Ondes thermiques dans les cristaux et diffraction des rayons X

Autor(en): **Weigle, Jean**

Objekttyp: **Article**

Zeitschrift: **Archives des sciences physiques et naturelles**

Band (Jahr): **24 (1942)**

PDF erstellt am: **13.07.2024**

Persistenter Link: https://doi.org/10.5169/seals-741755

Jean Weigle. — *Ondes thermiques dans les cristaux et diffraction des rayons X.*

L'influence de l'agitation thermique des atomes d'un cristal sur la diffraction des rayons X a été remise à l'ordre du jour par toute une série de travaux expérimentaux et théoriques. Nous avons montré [1] comment, en considérant l'influence des ondes thermiques sur le réseau réciproque, tous les phénomènes devenaient simples. Mais notre raisonnement ne s'appliquait qu'à des réseaux simples et cubiques. Nous désirons montrer ici qu'il existe une méthode plus générale s'appliquant à tous les réseaux cristallins.

Le problème peut être posé de la façon suivante:

On donne la densité d'un atome m, $f_m(\mathbf{a})$ et l'on connaît donc l'image $\varphi_m(\mathbf{b})$ de celle-ci dans l'espace de Fourier

$$\varphi_m(\mathbf{b}) = \int_\infty f_m(\mathbf{a})\, e^{-2\pi i(\mathbf{ba})}\, dv_a \qquad f_m(\mathbf{a}) = \int_\infty \varphi_m(\mathbf{b})\, e^{2\pi i(\mathbf{ba})}\, dv_b\ .$$

On demande alors ce que devient l'image, dans l'espace de Fourier, de la densité d'atomes formant un cristal et placés donc aux points

$$\mathbf{a}_{l,m} = l_1\mathbf{a}_1 + l_2\mathbf{a}_2 + l_3\mathbf{a}_3 + \rho_m$$

$\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ définissant la maille du cristal, l_1, l_2, l_3 étant des nombres entiers et ρ_m le vecteur allant de l'origine de la maille jusqu'à l'atome m contenu dans celle-ci.

La densité en chaque point a du cristal est donc

$$\mathrm{F}(\mathbf{a}) = \sum_l \sum_m f_m(\mathbf{a} - \mathbf{a}_{m,l}) = \sum_h \mathrm{F}_h\, e^{2\pi i(\mathbf{b}_h\mathbf{a})} \qquad (1)$$

puisqu'elle est périodique avec la maille.

[1] WEIGLE et SMITH, Phys. Rev. (sous presse).

On trouve alors sans peine

$$\mathrm{F}_h = \frac{1}{v_a} \sum_m \varphi_m(\mathbf{b}_h)\, e^{-2\pi i(\mathbf{b}_h \rho_m)}$$

avec $\mathbf{b}_h = \mathbf{b}_{h_1h_2h_3} = h_1\mathbf{b}_1 + h_2\mathbf{b}_2 + h_3\mathbf{b}_3$ ($h_1 h_2 h_3$ entiers) les $\mathbf{b}_i$ étant définis par $(\mathbf{b}_i \mathbf{a}_j) = \delta_{ij}$ et $v_a = (\mathbf{a}_1[\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3])$. La quantité $\mathrm{F}_{h_1h_2h_3}$ est ce qu'on appelle le facteur de structure du plan dont les indices de Miller sont $(h_1 h_2 h_3)$.

