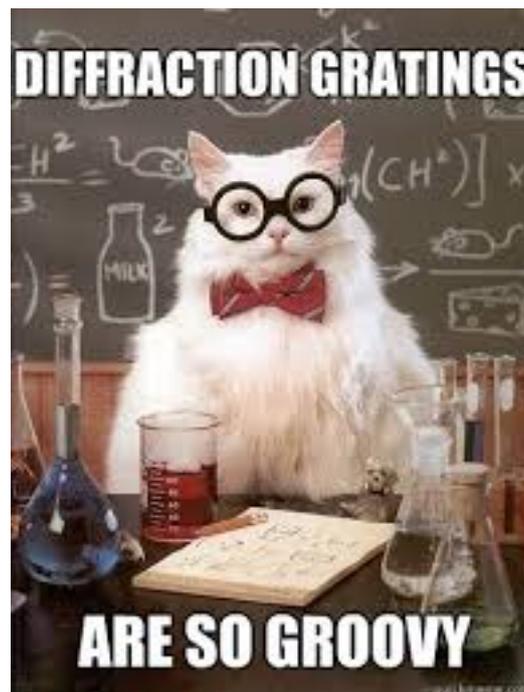


LP 36: Diffraction par des structures périodiques

Géraud Dupuy, Thomas Wojtokwski



Niveau : L3

Prérequis :

- Diffraction de Fraunhofer (exemple de la fente simple de largeur finie)
- Interférences (formules de réseaux en transmission et réflexion)
- Cristallographie (Réseau de Bravais, Réseau Réciproque, Maille, Motif, plan réticulaire)
- Transformée de Fourier

Introduction

[Diapo photo du colibri et du rideau]

Dans la nature il existe tout un tas de phénomènes d'irisations, certains sont dus à la diffraction, comme par exemple les irisations à la surface d'un CD (*montrer la face de lecture d'un CD et la faire bouger pour montrer ces irisations*), ou celles qu'on voit en regardant les ailes d'un colibri.

C'est bien joli tout ça, mais comment on l'explique ???



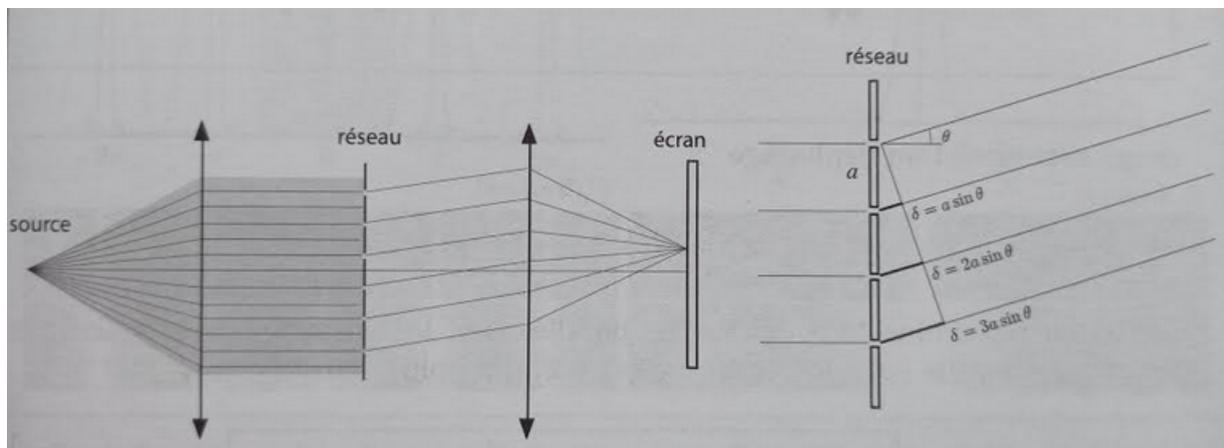
Crédit photo : Christian Spencer



Source : Wikipédia, article sur la théorie de la diffraction

1 Réseau optique diffractant

[Diapo Schema du reseau]



Source : Taillet : Optique physique

L'idée de cette partie est d'arriver à la description de la figure de diffraction optique à partir du facteur de forme et du facteur de structure.

