

Semaine 14:
Diffraction

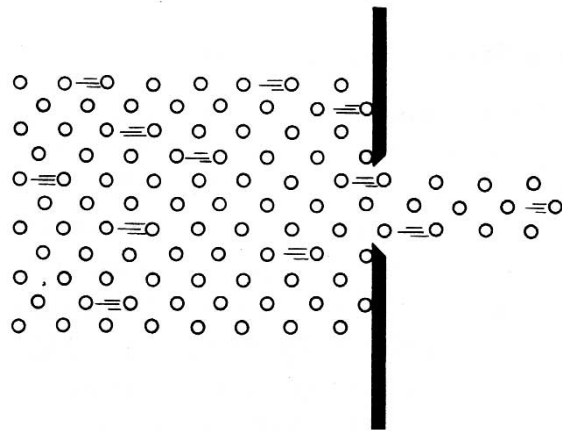
Diffraction

La diffraction fait référence à divers phénomènes qui se produisent lorsqu'une onde rencontre un obstacle, une fente, ou un trou.

Le phénomène de **diffraction** est décrit comme **l'interférence** des ondes selon le principe de Huygens-Fresnel. Les calculs de la figure de diffraction ne sont pas faciles (pour les curieux, voir Z 804).

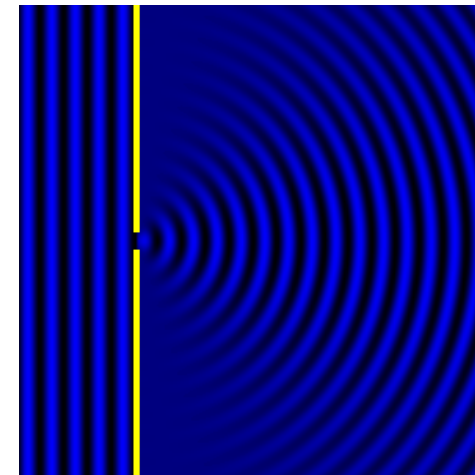
La diffraction se produit avec les ondes sonores, les ondes électromagnétiques (radio, visible, rayons X, ..),...

PARTICULES «CLASSIQUES»



Pas de diffraction

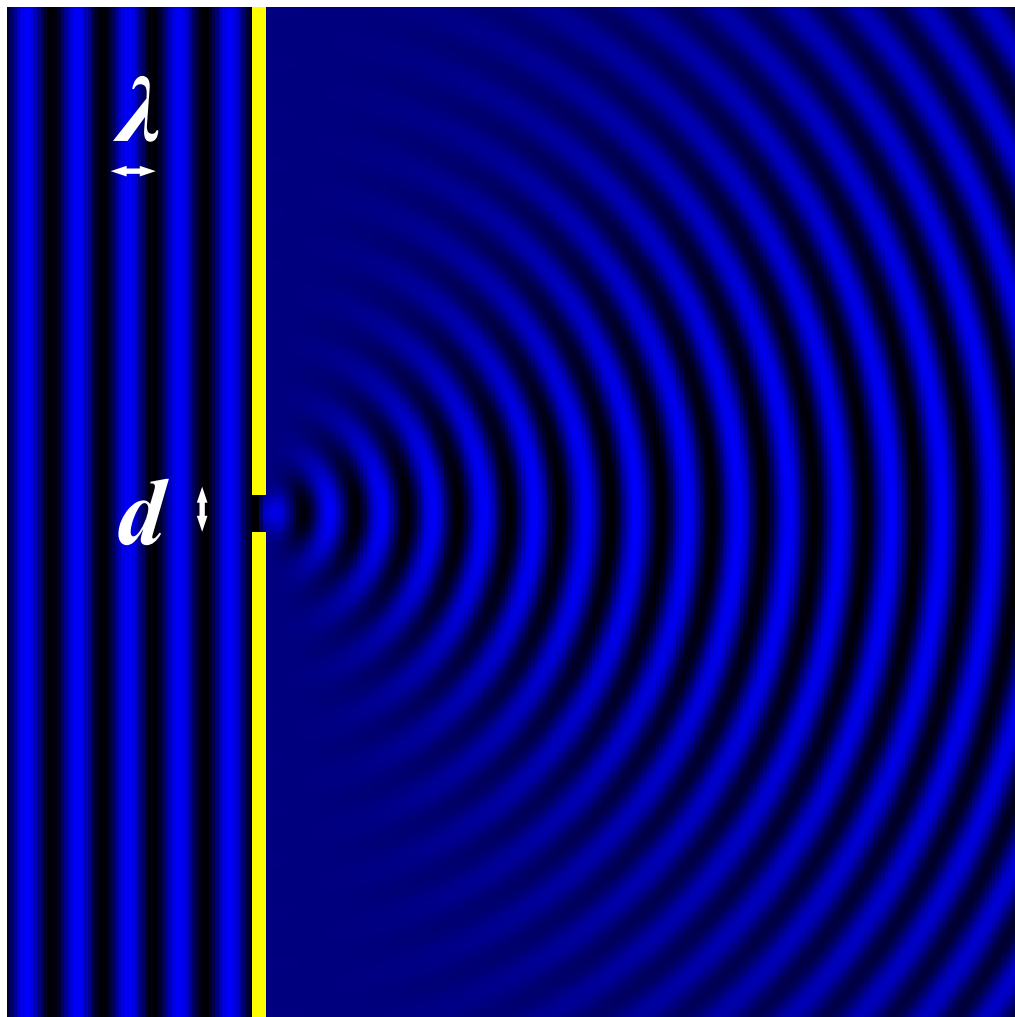
ONDES (avec $d \sim \lambda$)



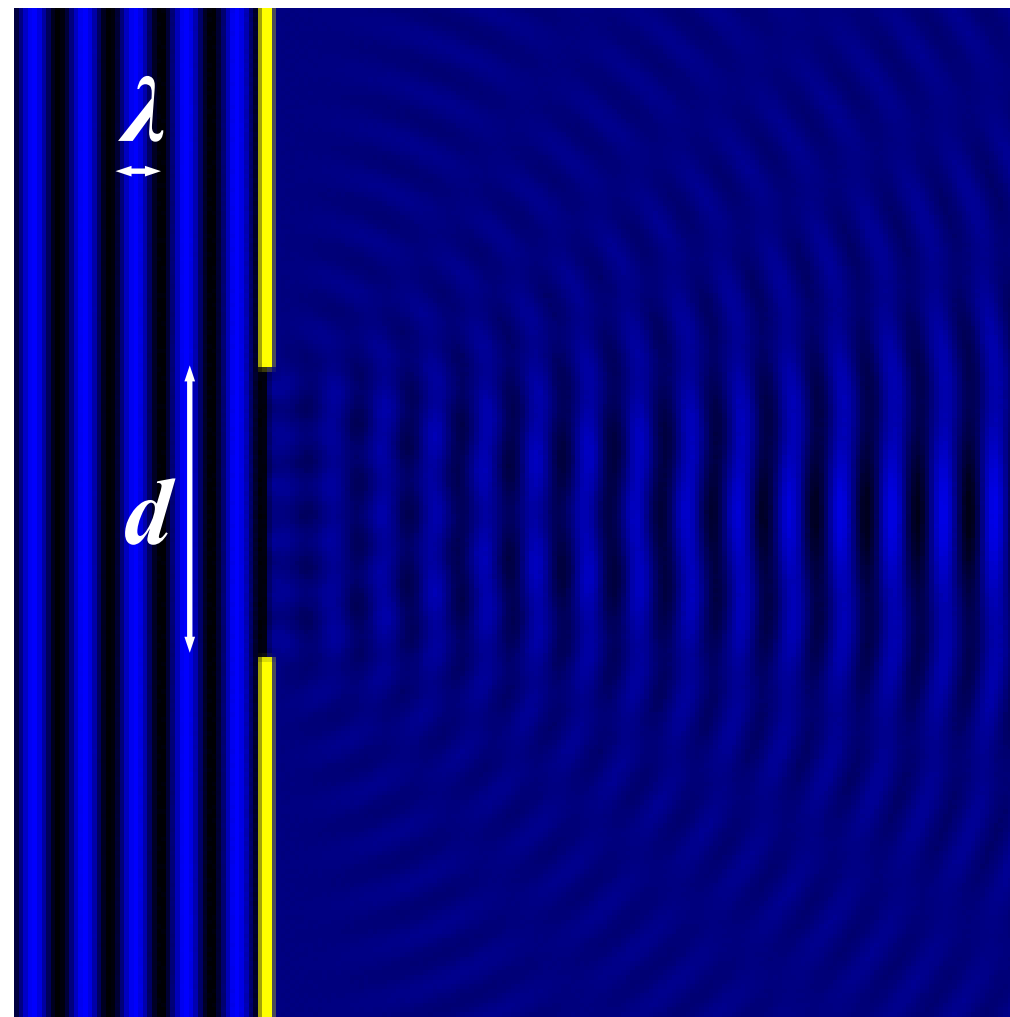
Diffraction

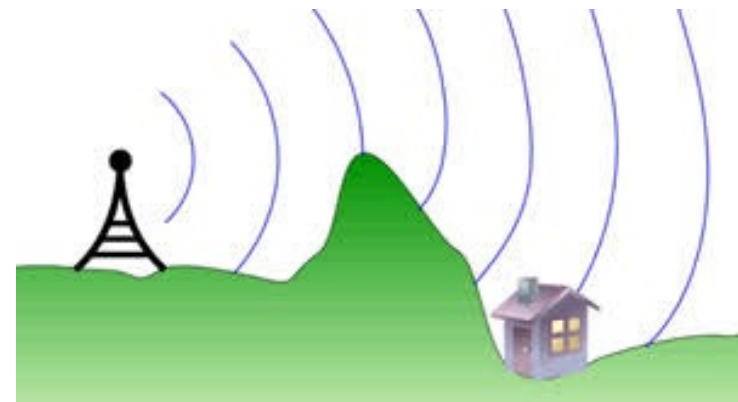
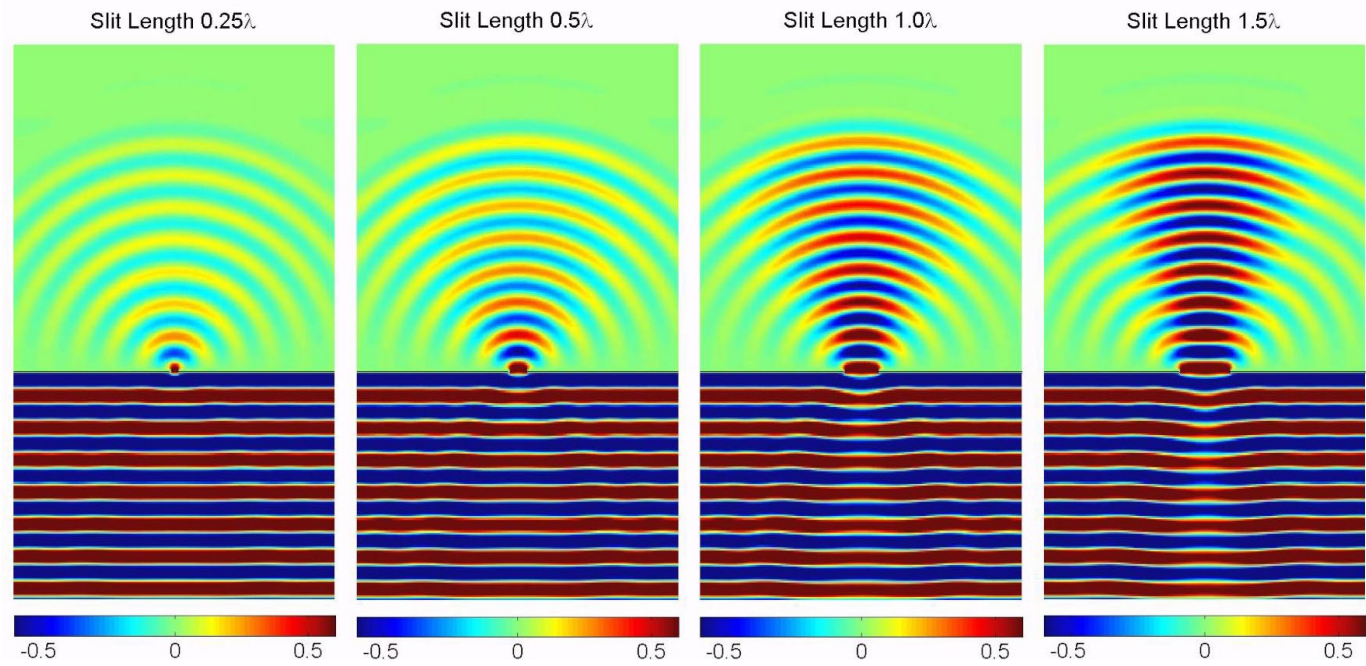
La diffraction s'observe plus facilement lorsqu'une onde est déformée par un «obstacle» de dimension comparable avec la longueur d'onde.

$$d \cong \lambda$$



$$d \gg \lambda$$

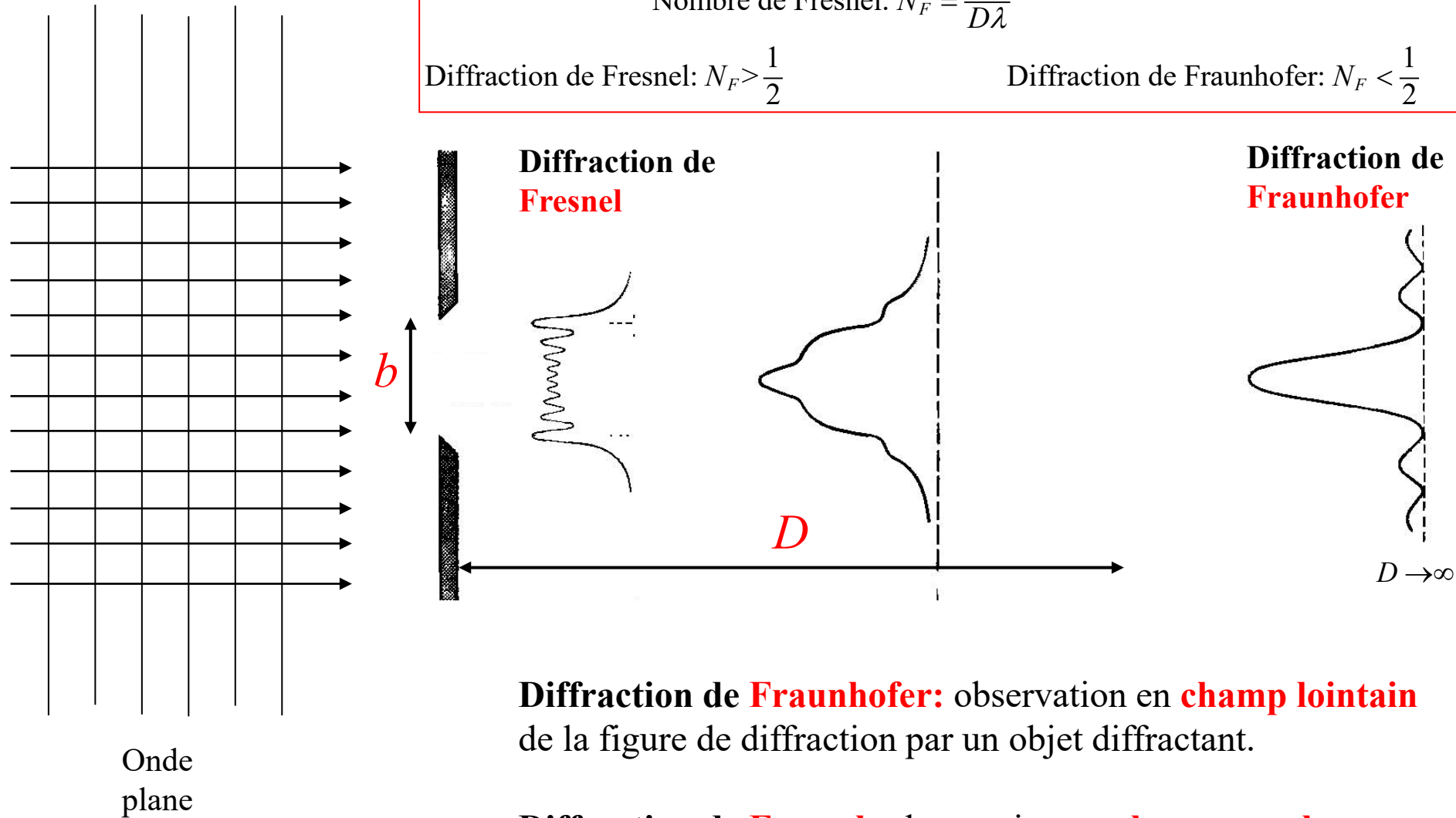




Diffraction de Fraunhofer et de Fresnel

$$\text{Nombre de Fresnel: } N_F = \frac{b^2}{D\lambda}$$

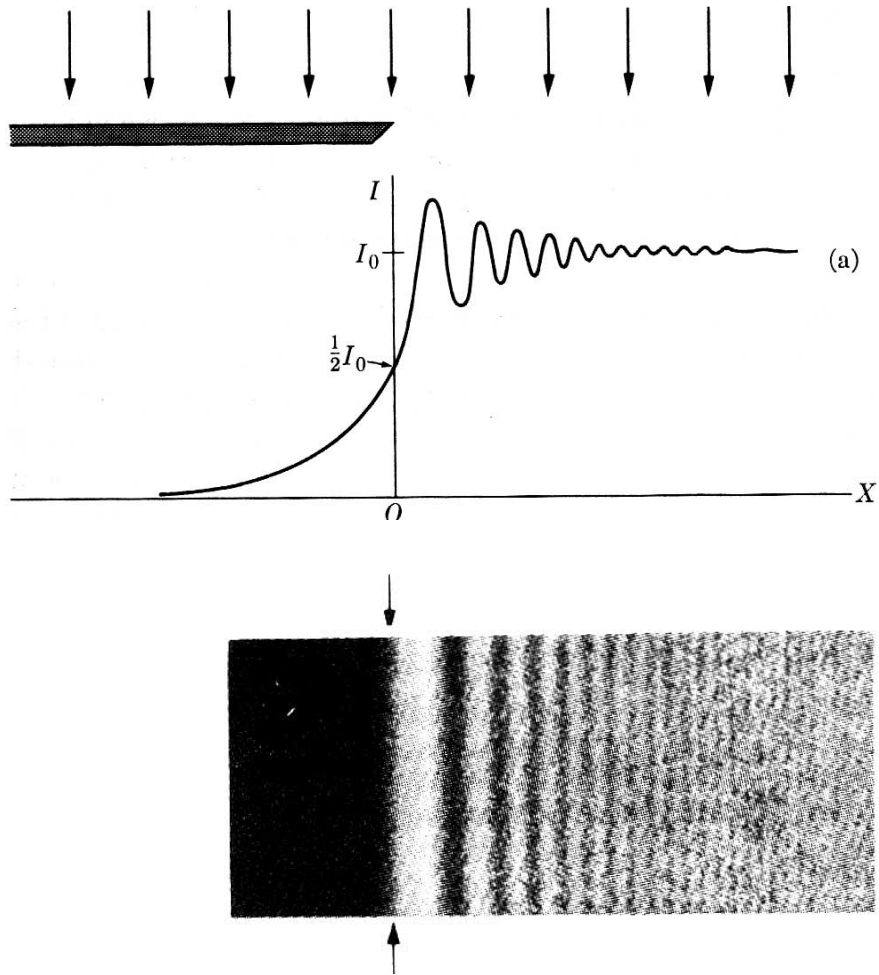
Diffraction de Fresnel: $N_F > \frac{1}{2}$ Diffraction de Fraunhofer: $N_F < \frac{1}{2}$



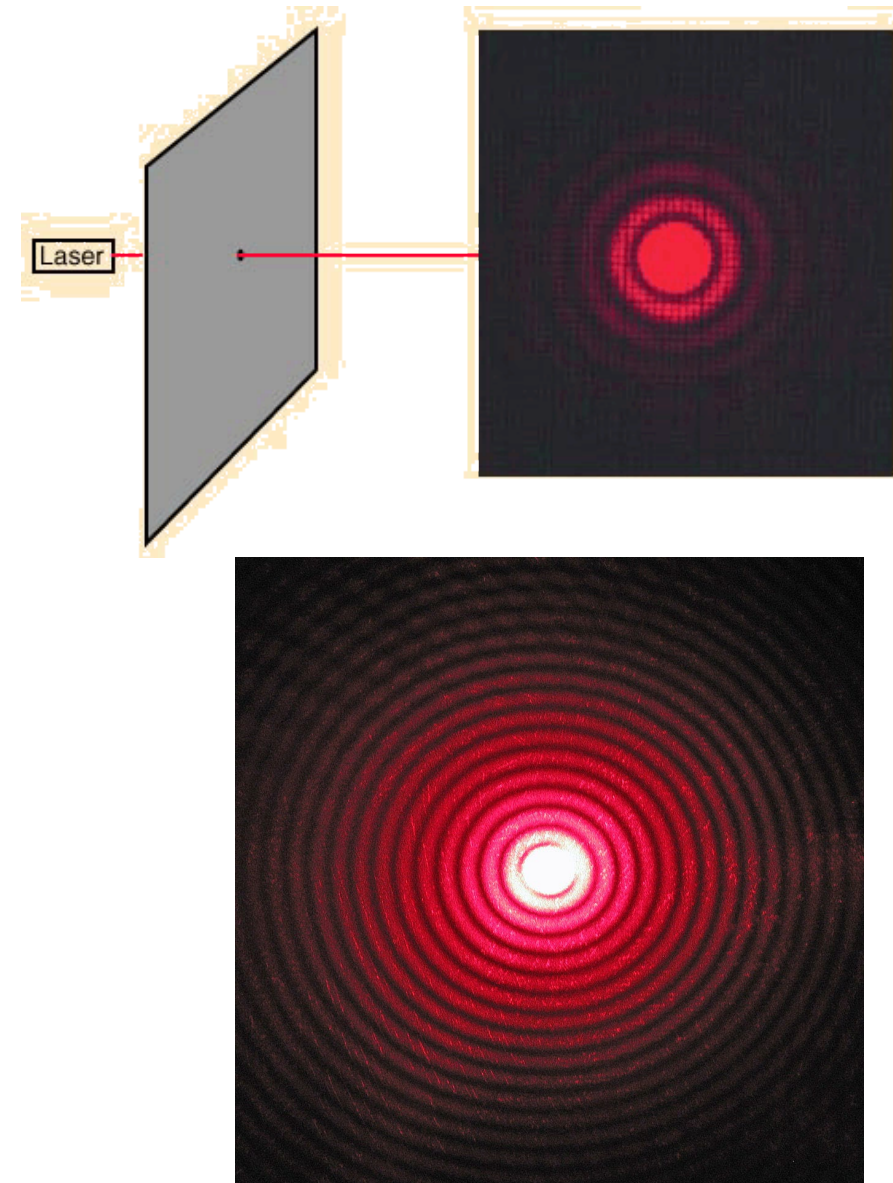
Diffraction de Fraunhofer: observation en **champ lointain** de la figure de diffraction par un objet diffractant.

