

14 janvier 2025

## 1 Diffraction

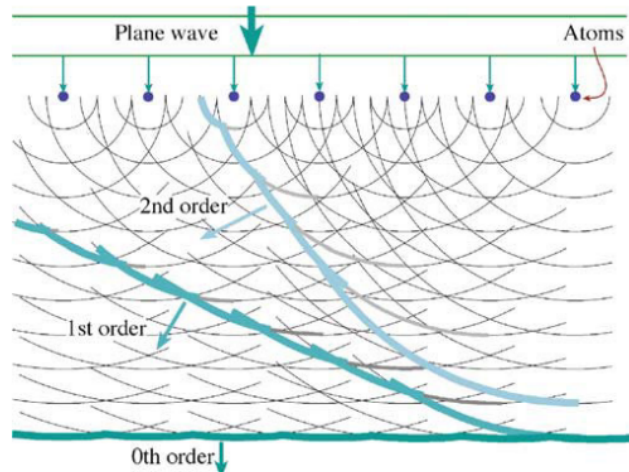
### 1.1 Principe Abbé

Selon le principe d'Abbé la résolution d'un microscope est définie comme  $d = \frac{\lambda}{2n \sin(\theta)}$  où  $\lambda$  est la longueur d'onde de la lumière traversant la lentille,  $n$  l'indice de réfraction dans lequel se trouve l'objet et  $\theta$  l'angle formé entre les rayons provenant de l'objet et la lentille. Une conclusion que l'on peut tirer de ce principe c'est que plus la lentille est grande meilleure sera la résolution. Effectivement pour une grande lentille, les rayons arrivant aux extrémités de la lentille arriveront avec un angle plus proche de zéro donc  $\sin(\theta) \Rightarrow 0$ .

### 1.2 Principe Huygens

L'interaction entre un front d'onde plane et un atome génère une onde sphérique. Cependant lorsque l'interaction ne se fait pas avec un atome unique mais une série d'atomes alignés comme c'est le cas pour un réseau cristallin alors le principe d'Huygens stipule que la multiplication d'onde sphérique se superposant forment à nouveau une onde plane.

L'onde plane d'ordre zéro correspond à l'onde émise quand tous les atomes sont activés par le même front d'onde et elle est parallèle à la rangée d'atome. Cependant les atomes peuvent aussi être activés par l'interaction avec l'onde sphérique émise des autres atomes. C'est ce qui crée les ondes planes de degré supérieur qui forment différents angles avec la rangée d'atome.



### 1.3 Image vs Diffraction avec TEM

En microscopie électronique en transmission (TEM), l'image et la diffraction sont deux techniques essentielles qui permettent de caractériser les matériaux à l'échelle atomique.

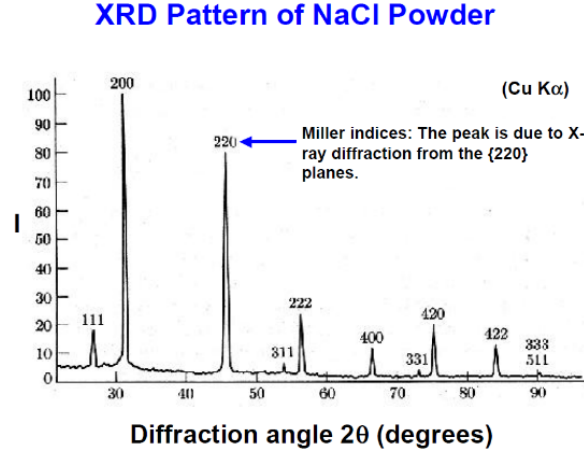
- **Mode image** : le TEM produit des images de haute résolution qui peuvent révéler la structure atomique de l'échantillon, les défauts cristallins (dislocations, lacunes, etc.), ainsi que des informations sur la morphologie et l'épaisseur de l'échantillon.
- **Mode diffraction** : En fonction de l'orientation et de la structure cristalline, chaque type de matériau produit un motif de diffraction caractéristique, composé de points (pour les structures cristallines ordonnées) ou d'anneaux (pour les structures polycristallines ou amorphes). Cette technique permet de déterminer la structure cristalline, l'orientation des grains, la taille des cristaux et la présence de défauts ou de phases multiples dans un échantillon.