On part de l'expression connue de $\delta = a \sin(\theta)$

A la fin on essaye de balayer quelques applications / phénomènes rigolos pour montrer l'intérêt de la diffraction dans la mesure de pas de réseau.

1.1 Interférences à N ondes

[R. Taillet, Optique Physique : Chapitre 4.1]

On calcule la figure de diffraction dans le cas simple du réseau à N fentes infinie.

L'onde résultante s est la superposition des N ondes déphasées par le réseau de $\Delta\phi$ chacune.

$$\begin{aligned}
 s &= s_o \sum_{n=0}^{N-1} e^{in\Delta\phi} = s_o \frac{1 - e^{iN\Delta\phi}}{1 - e^{i\Delta\phi}} \\
 &= s_o \exp\left(i\frac{(N-1)\Delta\phi}{2}\right) \frac{e^{-i\frac{N\Delta\phi}{2}} - e^{i\frac{N\Delta\phi}{2}}}{e^{-i\frac{\Delta\phi}{2}} - e^{i\frac{\Delta\phi}{2}}} \\
 &= s_o \exp\left(i\frac{(N-1)\Delta\phi}{2}\right) \frac{\sin\left(\frac{N\Delta\phi}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\Delta\phi}{2}\right)} \\
 I &= |s|^2 = I_o \frac{\sin^2\left(\frac{N\Delta\phi}{2}\right)}{\sin^2\left(\frac{\Delta\phi}{2}\right)}
 \end{aligned}$$

Or $\Delta\phi = \frac{2\pi\delta}{\lambda} = \frac{\pi a \sin\theta}{\lambda}$

Donc on a :

$$I = I_o \frac{\sin^2\left(\frac{N\pi a \sin\theta}{2\lambda}\right)}{\sin^2\left(\frac{\pi a \sin\theta}{2\lambda}\right)} \tag{1}$$

On sent assez facilement qu'il y aura une anisotropie typique de la diffraction, puisque le numérateur varie beaucoup plus vite que le dénominateur. Mais on y reviendras dans la partie suivante

(Pour le correcteur, il lui semblait nécessaire de faire le mini calcul de la finesse du pic et d'en parler un peu, soit ici, soit dans la partie suivante. Le truc c'est que ça prend un peu de temps d'expliquer ça à l'oral, dans une leçon ou il y a déjà plein de truc à dire.

Le calcul pour info : $F = \frac{\Delta\lambda}{\delta\lambda}$ avec $\delta\lambda$ la largeur à mi hauteur d'un pic donné par le numérateur, et $\Delta\lambda$ l'écart entre deux pics donné par le dénominateur.

$$F = \frac{N\lambda}{\frac{a}{\lambda}} = N$$

Donc plus il y a de fentes, plus F est grand et mieux on distingue les pics

Transition : Pour l'instant notre modèle est incomplet, car on ne prends pas en compte ce qui permet de diffracter à chaque étape du réseau. Cherchons à l'appliquer maintenant.

1.2 Facteurs de forme et de structure

[R. Champeau, Ondes lumineuses : Chapitre 13.3.2 et 13.3.4]

Maintenant, prenons en compte la largeur b de chaque fente du réseau.

On applique les résultats de la diffraction de Fraunhofer.

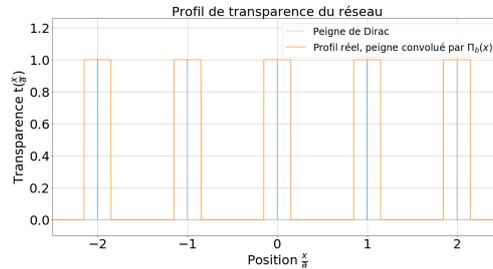
On modélise la fonction de transmittance du réseau comme suit :

$$t(x) = \text{III}_{a,N}(x) \otimes \text{II}_b(x)$$

Avec $\text{III}_{a,N}(b) = \sum_{n=0}^{N-1} \delta(x - na)$ et $\text{II}_b(x) = 1$ si $|x| < \frac{b}{2}$ et 0 sinon