Diffraction de Fresnel: observation en **champ proche** de la figure de diffraction par un objet diffractant.

Diffraction de Fresnel d'un bord droit



Diffraction de Fraunhofer d'une ouverture circulaire



Diffraction de Fresnel d'une sphère

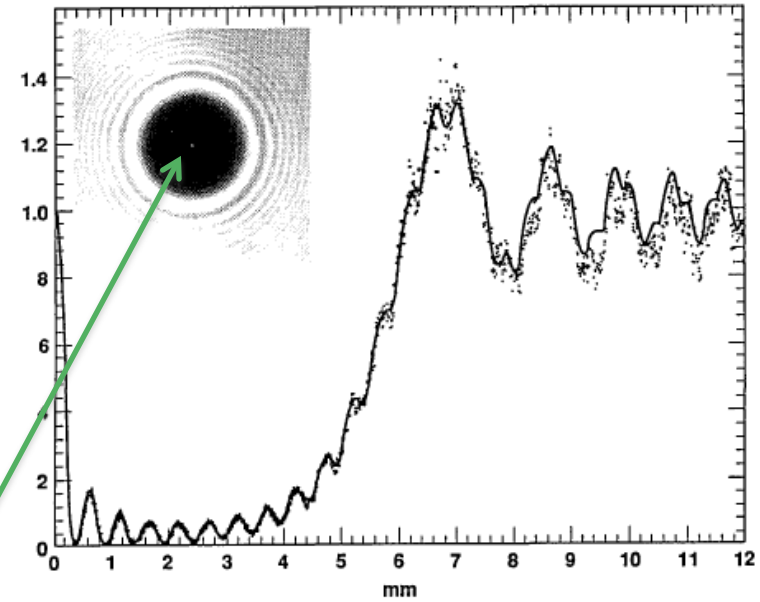
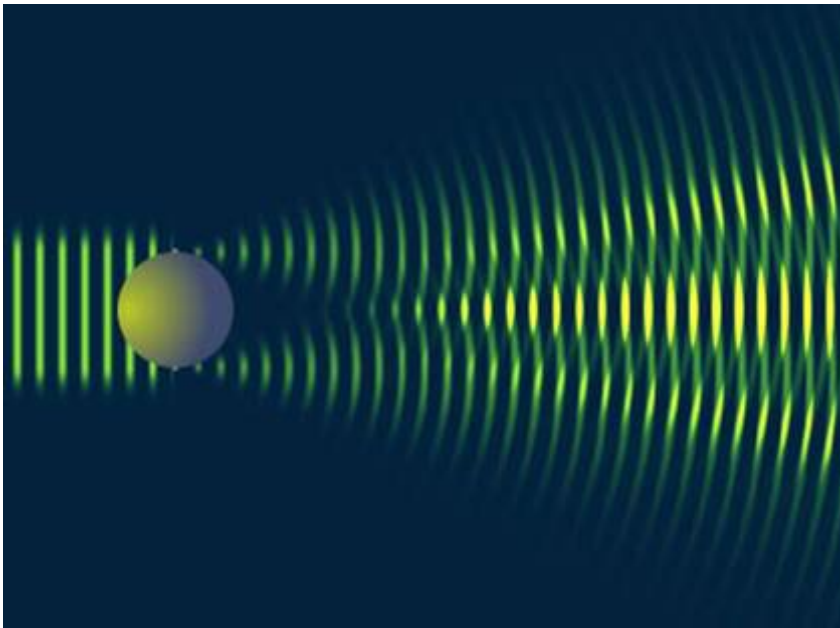
Exemple:

onde plane

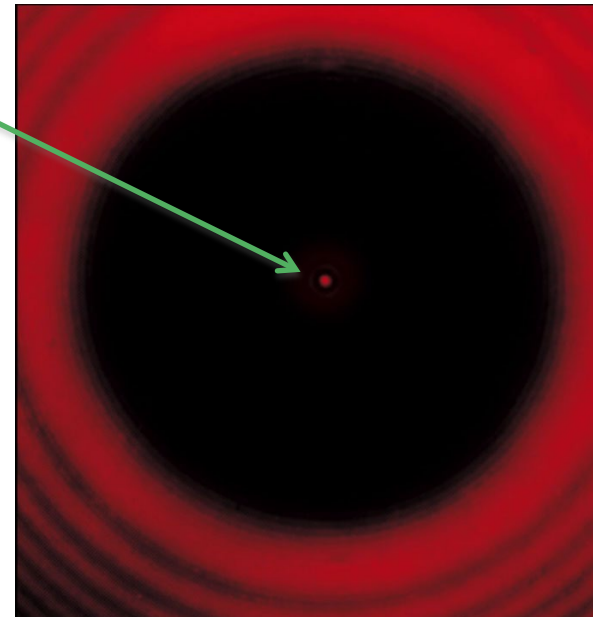
long. d'onde: $\lambda = 514 \text{ nm}$ (lumière vert)

diamètre de la sphère: $b=5 \text{ mm}$

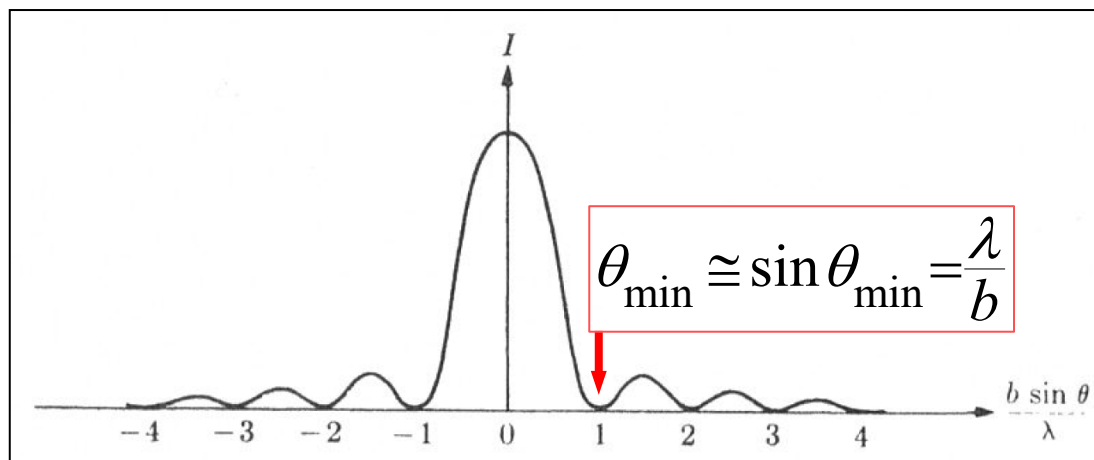
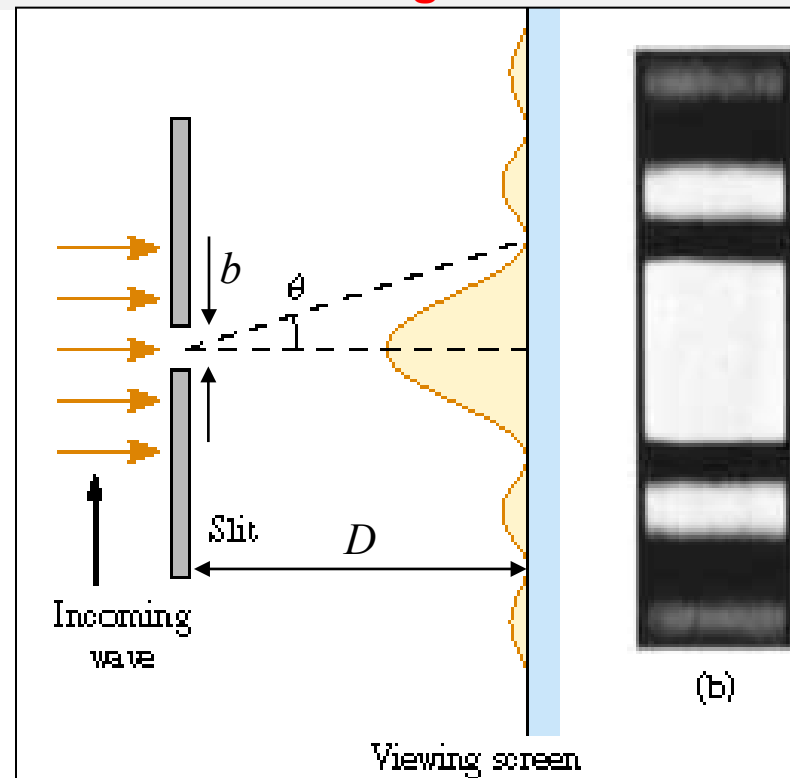
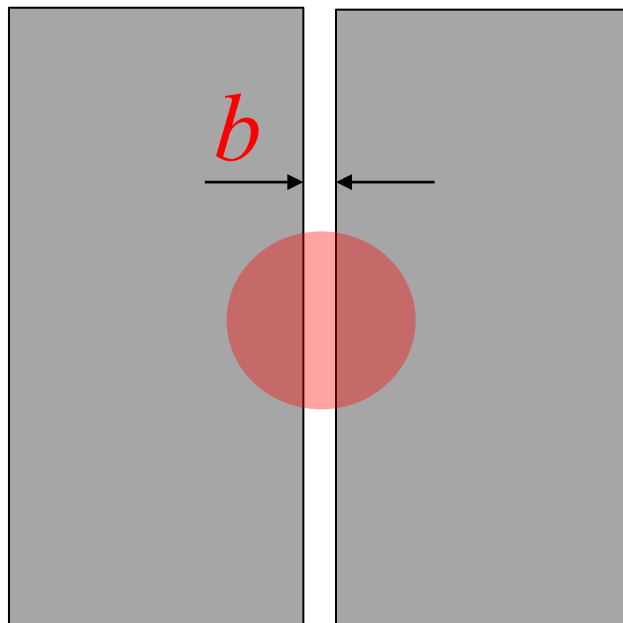
distance entre la sphère et l'écran: $D=10 \text{ m}$



Point
clair



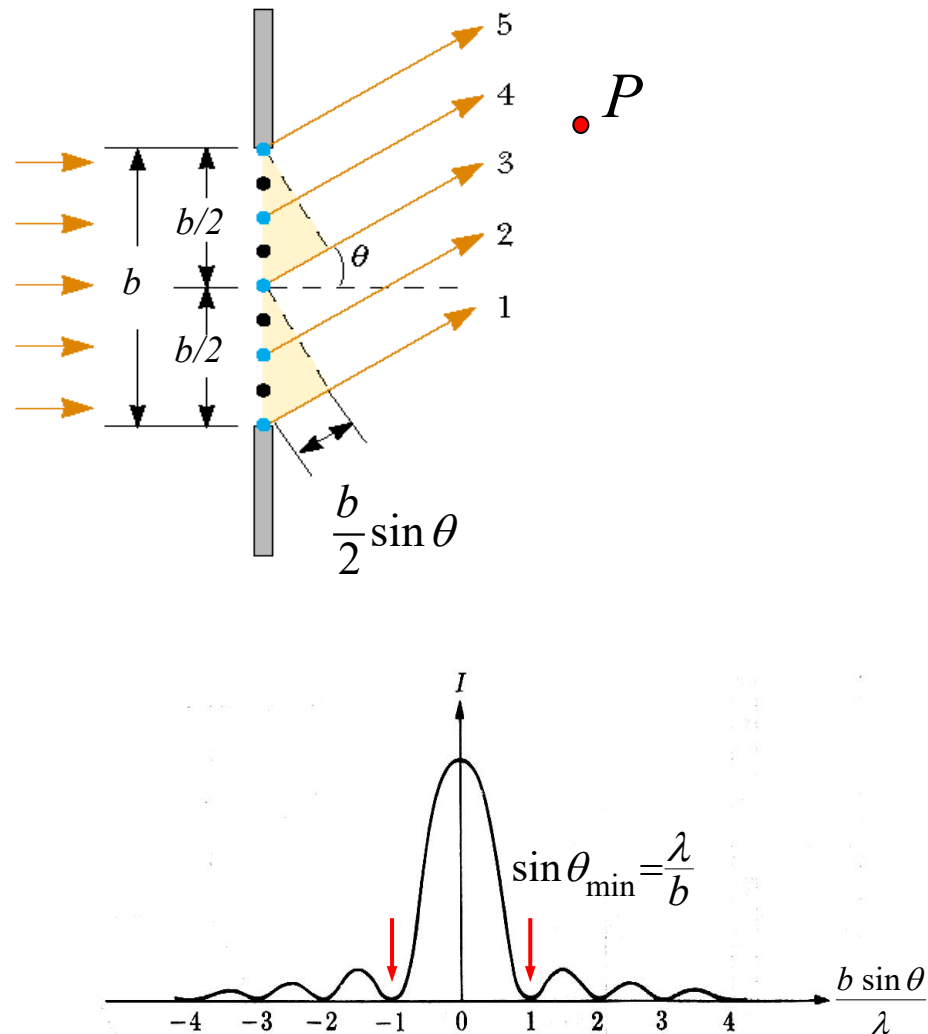
Diffraction de Fraunhofer: fente rectangulaire étroite et allongée



Dans la condition de Fraunhofer ($b^2/D\lambda \ll 1$)
et pour une onde incidente normale au
plan d'une fente très étroite et très allongée
l'intensité est zéro pour

$$\theta_{\min} \cong \sin \theta_{\min} = \frac{m\lambda}{b} \quad m = 1, 2, 3, \dots$$

Analyse «qualitative»:



Relation déphasage - différence de distance:

$$\frac{\Delta \delta}{2\pi} = \frac{\Delta x}{\lambda} \Rightarrow \Delta \Phi = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta x = k \Delta x$$

\Rightarrow

Déphasage au point P (angle θ):

$$\delta_1 = 0, \delta_2 = \pi / 2, \delta_3 = \pi, \delta_4 = 3\pi / 2, \delta_5 = 2\pi$$

$$\delta_5 - \delta_1 = kb \sin \theta = 2\pi \Rightarrow \frac{b \sin \theta}{\lambda} = 1$$

....

$$\delta_1 = 0, \delta_2 = \pi, \delta_3 = 2\pi, \delta_4 = 3\pi, \delta_5 = 4\pi$$

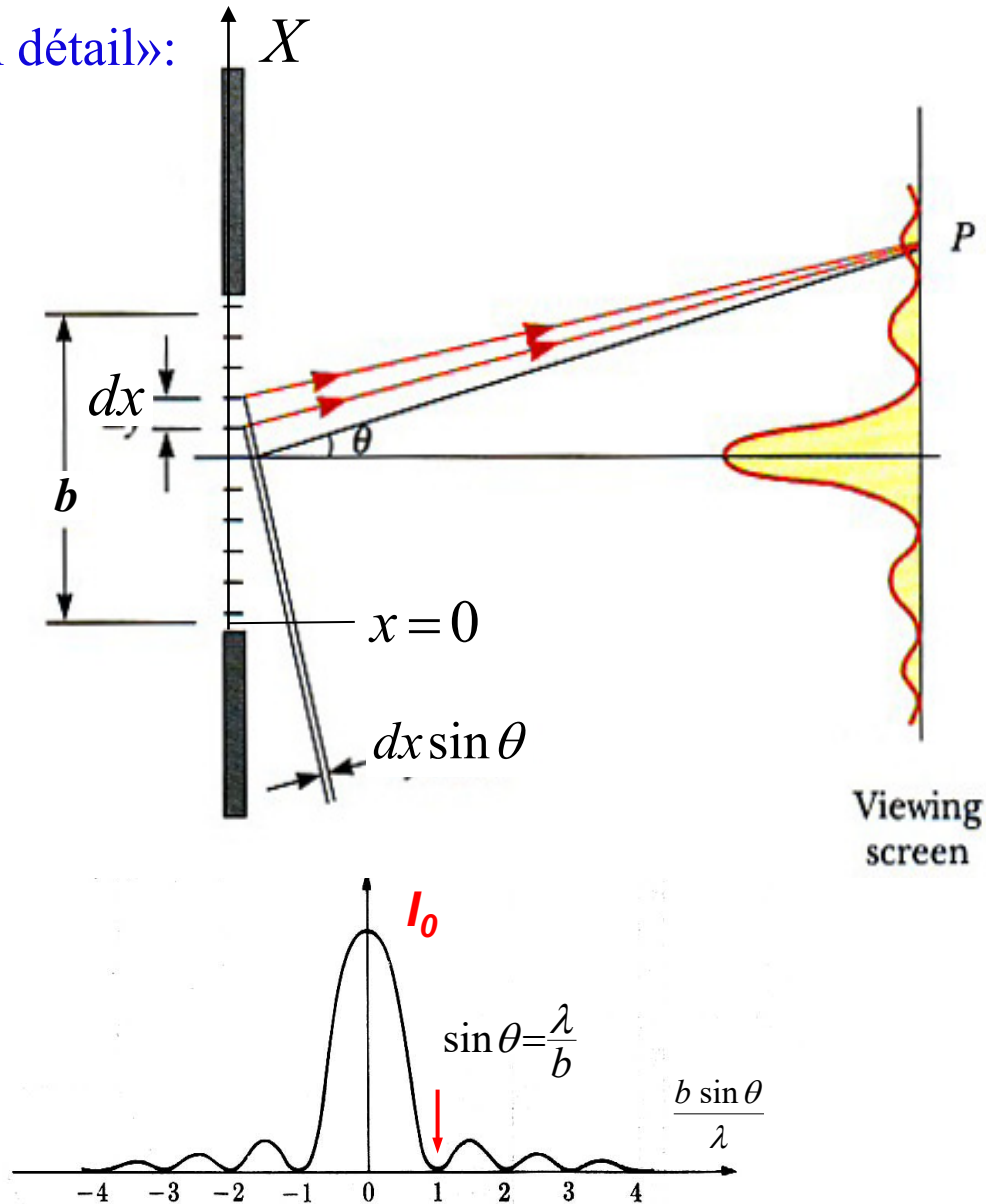
$$\delta_5 - \delta_1 = kb \sin \theta, \delta_5 - \delta_1 = 4\pi \Rightarrow \frac{b \sin \theta}{\lambda} = 2$$

.....