Ces deux techniques sont complémentaires : l'image en TEM donne des informations spatiales directes (images réelles), tandis que la diffraction fournit des informations structurales (images en espace réciproque).

## 1.4 diffraction électron / rayon-X

Dans un TEM il est possible d'utiliser des électrons ou des rayons-X pour faire de la diffraction. Les électrons dont la longueur d'onde est de l'ordre du picomètre permettent une résolution plus élevée (selon la loi de Bragg) que les rayons-X dont la longueur d'onde est de l'ordre de l'angström. Les électrons interagissent plus fortement avec l'échantillon que les rayons-X ce qui a pour conséquence une intensité de diffraction plus élevée donc une analyse plus rapide de l'échantillon.

La diffraction au rayons-X (XRD) produit des graphes comme celui-ci :



## 2 Ewald sphere

La sphère d'Ewald est une construction géométrique utilisée en diffraction pour visualiser les conditions de diffraction. Elle représente l'espace réciproque où un faisceau incident (vecteur  $K_1$ ) est diffracté. La sphère a un rayon  $1/\lambda$ , où  $\lambda$  est la longueur d'onde des électrons ou des rayons X. La diffraction se produit si la sphère intersecte un point du réseau réciproque.

Lorsque le cristal est orienté sur l'axe de la zone la sphère d'Ewald peut ne pas intersecter les points de réseau réciproques. Cependant, nous observons une forte diffraction à partir de nombreux plans dans cette condition parce que les points du réseau réciproque ont une taille et une forme.

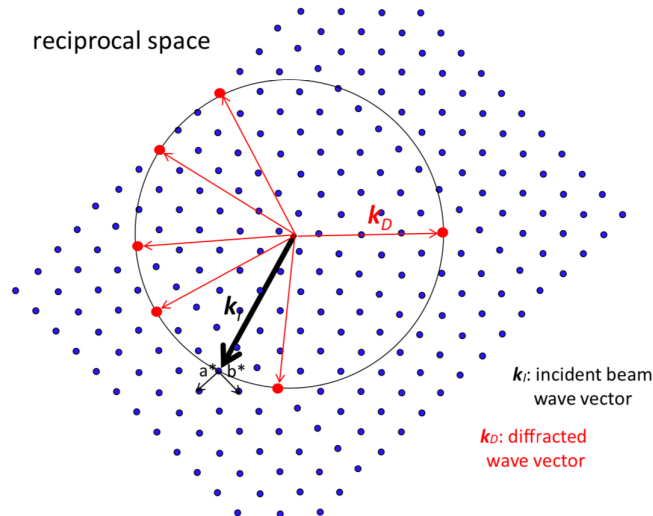


FIGURE 1 – sphère d'Ewald

### 2.1 Bragg's Law

La loi de Bragg décrit la condition pour laquelle des faisceaux d'ondes, comme des rayons X ou des électrons, sont diffractés de manière constructive par un cristal. Elle est donnée par la relation mathématique suivante :

$$n\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta, \quad (1)$$

où  $n$  est un entier représentant l'ordre de diffraction,  $\lambda$  est la longueur d'onde de l'onde incidente,  $d_{hkl}$  est la distance entre les plans cristallographiques identifiés par les indices de Miller ( $hkl$ ), et  $\theta$  est l'angle d'incidence ou de diffraction. La diffraction constructive se produit lorsque la différence de chemin optique entre les ondes réfléchies par des plans cristallographiques adjacents est égale à un multiple entier de la longueur d'onde. Cette condition permet d'obtenir des informations sur la structure cristalline, l'orientation des cristaux et la symétrie des réseaux cristallins.

