

Diffraction et Réseau Réciproque

C. LONGUEMARE - séminaire d'analyse *

11 mars 2008

Version 11/03/2008

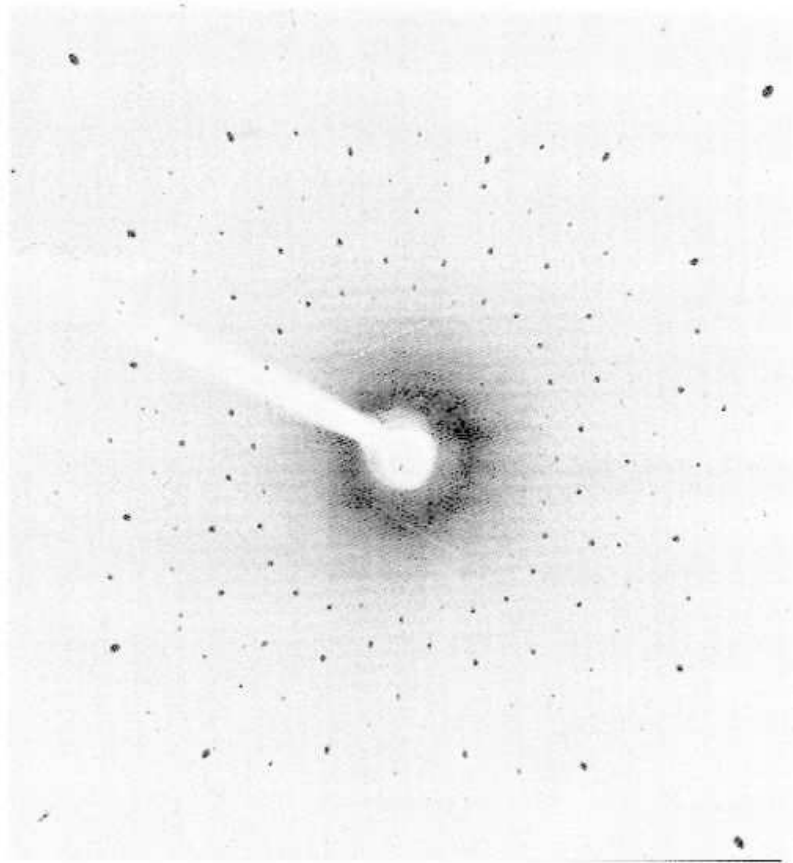


Fig. 17-37. Diagramme de diffraction de Laue d'un cristal de quartz. On a essayé de masquer l'effet du faisceau direct.

Figure 1: Diffraction références [1], 605

Abstract

Ces notes accompagnent un séminaire présenté au département de mathématiques de l'U-Caen le 11 mars 2008 à la demande de Guy Laville.

*UNIVERSITE DE CAEN année 2007-2008

Sommaire

1	Le principe de moindre action	4
1.1	L'action réduite de Maupertuis	4
1.2	L'action de Hamilton - Jacobi	5
1.3	Ordres de grandeur	5
2	Les Ondes	6
2.1	Quelques principes	6
2.2	Diffusion-Diffraction d'une onde sur un centre ponctuel	8
3	Diffusion par un monocristal	9
3.1	Diffusion par une collection de centres diffuseurs	9
3.2	Diffusion par un cristal périodique	10
3.3	Diffraction et réseau réciproque	10
4	Physique des ondes sur un cristal	11
4.1	Première zone de Brillouin	11
4.2	Les bandes d'énergie dans les cristaux	12
5	Conclusion	13

List of Figures

1	Diffraction références [1],605	1
2	Principe de moindre action	4
3	L'action de Hamilton	5
4	Propagation de la phase d'une onde semi-classique	6
5	Inteférences	7
6	Diffusion sur un centre	8
7	Diffusion par une collection de centres diffuseurs	9
8	Le transfert de vecteur d'onde ($\sim$ quantité de mouvement)	10
9	Première zone de Brillouin dans un cas schématique à 2 D	11
10	Structure de l'énergie en bandes dans pzb	12
11	Expérience de diffraction X sur un cristal références [1],605	13

1 Le principe de moindre action

Système physique $\{q, \dot{q}\} \rightarrow$ détermination de la trajectoire par le lagrangien $L(q, \dot{q})$