\Rightarrow

$$L'intensité \text{ est nulle pour } \frac{b \sin \theta}{\lambda} = m \quad m = 1, 2, 3, \dots$$

Analyse «plus en détail»:



Relation déphasage - différence de distance:

$$\frac{\Delta \delta}{2\pi} = \frac{\Delta r}{\lambda} \Rightarrow \Delta \delta = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta r = k \Delta r \Rightarrow d\delta = k dx \sin \theta \Rightarrow$$

$$\delta(x) = \int_0^x k dx \sin \theta = kx \sin \theta = (2\pi x / \lambda) \sin \theta \Rightarrow$$

$$\delta(b) = \alpha = (2\pi b / \lambda) \sin \theta$$

$$\xi_0(P) = OP = 2\rho \sin(\alpha/2) = 2\rho \sin(\pi b \sin \theta / \lambda)$$

$$\xi_0(\theta = 0) = \widehat{OP} = \rho \alpha = \rho(2\pi b \sin \theta / \lambda)$$

\Rightarrow

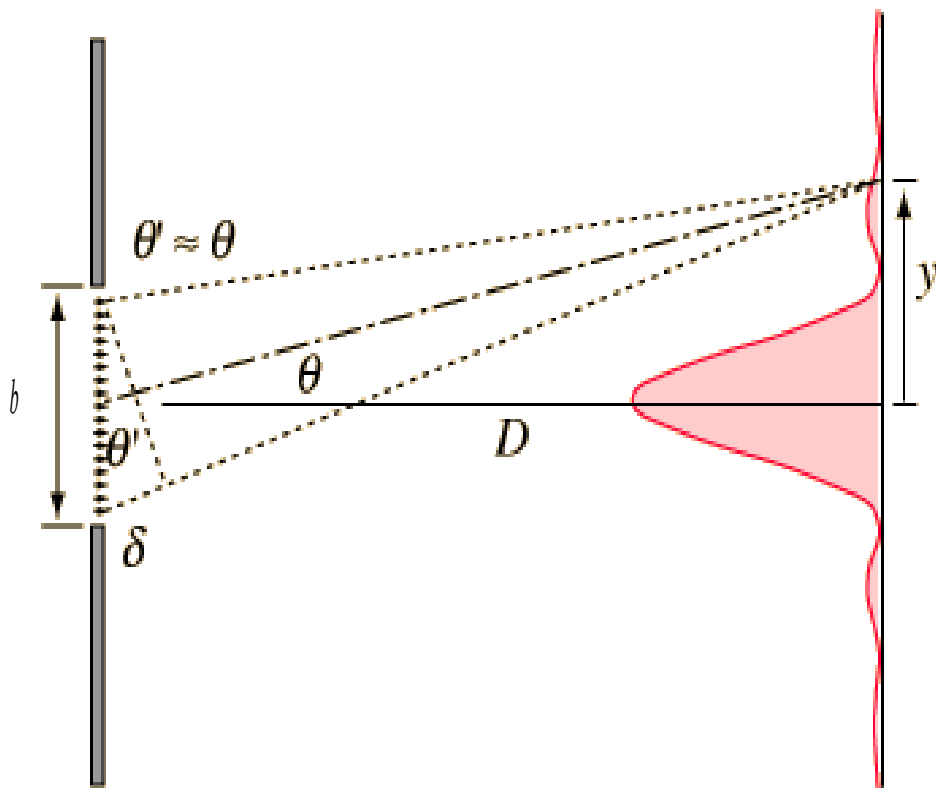
$$I(\theta) \propto [\xi_0(P)]^2 \quad I(\theta = 0) = I_0 \propto [\xi_0(\theta = 0)]^2$$

\Rightarrow

$$I(\theta) = I_0 \left[\frac{\sin(\pi b \sin \theta / \lambda)}{\pi b \sin \theta / \lambda} \right]^2$$

\Rightarrow

$$I(\theta) = 0 \quad \text{pour} \quad (b \sin \theta / \lambda) = m \quad m = 1, 2, 3, \dots$$



$$I = I_0 \left[\frac{\sin(\pi b \sin \theta / \lambda)}{\pi b \sin \theta / \lambda} \right]^2$$

$$\Rightarrow$$

Condition pour le minimum:

$$b \sin \theta_{\min} = m \lambda \quad m = 1, 2, 3, \dots$$

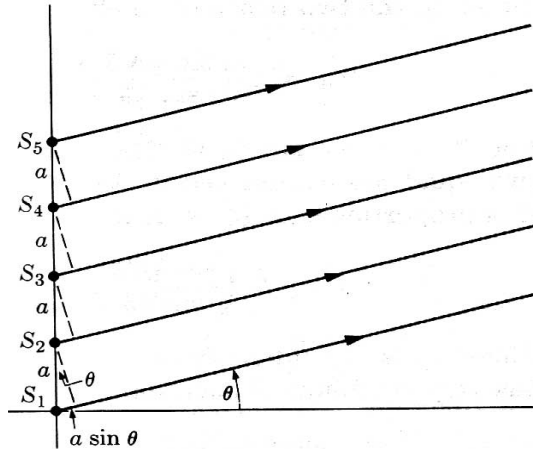
$$\Rightarrow$$

$$\theta_{\min} \cong \frac{m \lambda}{b}$$

$$y_{\min} \cong m D \frac{\lambda}{b}$$

$y = D \tan \theta$ mais pour petit θ $\theta \cong \sin \theta \cong \tan \theta \Rightarrow y \cong \theta D$

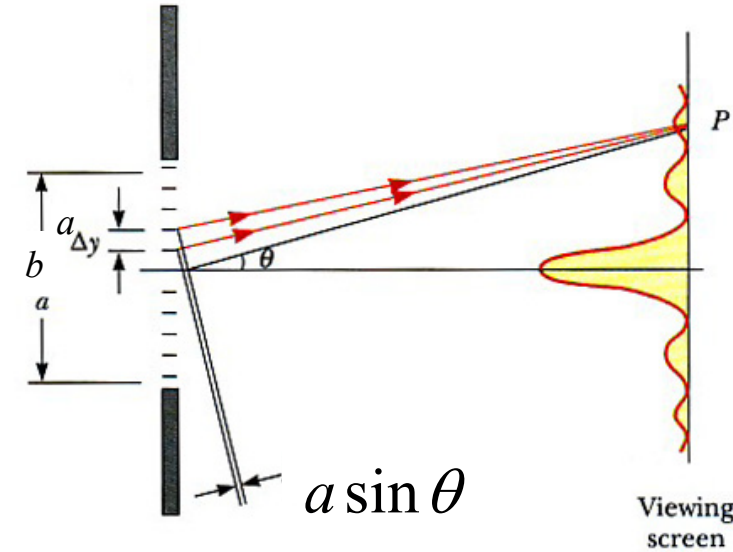
N sources ponctuelles



$$I = I_1 \left(\frac{\sin(N\pi a \sin \theta / \lambda)}{\sin(\pi a \sin \theta / \lambda)} \right)^2 ; I_0 = N^2 I_1$$

$$I = \frac{I_0}{N^2} \left(\frac{\sin(N\pi a \sin \theta / \lambda)}{\sin(\pi a \sin \theta / \lambda)} \right)^2$$

$N = \infty$ sources infinitésimales



$$N \rightarrow \infty ; a \rightarrow 0 ; Na = b ; I_1 \rightarrow 0 ; I_0 \rightarrow I_0$$

$$I = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{I_0}{N^2} \left(\frac{\sin(\pi b \sin \theta / \lambda)}{\sin(\pi b \sin \theta / N\lambda)} \right)^2 \cong I_0 \left(\frac{\sin(\pi b \sin \theta / \lambda)}{\pi b \sin \theta / \lambda} \right)^2$$

Diffraction

=

Interférence d'un très grand nombre de sources «infinitésimales»

Exemple: Diffraction par une fente très étroite et très allongée

Largeur de la fente $b = 100 \mu\text{m}$, Distance d'observation $D = 1 \text{ m}$,

Lumière monochromatique de longueur d'onde $\lambda = 600 \text{ nm}$.

⇒

La condition de Fraunoufer

$$\frac{b^2}{D\lambda} = 0.017 \ll 1/2$$

est vérifiée.

Première zéro ($m=1$):

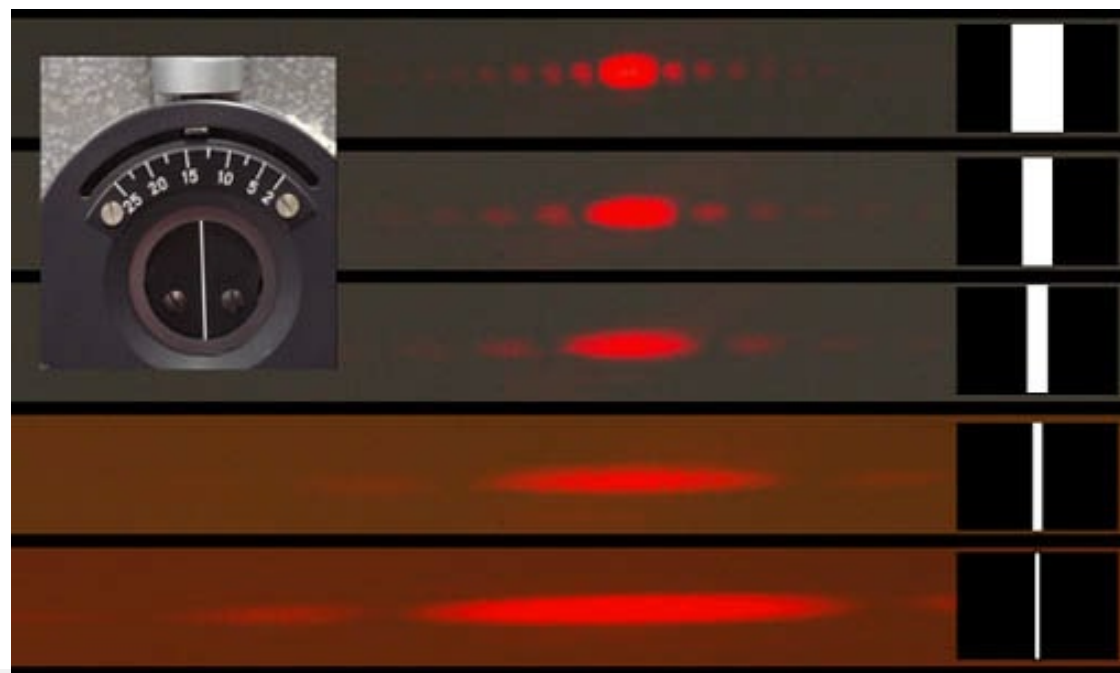
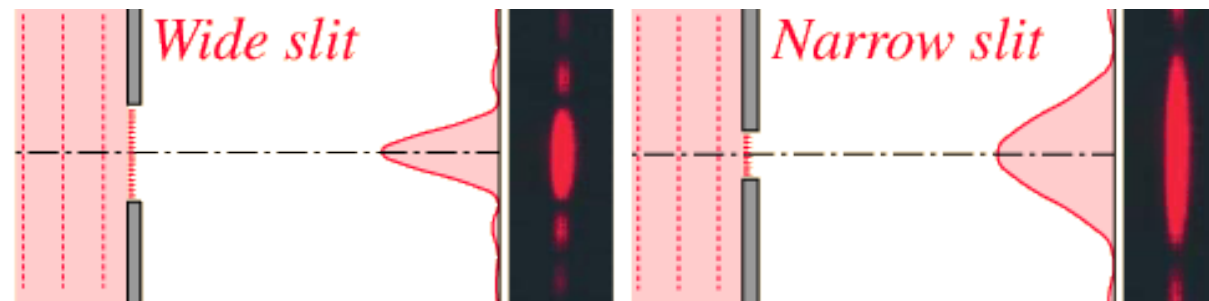
$$\sin \theta = \lambda / b$$

⇒

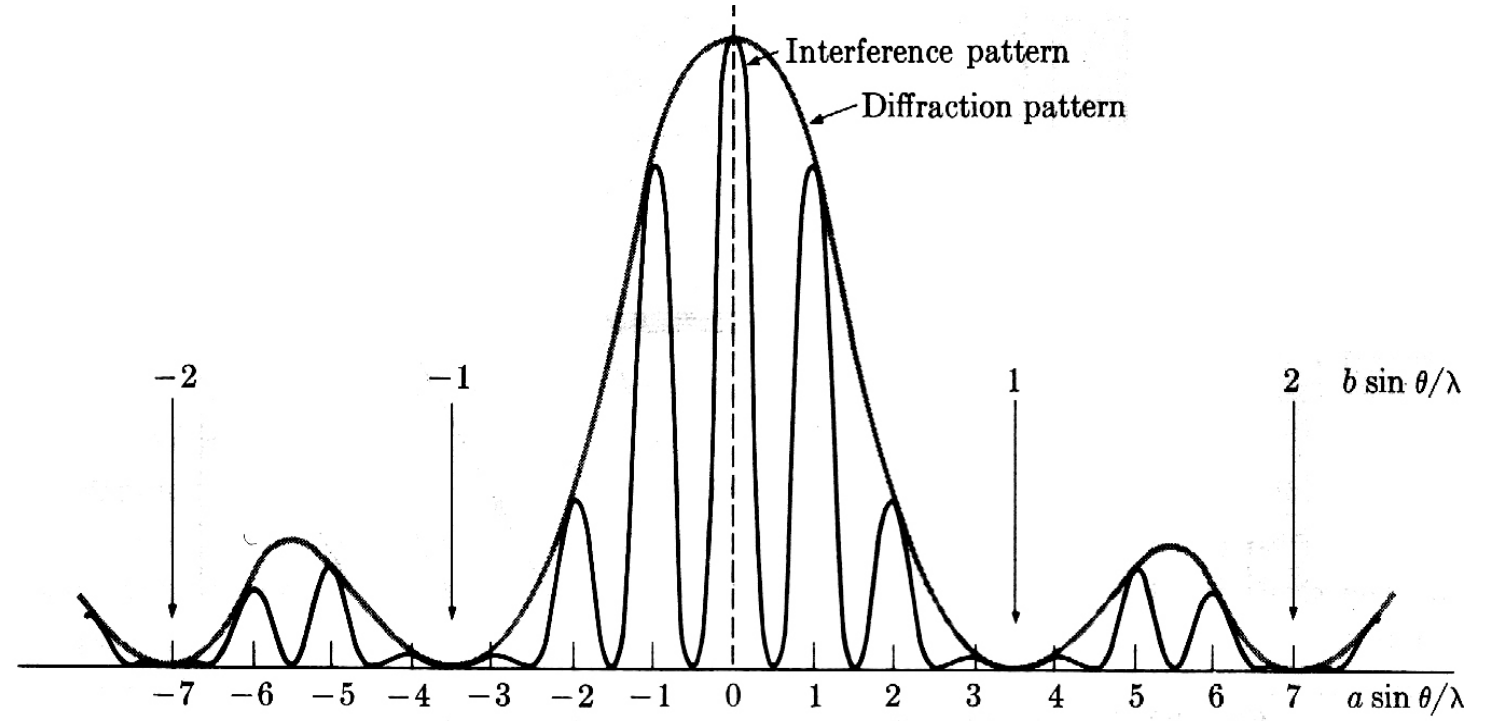
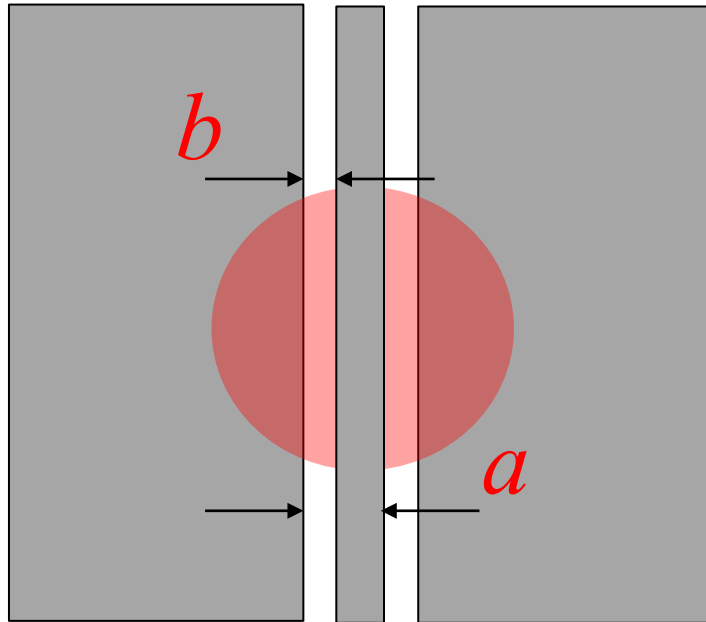
$$\theta = \arcsin(\lambda / b) = 0.34^\circ$$

⇒

$$y(I = 0) = D \sin \theta = 6 \text{ mm}$$



Diffraction de Fraunhofer et interférence de deux fentes étroites et allongée (exp. de Young)



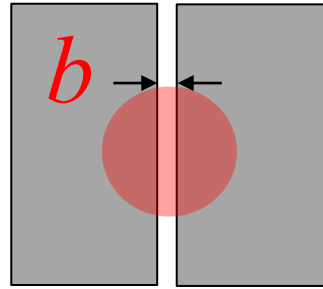
$$I(\theta) = I_0 \left(\frac{\sin(\pi b \sin \theta / \lambda)}{\pi b \sin \theta / \lambda} \right)^2 \cos^2 \frac{\pi a \sin \theta}{\lambda}$$



diffraction
d'une fente

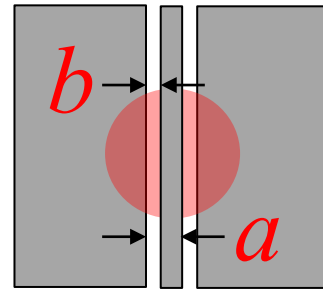
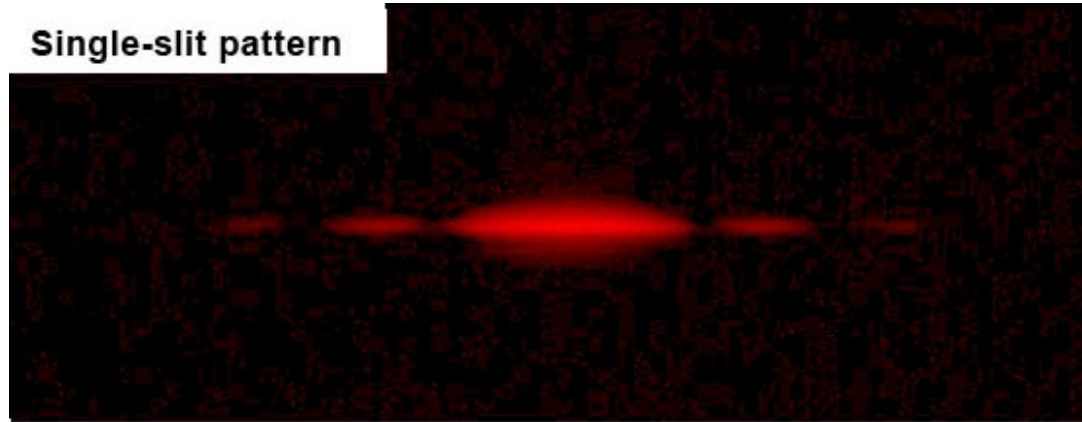


interférence
des deux fentes



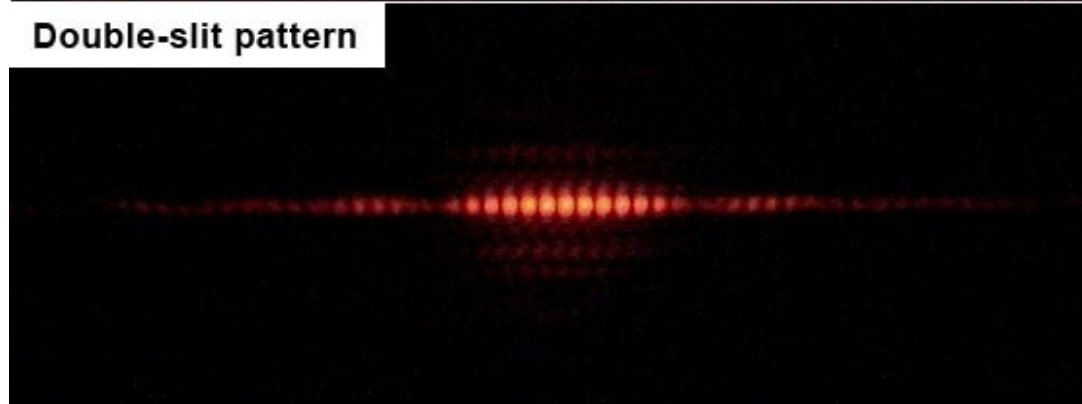
a : ----
 b : 0.1 mm
 λ : 633 nm (laser rouge)

Single-slit pattern



a : 0.7 mm
 b : 0.1 mm
 λ : 633 nm (laser rouge)