(A ce moment, il faut bien expliquer pourquoi on fait ce modèle, à quoi sert la convolution ici. Il est à mon avis nécessaire d'afficher ou dessiner ce profil)

[Diapo profil de transmittance]



Les valeurs numériques ne sont pas 'réalistes' et sont choisis pour que ce soit visible, ici b = 0.3 a

En appliquant les résultats de Fraunhofer, on sait que :

$$\begin{aligned}
 A(\theta) &\propto TF(\text{III}_{a,N}(x) \otimes \text{II}_b(x)) \\
 &\propto \underbrace{TF(\text{III}_{a,N}(x))}_{\text{Déjà calculé en I.1}} \cdot \underbrace{TF(\text{II}_b(x))}_{\text{En prérequis}} \\
 &\propto \frac{\sin(\frac{N\pi a \sin\theta}{2\lambda})}{\sin(\frac{\pi a \sin\theta}{2\lambda})} \cdot \text{sinc}(\frac{\pi b \sin\theta}{2\lambda})
 \end{aligned}$$

On obtiens donc la formule finale de la figure de diffraction :

$$I(\theta) = I_o \underbrace{\frac{\sin^2(\frac{N\pi a \sin\theta}{2\lambda})}{\sin^2(\frac{\pi a \sin\theta}{2\lambda})}}_{\text{Facteur de forme}} \cdot \underbrace{\text{sinc}^2(\frac{\pi b \sin\theta}{2\lambda})}_{\text{Facteur de structure}} \quad (2)$$

[Diapo Figure de diffraction]

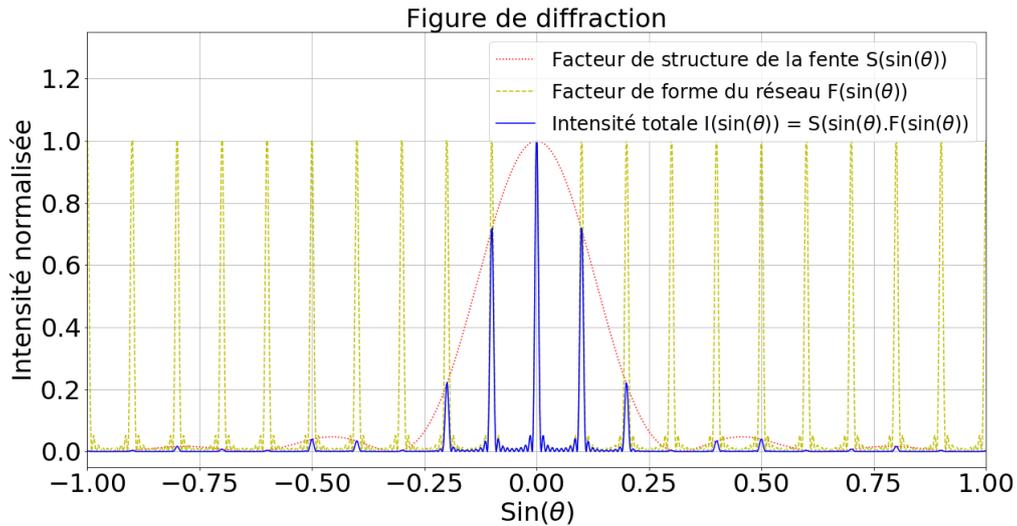
(Ici il est à mon avis nécessaire d'à nouveau afficehr ou tracer le profil d'intensité de chaque facteur et du produit des deux)

On peut isoler ici un facteur de forme et un facteur de structure. Le premier est la contribution de l'interférence à N ondes provoquées par la structure périodique. Le second est la contribution du contenu de chaque point du réseau, à savoir une fente ici, qui va moduler la figure obtenue juste grâce au réseau.

$$F(\theta) = \frac{\sin^2(\frac{N\pi a \sin\theta}{2\lambda})}{\sin^2(\frac{\pi a \sin\theta}{2\lambda})}. \text{ Provient de la forme du réseau, et donne la position des pics}$$

$$S(\theta) = \text{sinc}^2(\frac{\pi b \sin\theta}{2\lambda}). \text{ Provient de la structure des fentes, et donne l'intensité des pics}$$

On voit directement ici, notamment grâce au tracé du profil d'intensité qu'on a l'anisotropie typique de la diffraction.