Principe de moindre action

$$S = \int_{AB} L dt \quad \text{extrémum} \Rightarrow \delta S = 0$$

on varie la trajectoire δq dans les conditions initiales et finales fixées :

$$q, \dot{q}, t \text{ fixe en A et B}$$

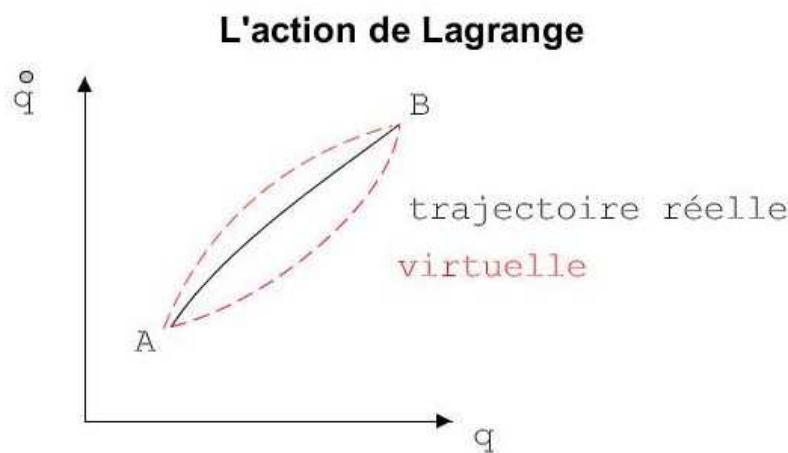


Figure 2: Principe de moindre action

Equations de Lagrange

$$\frac{\partial L}{\partial q} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right)$$

Exemple $L = \frac{m}{2}(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) + k(x^2 + y^2)$ avec $q = (x, y)$

1.1 L'action réduite de Maupertuis

Soit p la variable conjuguée de q

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$$

L'hamiltonien du système

$$H = p\dot{q} - L$$

Donc

$$S = \int_{AB} -H dt + p dq \quad \text{extrémum}$$

Si on se limite aux trajectoires virtuelles conservatives telles que $H = E$ soit constant, alors

$$S_0 = \int_{AB} p dq \quad \text{extrémum} \Rightarrow \delta S_0 = 0$$

1.2 L'action de Hamilton - Jacobi

L'action peut être définie comme une fonction dans l'espace temps $\{q, t\}$ soit

$$S(q, t)$$

Elle est calculée sur les trajectoires physiques, on démontre :

$$\frac{\partial S}{\partial q} = p \quad \frac{\partial S}{\partial t} = -H$$

Soit

$$dS = -H dt + p dq$$

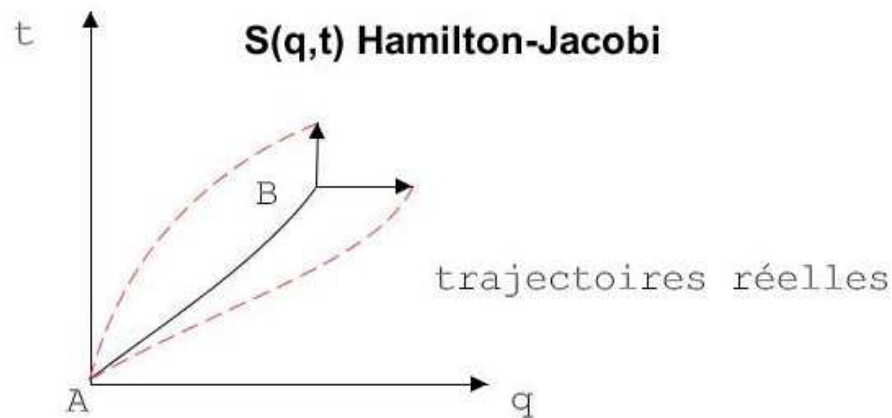


Figure 3: L'action de Hamilton

1.3 Ordres de grandeur

L'action S a la dimension d'une énergie par un temps comme $\hbar$

Le rapport est sans dimension, c'est un angle qui se compare à 2π :