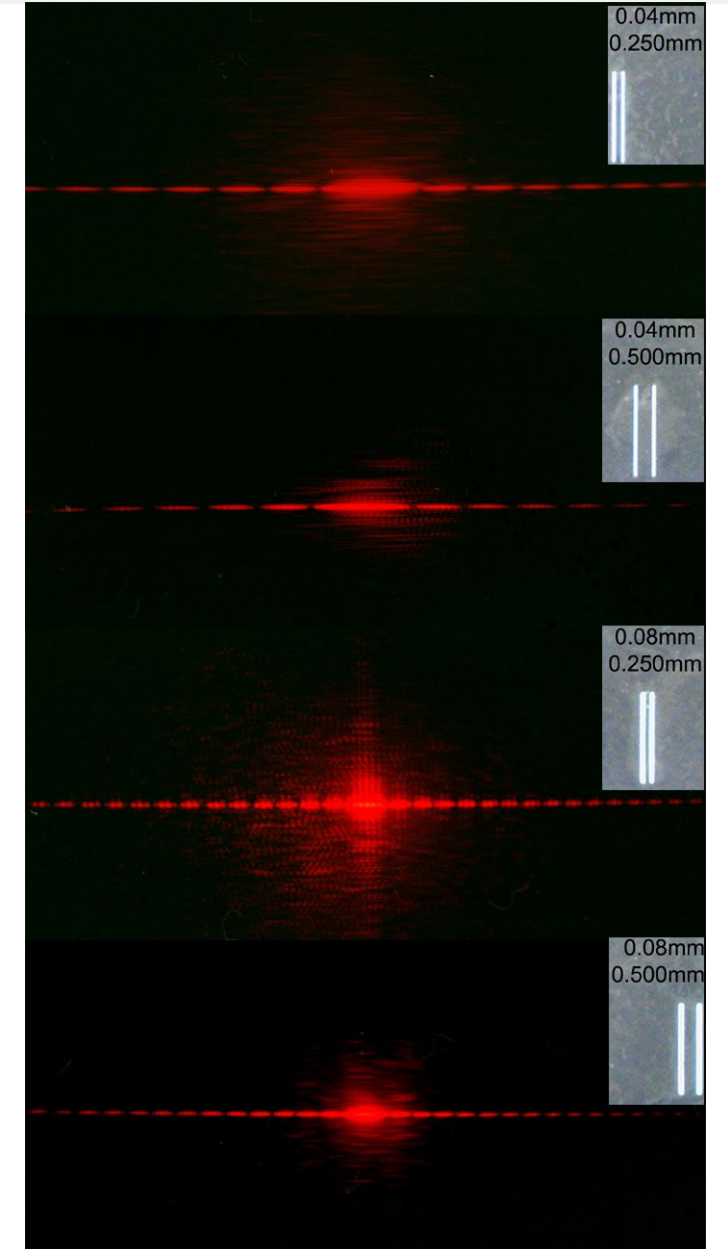
Double-slit pattern



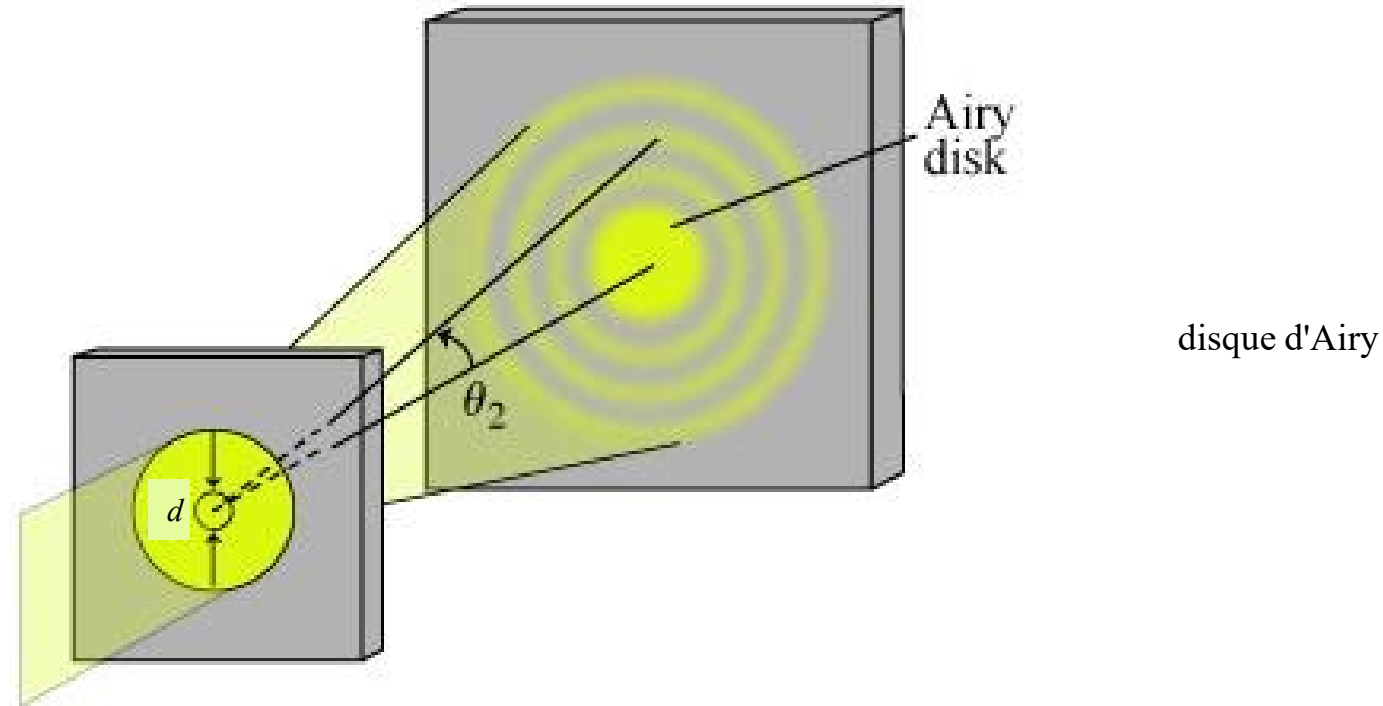
$$I(\theta) = I_0 \left(\frac{\sin(\pi b \sin \theta / \lambda)}{\pi b \sin \theta / \lambda} \right)^2 \cos^2 \frac{\pi a \sin \theta}{\lambda}$$

↑
diffraction
 d'une fente

↑
interférence
 des deux fentes



Diffraction de Fraunhofer d'une ouverture circulaire

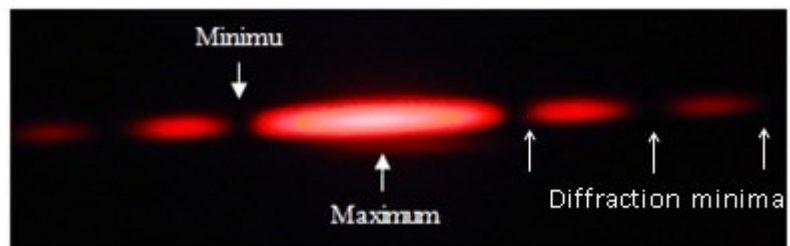
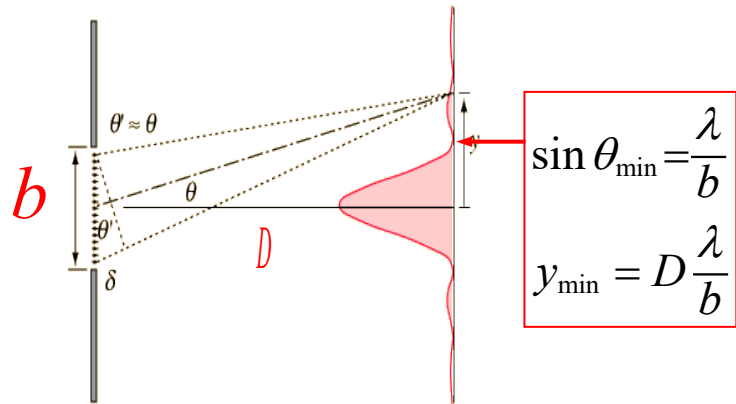
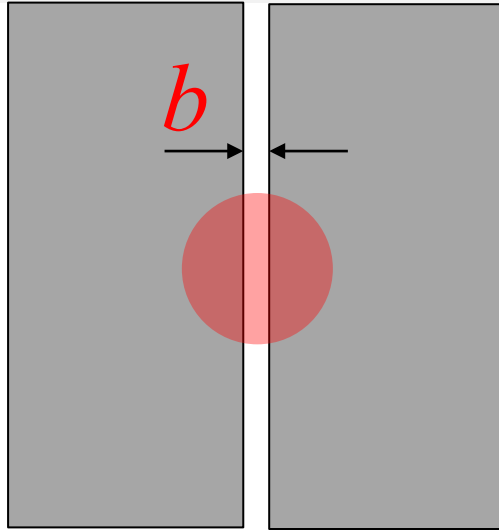


Lorsque la lumière passe par une petite ouverture circulaire, elle ne produit pas un point lumineux en tant qu'image, mais plutôt un disque circulaire diffus connu sous le nom de **disque d'Airy** entouré par des anneaux circulaires concentriques beaucoup plus faibles.

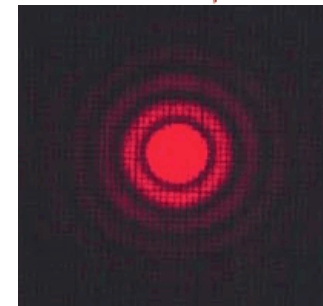
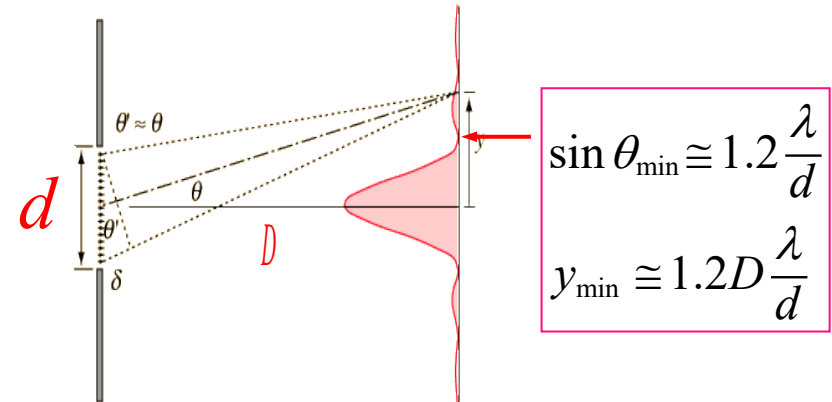
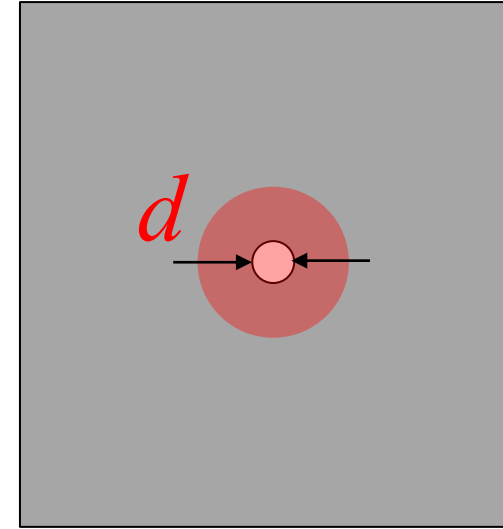
Cet exemple de diffraction est d'une grande importance car l'oeil et de nombreux instruments optiques (microscopes, télescopes, appareils photo,...) ont des ouvertures circulaires.

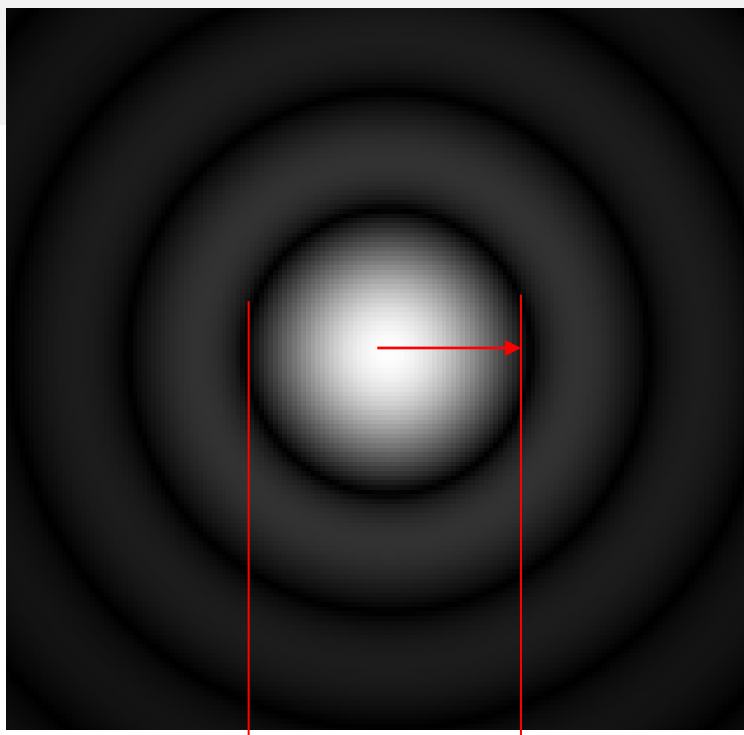
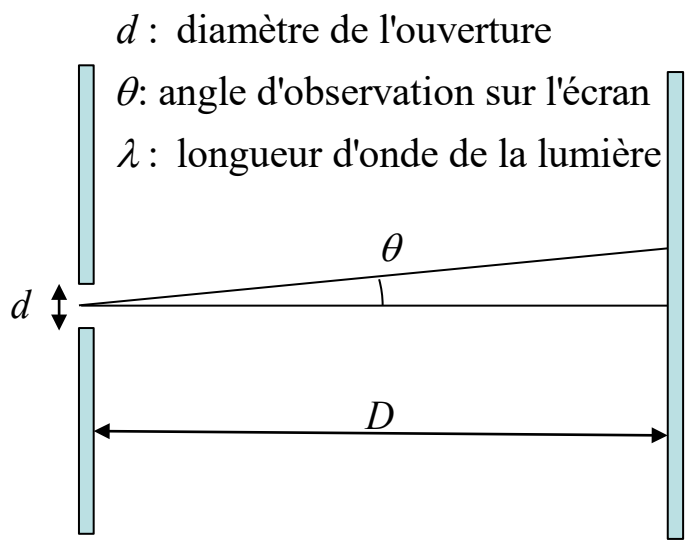
Si cet «étalement» de l'image de la source ponctuelle est plus grand que celui produit par les aberrations du système, on dit que le processus d'imagerie est limité par la diffraction et c'est le meilleur qui peut être fait avec cette taille d'ouverture. Cette limitation de la résolution des images est quantifiée avec le critère de Rayleigh.

Fente rectangulaire
étroite et allongée



Ouverture circulaire



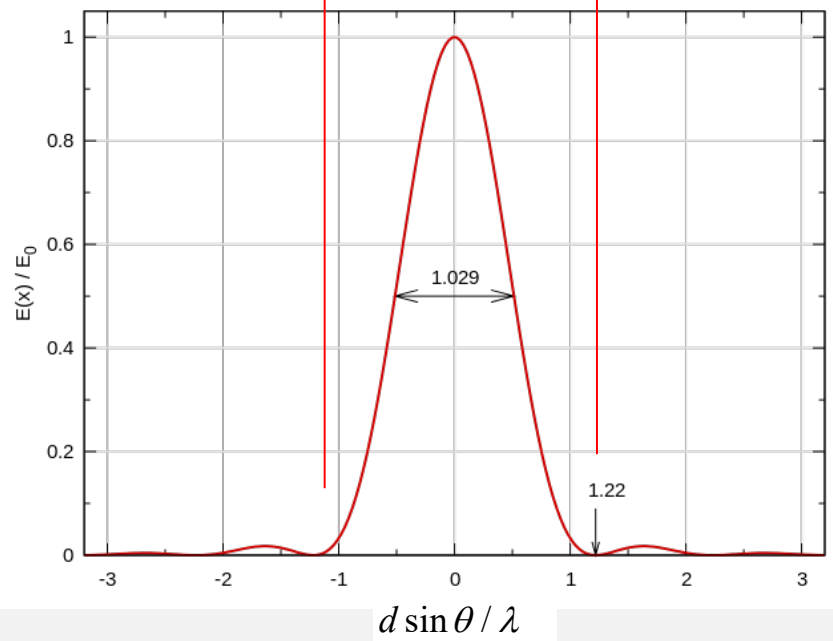


Premier zéro:

$$\frac{d \sin \theta_{\min}}{\lambda} \cong 1.2 \Rightarrow \sin \theta_{\min} \cong 1.2 \frac{\lambda}{d}$$

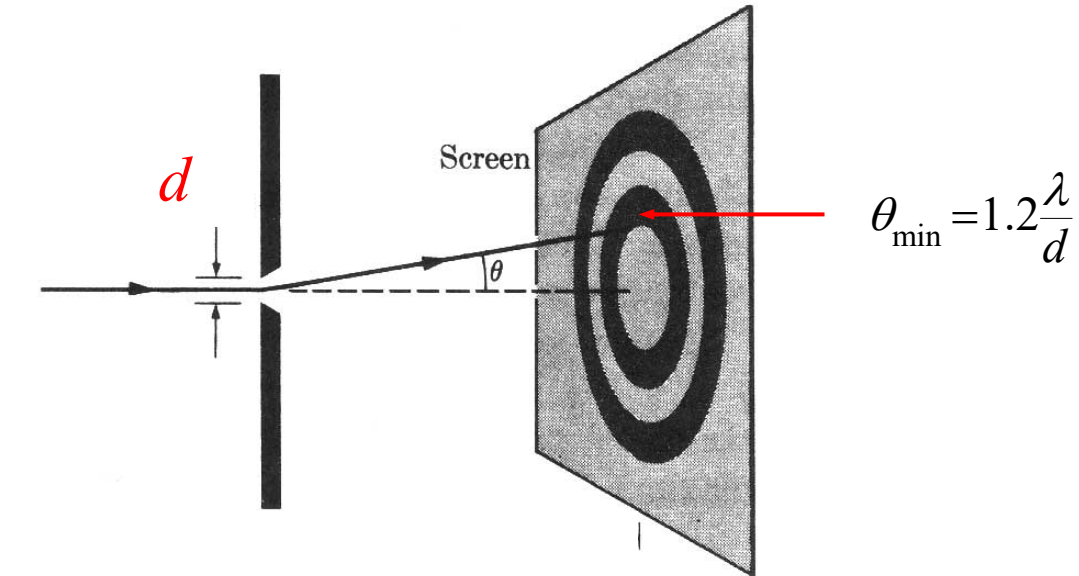
Pour θ_{\min} petit $\Rightarrow \theta_{\min} \cong 1.2 \frac{\lambda}{d}$

$$y_{\min} = D \tan \theta_{\min} \cong D \sin \theta_{\min} \cong D \theta_{\min} \cong 1.2 D \frac{\lambda}{d}$$



point	x	$E(x) / E_0$
point à mi-hauteur	0.514497	0.5
premier zéro	1.219670	0
maximum local	1.634719	0.017498
deuxième zéro	2.233131	0
maximum local	2.679292	0.004158
troisième zéro	3.238315	0

Pouvoir de résolution (critère de Rayleigh)



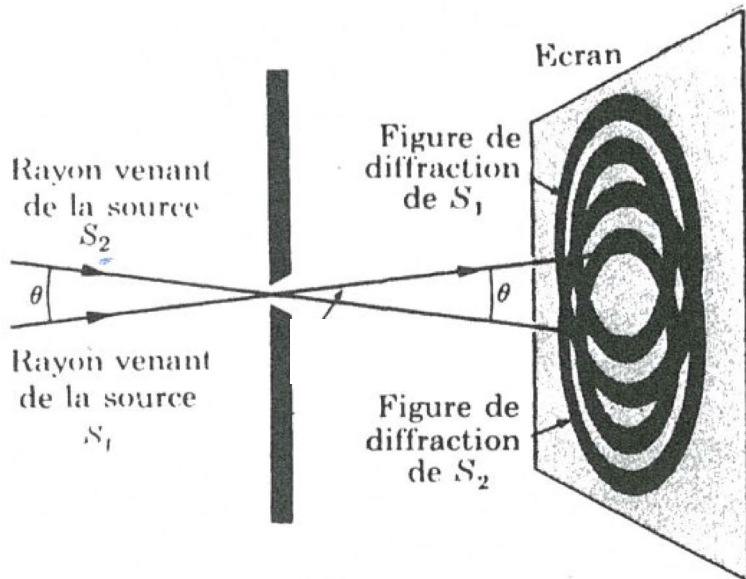
Pouvoir de résolution:

Angle minimum sous-tendu par deux ondes provenant de deux sources ponctuelles éloignées tel qu'il permette à leurs figures de diffraction respectives d'être distinguées.