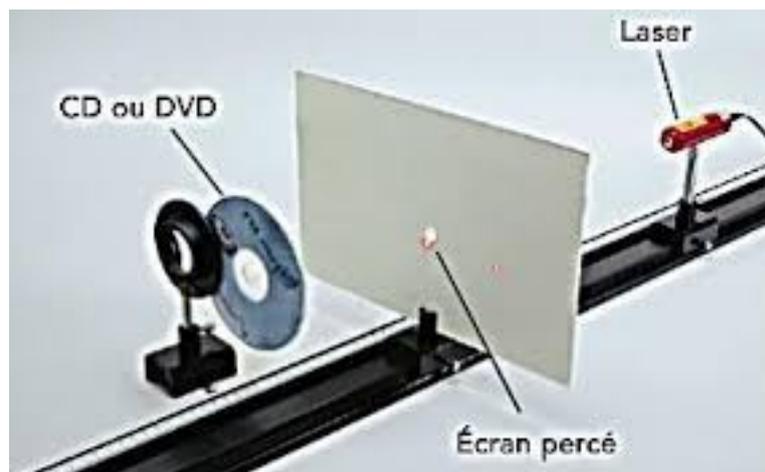
Les valeurs numériques ne sont pas 'réalistes' et sont choisis pour que ce soit visible, ici $a = 5\mu\text{m}$, $b = 500\text{nm}$, $N = 10$

Transition : C'est bien sympa, on a fait plein de calcul, et connaissant notre réseau, on peut décrire la forme de la figure de diffraction. Maintenant regardons quelques applications, qui nous permettent à l'aide de la figure de diffraction, d'obtenir des infos sur le pas d'un réseau

1.3 Applications : pas d'un réseau

1.3.1 Le CD

[Diapo CD]



Source : Thierry Chauvet (<http://www.prof-tc.fr/Lycee/file/Terminale%20S/Specifique/03%20-%20Proprietes%20des%20ondes/Cours%20-%20TP%20-%20Exercices/TP%20-%20Mesure%20du%20pas%20d%20un%20CD.pdf>)

On peut effectuer la manip facilement avec un CD dont on mesure voit qu'en mesurant l'angle des différents ordre, à l'aide de la formule des réseaux en réflexion.

On a en incidence normale : $a = \frac{p\lambda}{\sin \theta_p}$ Pour l'ordre $p = 1$ et un laser à $\lambda = 532 \text{ nm}$, on mesure un angle de $\sin \theta_p = 0.34$.

Donc $a \approx 1.6 \mu\text{m}$ ce qui est le standard du format CD.

(On peut ici faire une digression sur le petit pas du réseau et donc la nécessité de passer à des standards Blu-ray pour éviter des problématiques de taches d'Airy. En effet, La quantité de données stockée est proportionnel à $\frac{1}{a}$, donc si on veut stocker plus, il faut diminuer a , mais on se retrouve à avoir a de l'ordre des longueurs d'onde optique, donc pour essayer de limiter des brouillages à cause de la tache d'Airy, il faut diminuer λ .)

1.3.2 Le colibri

[Diapo photo Colibri]



Credit photo : Christian Spencer

Sur ce site, on trouve de superbes photos de colibri : <https://creapills.com/christian-spencer-photo-nature-colibri-ailes-arc-en-ciel-20190717>

et notamment sur la 5eme, on a un bel éclairage presque incident, et on voit le différent ordre de certaines couleurs, typiquement le bleu sur l'aile de droite. En estimant un peu en ordre de grandeurs, sachant que la focale de l'appareil doit être de l'ordre de 50 mm (en tout cas très certainement entre 15 et 150 mm) et que l'aile d'un colibri fait en moyenne un peu moins de 10 cm, l'écart entre les deux ordres doit être de 2 cm. Donc $\sin(\theta) \sim 0.37$ Par ailleurs, on suppose $\lambda 400\text{nm}$

