

**Zeitschrift:** Helvetica Physica Acta  
**Band:** 10 (1937)  
**Heft:** II

**Artikel:** Réflexion simultanée de Rayons X par deux plans dans un cristal  
**Autor:** Weigle, Jean / Mühsam, Helmut  
**DOI:** <https://doi.org/10.5169/seals-110737>

### **Nutzungsbedingungen**

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. [Siehe Rechtliche Hinweise.](#)

### **Conditions d'utilisation**

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. [Voir Informations légales.](#)

### **Terms of use**

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. [See Legal notice.](#)

**Download PDF:** 15.10.2024

**ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>**

## Réflexion simultanée de Rayons X par deux plans dans un cristal

par Jean Weigle et Helmut Mühsam.

(9. II. 37.)

### Introduction.

Dans les spectrogrammes de rayons X, on observe souvent des lignes blanches se détachant sur le fond continu et donnant l'apparence de lignes d'absorption. Ces lignes, que nous appellerons des lignes blanches, sont indépendantes de l'anticathode et ne varient qu'avec le cristal employé pour la diffraction des rayons X. Elles sont dues au fait que, pour la longueur d'onde considérée, deux plans réticulaires peuvent à la fois réfléchir les rayons X; une partie de l'énergie alors, qui se réfléchissait dans la direction considérée, se propage maintenant dans une direction différente.

Les lignes blanches furent observées pour la première fois par E. WAGNER<sup>1)</sup>. O. BERG<sup>2)</sup> a donné une explication du phénomène par les conditions géométriques du cristal et a esquissé une théorie simple, permettant de prévoir l'intensité des lignes. BERG s'est limité au cas des cristaux cubiques.

Pour étudier l'intensité des lignes et leur largeur, G. MAYER<sup>3)</sup> a employé la théorie dynamique de la dispersion des rayons X, due à EWALD<sup>4)</sup>. Il s'est placé dans le cas très particulier d'une seule longueur d'onde incidente sur le cristal, alors qu'en général les lignes se forment sur un fond continu, comprenant tout un domaine de longueurs d'ondes.

LAUE<sup>5)</sup> a donné récemment une expression plus simple de la théorie d'EWALD, décrivant le cristal comme un milieu continu, à constante diélectrique périodique. Il nous a semblé intéressant de reprendre l'étude des lignes blanches au moyen de la théorie d'EWALD-LAUE et de la compléter, vue que certains phéno-

<sup>1)</sup> E. WAGNER, Phys. Zeitschr. **21**, 94 (1923).

<sup>2)</sup> O. BERG, Wissensch. Veröffentl. a. d. Siemenskonzern, **5**, 89 (1926).

<sup>3)</sup> G. MAYER, Zeitschr. f. Kristallogr. **66**, 585 (1928).

<sup>4)</sup> P. P. EWALD, Handbuch der Physik, **23/2**, p. 285.

<sup>5)</sup> LAUE, Ergeb. der exakten Naturw., p. 133, 1931.

mènes très caractéristiques, comme l'adjonction d'une ligne noire, bordant la ligne blanche n'avaient pas reçu d'explication jusqu'ici.

Ces lignes blanches pourraient servir à déterminer avec précision les constantes de la structure des cristaux. En outre, comme ces lignes ne dépendent que du cristal, on pourrait, en mesurant leur largeur, étudier la qualité du réseau cristallin. Jusqu'ici, on s'est toujours servi pour les mesures de réflexion des cristaux de lignes spectrales d'émission, dont la largeur propre était inconnue (spectromètre à double cristal) et il serait fort avantageux de posséder une méthode permettant d'éliminer cette largeur propre. Il est possible, que ces lignes blanches nous donnent un moyen d'arriver à ce but.

Dans la première partie de ce travail préliminaire, nous étudions pour le mica les conditions géométriques de la formation des lignes blanches et nous vérifions expérimentalement les résultats de nos calculs. Dans la seconde partie, nous appliquons, dans un cas simple, la théorie d'EWALD-LAUE à la formation des lignes blanches.