Critère de Rayleigh:

On peut résoudre les deux sources si le maximum de la première image de diffraction tombe sur le (ou au delà du) premier minimum de la deuxième, i.e.,:

$$\theta > 1.2 \frac{\lambda}{d}$$



Résolution spatiale:

La **résolution angulaire** peut être convertie en **résolution spatiale** par multiplication de l'angle (en radians) par la distance à l'objet:

$$r \cong D\theta \Rightarrow$$

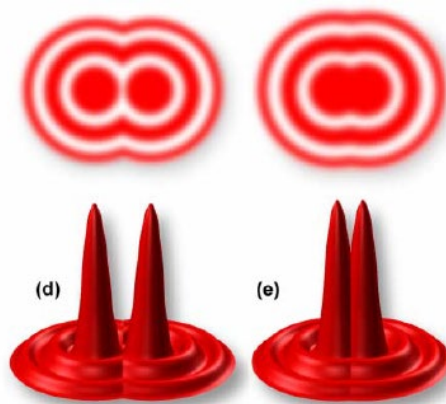
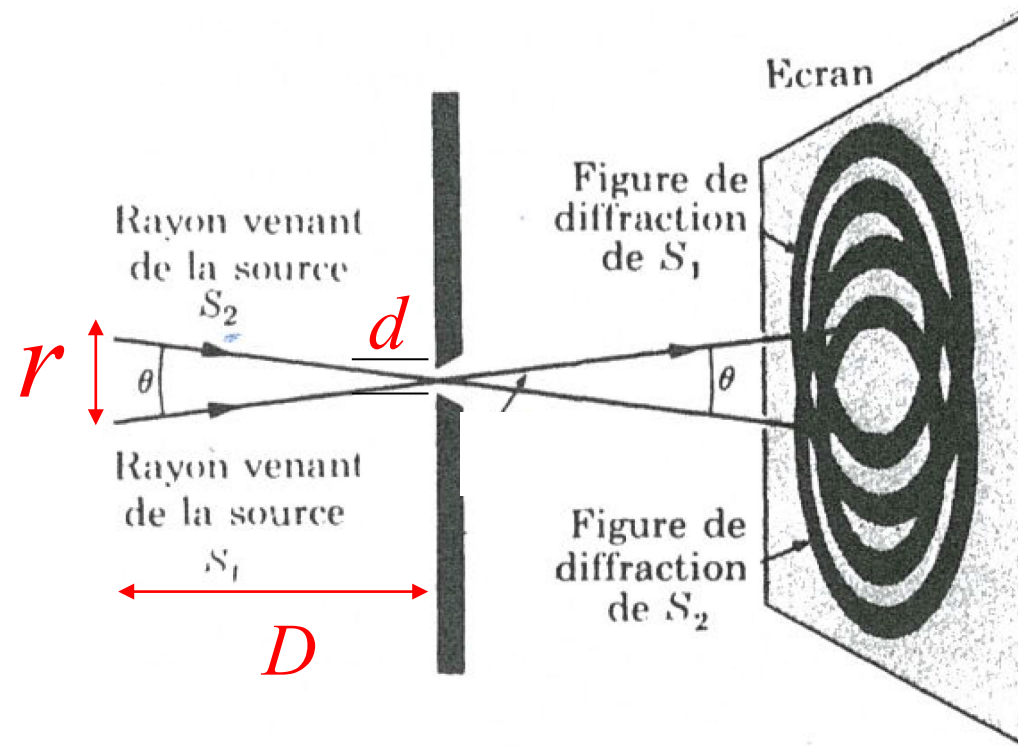
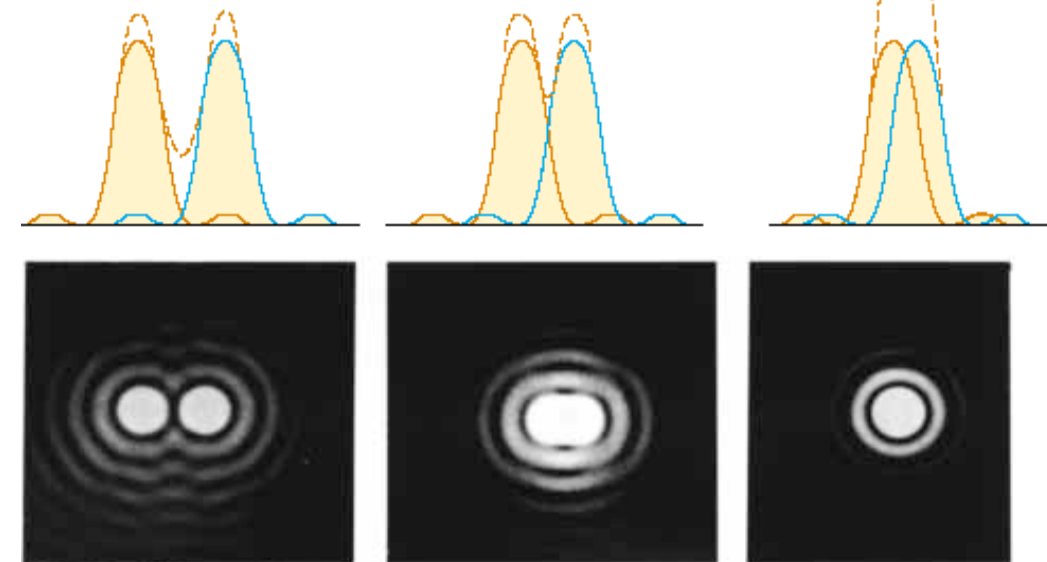
$$r_{\min} = D\theta_{\min} \cong 1.2D \frac{\lambda}{d}$$

r_{\min} : résolution (limitée par la diffraction)

Objets distingués

Condition limite

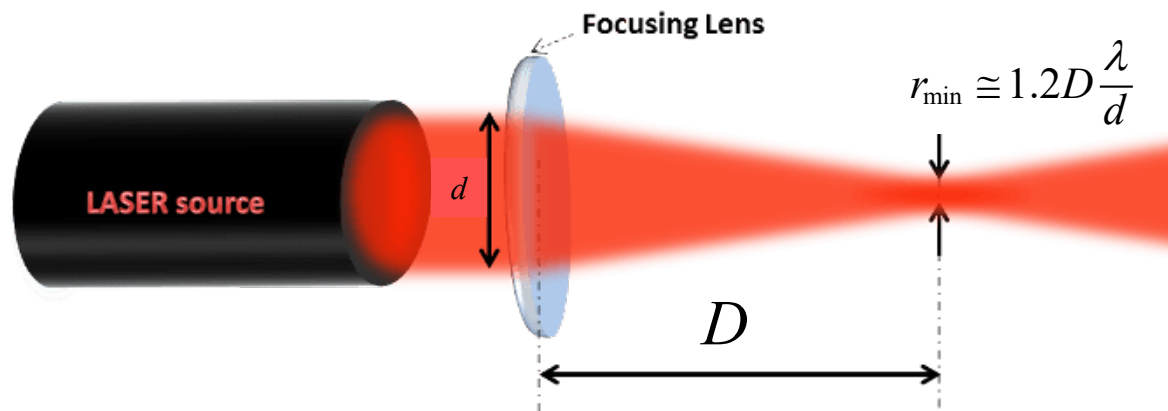
Objets non-distingués



Note 1:

r_{\min} est aussi le diamètre du plus petit point auquel un faisceau collimaté de lumière peut être focalisé.

Si une lentille focalise un faisceau de lumière d'une étendue finie (par exemple un faisceau laser), la valeur de d correspond au diamètre du faisceau lumineux, et non au diamètre de la lentille. Comme la résolution spatiale est inversement proportionnelle à d , un faisceau de lumière large peut être focalisé à une tache plus petite qu'un faisceau de lumière étroite !!



Exemple : Appareil photographique

Pour un petit **capteur d'imagerie** d'un sujet à l'infini, la résolution angulaire peut être convertie en résolution spatiale sur le capteur en utilisant f comme distance du capteur d'image. Ceci relie la résolution spatiale de l'image au **nombre $f/\#$ (f -number)** de la lentille avec:

$$r_{\min} \cong 1.2f \frac{\lambda}{d} \cong 1.2\lambda(f / \#)$$

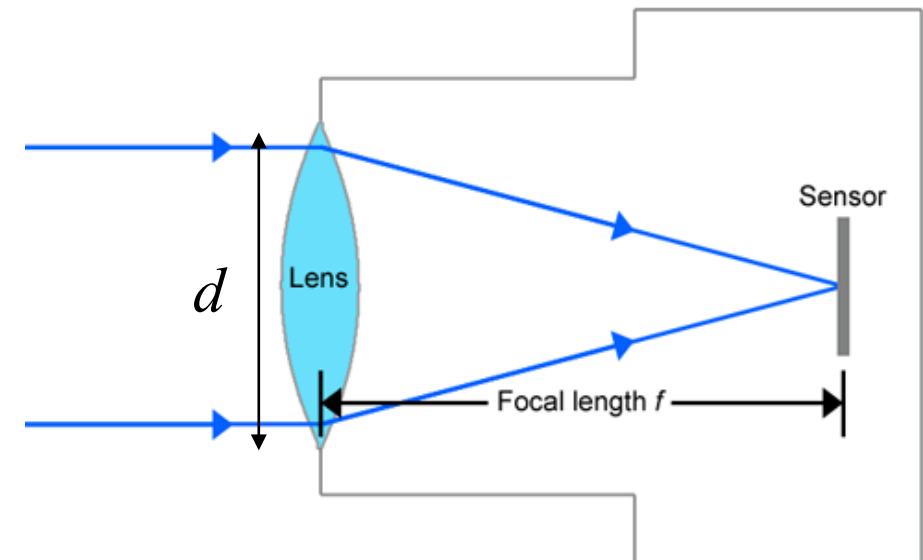
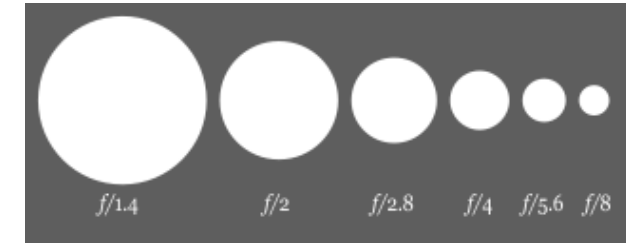
$$\begin{aligned} \text{Example : } (f / \#) = 1.4 &\Rightarrow r_{\min} \cong 2 \lambda \\ (f / \#) = 8 &\Rightarrow r_{\min} \cong 10 \lambda \\ (f / \#) = 22 &\Rightarrow r_{\min} \cong 30 \lambda \end{aligned}$$

$$(f / \#) \triangleq f / d$$

d : diamètre effectif de l'ouverture

$$\Rightarrow d = \frac{f}{(f / \#)}$$

$$\begin{aligned} \text{Example : } f = 50 \text{ mm, } (f / \#) = 1.4 &\Rightarrow d = 35 \text{ mm} \\ f = 200 \text{ mm, } (f / \#) = 2.8 &\Rightarrow d = 71 \text{ mm} \end{aligned}$$



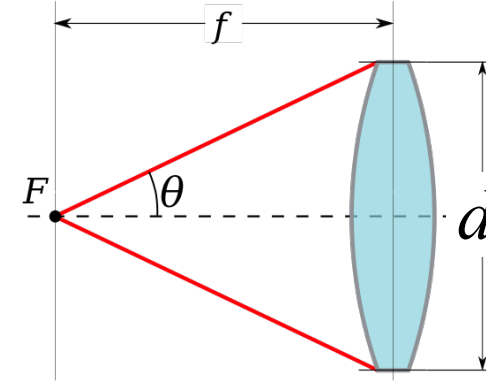
Exemple: Microscope

Pour un **microscope**, la distance effective à l'objet est proche de la **distance focale** f de l'objectif. Dans ce cas, le critère de Rayleigh est:

$$r_{\min} \cong 1.2D \frac{\lambda}{d} \cong 1.2f \frac{\lambda}{d}$$

Le minimum $\frac{f}{d}$ pour un microscope optique est d'environ $\frac{1}{2} \Rightarrow$

$$r_{\min} \cong \frac{\lambda}{2}$$



Note 1 :

La résolution d'un microscope souvent s'écrit comme:

$$r_{\min} \cong \frac{\lambda}{2NA} \quad \text{avec } NA \triangleq n \sin \theta : \text{ouverture numérique de la lentille}$$

La limite pratique pour θ est d'environ 70° .

Dans un objectif sec (i.e., $n=1$), ceci donne une NA maximum de 0.94.

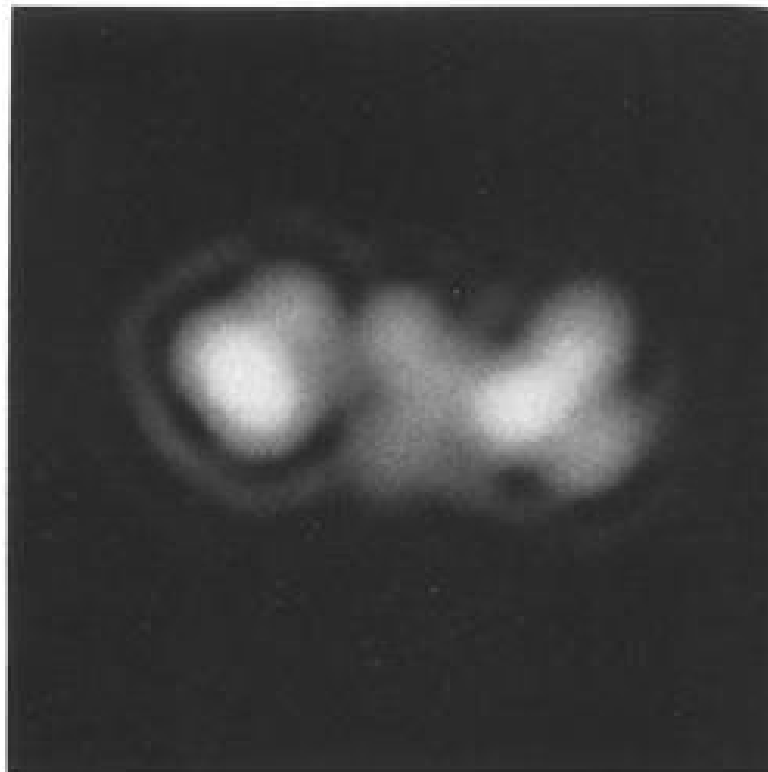
Dans une lentille à immersion dans l'huile, le NA maximal est typiquement de 1.43 (huile avec $n=1.52$).

Donc la résolution limite est:

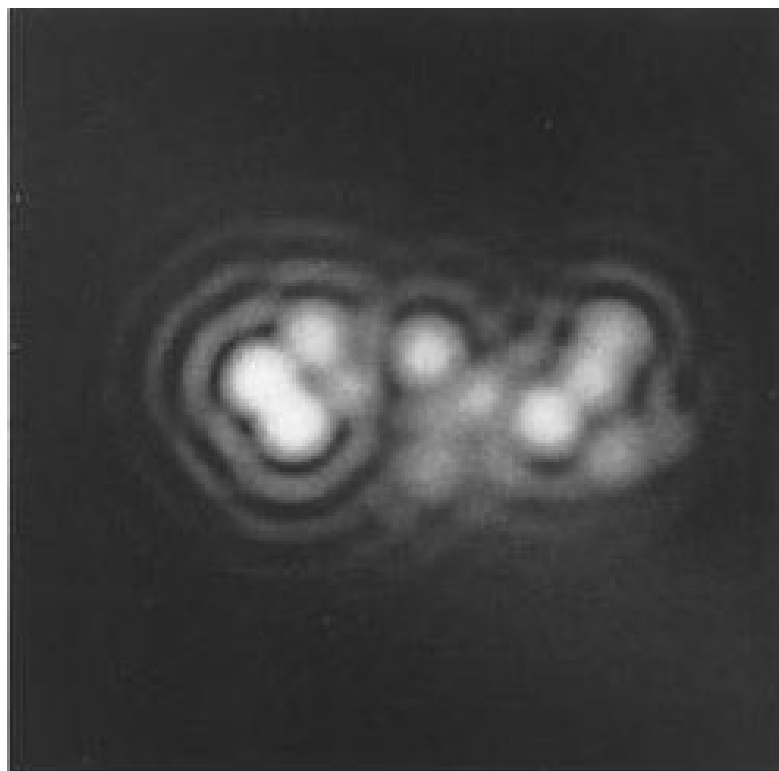
$$r_{\min} \cong \frac{\lambda}{2} \quad (\text{dans l'air}) \quad \text{et} \quad r_{\min} \cong \frac{\lambda}{3} \quad (\text{dans l'huile})$$

Note 2:

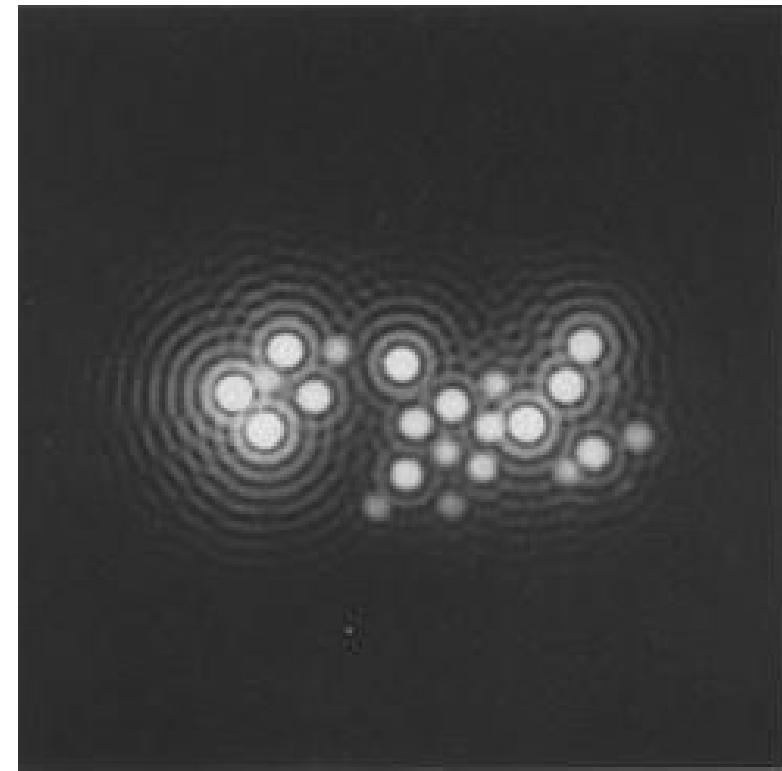
Une résolution en-dessous de la limite théorique peut être obtenue avec un microscope optique "à balayage à champ proche" ou avec un microscope optique "à super-résolution". Des objets aussi petits que 30 nm ont été résolus avec les deux techniques.



$$NA = n \sin \theta = 0.3$$



$$NA = n \sin \theta = 0.45$$



$$NA = n \sin \theta = 0.95$$

Exemple: Oeil humain.

