

# Remarques sur la diffraction des rayons X par les ondes thermiques

Autor(en): **Bleuler, Konrad / 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-741798>

## **Nutzungsbedingungen**

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern.

Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden.

Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

## **Haftungsausschluss**

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

moyenne, valable pour la courbe de magnétisme sans hystérésis :

$$\mathcal{C} = m\mathcal{B} + k \operatorname{sh} \frac{\mathcal{B}}{c} .$$

Développons le sinus hyperbolique en série. En se limitant aux deux premiers termes, on trouve

$$\mathcal{C} = \left( m + \frac{k}{c} \right) \mathcal{B} + \frac{k}{c^3} \mathcal{B}^3 ,$$

expression de la même forme que ci-dessus. Notre formule peut donc être considérée comme une première approximation de celle de Sedlmayer, quoique obtenue par une voie entièrement différente. Appliquée à certains fers, cette formule est suffisante pour un calcul de première approximation; elle est insuffisante dans d'autres cas, car alors les harmoniques du courant d'ordre supérieur à trois ne sont pas négligeables.

**Konrad Bleuler et Jean Weigle.** — *Remarques sur la diffraction des rayons X par les ondes thermiques.*

Dans une série de publications récentes nous avons donné une forme nouvelle à la théorie de la diffraction des rayons X par les mouvements thermiques des atomes formant un cristal. Certaines conséquences de nos résultats, sur lesquelles nous n'avons pas insisté précédemment, nous semblent suffisamment intéressantes pour justifier la publication des remarques constituant cette note.

A. *Peut-on obtenir une réflexion des rayons X sur un plan réticulaire dont le facteur de structure est nul ?*

C'est là une question classique qui s'est posée en particulier au sujet de la réflexion sur certains plans du diamant et qui n'a pas reçu jusqu'ici de solution complète. Or nous obtenons l'expression suivante pour le facteur de structure

$$\sum_m \varphi_m(\vec{b}_h) e^{-2\pi i(h_1 \alpha_{1m} + h_2 \alpha_{2m} + h_3 \alpha_{3m})} \quad (1)$$

Le plan a les indices de Miller  $(h_1 h_2 h_3)$ , les atomes de la maille élémentaire numérotés par l'indice  $m$  ont les coordonnées  $(\alpha_{1m}, \alpha_{2m}, \alpha_{3m})$  et une densité électronique dont la transformée de Fourier est  $\varphi_m(\vec{b})$ . Le vecteur  $\vec{b}_h$  est le vecteur du réseau réciproque aboutissant au point  $(h_1 h_2 h_3)$  correspondant au plan réticulaire considéré. Lorsque le cristal est perturbé par une onde thermique sinusoidale de vecteur  $\vec{k}$ , le réseau réciproque n'est plus seulement fait des points  $\vec{b}_h$ , il y a en plus (en première approximation) des points  $\vec{b}_h \pm \vec{k}$  dont le facteur de structure est

$$\sum_m \left( (\vec{b}_h + \vec{k}) \vec{\xi}_m \right) \varphi_m(\vec{b}_h + \vec{k}) e^{-2\pi i(h_1 \alpha_{1m} + h_2 \alpha_{2m} + h_3 \alpha_{3m})} \quad (2)$$

l'onde ayant l'amplitude  $\vec{\xi}_m$ , pour l'atome  $m$ .

Dans le voisinage du point  $\vec{b}_h$ , c'est-à-dire pour des angles de réflexion voisins de celui du plan  $(h_1 h_2 h_3)$ ,  $\vec{k}$  est très petit par rapport à  $\vec{b}$ . Les ondes thermiques ont donc de grandes longueur d'ondes et elles déplacent les atomes comme s'ils étaient liés rigidement les uns aux autres. Les amplitudes sont donc les mêmes pour tous les atomes et le terme  $\left( (\vec{b}_h + \vec{k}) \vec{\xi} \right)$  peut être mis en évidence. Si le cristal est fait d'atomes tous semblables, on peut aussi mettre  $\varphi(\vec{b}_h + \vec{k})$  en évidence et on voit alors que si (1) est nul, (2) le sera aussi. Ainsi pour un cristal fait d'atomes semblables, il n'est pas possible d'obtenir, par la présence des ondes thermiques, une réflexion sur un plan dont le facteur de structure est nul.

Si les atomes ne sont pas semblables on peut toujours mettre dans le facteur de structure la partie qui devient nulle en évidence. Et les mêmes arguments que ci-dessus nous amènent aux mêmes résultats.

#### B. *Les atomes se meuvent rigidement sous l'effet des ondes thermiques.*

La plupart des problèmes dans lesquels les mouvements thermiques des atomes jouent un rôle (chaleurs spécifiques, reststrahlen, spectres infra-rouges, effet Raman, dilatation thermique, etc.) ne font intervenir que les déplacements des noyaux

des atomes. Lorsqu'on décrit ces mouvements par des ondes sinusoïdales planes

$$\vec{\xi}_m \sin 2\pi \left( (\vec{k} \cdot \vec{r}_m) - \nu t \right) \quad (3)$$

le vecteur de position  $\vec{r}_m$  ne prend que les valeurs

$$\vec{r}_m = (l_1 + \alpha_{1m}) \vec{a}_1 + (l_2 + \alpha_{2m}) \vec{a}_2 + (l_3 + \alpha_{3m}) \vec{a}_3$$

( $l_1, l_2, l_3$  entiers)

$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  étant les vecteurs définissant la maille du cristal. L'expression (3) représente donc une onde très spéciale (on sait en particulier qu'on peut obtenir des déplacements des noyaux d'atomes exactement équivalents avec des « ondes » de vecteur  $(\vec{k} + \vec{b}_h)$  et de même fréquence  $\nu$ . Or c'est le nuage d'électrons attachés au noyau qui diffracte les rayons X alors que les noyaux eux-mêmes ne produisent aucun effet à cause de leur grande inertie. La théorie de la diffraction va donc faire ressortir des ondes (3) des effets nouveaux. Pour les fréquences  $\nu$  qui entrent en jeu, on peut supposer que les atomes se déplacent rigidement, le nuage d'électrons se déplaçant exactement comme le noyau auquel il est attaché. On voit alors que la distribution de matière diffractante dans un cristal perturbé par l'onde sinusoïdale (3) n'est pas elle perturbée par une onde sinusoïdale. L'onde par laquelle on décrit la distribution de matière perturbée fait intervenir des ordres élevés avec des vecteurs d'onde  $n\vec{k}$  et des fréquences  $n\nu$  ( $n$  entier) et la superposition de deux ondes (3) n'est pas représentée par la superposition simple de deux ondes de matière perturbée. Les conséquences de ces effets forment le sujet de la note suivante de M. Bleuler et M<sup>lle</sup> Bonnelance.

Remarquons pour terminer qu'une étude expérimentale détaillée de la diffraction par les ondes thermiques permettra de mesurer  $\varphi_m(\vec{b})$  de la formule (2). On pourra donc mesurer la densité électronique de chaque atome séparément et non pas seulement comme on le fait maintenant grâce à l'analyse de Fourier des structures cristallines, la densité électronique due à la superposition des atomes dans la maille. C'est bien parce que les atomes se déplacent rigidement que cette mesure est possible.