### I. Conditions géométriques dans le mica.

La diffraction des rayons X par les cristaux peut être considérée comme une réflexion sur les plans réticulaires du cristal, qui n'a lieu que si la relation de BRAGG

$$2 d \sin \Theta = \lambda \quad (1)$$

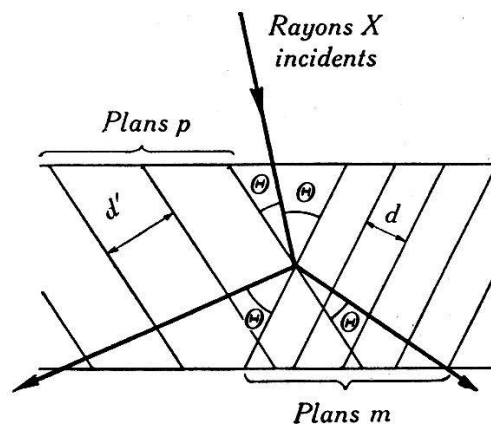


Fig. 1.

Réflexion simultanée sur les plans  $p$  et  $m$ .

est satisfaite. Si, pour un autre plan réticulaire qui forme avec les rayons X incidents un angle  $\Theta'$  et dont la distance est  $d'$ , la relation

$$2 d' \sin \Theta' = \lambda \quad (2)$$

est aussi satisfaite, les rayons X de longueur d'onde  $\lambda$  se réfléchissent simultanément sur ces deux plans. On observe alors sur le fond continu du spectre, dû à chacun de ces plans, une ligne blanche, qui provient du fait que l'énergie a dû se partager entre les deux directions dans lesquelles partent les rayons réfléchis (voir fig. 1).

Dans le cas du mica, que nous avons étudié expérimentalement, un plan (200) nous a servi à obtenir le fond continu, l'axe  $a_1$  étant horizontal, l'axe  $a_3$  horizontal et approximativement