Donc on obtiens $a \sim 1\mu\text{m}$, cohérent avec des mesures microscopiques de l'aile

Ok, mais à quoi correspond ce réseau ? En fait une plume d'oiseau est composé de petit faisceau nommés barbules. Ces barbules sont écarté de quelques μm dans le cas général, mais avec la bonne inclinaison, on peut les voir écarté de moins et font donc ces irisations pleines de poésie sur le plumage de l'oiseau (Il est toutefois compliqué de trouver une vrai référence à ce sujet

Transition : Ok, on commence à comprendre comment ça fonctionne en 2D dans le cas de l'optique. Mais changeons un peu de perspective, en étudiant un milieu à 3D. On va étudier la méthode de la diffraction X pour sonder la matière cristalline à l'échelle atomique

2 Diffraction X

Ici l'optique de Fraunhofer n'est plus valable car on travaille avec des objets qui ne sont plus plan. Par ailleurs, on cherche à sonder la matière à l'échelle de l'angstrom. donc on doit avoir : $\lambda \sim 1 \text{ \AA}$. Ce qui équivaut à une énergie de l'ordre de la centaine de keV, ce qui équivaut à des rayons X.

2.1 Rappel de cristallographie

[Ashcroft et Mermin, physique des solide : Chapitre 4 et 5]

[Serie diapo cristallographie]

Ici on rappelle quelques définitions de base très rapidement pour pas être paumé par la suite et poser les notations : Réseau direct, réseau réciproque, maille, motif, plan réticulaire. Je pose ici les notations utilisées et les quelques relation centrales.

(J'ai fait le choix puisque ce sont des rappels d'aller très vite et tout mettre sur diapo. Le correcteur m'a même invité à ne pas faire ces rappels. Je ne suis pas à l'aise avec cette idée, mais ça permet peut-être de grapiller les quelques minutes qui me manquait à la fin)

Le RD est décrit par :

un vecteur $\vec{R}_{u,v,w} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$ lui appartenant et la fonction :

$$S(\vec{r}) \propto \sum_{u,v,w} \delta(\vec{r} - \vec{R}_{u,v,w})$$

Le RR est décrit par :

un vecteur $\vec{K}_{h,k,l} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$ lui appartenant et la fonction :

$$S(\vec{r}) \propto \sum_{h,k,l} \delta(\vec{q} - \vec{K}_{h,k,l}) = TF(S(\vec{r}))$$

Un vecteur $\vec{K}_{h,k,l}$ appartient au RR si il décrit un vecteur d'onde de périodicité égal au RR. C'est à dire $\forall (u,v,w) : \vec{K}_{h,k,l} \cdot \vec{R}_{u,v,w} = 2\pi m$ avec m un entier relatif.

À chaque famille réticulaire on associe un vecteur du réseau réciproque $\vec{K}_{h,k,l}$ tel que ce vecteur est orthogonal aux plans (ou droites dans le cas du réseau 2D) et tel que $||\vec{K}_{h,k,l}|| = \frac{2\pi}{d}$ avec d la distance entre ces plans.

Transition : Maintenant voyons comment la structure du réseau induit nécessairement certaines formes sur la figure de diffraction.

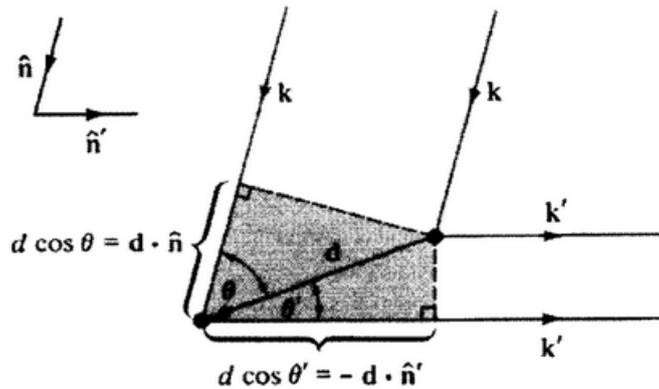
2.2 Vecteur de diffusion, construction de Von Laue