L'oeil humain a une "ouverture" de diamètre "effectif" $d \cong 1$ mm;

Pour la lumière verte ($\lambda \cong 500$ nm) $\Rightarrow \theta_{\min} \cong 100 \mu\text{rad} \cong 10 \times 10^{-3}$ deg

Distance d'observation D entre 0.1 m et 10000 m

\Rightarrow

Résolution limite:

$$D \cong 10000 \text{ m} \Rightarrow r_{\min} = D\theta_{\min} \cong 10 \text{ m}$$

$$D \cong 10 \text{ m} \Rightarrow r_{\min} = D\theta_{\min} \cong 10 \text{ mm}$$

$$D \cong 1 \text{ m} \Rightarrow r_{\min} = D\theta_{\min} \cong 1 \text{ mm}$$

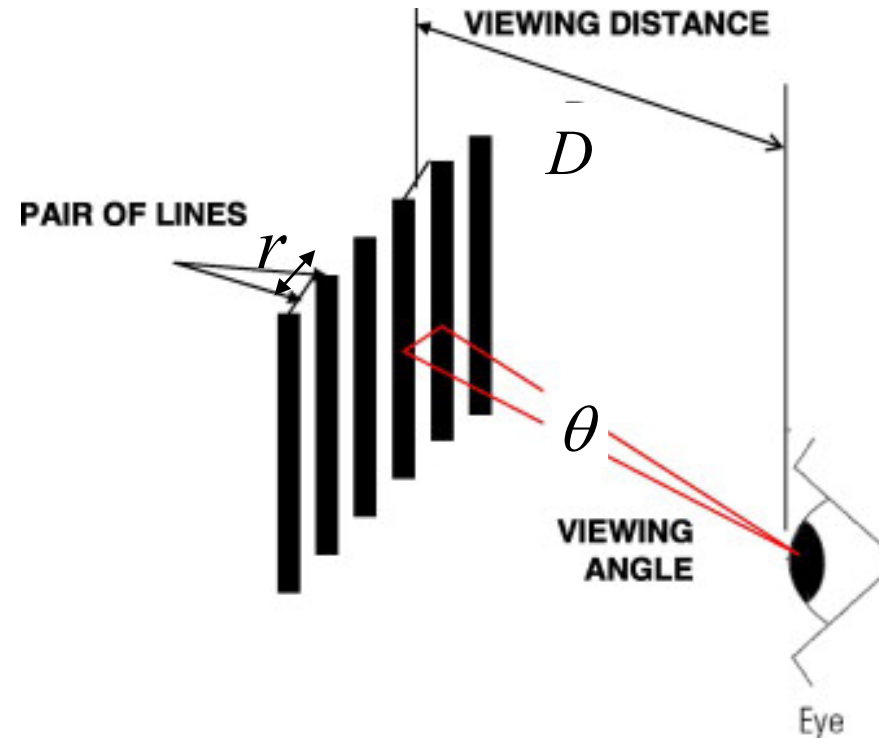
$$D \cong 0.1 \text{ m} \Rightarrow r_{\min} = D\theta_{\min} \cong 0.1 \text{ mm}$$

$$\theta_{\min} \cong 1.2 \frac{\lambda}{d}$$

$$r \cong D\theta \Rightarrow$$

$$r_{\min} = D\theta_{\min} \cong 1.2D \frac{\lambda}{d}$$

r_{\min} : résolution (limitée par la diffraction)



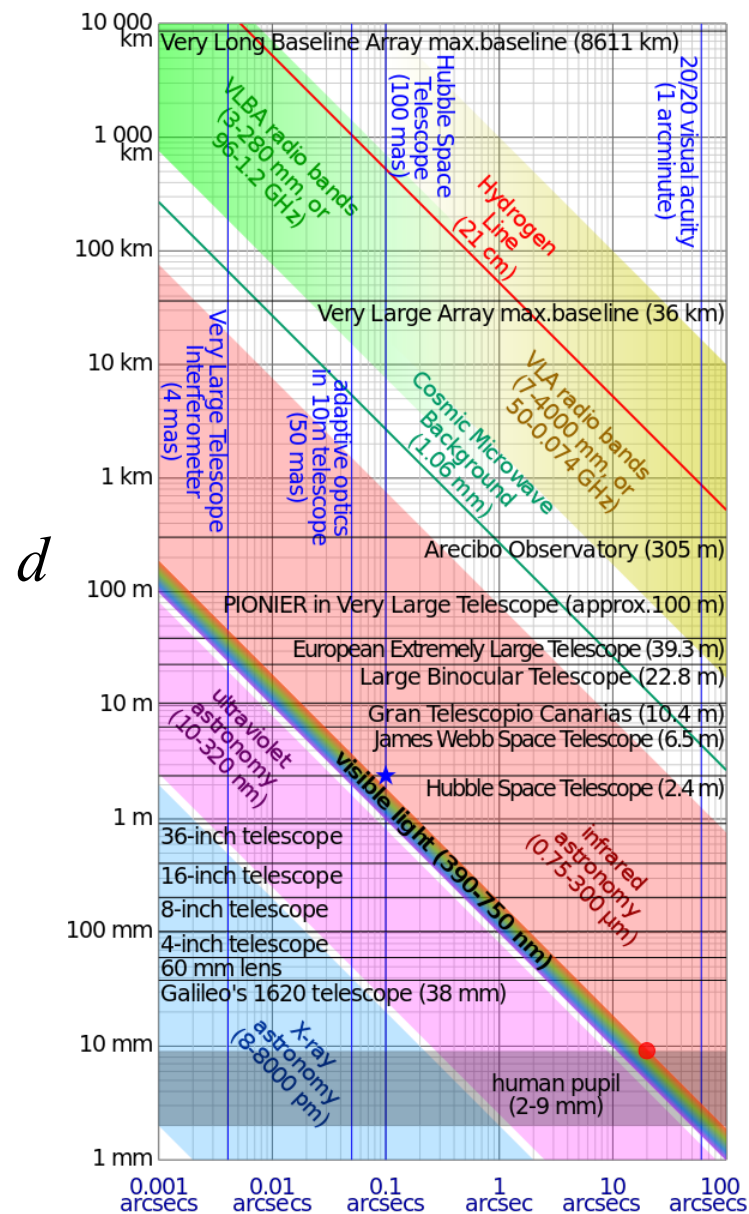
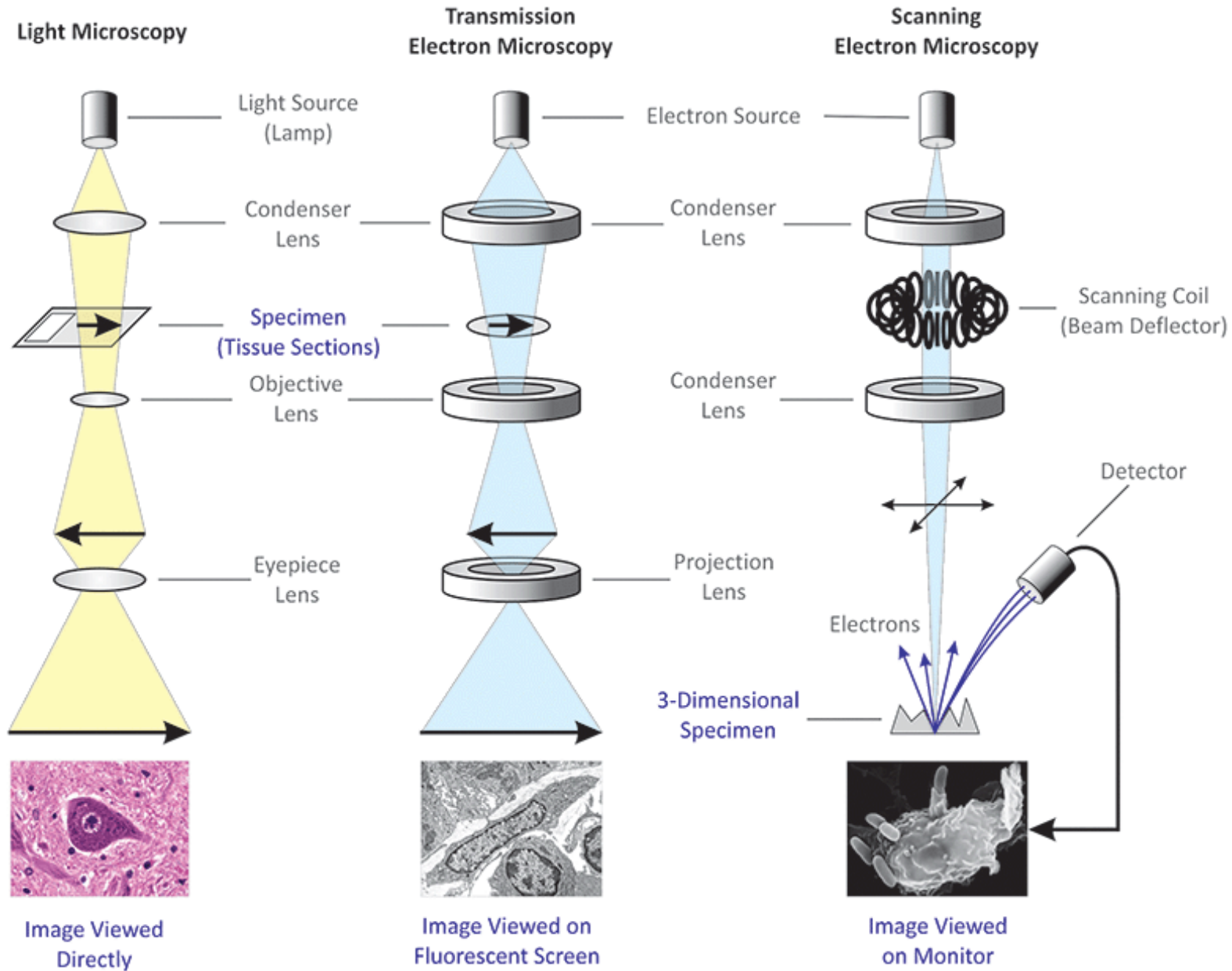
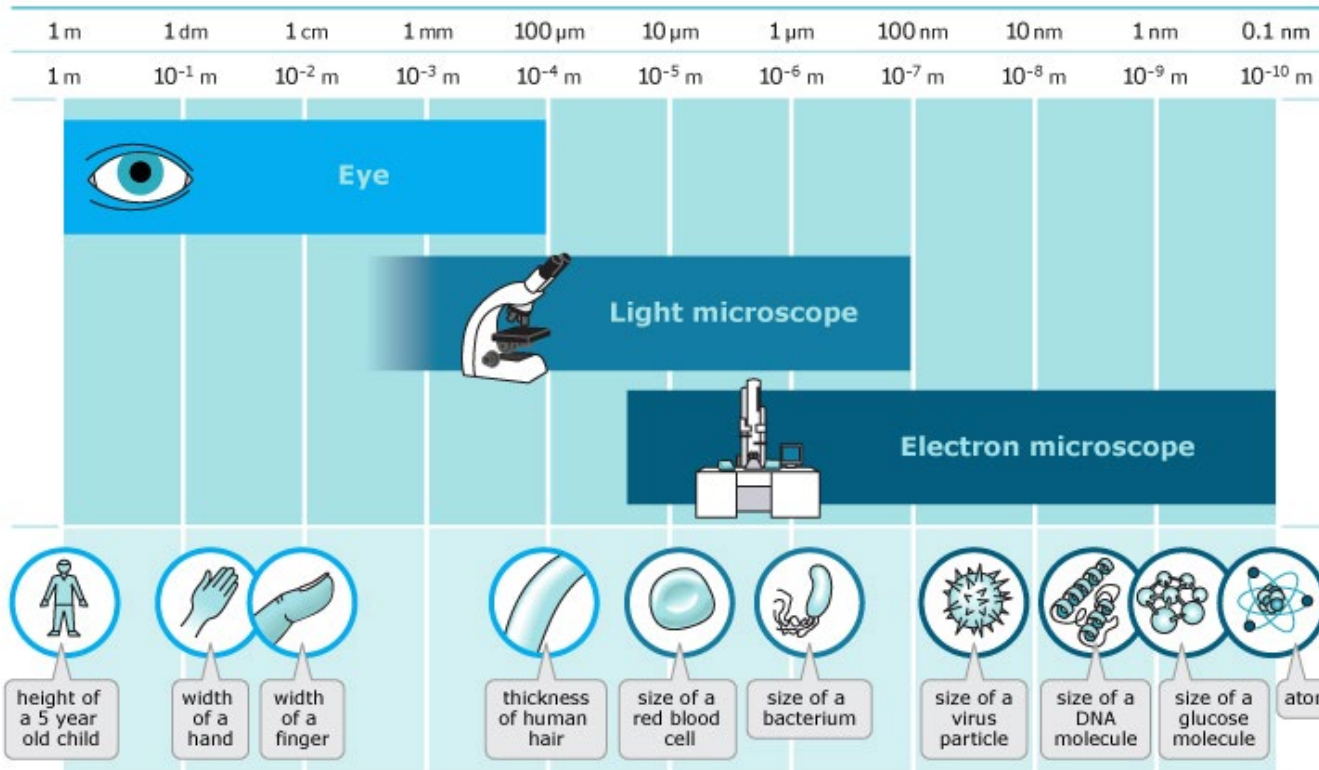


Diagramme logarithmique du **diamètre de l'ouverture d** par rapport à la **résolution angulaire à la limite de diffraction** pour diverses longueurs d'onde de lumière par rapport à divers instruments astronomiques.

Exemple:
le télescope spatial Hubble est diffracté dans le spectre visible à 0.1 arcsecs (28 μ deg)



Resolving power of microscopes



Microscope optique (light microscope):

$$\lambda \cong 0.4 \text{ to } 1 \mu\text{m}$$

$$r_{\min} \cong \frac{\lambda}{2} \cong 0.2 \text{ to } 0.5 \mu\text{m}$$

Microscope électronique (electron microscope):

$$(1/2)mv^2 = eV \Rightarrow \lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2meV}}$$

$$\Rightarrow 1 \text{ keV} \rightarrow v \cong 0.06c \quad \lambda \cong 0.04 \text{ nm}$$

$$100 \text{ keV} \rightarrow v \cong 0.5c \quad \lambda \cong 0.004 \text{ nm}$$

En pratique:

Scannig electron microscope (SEM): Energie: 1 keV à 30 keV,

$$r_{\min} \cong 0.5 \text{ nm}$$

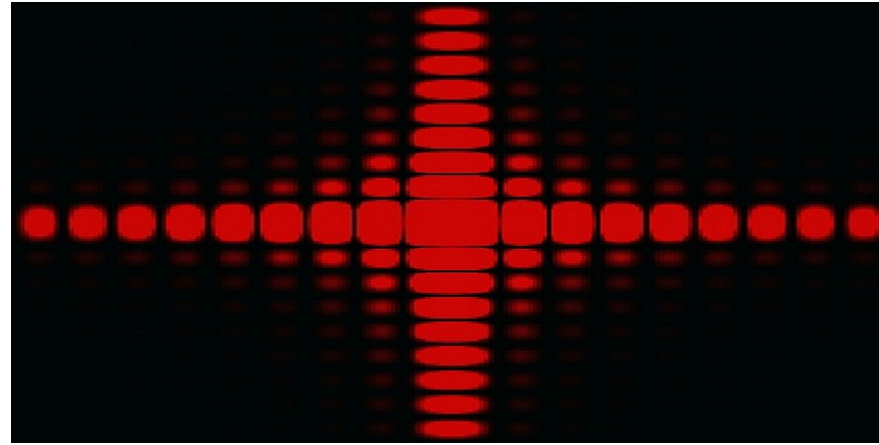
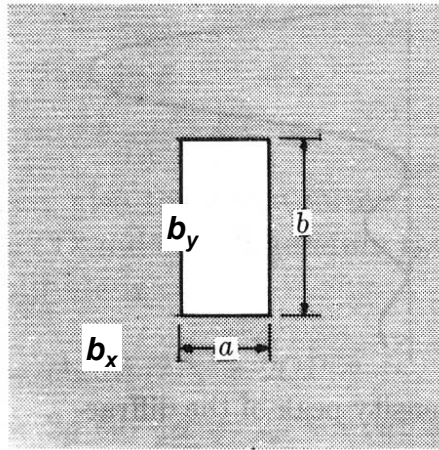
Transmission electron microscope (TEM): Energie: 100 keV à 300 keV

$$r_{\min} \cong 0.05 \text{ nm}$$

Dans le microscope électronique la résolution effective est dominée par les aberrations des lentilles, la taille du spot focalisé, et les effets de diffusion.

Cependant, même en pratique, elle est bien meilleure que celle d'un microscope optique (d'environ un facteur 1000)

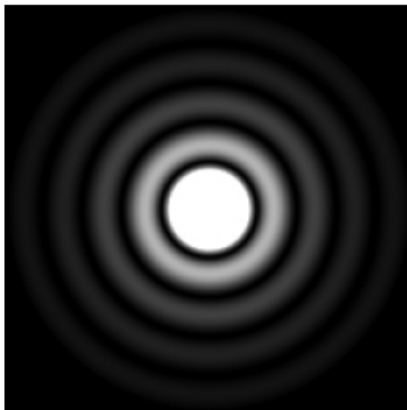
Diffraction de Fraunhofer d'une fente rectangulaire



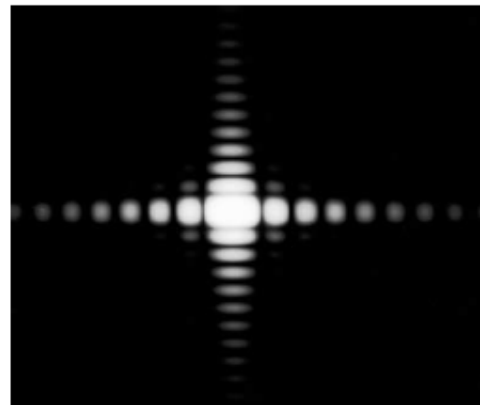
$$\langle I \rangle \cong \left(\frac{\sin(\alpha/2)}{\alpha/2} \right)^2 \left(\frac{\sin(\beta/2)}{\beta/2} \right)^2$$

$$\alpha = kb_x \sin \theta ; \quad \beta = kb_y \sin \theta$$

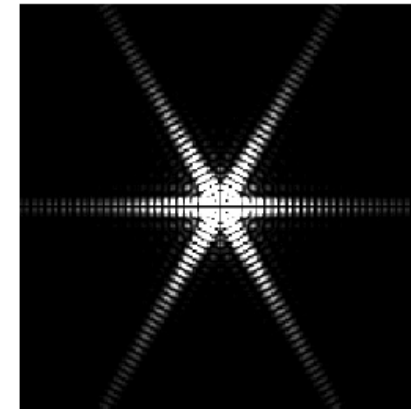
Ouverture circulaire



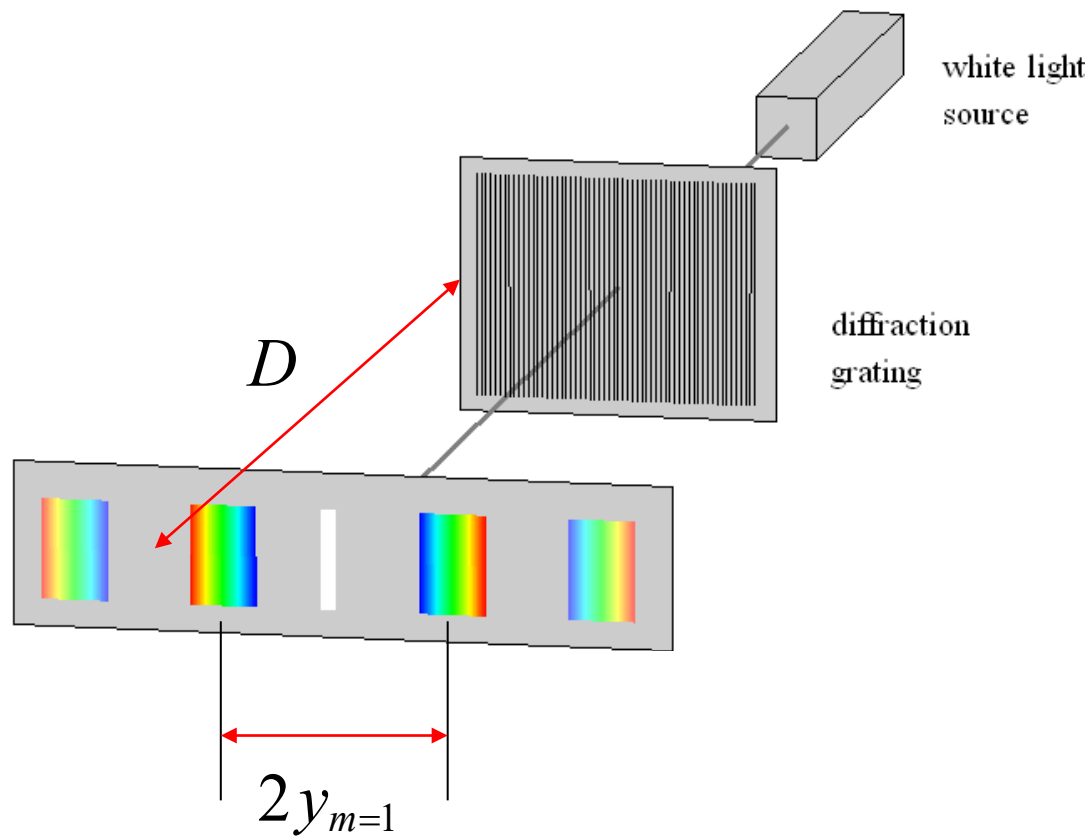
Ouverture rectangulaire



Ouverture triangulaire

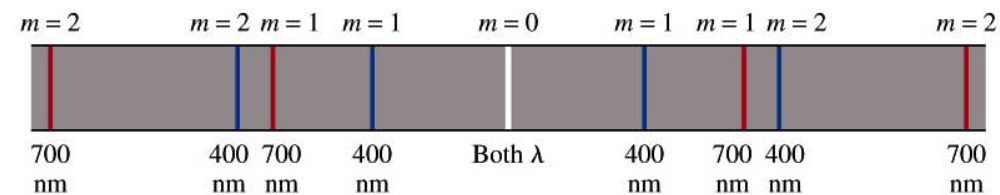
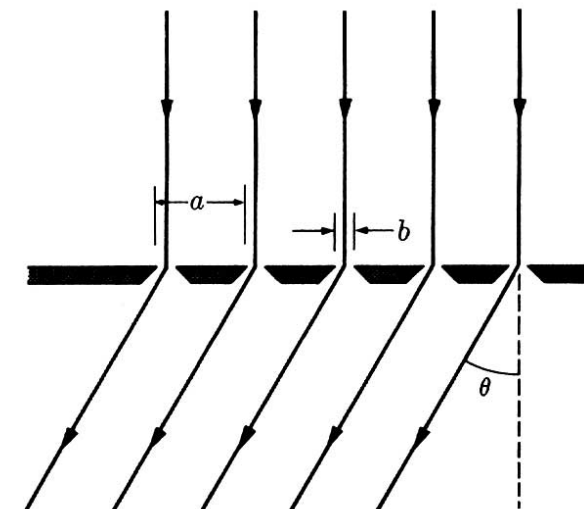
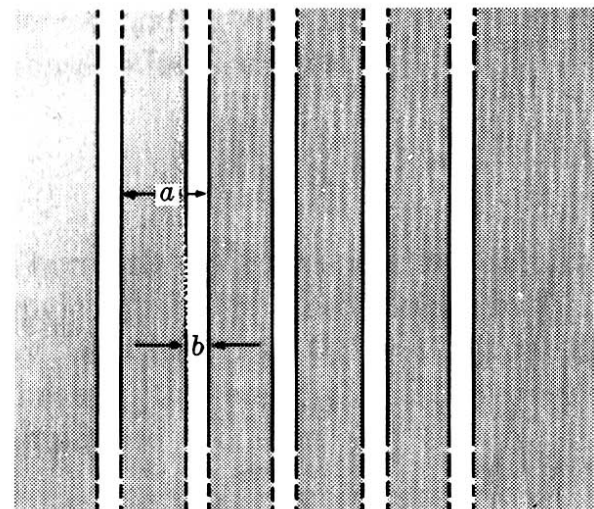


Réseau de diffraction en transmission

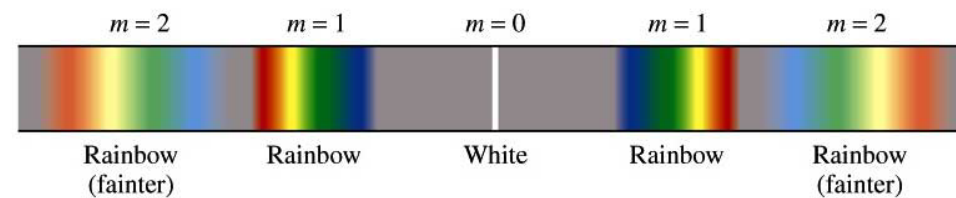


$$m\lambda = a \sin \theta$$

$$\left(\text{pour petite } \theta : \sin \theta \cong \frac{y_m}{D} \Rightarrow y_m \cong m \frac{D\lambda}{a} \right)$$



(a)



Exemple 1: Réseau de diffraction pour la lumière visible

Réseau de $N=10'000$ lignes/cm (i.e., distance entre les lignes $a = L / N = 1 \mu\text{m}$).