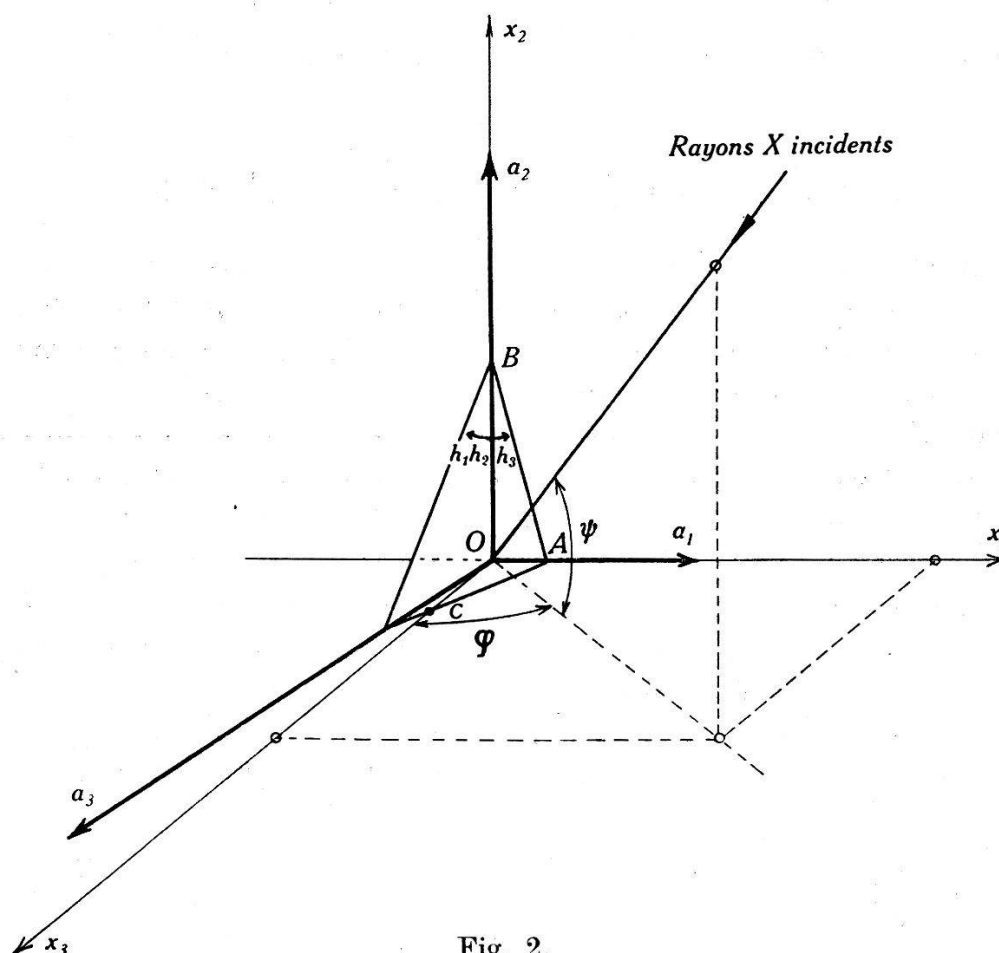


Fig. 2.

Conditions géométriques pour la réflexion simultanée. Les axes  $a_1$   $a_2$   $a_3$  sont les axes de la maille cristalline, et  $x_1$   $x_2$   $x_3$  un système d'axes rectangulaires. Les segments  $OA$ ,  $OB$ ,  $OC$  sont coupés par un plan d'indices  $(h_1 h_2 h_3)$ .

normal à la face du cristal, l'axe  $a_2$  vertical. L'angle  $\beta$  entre  $a_1$  et  $a_3$  est d'environ  $84^\circ$  et les autres dimensions sont:

$$a_1 = 5,2 \text{ A} \quad a_2 = 9 \text{ A} \quad a_3 = 20 \text{ A}.$$

Ces valeurs connues à quelques pour cent près varient avec les échantillons de mica.

En général, chaque plan réticulaire d'indices  $(h_1 h_2 h_3)$  peut donner lieu à une ligne blanche sur le fond continu de tout autre

plan. Pour déterminer la position de raie blanche, nous repérerons la direction des rayons X incidents par les angles  $\varphi$  et  $\psi$  (fig. 2). Les angles  $\Theta$  et  $\Theta'$  que ces rayons forment avec les plans (200) et  $(h_1 h_2 h_3)$  sur lesquels nous supposons qu'il y a réflexion simultanée sont alors donnés par :

$$\sin \Theta = \cos \psi \sin \varphi \sin \beta + \cos \psi \cos \varphi \cos \beta$$

$$\sin \Theta' = d' \left[ \frac{h_1}{a_1} \cos \psi \sin \varphi + \frac{h_2}{a_2} \sin \psi + \frac{h_1}{a_1} \frac{1 + \frac{a_1 h_3}{a_3 h_1 \cos \beta}}{\operatorname{tg} \beta} \cos \psi \cos \varphi \right]$$

où  $d'$  est la distance réticulaire des plans  $(h_1 h_2 h_3)$

$$d' = \frac{\sin \beta}{\sqrt{\left(\frac{h_1}{a_1}\right)^2 + \left(\frac{h_2 \sin \beta}{a_2}\right)^2 + \left(\frac{h_3}{a_3}\right)^2 + \frac{2 h_1 h_3}{a_1 a_3} \cos \beta}}$$

En éliminant  $\lambda$  des conditions de réflexion simultanée (1) et (2) et en introduisant les expressions ci-dessus pour  $\Theta$  et  $\Theta'$ , on obtient l'équation entre  $\psi$  et  $\varphi$  qui détermine dans quelle direction les rayons X doivent tomber sur le cristal pour être réfléchis simultanément par le plan (200) et  $h_1 h_2 h_3$ . A chaque direction correspond évidemment une longueur d'onde bien déterminée.