$$\delta\Phi = \frac{\delta S}{\hbar}$$

avec $\hbar = 6,6 \cdot 10^{-34} J.s$

ordres de grandeurs

échelle macroscopique si $\delta S \sim J.s$ alors $\delta\Phi \sim 10^{34}$

échelle atomique si $\delta S \sim J.\dot{A}/c$ alors $\delta\Phi \sim 10^{-3}$

2 Les Ondes

2.1 Quelques principes

- Les ondes $\rightarrow$ fonctions complexes sur l'espace-temps du système considéré : le lien avec l'observation physique n'est pas toujours trivial notamment en MQ, posons

$$f(q, t) = A \exp(i\Phi)$$

- A est le module ou l'amplitude
 - Φ est l'argument ou la phase
- la physique des ondes est linéaire, par exemple l'équation de D'Alembert

$$\Delta f - \frac{1}{c^2} \frac{d^2 f}{dt^2} = 0$$

Une onde est une perturbation d'un milieu étendu dans son espace et dans le temps. La linéarité est donc associée à un traitement dynamique au premier ordre de cette perturbation, la fonction 0 étant toujours une solution possible car correspondant au système au repos.

- La phase des ondes semi-classiques est liée à l'action

$$\delta\Phi = \Phi_A - \Phi_B = \int_{AB} p dq / \hbar$$

avec la longueur d'onde définie par la relation de de Broglie

$$\frac{p}{\hbar} = k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

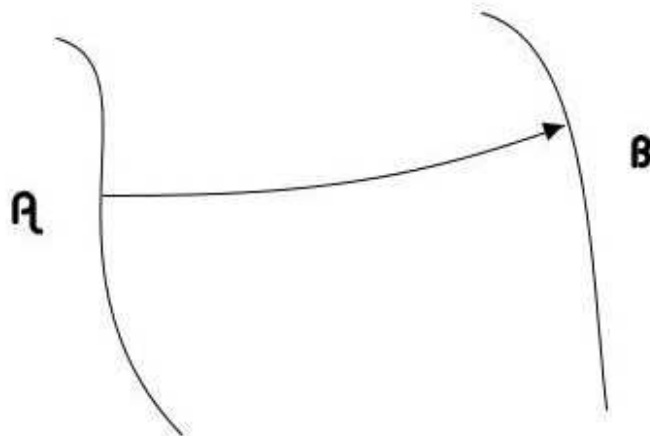


Figure 4: Propagation de la phase d'une onde semi-classique

- la superposition d'ondes cohérentes permet de mettre en évidence des interférences