[Ashcroft et Mermin, physique des solides : Chapitre 6.2]

On envoie une onde incidente \vec{k} sur deux sites du réseau obtenu par une translation \vec{d} . On essaye de récupérer l'onde retransmise \vec{k}' . La différence de marche entre les deux rayons est

(J'ai fait le schéma au tableau)

$$\begin{aligned} \delta &= d\cos(\theta) + d\cos(\theta') = \vec{d} \cdot \vec{n} - \vec{d} \cdot \vec{n}' \\ &= \vec{d} \cdot (\vec{n} - \vec{n}') \end{aligned}$$



Source : Ashcroft et Mermin : Physique des solides

On fait l'hypothèse que l'onde est retransmise par collision élastique, ie $\lambda = \lambda'$. De plus on pose $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$

$$\delta = \frac{\lambda}{2\pi} \vec{d} \cdot (\vec{k} - \vec{k}')$$

On récupère du signal si l'interférence est constructive, ie si $\delta = m\lambda$. Donc si

$$\begin{aligned} m\lambda &= \frac{\lambda}{2\pi} \vec{d} \cdot (\vec{k} - \vec{k}') \\ 2\pi m &= \vec{d} \cdot \vec{q} \end{aligned}$$

Puisque \vec{d} appartient au RD, on reconnait ici la définition d'un vecteur du RR. Donc on on interférence constructive et donc un pic si et seulement si \vec{q} appartient au RR

Transition : On retrouve que comme pour la diffraction optique, seul certaines directions de diffusions permettent d'avoir un signal non nul. On a dès lors des pics typique de la diffraction, maintenant voyons comment on peut obtenir la figure de diffraction

2.3 Densité de diffuseur, facteur de structure et forme

[J.J. Rousseau : Cristallographie geometrique : Chapitre 10]

Ici, ce n'est pas $t(\vec{r})$ mais $\rho(\vec{r})$ la densité d'objet diffusant (généralement les nuages électroniques) qui pilote la diffraction

$$\text{On a : } \rho(\vec{r}) = \rho_{motif}(\vec{r}) \otimes \sum_{u,v,w} \delta(\vec{r} - \vec{R}_{u,v,w})$$

$$\text{Avec : } \rho_{motif}(\vec{r}) = \sum_{\substack{\text{atome } i \text{ de} \\ \text{la maille}}} \rho_{at}^{(i)}(\vec{r}) \otimes \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$$

On peut raisonner par analogie avec l'optique de Fraunhofer, en supposant que la transformée de Fourier de la densité d'objet diffusant donnera l'intensité.

$$A(\vec{q}) \propto \int \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} d\vec{r}$$

$$A(\vec{q}) \propto \sum_{h,k,l} \left[\sum_i \left(\int \rho_{at}^{(i)}(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} d\vec{r} \right) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} \right] \delta(\vec{q} - \vec{K}_{h,k,l}).$$

On pose $f_i = \int \rho_{at}^{(i)}(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} d\vec{r}$ la facteur de diffusion atomique.

(C'est à ce moment là que le correcteur m'a demandé de conclure, donc très certainement qu'en grapillant un peu par ci par là on peut conclure cette sous partie)

$$A(\vec{q}) = A_o \underbrace{\sum_{h,k,l} \delta(\vec{q} - \vec{K}_{h,k,l})}_{\text{Facteur de forme}} \underbrace{\left[\sum_i f_i e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} \right]}_{\text{facteur de structure}} \quad (3)$$

On retrouve ici les facteur de forme et de structure, comme en optique. Le facteur de forme donne la position des pics de la figure de diffraction (dont la position est donné par un dirac car on a ici un réseau où $N \rightarrow \infty$) et donne des informations sur la géométrie du réseau. Tandis que le facteur de structure donne l'intensité du pic et permet d'en venir à sa constitution.

Pour résumer cela, on peut montrer l'animation suivante :

<https://toutestquantique.fr/crystallography/> (A moins d'être chaud pour répondre aux questions sur la fin de l'animation, je recommande de couper la dernière partie sur la diffraction X de poudre).

