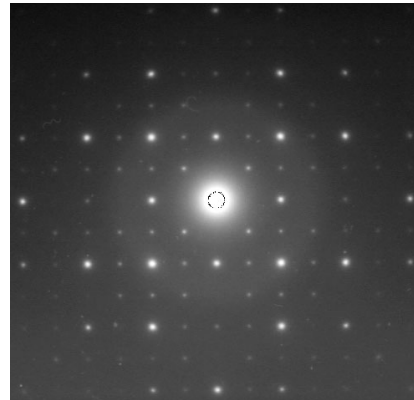
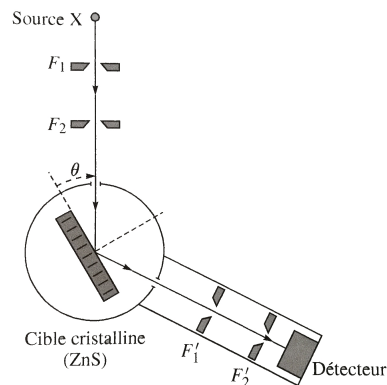
d'interférences constructives donnant $\delta = 2m\pi, m \in \mathbb{Z}$ on en déduit la célèbre formule de Bragg pour la diffraction des rayons X par des cristaux :

$$2d \sin \theta = m\lambda$$

. Grâce à cette relation, on est en mesure de lier l'angle de mesure θ , la longueur d'onde des rayons X utilisés λ et la distance entre deux plans réticulaires successifs d .

4.3 application à la cristallographie

Plusieurs techniques de cristallographie existent, parmi lesquelles on trouve la méthode de Davidsson et Germer (schéma), qui consiste à venir sonder un cristal avec un faisceau X fixe, puis à venir tester les différentes incidences possibles en faisant tourner le cristal de différents angles pour modifier l'angle d'incidence du faisceau. On recueille ensuite la figure de diffraction sur un écran/capteur sensible aux rayons X. La figure typiquement obtenue est comme celle de la figure. La disposition des impacts est directement proportionnelle à la transformée de Fourier de la structure cristalline sondée : on peut donc en tirer les différentes distances / angles recherchés.



perez

Il existe aussi la méthode de Debye-Scherrer, dite méthode des poudres, utilisant le cristal réduit en poudre fine, mais dont les grains sont suffisamment gros par rapport aux distances interatomiques du réseau. Cela permet de sonder en une mesure tous les plans cristallins possibles, puisque l'orientation des grains est aléatoire dans le contenant.

Conclusion

Dans cette leçon nous avons vu l'action d'un réseau sur une onde lumineuse. Nous avons mis en évidence qu'un réseau disperse la lumière ce qui permet d'analyser les propriétés de l'émission lumineuse. Nous avons aussi vu que les propriétés diffractantes du réseau permettent aussi de remonter aux caractéristiques de ce réseau ce qui est utilisé pour l'analyse de solides grâce aux rayons X.

Les propriétés que nous avons vues dans cette leçon sont vraies pour toutes les ondes, y compris acoustiques (permet la focalisation d'un faisceau échographique par exemple) ou les ondes de Broglie associées aux particules que l'on peut faire diffracter sur de la matière pour sonder d'autres propriétés de cette matière. Par exemple la diffraction d'électrons permettant de sonder les nuages atomiques.