Les rayons X réfléchis répondant à ces conditions forment alors une surface dont l'intersection avec un film photographique donne une ligne blanche. Dans le spectrographe dont nous nous sommes servis, l'angle  $\psi$  reste toujours petit et les lignes blanches apparaissent sur le film comme des droites. On peut alors mesurer la longueur d'onde correspondant à  $\psi = 0$  et l'angle  $i$  que la ligne blanche forme avec l'horizontale. Cet angle est donné par :

$$\operatorname{tg} i = \left(\frac{d\psi}{d\varphi}\right)_{\psi=0} = \frac{a_2}{h_2} \left[ \frac{d}{d'^2} (\cos \varphi_0 \sin \beta - \sin \varphi_0 \cos \beta) - \frac{h_1}{a_1} \cos \varphi_0 \right. \\ \left. + \sin \varphi_0 \frac{h_1}{a_1} \frac{1 + \frac{a_1 h_3}{a_3 h_1 \cos \beta}}{\operatorname{tg} \beta} \right].$$

$\varphi_0$  est l'angle correspondant à  $\psi = 0$ ; il est donné par

$$\operatorname{tg} \varphi_0 = \frac{h_1}{a_1} \frac{1 + \frac{a_1 h_3}{a_3 h_1 \cos \beta}}{\operatorname{tg} \beta} \left/ \frac{d}{d'^2} \sin \beta - \frac{h_1}{a_1} \right.$$

La longueur d'onde  $\lambda_0$  correspondant au point  $\psi = 0$  de la ligne blanche peut être calculée par l'expression :

$$2d (\sin \varphi_0 \sin \beta + \cos \varphi_0 \cos \beta) = \lambda_0.$$

On remarque que  $i$  change de signe si l'on remplace  $h_2$  par  $-h_2$ , tandis que la valeur de  $\varphi_0$  reste la même. On observera donc en général des paires de lignes blanches placées symétriquement par rapport à l'horizontale et se croisant sur celle-ci. A titre d'exemple, pour une de ces paires de lignes blanches qui était assez nette pour permettre des mesures suffisamment précises, les résultats ci-dessus ont pu être vérifiés, comme le montre le tableau suivant :

	fond continu (200)	ligne blanche (424)
	observé	calculé
$\lambda_0$	1,557 Å	1,550 Å
$i$	74° 30'	77°

La différence entre les valeurs calculées et observées provient du fait que les constantes du cristal n'étaient pas connues avec précision.

Si  $h_2 = 0$ , l'angle  $i$  est droit, la ligne blanche est alors verticale. Ce sont ces lignes qu'on a pu obtenir avec le plus de facilité et qui ont permis de vérifier nos résultats. Par exemple, pour un fond continu dû au plan (200), seuls les plans (204), (206), (208), (404), (406), (4010) donnent lieu à des lignes blanches pour des longueurs d'onde comprises entre 1 Å et 2 Å. Sur un film, comprenant le domaine entre 1,2 Å et 1,65 Å, on a mesuré les longueurs d'onde des lignes blanches données dans le tableau ci-dessous :

fond continu 200							
plan	404	204	406	408	4010	206	208
calculé en Å	1,08	1,23	1,36	1,51	1,56	1,61	1,82
observé . . .	—	1,220	1,365	1,505	1,559	1,604	—

Les longueurs d'onde calculées ne peuvent être déterminées avec plus de précision car les constantes de la maille cristalline ne nous sont connues qu'à plusieurs pour cent près. Il est vrai qu'à partir des valeurs observées pour les longueurs d'onde des lignes blanches, on pourrait retrouver avec plus de précision les constantes du réseau cristallin. Mais, par le fait que, pour les lignes verticales, interviennent déjà trois constantes,  $a_1$ ,  $a_2$  et  $\beta$ , les calculs ne peuvent aboutir à des résultats satisfaisants qu'avec un nombre considérable de lignes mesurées avec précision.

## II. Largeur et intensité des lignes blanches.

### 1. Théorie d'Ewald.

D'après la théorie géométrique développée dans le paragraphe précédent, la largeur des lignes blanches devrait devenir infiniment petite pour un cristal idéal. Ce que l'on observe expérimentalement est une ligne claire d'une largeur finie, accompagnée souvent d'une ligne noire adjacente, plus intense que le fond continu avoisinant.

Il faut avoir recours à la théorie dynamique d'EWALD sur la dispersion des rayons X dans un cristal pour pouvoir donner une description complète du phénomène.