Conclusion

Maintenant on sait raccorder la structure périodique d'un système à sa figure de diffraction, et comment déduire des informations de l'une sur l'autre. Typiquement on peut essayer de tirer quelques conclusions sur la tête du spectre aux rayons X du cristal de Fe-Pt. Mais surtout, si on quitte un peu le domaine de l'optique. La dualité onde corpuscule permet d'étudier la diffraction de particules comme les neutrons, qui permettent par leur interaction différente avec les objets diffuseurs, d'observer la transition Para-Ferro dans un metal

2.4 Bonus : Loi de Bragg et construction d'Ewald

[Ashcroft et Mermin, physique des solide : Chapitre 6.4]

(Je ne pense pas qu'on ai le temps d'en parler dans la leçon, mais ça peut toujours servir pour des questions)

$$\text{On a } \|\vec{q}\| = \|\vec{k}_r - \vec{k}_i\| = \frac{2\pi}{\lambda} 2\sin\theta = \frac{4\pi}{\lambda} \sin\theta$$

Par ailleurs : \vec{q} appartient au RR, donc il existe (h,k,l) tel que $\vec{q} = \vec{K}_{h,k,l}$. donc il existe une

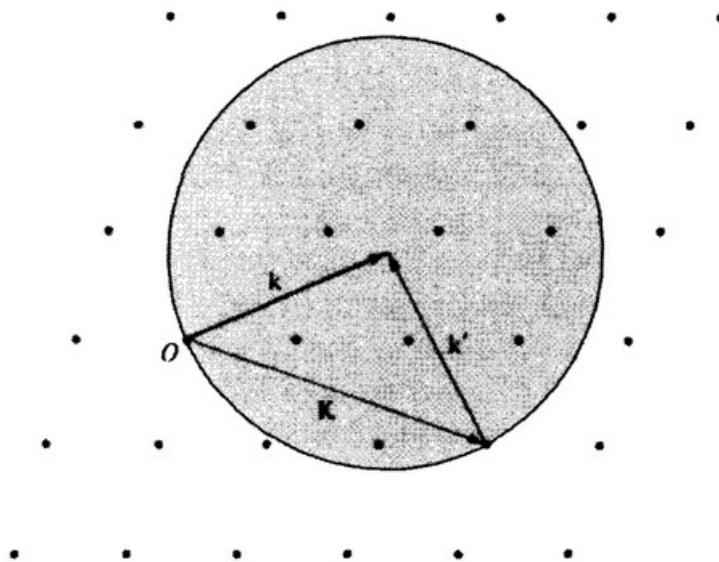
famille de plan réticulaire tel que $\|\vec{q}\| = \|\vec{K}_{h,k,l}\| = \frac{2\pi}{d_{h,k,l}}$. Donc :

$$\boxed{2d_{h,k,l} \sin\theta = \pi\lambda} \quad (4)$$

Il s'agit de la loi de Bragg, qui permet sur un spectre X d'identifier les pics à des familles de plans

Maintenant qu'on sait (à peu près) identifier un spectre, comment l'acquérir? Comme on a $\|\vec{k}_r\| = \|\vec{k}_i\| = \frac{2\pi}{\lambda}$, on trace une sphère de rayon \vec{k}_r et \vec{k}_i . On a dès lors $\|\vec{q}\|$ qui relie deux points de la sphère.

[Diapo Construction d'Ewald]



Source : Ashcroft et Mermin : Physique des solides

On place la sphère de telles sortes qu'un point du RR appartient à sa surface, et dès lors qu'on arrive à obtenir un deuxième point sur cette surface (ce qui est peu probable à obtenir spontanément), il existe un \vec{q} qui relie ces deux points et qui appartient dès lors au réseau réciproque et donne une interférence constructive. Pour réussir à obtenir deux points sur la surface, on peut utiliser la méthodes du cristal tournant et la méthode de Van Laue.

Choix pédagogiques

Les rapport du jury insistent bien sur la nécessité de traiter plusieurs exemples de diffraction, et la diffraction X est presque un indispensable (même si on peut construire des parties sur l'échographie ou sur les antennes).