Si maintenant on suppose qu'une onde thermique déplace l'atome m de

$$\xi_{l,m} = \xi_m e^{2\pi i(\mathbf{k}\mathbf{a}_{l,m} - \nu t)}$$

la densité devient alors

$$\mathrm{F}(\mathbf{a}) = \sum_l \sum_m f_m(\mathbf{a} - \mathbf{a}_{l,m} - \xi_{l,m})$$

et elle n'est plus périodique. Si l'on tient compte du fait que l'amplitude d'une onde thermique est toujours très petite par rapport aux dimensions de la maille, on peut écrire:

$$\mathrm{F}(\mathbf{a}) = \sum_l \sum_m f_m(\mathbf{a} - \mathbf{a}_{l,m}) - \sum_l \sum_m (\xi_m \cdot \operatorname{grad} f_m)\, e^{2\pi i(\mathbf{k}\mathbf{a}_{l,m} - \nu t)}\ .$$

La première somme est celle que nous avons rencontrée, elle correspond au cristal non perturbé par l'onde thermique. La seconde somme peut se mettre sous la forme

$$e^{2\pi i(\mathbf{k}\mathbf{a} - \nu t)} \sum_l \sum_m \big(\xi_m \cdot \operatorname{grad} f_m(\mathbf{a}')\big)\, e^{-2\pi i(k\mathbf{a}')}$$

avec

$$\mathbf{a} - \mathbf{a}_{l,m} = \mathbf{a}'\ .$$

Et l'on voit alors qu'elle est faite d'une fonction périodique modulée par l'onde thermique. En exprimant la partie périodique en série de Fourier, on trouve

$$\frac{1}{v_a} \sum_h \left[\sum_m 2\pi i\big((\mathbf{b}_h + \mathbf{k})\,\xi_m\big)\, \varphi_m(\mathbf{b}_h + \mathbf{k})\, e^{-2\pi i(\mathbf{b}_h \cdot \rho_m)}\right] e^{2\pi i\left((\mathbf{b}_h + \mathbf{k})\,\mathbf{a} - \nu t\right)}\ . \tag{4}$$

Ce résultat général s'applique à tous les cristaux quelle que soit leur symétrie ou la disposition des atomes de la maille. Il montre que le réseau réciproque qui, d'après (1), était formé de points placés aux extrémités des vecteurs $\mathbf{b}_h$, possède maintenant des points aux extrémités de $\mathbf{b}_h + \mathbf{k}$. On voit en effet d'après (2) qu'il suffit de connaître $\varphi(\mathbf{b})$ aux points $\mathbf{b}_h$ pour obtenir $F(\mathbf{a})$ tandis que, pour le réseau perturbé, il faut, en plus, connaître $\varphi(\mathbf{b})$ aux points $\mathbf{b}_h + \mathbf{k}$. Ces derniers points ont des facteurs de structure qui, comme on peut le voir en (4), dépendent de l'amplitude ξ de l'onde.

Si l'on tient compte du fait qu'il n'y a pas une seule onde thermique mais que le cristal est parcouru par un très grand nombre de celles-ci (leurs amplitudes sont données par les lois de distribution de l'énergie), on voit que le réseau réciproque est rempli de points $\mathbf{b}_h + \mathbf{k}$, $\mathbf{k}$ prenant toutes les valeurs permises par la forme géométrique du cristal. On comprend alors que les rayons X donnent des réflexions diffuses en dehors de l'angle de Bragg, réflexions diffuses qui seront d'autant plus intenses que le mouvement thermique des atomes aura plus d'amplitude.

Université de Genève.
Institut de physique.

Marko Zalokar. — *Action inhibitrice du cristallin dans la « régénération de Wolff ».*

Le remplacement du cristallin de l'œil, observé par Wolff chez les Batraciens, ne constitue pas une véritable régénération. Il s'agit, en effet, de la néoformation d'un organe lentoïde, grâce à un processus qui diffère profondément de celui qui donne naissance au cristallin embryonnaire. Le phénomène met en évidence la potentialité que possède le bord supérieur de l'iris de former une lentille transparente, potentialité qui ne peut s'exprimer que si deux conditions sont réunies: présence de la rétine et absence du cristallin normal. Ce dernier inhibe donc cette néoformation. Par quel mécanisme ?

Plusieurs auteurs se demandant s'il ne s'agissait que d'un simple obstacle mécanique représenté par le cristallin *in situ*,