Un schéma typique de la diffraction selon la loi de Bragg est montré ci-dessous :

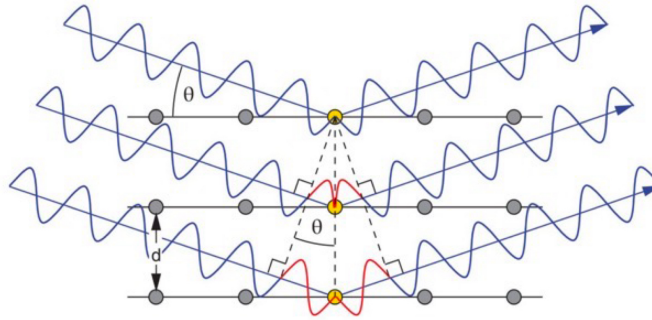
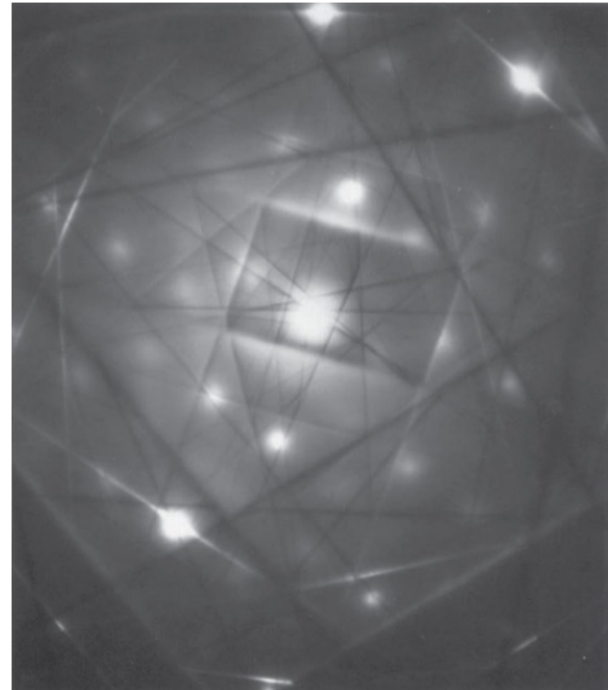
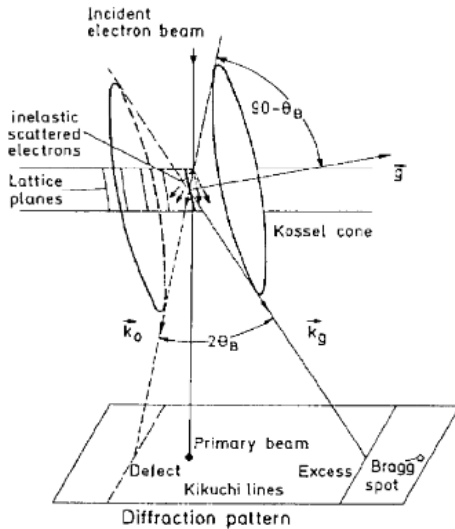