De fait le placement est un peu compliqué. Le réseau optique c'est plutôt L2 et la matière condensée niveau M1. Donc j'ai traité le réseau à l'aide de la TF pour justifier la L3 et l'aspect diffraction X peut se justifier niveau L3, et n'est v en M1 que car il s'intègre dans une thématique

de matière condensée qui étudie notamment aussi les structures de bandes trop haut niveau pour la L3.

Il n'empêche qu'il résulte de cette leçon un placement compliqué, et je suis toujours pas 100% content des prérequis.

J'ai aussi essayé d'apporter un peu de poésie et sensibilité dans ma leçon, en parlant de l'exemple du colibri tiré du compte rendu de l'année dernière, c'est en effet un bel exemple qui a bien plus, et qui permet de faire des ponts avec d'autres disciplines. J'ai mis le CD qui est moins passionnant et plus redondant pour certains pour inclure une manip, et je pense que pour rendre la manip intéressante, il faut comparer aux standards et commenter un peu les pas de réseaux notamment avec le Blu-Ray.

J'ai fait le choix de ne pas parler de finesse et de couper un peu la partie optique, notamment en présupposant que les élèves connaissent la formule des réseaux pour aller plus vite et me dégager du temps sur la diffraction X

C'est une leçon assez difficile à construire car si les grandes parties sont faciles à trouver, comment les construire et comment les articuler est très difficile. Pour cela, j'ai essayé d'orienter chaque partie autour de comment la figure de diffraction et la forme du réseau se répondent, et comment la figure de diffraction permet de déterminer des infos sur le cristal. De ce fait, je pense que l'articulation doit se faire autour d'analogie et la capacité à la fin de nos raisonnements d'isoler un facteur de forme et un facteur de structure à chaque fois.

Les messages forts de la leçon à communiquer selon moi :

- La structure périodique d'un réseau crée une diffraction qui permet d'en déterminer les caractéristiques.
- La forme du réseau influe sur la position des pics, et la structure de ce qui le peuple donne l'intensité
- Ça permet d'observer des jolis phénomènes, que ce soit les irisations du colibri ou la transition para-ferro

Questions

- Quelle différence entre diffraction et diffusion ?
Il n'y a pas vraiment de différence. Formellement, la diffusion est le moteur d'une répartition anisotrope de l'intensité, ce qui est la diffraction. Donc la diffusion est le moteur de la diffraction
- La position des franges constructives dépend-elle de la longueur d'onde ? Comment cela peut-il être utilisé en pratique ?
La réponse est oui, et en plaçant une fente au bon endroit, on obtient un monochromateur.
- Quelles autres applications peut-on trouver aux systèmes interférentiels à N ondes ?
La spectroscopie
- Comment varie la finesse avec le nombre de fentes ?
 $F = N$ [obtenu à partir de (1)]

- À partir de la formule des réseaux, on voit qu'on résoud mieux les différentes longueurs d'ondes pour des ordres élevés, comment pouvoir obtenir un ordre élevé avec une bonne intensité ?

Si on utilise un réseau blazé ou échellette, on peut obtenir le même profil de diffraction pour le réseau, mais le facteur de structure change pour que le sinus cardinal de la diffraction par la fente soit décalé en angle vers un autre angle.

Remarques des correcteurs

- L'exemple du colibri, que j'avais repris de la leçon de l'année dernière, avait beaucoup plu. Les ordres de grandeurs sont un peu difficile à vérifier, mais ça permet de rendre le tout plus poétique
- Il faut bien expliquer la première diapo, et bien expliciter comment marche le réseau
- Les rappels de cristallographie sont superflus et peuvent être retirés. Ce qui permet de gagner un peu de temps pour bien finir et peut-être expliquer comment on exploite une mesure de diffraction X sur un graphe
- c'est bien de mettre des ordres de grandeurs régulièrement, notamment pour le CD et le colibri
- les calculs étaient par moment un peu long
- le plan était plutôt bon, avec un bon équilibre diffraction X et optique