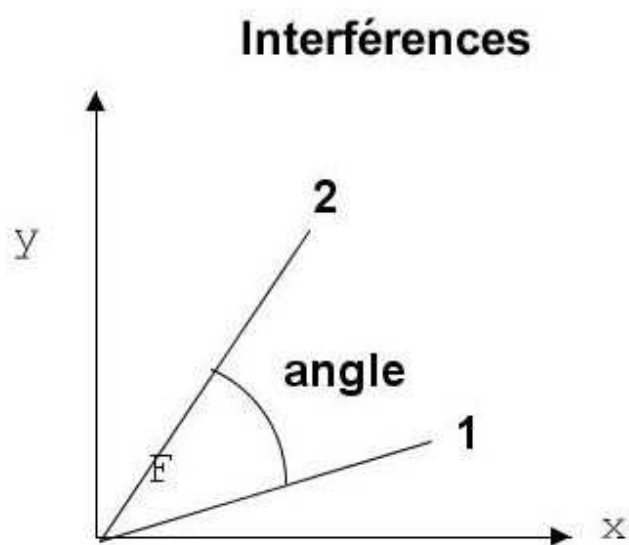


Figure 5: Inteférences

2.2 Diffusion-Diffraction d'une onde sur un centre ponctuel

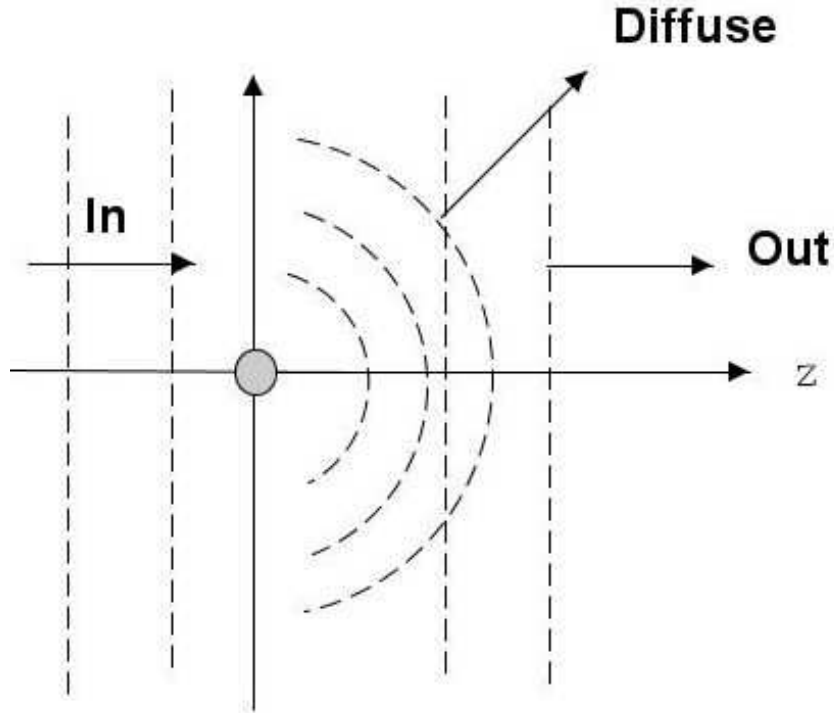


Figure 6: Diffusion sur un centre

L'onde entrante dans la région $z \sim -\infty$

$$\psi_{in} = \exp(ikz)$$

L'onde sortante dans la région $z \sim +\infty$

$$\psi_{out} = \exp(ikz) + f(\theta) \frac{\exp(ikr)}{r}$$

$f(\theta)$ mesure l'interaction de l'onde incidente avec le centre diffuseur

La section efficace s'écrit :

$$\sigma = \int |f(\theta)|^2 d\Omega$$

La mesure "physique" est liée à l'amplitude de l'onde diffusée au carré.

3 Diffusion par un monocristal

3.1 Diffusion par une collection de centres diffuseurs

Diffusion sur plusieurs centres

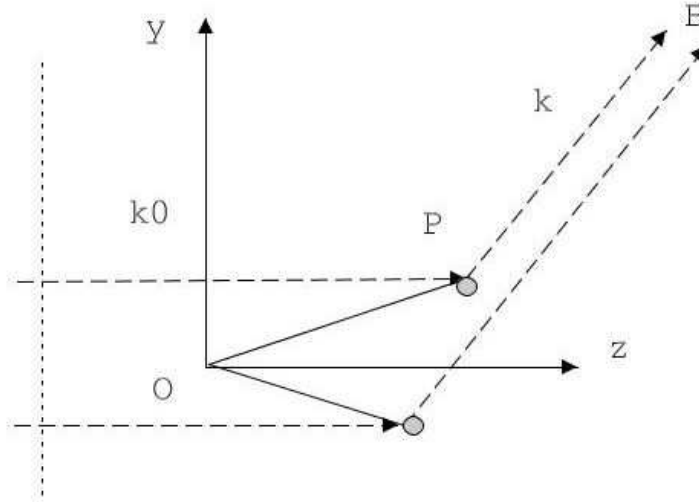


Figure 7: Diffusion par une collection de centres diffuseurs

P est un centre diffuseur repéré par $\vec{OP} = \vec{X}$

L'onde incidente en P : $\psi_{in} = \exp(ik_0 z) = \exp(i\vec{k}_0 \vec{X})$

L'onde diffusée depuis P vers B : $\psi_{dif} = f(\theta) \frac{\exp(ikr)}{r} \times \exp(i\vec{k}_0 \vec{X})$ où $r = |\vec{PB}|$ et $kr = \vec{k} \vec{PB} = \vec{k} \vec{OB} - \vec{k} \vec{X}$