Observation sur écran à distance $x=2$ m

$$a \sin \theta = m \lambda \Rightarrow \sin \theta = m \lambda / a$$

\Rightarrow

pour $m=1$ (premier ordre)

pour $\lambda \cong 0.76 \mu\text{m}$ (rouge) $\Rightarrow \theta_R \cong 49.5^\circ$

pour $\lambda \cong 0.38 \mu\text{m}$ (violet) $\Rightarrow \theta_V \cong 22.3^\circ$

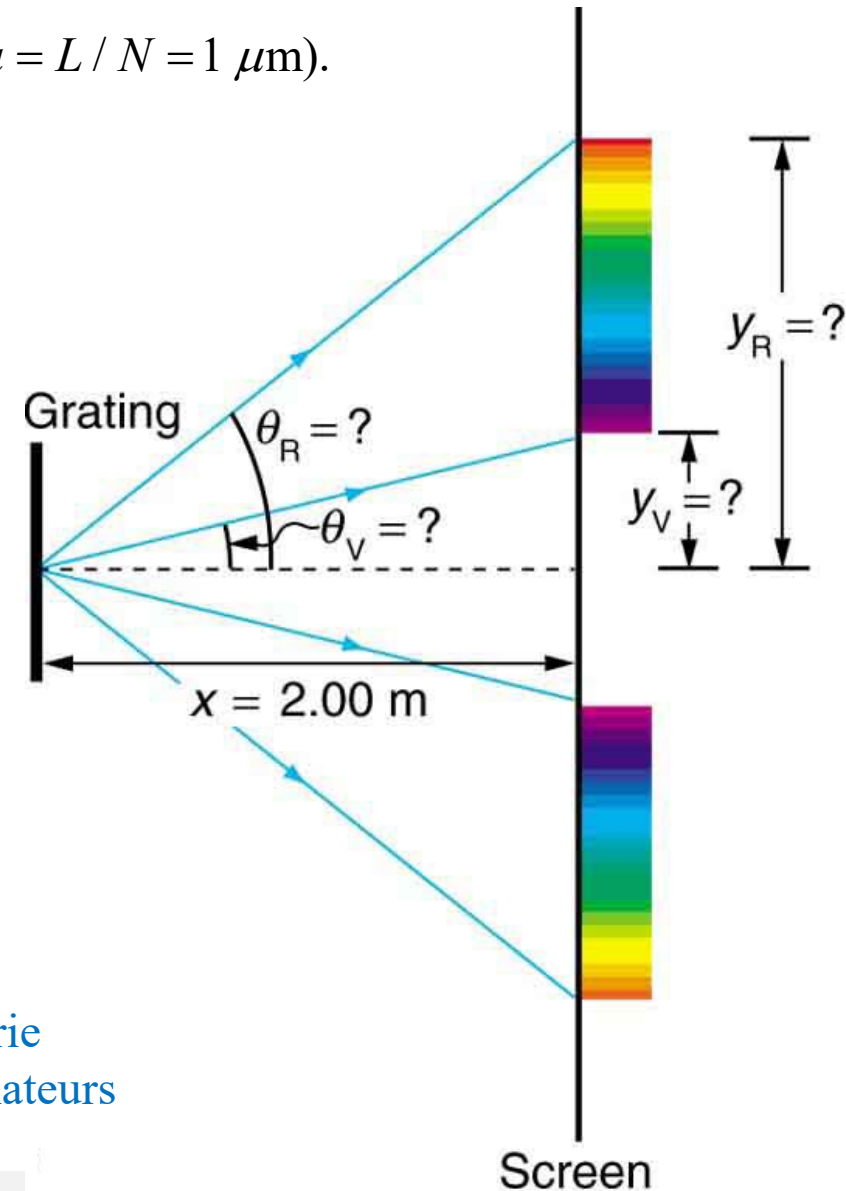
\Rightarrow

$$y_V = x \tan \theta_V = 0.815 \text{ m}$$

$$y_R = x \tan \theta_R = 2.338 \text{ m}$$

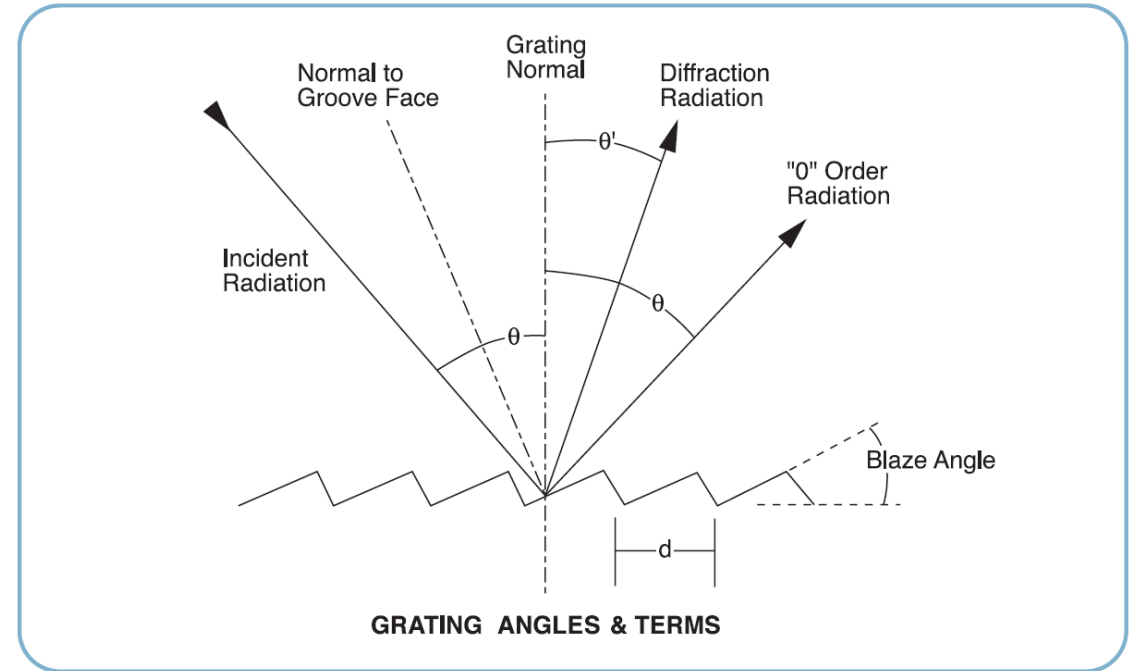
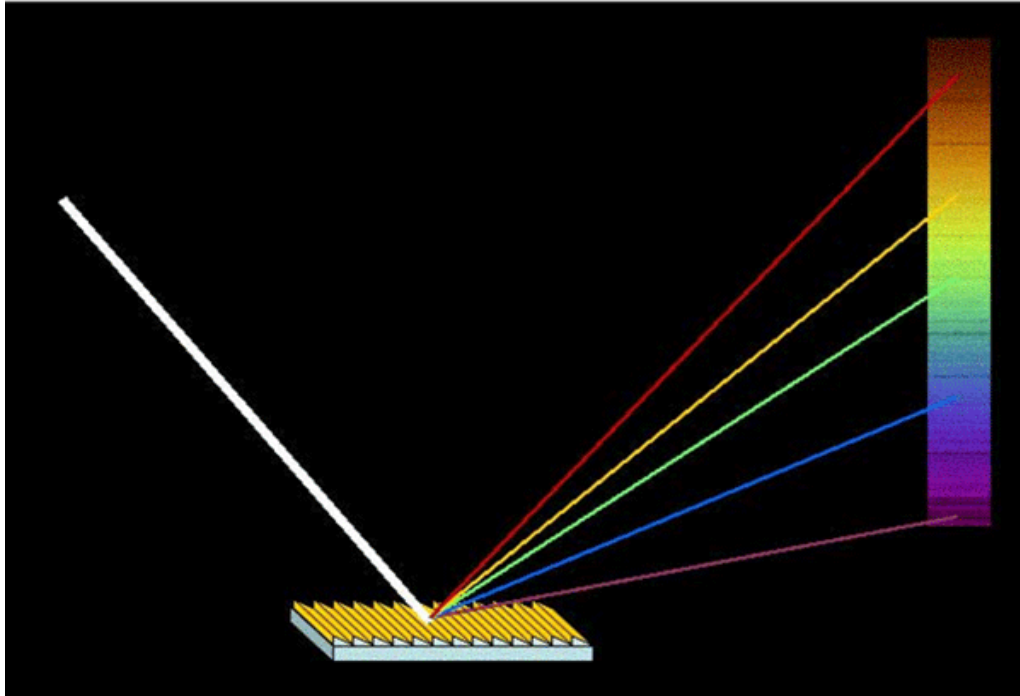
\Rightarrow

$$y_R - y_V = 1.52 \text{ m}$$



Application du réseau de diffraction: spectrométrie
monochromateurs

Réseau de diffraction en réflexion



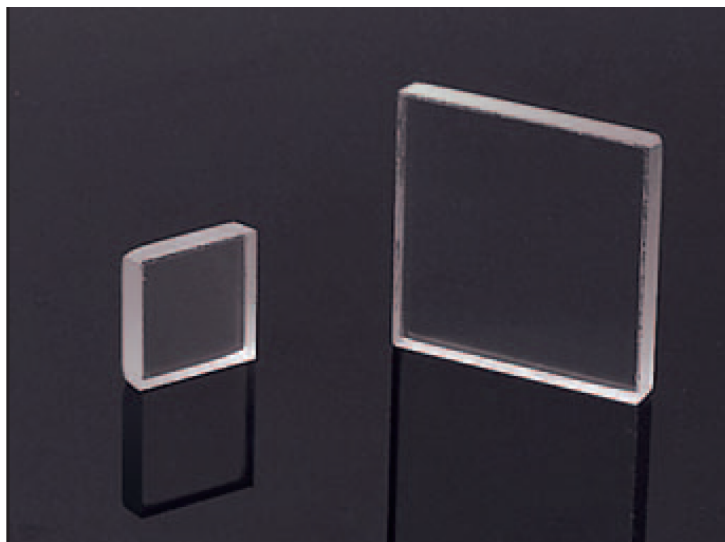
Soit n_1 l'indice du milieu de propagation de l'onde incidente (de longueur d'onde λ). Soit θ l'angle d'incidence et θ' l'angle de réflexion pour lequel on a une interférence constructive. Soit d le pas du réseau et m un nombre entier.

Il y a des interférences constructives si (sans démonstration):

$$n_1 \sin \theta' = n_1 \sin \theta - m \frac{\lambda}{d} \quad \text{Dans le vide } n_1 = 1 \Rightarrow \sin \theta' = \sin \theta - m \frac{\lambda}{d}$$

Note 1:

Exemple de réseau de diffraction.

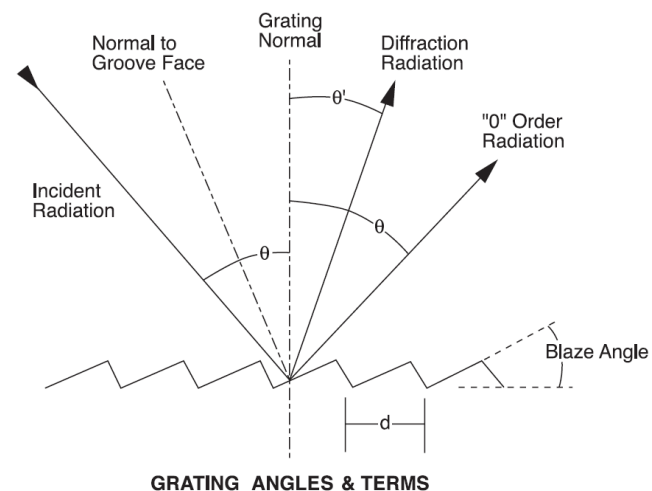


Specifications

- **Substrate Material:** Schott B270
- **Thickness:** 3mm Nominal
- **Dimensional Tolerances:** $\pm 0.5\text{mm}$
- **Thickness Tolerances:** $\pm 0.5\text{mm}$
- **Gratings Available:**
 - 300 grooves/mm, 17.5° blaze angle
 - 600 grooves/mm, 28.7° blaze angle
 - 830 grooves/mm, 29.87° blaze angle
 - 1200 grooves/mm, 36.9° blaze angle

300 grooves/mm $\Rightarrow d = 3 \mu\text{m}$

1200 grooves/mm $\Rightarrow d = 0.75 \mu\text{m}$



Note 2:

Les pistes d'un disque compact (CD) agissent comme un réseau de diffraction en réflexion, produisant une séparation des couleurs de la lumière blanche. La séparation de piste nominale sur un CD est de $1.6 \mu\text{m}$, ce qui correspond à environ 625 pistes/mm. C'est dans la gamme des réseaux ordinaires de diffraction de laboratoire.

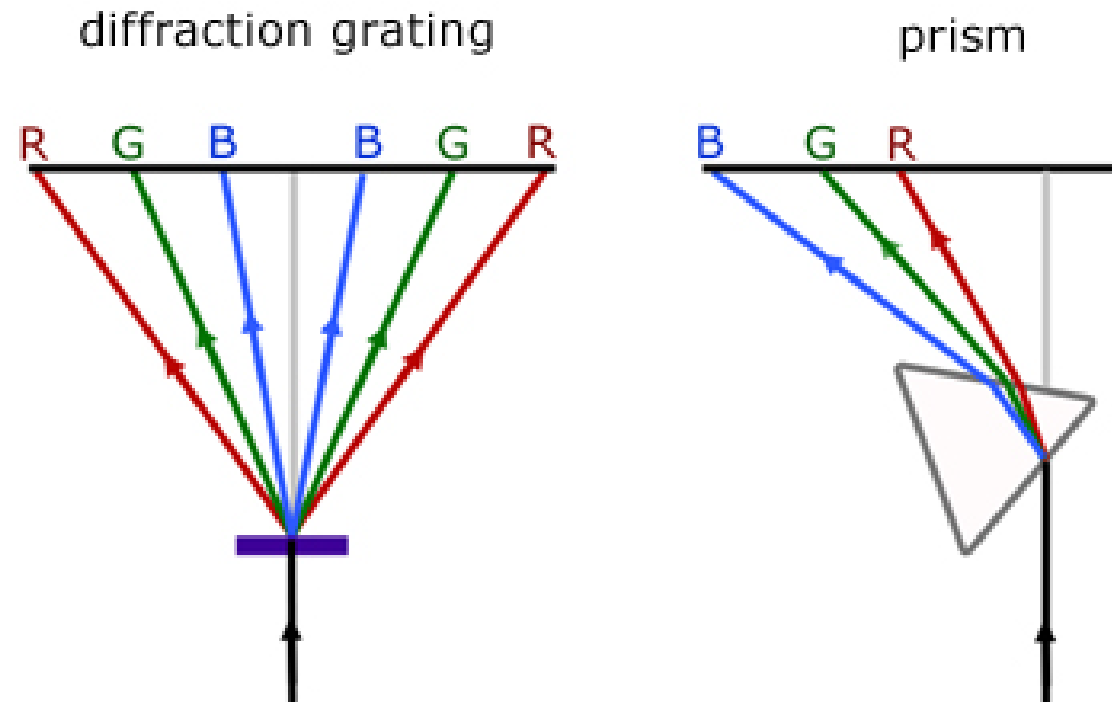


Avantage du réseau de diffraction par rapport au prisme:

Le prisme et le réseau de diffraction permettent de répartir les spectres lumineux en plusieurs couleurs.

Le verre d'un prisme est transparent à la lumière visible, mais il absorbe et bloque la lumière dans les parties infrarouge et ultraviolette du spectre. L'analyse chimique dépend souvent de l'identification de couleurs particulières du spectre de l'échantillon qui se trouvent au-delà du domaine visible (infrarouge et ultraviolet).

Un réseau de diffraction comportant quelques centaines de lignes par pouce peut dévier la lumière au milieu du spectre visible d'au moins 20 degrés. L'angle de déviation d'un prisme de verre est généralement beaucoup plus petit que cela.