Pour trouver les directions dans lesquelles les ondes secondaires diffusées par les atomes s'ajoutent pour donner des interférences positives, on trace, dans le réseau réciproque, ce qu'EWALD appelle la sphère de propagation: à partir d'un point du réseau réciproque choisi arbitrairement comme origine, on trace le vecteur  $-\vec{k}$  ( $k = 1/\lambda$ ) de l'onde incidente et, à partir de l'extrémité de ce vecteur, on décrit une sphère de rayon  $k$ . Si d'autres points du réseau réciproque (à part l'origine) se trouvent près de cette sphère de propagation, les vecteurs d'onde des ondes diffractées (« réfléchies ») sont donnés *approximativement* par les vecteurs  $k_i$  joignant le centre de la sphère à ces points. Alors que la théorie élémentaire (de LAUE-BRAGG) demandait que ces points soient exactement placés sur la sphère de propagation pour donner lieu à des « réflexions », il suffit, dans la théorie dynamique, que ces points soient près de cette sphère pour que des ondes réfléchies se propagent dans le cristal.

Dans le cas qui nous occupe ici, il y a réflexion simultanément sur deux plans. Il y a donc à part l'origine  $O$  deux points que nous appellerons  $M$  et  $P$  du réseau réciproque qui se trouvent près de la sphère de propagation.

Nous supposons, pour simplifier le problème, que le vecteur de l'onde incidente est dans le plan défini par les trois points  $O$ ,  $M$  et  $P$ . On peut alors, en décomposant les ondes en deux polarisations, l'une dans le plan  $OMP$  et l'autre perpendiculaire à ce plan, traiter chacune des polarisations séparément. Comme notre but, dans cette étude préliminaire, est de montrer les propriétés principales des lignes blanches, nous introduirons les simplifications suivantes:

a) nous admettrons que les deux plans qui donnent lieux aux réflexions simultanées sont placés symétriquement par rapport à la direction de l'onde incidente,



- b) nous supposons que les facteurs de structure de tous les plans sont égaux,
- c) nous ne traiterons que l'une des polarisations,
- d) nous supposons que le cristal n'est pas absorbant.

Par contre, nous étudierons la réflexion non seulement pour la longueur d'onde unique qui, d'après la théorie élémentaire, devrait se réfléchir simultanément sur les deux plans, mais aussi pour les longueurs d'ondes voisines. Car, en vertu de la théorie d'EWALD, des longueurs d'ondes voisines de celle satisfaisant à l'équation de BRAGG se réfléchissent aussi sur les plans considérés. Une bande même infiniment petite d'un spectre continu étalé par un cristal contient encore une infinité de longueurs d'ondes différentes, mais les intensités de ces différentes ondes, maxima pour une longueur d'onde très voisine de celle de BRAGG, diminuent très rapidement lorsqu'on s'éloigne tant soit peu de celle-ci.

## 2. Trois ondes dans un cristal infini.

A l'intérieur d'un cristal que, pour l'instant, nous supposons infini, le champ d'ondes électromagnétiques planes de fréquence  $\nu = k/c$  sera représenté par

$$\vec{D} = e^{2\pi i \nu t} \sum_j \vec{D}_j e^{-2\pi i (\vec{k}_j \cdot \vec{r})}$$

où  $\vec{D}$  est le déplacement électrique. Pour satisfaire aux équations de MAXWELL, autrement dit pour que les ondes soient dynamiquement stables, il faut que les  $\vec{D}_j$  vérifient les équations de récurrence<sup>1)</sup>

$$\frac{k_j^2 - k^2}{k_j^2} \vec{D}_j = \sum_l \psi_{l-j} \vec{D}_{l[j]} \quad (3)$$

et que

$$\vec{k}_j - \vec{k}_0 = \vec{b}_j \quad (4)$$

qui sont les équations fondamentales du problème.  $\vec{D}_{l[j]}$  représente la projection de  $\vec{D}_l$  sur une direction normale à  $\vec{k}_j$  qui est le vecteur de l'onde dont l'amplitude est  $\vec{D}_j$ . Le vecteur  $\vec{b}_j$  est un vecteur du réseau réciproque (tracé entre le point origine 000 et un point quelconque  $j_1 j_2 j_3$  du réseau réciproque). Les indices  $i$  et  $j$  représentent trois chiffres. Les coefficients  $\psi_j$  sont proportionnels aux coefficients du développement en série de FOURIER de la densité électronique du cristal ou si l'on veut ce sont les

<sup>1)</sup> LAUE, loc. cit.



facteurs de structure des plans d'indices de MILLER  $j$ . Ils sont de l'ordre de grandeur de  $10^{-5}$  à  $10^{-6}$ .