Soit à grande distance des centres diffuseurs de la collection

$$\psi_{dif} = f(\theta) \frac{\exp(i\vec{k} \vec{OB})}{r_0} \times \sum_{\vec{X}} \exp(i\vec{q} \vec{X})$$

avec $\vec{q}$ le transfert de vecteur d'onde

$$\vec{q} = (\vec{k}_0 - \vec{k})$$

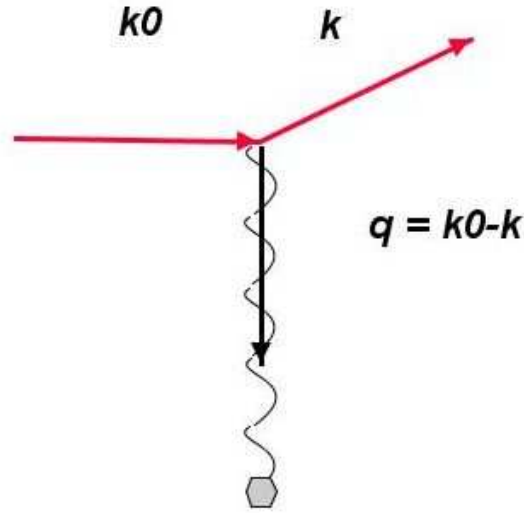
Remarque $|\vec{q}|$ varie entre 0 et $2k_0$, il est important d'ajuster la valeur de k_0 à la périodicité du réseau ; par exemple, des rayons X durs sont utilisés dans le domaine des dimensions atomiques.

Si $\mathcal{N}$ est le nombre de centres diffuseurs, on peut définir la transformée de Fourier du réseau physique

$$\hat{f}(\vec{q}) = \mathcal{N}^{-1} \sum_{\vec{X}} \exp(i\vec{q} \vec{X})$$

et l'amplitude émise par le réseau se déduit de l'amplitude émise par un élément diffuseur en O :

$$\psi_{dif}(\text{réseau}) = \psi_{dif}(O) \times \mathcal{N} \times \hat{f}(\vec{q})$$

Figure 8: Le transfert de vecteur d'onde ($\sim$ quantité de mouvement)

3.2 Diffusion par un cristal périodique

Dans un monocristal les centres diffuseurs sont distribués périodiquement : l'espace est dénombrable , périodique et de dimension physique L , une longueur

$$\vec{X}(n, m, p) = n\vec{a} + m\vec{b} + p\vec{c} \quad n, m, p \in \mathbb{Z}$$

La maille cristalline est définie par 3 vecteurs (les périodes spatiales)

$$(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$$

Le réseau réciproque est par définition un réseau associé de dimension L^{-1} :

$$\vec{K}(n', m', p') = \frac{2\pi}{(a, b, c)} \times [n'\vec{b} \wedge \vec{c} + m'\vec{c} \wedge \vec{a} + p'\vec{a} \wedge \vec{b}]$$

3.3 Diffraction et réseau réciproque

Si le transfert de vecteur d'onde $\vec{q} = (\vec{k}_0 - \vec{k})$ dans la direction de B considérée précédemment appartient au réseau réciproque alors :

$$\forall \vec{X} \quad \vec{q} \cdot \vec{X} = 2\pi(nn' + mm' + pp') = \phi = 2\pi N \Rightarrow \exp(i\phi) = 1$$

$$\text{et } \hat{f}(\vec{q}) = 1$$

L'amplitude de l'onde diffusée est donc multipliée par $\mathcal{N}$, le nombre d'éléments de la collection, et l'intensité physique est donc multipliée par $\mathcal{N}^2$

...voir figure 11

pour seulement $\mathcal{N} = 10^{23}$ on a $I = I_0 \times 10^{46}$

Si le transfert $\vec{q}$ n'est pas un site de réseau réciproque alors

$$\hat{f}(\vec{q}) = \mathcal{N}^{-1} \sum_{\forall \phi} \exp(i\phi) = 0 \text{ et } I = 0$$

4 Physique des ondes sur un cristal

4.1 Première zone de Brillouin

- * Une onde plane dans un cristal est définie par sa "fonction d'onde" sur chaque site du cristal soit

$$\psi(\vec{X}, t) \sim \exp(-i\omega t + i\vec{k} \cdot \vec{X})$$

Les propriétés de ces ondes sont connues à partir de la relation de dispersion qui contient la dynamique du système.

$$\omega(k)$$

(éventuellement déterminée par le principe de moindre action appliqué au lagrangien de ces ondes)

- * si on change le vecteur d'onde $\vec{k}$

$$\text{en } \vec{k} + \vec{q} \text{ et si } \vec{q} = \vec{K} \in RR$$

on obtient une onde identique à l'onde initiale

$$\vec{k} \equiv \vec{k} + \vec{K}$$

$\vec{k}$ et $\vec{k} + \vec{K}$ sont des ondes indiscernables

- * **Il suffit** de choisir $\vec{k}$ dans la première zone de Brillouin pour décrire toutes les ondes possibles sur le cristal.