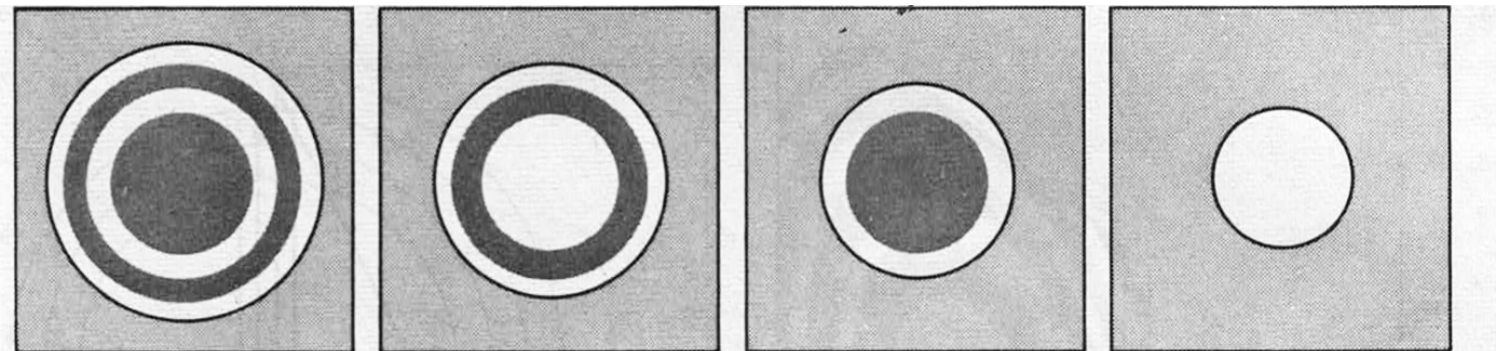
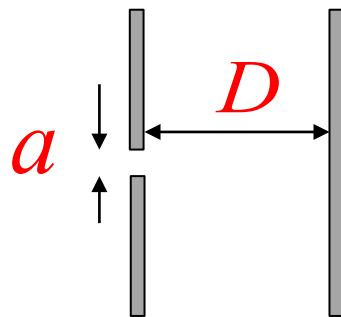
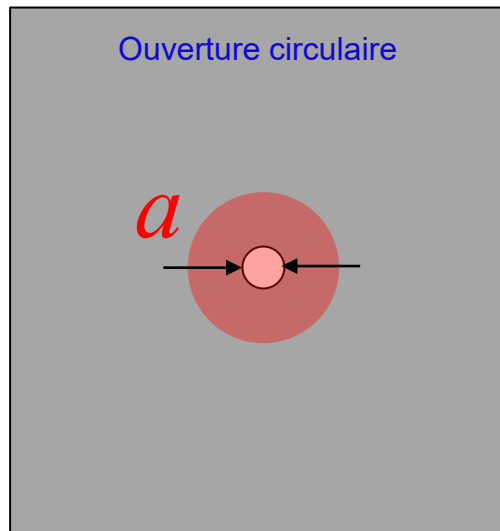


Diffraction de Fresnel d'une ouverture circulaire

Diffraction de Fresnel:

La source et/ou le point d'observation sont à distance «finie» de l'ouverture o de l'obstacle.

$$\text{Nombre de Fresnel: } N_F = \frac{a^2}{D\lambda} \quad \text{Diffraction de Fresnel: } N_F > \frac{1}{2}$$



$$N_F = 4$$

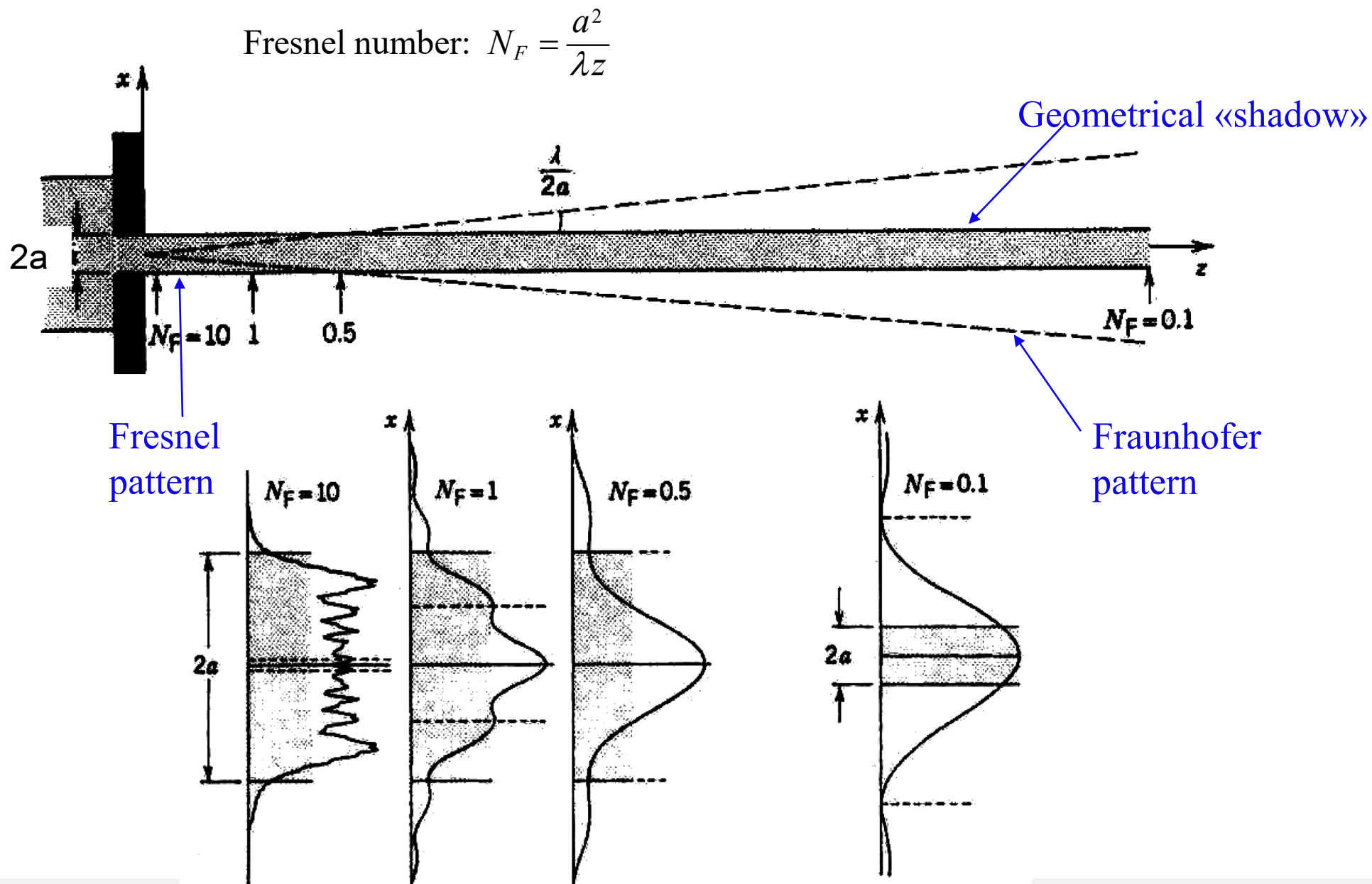
$$N_F = 3$$

$$N_F = 2$$

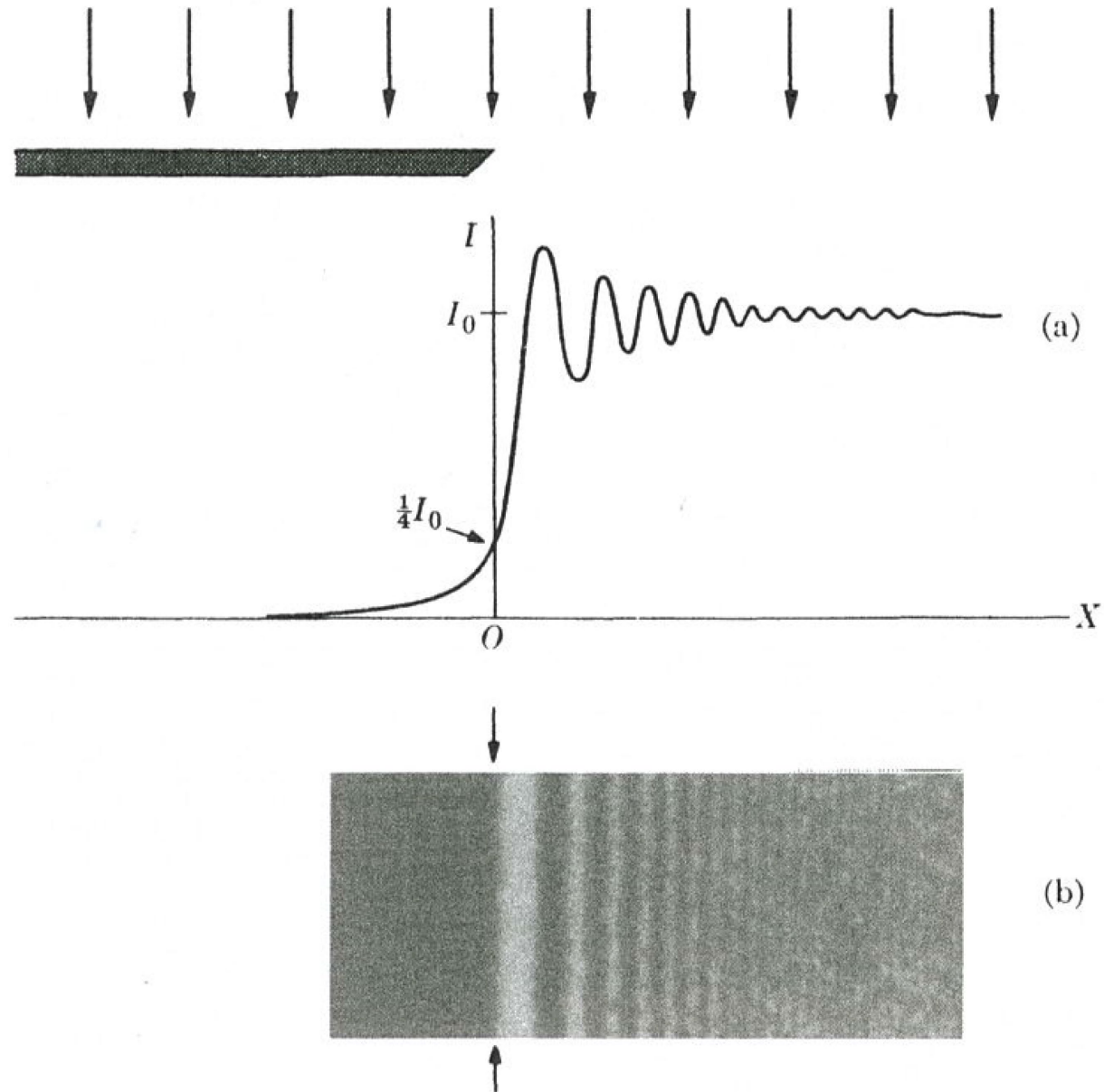
$$N_F = 1$$

D

Diffraction de Fresnel d'une ouverture carrée



Diffraction de Fresnel d'une arrête rectiligne



Diffraction et Diffusion

Nous avons jusqu'à présent implicitement admis que les objets interposés sur le trajet des ondes jouent en rôle **passif**.

Rôle passif → pas de création de nouvelles ondes → diffraction due exclusivement à l'onde incidente déformée.

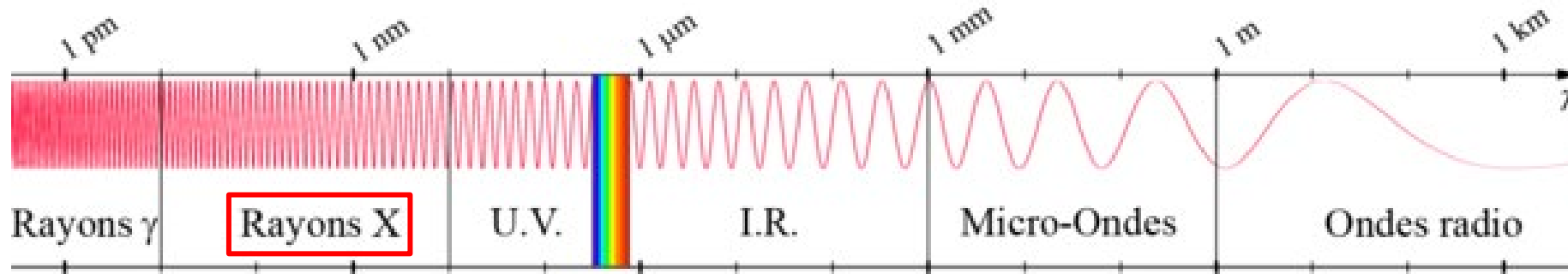
Rôle actif → création de nouvelles ondes → diffraction due à l'onde incidente déformée et aux ondes diffusées.

Exemples:

1. Onde sonore sur sphère élastique: diffraction de l'onde sonore mais aussi déformations de la sphère élastique, produisant à leur tour de nouvelles ondes acoustiques.
2. Onde électromagnétique sur sphère conductrice: les champs électriques et magnétiques de l'onde induisent des oscillations des charges libres de la sphère. Ces charges oscillantes produisent de nouvelles ondes électromagnétiques.

Les nouvelles ondes produites sont les ondes **diffusées** et le processus est appelé la **diffusion**.

Diffraction (et diffusion) des rayons X par un cristal

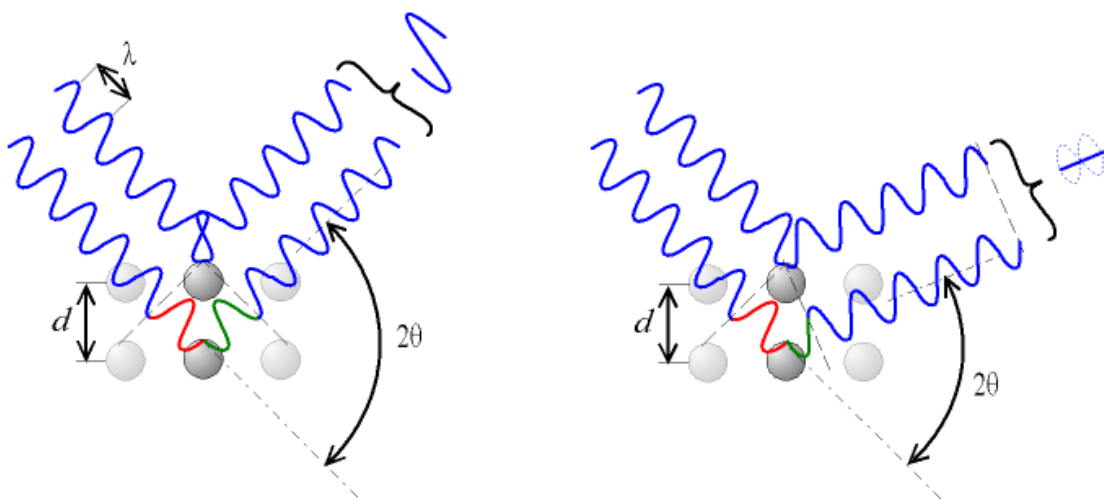


En cristallographie on utilise, typ., des rayons X avec longueur d'onde comprise entre 0.05 et 0.25 nm (ordre de grandeur des distances interatomiques).

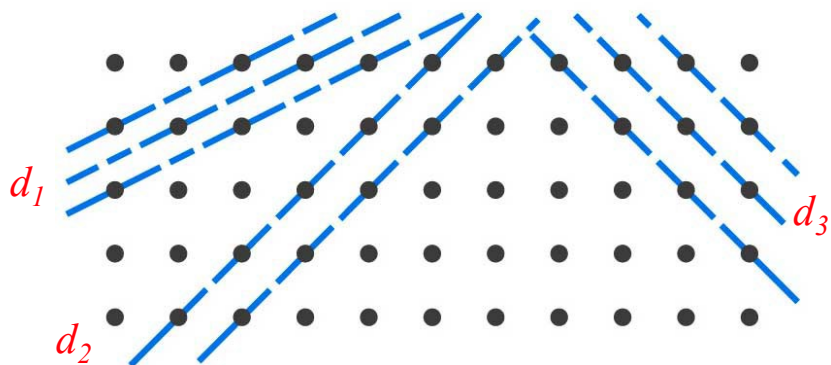
Les rayons X, comme autres ondes électromagnétiques, provoquent un déplacement du nuage électronique par rapport au noyau dans les atomes. Ces oscillations induites provoquent une ré-émission d'ondes électromagnétiques de même fréquence (diffusion cohérente ou élastique).

Les interférences des rayons diffusés vont être alternativement constructives ou destructives. Selon la direction de l'espace, on va donc avoir un flux important de photons X, ou au contraire très faible; ces variations selon les directions forment le phénomène de diffraction des rayons X. **Le cristal est, pour les rayons X, un réseau de diffraction 3D.**

La diffusion inélastique (modification de la structure électronique de l'atome avec rayonnement diffusé non cohérent, donc pas d'interférences) et l'effet photoélectrique (éjection d'un électron) sont aussi possible avec les rayons X.



plusieurs familles de plans cristallins



Les cristaux sont des réseaux réguliers d'atomes. Les atomes diffusant les ondes de rayons X, principalement à travers les électrons des atomes. Un rayon X frappant un électron produit des ondes sphériques secondaires émanant de l'électron. Ce phénomène est connu sous le nom de diffusion élastique, ou l'électron est le diffuseur. Un réseaux régulier de diffuseurs produit un réseau régulier d'ondes sphériques. Bien que ces ondes s'annulent dans la plupart des directions par interférence destructrice, elles ajoutent de manière constructive dans quelques directions spécifiques, déterminées par la loi de Bragg. Ces directions spécifiques apparaissent comme des taches dans une image 2D.

Loi de Bragg:

Si λ est la longueur d'onde de la radiation X et d est la distance inter-réticulaire du plan cristallin diffractant, les directions 2θ de l'espace dans lesquelles on aura des pics d'intensité (le zéro pour 2θ est la direction du faisceau incident) vérifient :

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

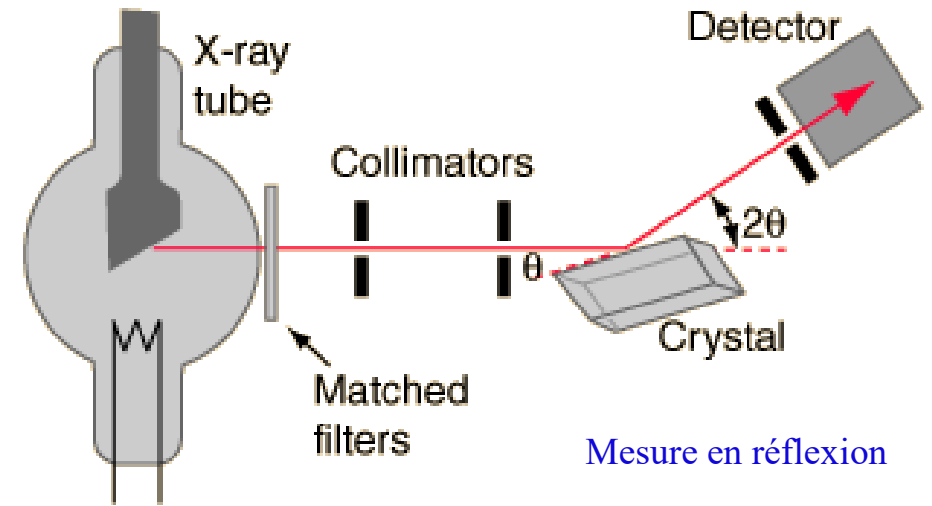
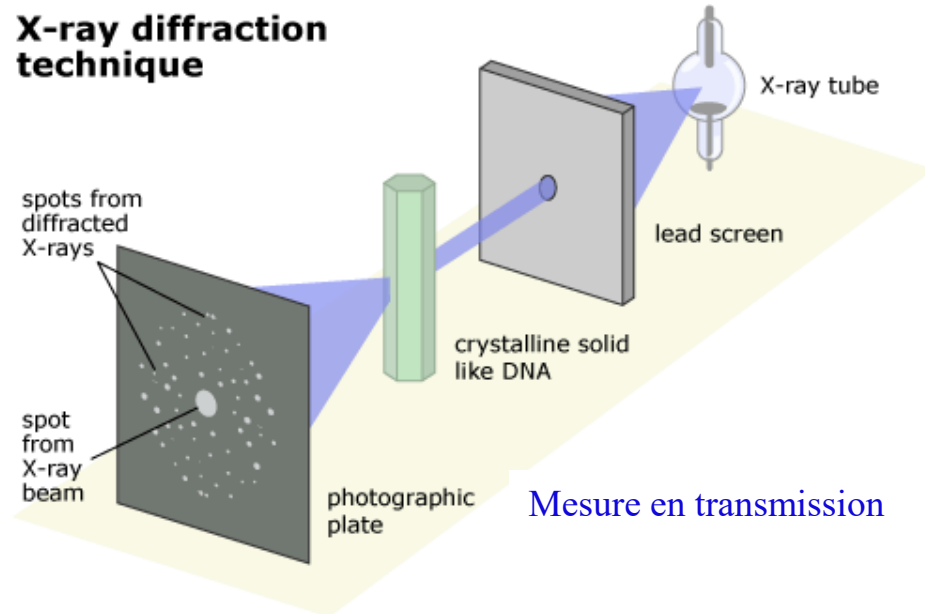
avec θ l'angle de Bragg, soit le demi-angle de déviation (moitié de l'angle entre le faisceau incident et la direction du détecteur). n l'ordre de diffraction (nombre entier).

Maximum d'intensité pour:

$$\sin \theta = \frac{n\lambda}{2d} \Rightarrow \theta = \arcsin\left(\frac{n\lambda}{2d}\right) \Rightarrow 2\theta = 2 \arcsin\left(\frac{n\lambda}{2d}\right)$$

Note 1: Montages expérimentaux pour la diffraction des rayons X

X-ray diffraction technique



Dans une mesure de diffraction de rayons X, le cristal est monté sur un goniomètre, utilisé pour positionner le cristal selon des orientations choisies. Le cristal est éclairé par un faisceau monochromatique focalisé de rayons X, produisant un diagramme de diffraction de spots régulièrement espacés. Les images bidimensionnelles prises à différentes orientations sont converties en un modèle tridimensionnel de la densité d'électrons dans le cristal en utilisant la méthode mathématique des transformées de Fourier.

Note 2: Sources de rayons X

Les rayons X peuvent être obtenus à partir de :

- transitions électroniques dans les couches internes atomiques
- dans le spectre du rayonnement électromagnétique émis par accélération ou décélération de particules chargées relativistes.

Note 3: De l'image de diffraction à la structure de la protéine.