FIGURE 2 – loi de Bragg

### 3 Exemple micrographie

#### 3.1 Kikuchi lines

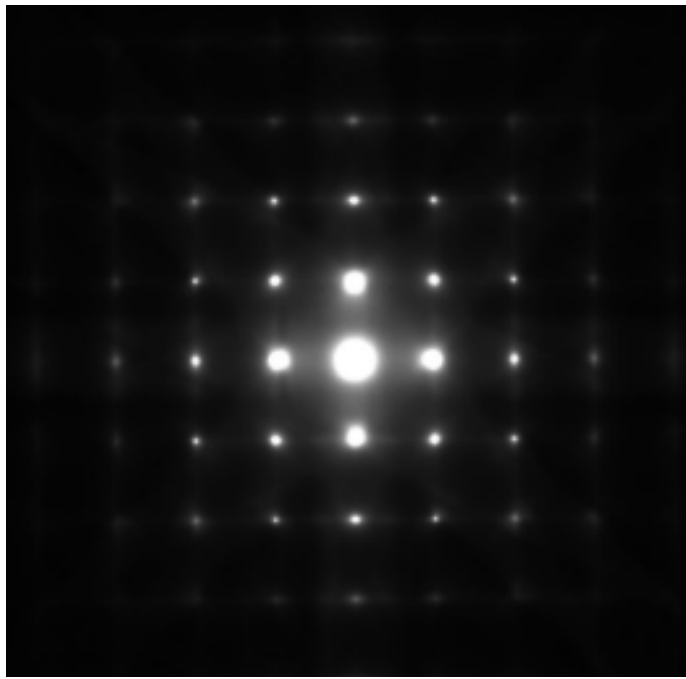
Les bandes de kikuchi sont dues à des interaction inélastiques avec l'échantillon, cela est favorisé par l'épaisseur de l'échantillon. Le spectre diffus est ensuite diffracté ce qui crée une convergence du signal en un point (ligne claire) et une absence de signal en d'autre point (ligne foncée)



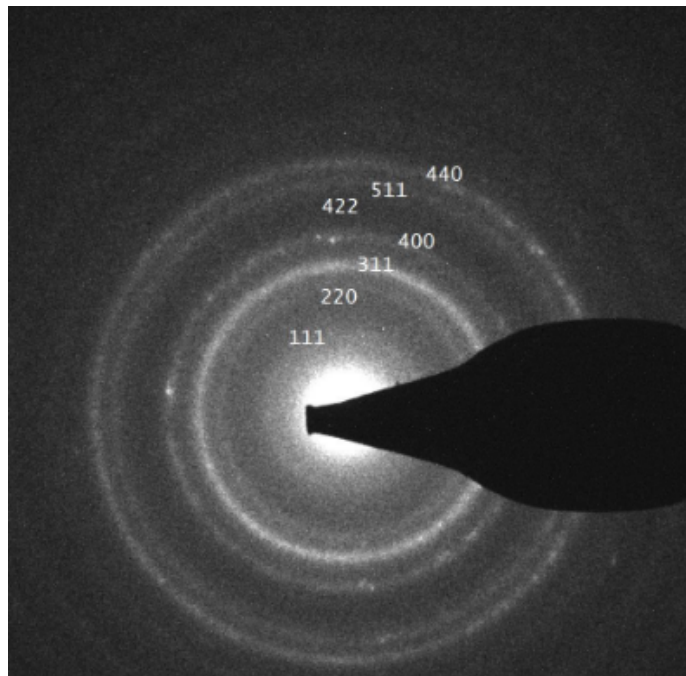
Thick sample: inelastic scattering followed by elastic scattering (= diffraction)

#### 3.2 Image diffraction typique

Ceci est une image de diffraction typique d'un échantillon cristallin sur un axe de zone :



Cette image de diffraction est celle d'une poudre. Dans cette micrographie chaque cercle représente un plan de diffraction. Comme il y a une multitude de grains avec des orientations différentes, il est possible d'avoir plusieurs plans de diffraction sur la même image à la différence d'un échantillon cristallin.



Les **zones de Laue** désignent des ensembles de points de diffraction formés lorsqu'un faisceau de rayons X interagit avec un cristal. Ces points, organisés en motifs caractéristiques, résultent de la diffraction par des plans cristallins spécifiques, identifiés par leurs indices de Miller. Chaque zone correspond à une orientation particulière des plans cristallins par rapport au faisceau incident. Les zones de Laue sont essentielles pour déterminer l'orientation cristalline, analyser les défauts dans un matériau ou étudier des monocristaux. Cette technique est largement utilisée en recherche scientifique et en industrie pour comprendre et optimiser les propriétés des matériaux cristallins.