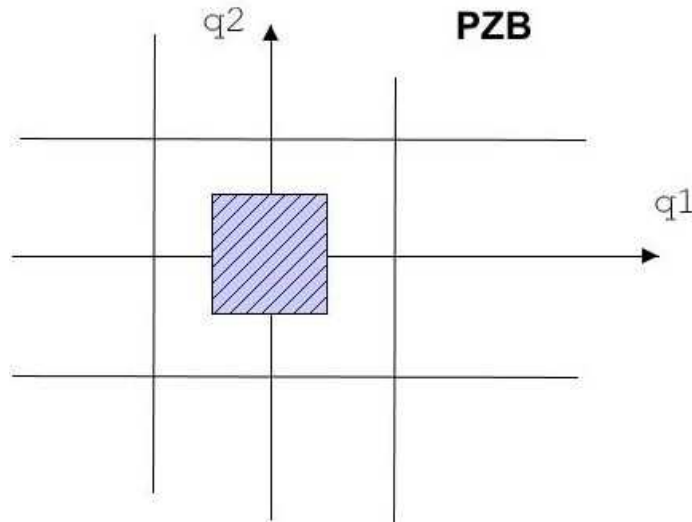


Figure 9: Première zone de Brillouin dans un cas schématique à 2 D

A 3D, la PZB est déterminée par l'enveloppe des plans médiateurs de segments tirés depuis l'origine jusqu'aux noeuds les plus proches

C'est un polyèdre qui permet un pavage de tout l'espace $\vec{k}$ par les translations du réseau réciproque.

La surface de ce polyèdre s'appelle parfois la surface de Fermi du cristal.

4.2 Les bandes d'énergie dans les cristaux

Les valeurs de k sont limitées, il en est de même pour $\omega(k)$ Cf figure 10

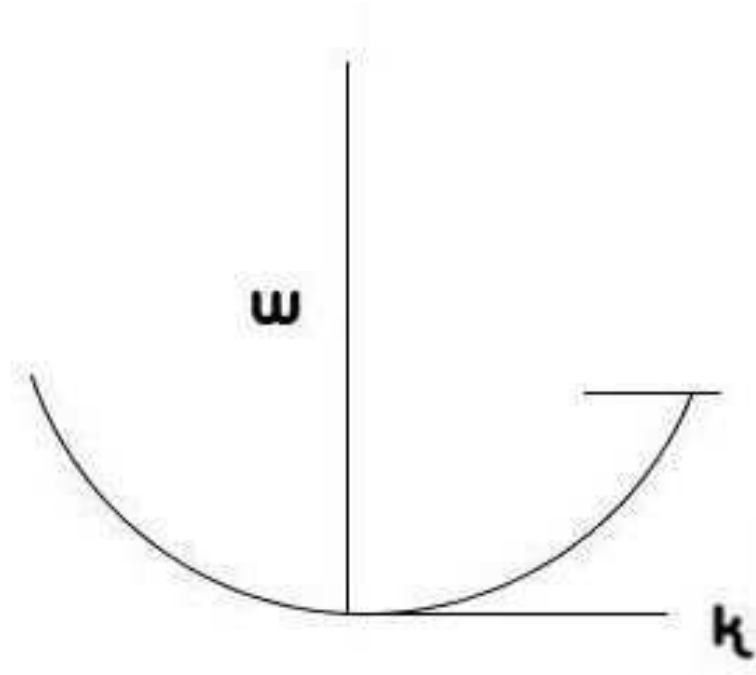


Figure 10: Structure de l'énergie en bandes dans pzb

A partir d'un état de repos (état fondamental) du cristal pour $k = 0$, les énergies d'excitation associées à l'apparition d'ondes sont bornées, on dit que les quanta d'excitation appartiennent à une bande. La densité d'énergie dans le cristal peut être quelconque car elle est liée à la densité des quanta d'excitation.

Les échanges d'énergie avec l'extérieur ne sont pas limités mais quantifiés

Les ondes les plus étudiées dans les solides sont

- les ondes électroniques : la conduction électrique
- les ondes acoustiques : ondes de contraintes (pression) et de déformation.
- les ondes électromagnétiques : propagation des champs E.M
- La capacité thermique est liée à l'apparition des excitations acoustiques dans le solide (modèle de Debye)

5 Conclusion

Un cristal a de nombreuses propriétés qui peuvent se comparer à celles du vide quantique.

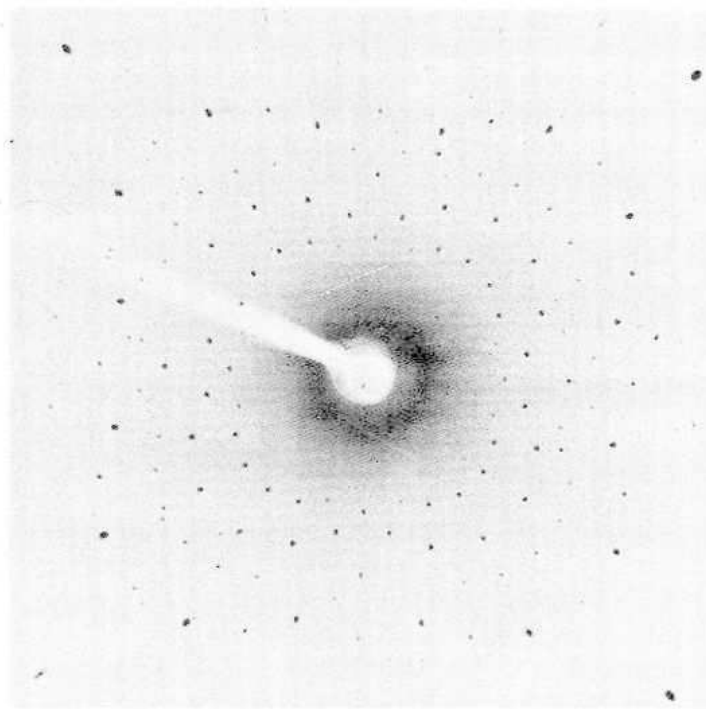
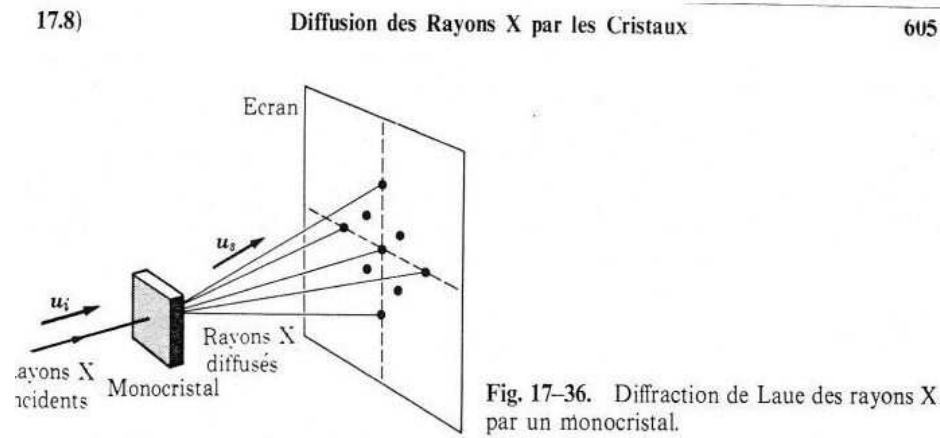


Fig. 17-37. Diagramme de diffraction de Laue d'un cristal de quartz. On a essayé de masquer l'effet du faisceau direct.

Figure 11: Expérience de diffraction X sur un cristal références [1], 605

References

- [1] M. Alonso & E. Finn. *{ Physique générale 2 , Champs et Ondes }*. InterEditions , Inc., 1986.