Comme les équations (3) sont linéaires et homogènes, il existe une condition de comptabilité entre les coefficients qui permet de calculer  $k_0$  et, en vertu de (4) tous les autres  $\vec{k}_j$  (la direction de  $k_0$  étant donnée).

Dans le cas des trois points  $O$ ,  $M$  et  $P$ , les équations fondamentales deviennent pour la composante de  $\vec{D}$  normale au plan des trois points (polarisation normale<sup>1</sup>)

$$\begin{aligned} 2 \varepsilon_0 D_0 &= \psi_0 D_0 + \psi_{-p} D_p + \psi_{-m} D_m \\ 2 \varepsilon_p D_p &= \psi_p D_0 + \psi_0 D_p + \psi_{p-m} D_m \\ 2 \varepsilon_m D_m &= \psi_m D_0 + \psi_{m-p} D_p + \psi_0 D_m \end{aligned} \quad (5)$$

où nous avons posé

$$k_j = k(1 + \varepsilon_j) \quad \text{et donc} \quad \frac{k_j^2 - k^2}{k_j^2} = 2 \varepsilon_j$$

car  $\varepsilon_j$  est comme  $\psi_j$  très petit par rapport à 1.

Il est intéressant de voir s'introduire dans les équations de récurrence ces facteurs de structure  $\psi_{m-p}$  de plans d'indices  $(m-p)$  qui, d'après les conceptions de la théorie cinématique de la diffraction des rayons X (théorie élémentaire de LAUE) ne devraient pas intervenir dans le problème. Un des défauts de celle-ci provient du fait qu'elle suppose que seule l'onde incidente excite les atomes à diffuser les ondes électromagnétiques, alors que les ondes diffractées ayant une intensité comparable à celle de l'onde incidente doivent, elles aussi, exciter les atomes. A l'intérieur du cristal, les ondes perdent leur personnalité, si bien qu'il est impossible de savoir quelle est l'onde incidente et quelles sont les ondes diffractées. Chacune des trois ondes peut, si l'on veut, être considérée comme incidente, les deux autres résultant de la première. Le passage alors de l'une aux autres fait intervenir les plans  $-m$ ,  $-p$ ,  $p-m$  et  $m-p$ . On peut aussi exprimer cela dans le langage de la « réflexion » en disant que l'onde  $m$  se propageant dans le cristal se trouve dans les conditions de BRAGG pour se réfléchir sur le plan  $(p-m)$  donnant par réflexion l'onde  $p$  (voir fig. 3).

<sup>1</sup>) L'autre polarisation, que nous ne traitons pas dans cet article, donne, en appelant  $\Theta_m$  et  $\Theta_p$  les angles de BRAGG relatifs aux réflexions sur les plans  $M$  et  $P$ ,

$$\begin{cases} 2 \varepsilon_0 D_o' = \psi_0 D_o' + \psi_{-p} \cos 2 \Theta_p D_p' + \psi_{-m} \cos 2 \Theta_m D_m' \\ 2 \varepsilon_p D_p' = \psi_p \cos 2 \Theta_p D_o' + \psi_0 D_p' + \psi_{p-m} \cos 2 (\Theta_p + \Theta_m) D_m' \\ 2 \varepsilon_m D_m' = \psi_m \cos 2 \Theta_m D_o' + \psi_{m-p} \cos 2 (\Theta_p + \Theta_m) D_p' + \psi_0 D_m' \end{cases}$$

Cet effet pourrait donner lieu à un phénomène intéressant. Supposons par exemple que le facteur de structure  $\psi_m$  soit nul alors que  $\psi_p$  et  $\psi_{m-p}$  ne le sont pas. Le plan  $m$  ne réfléchit donc pas les rayons X, cependant lorsque les conditions pour la réflexion simultanée sur  $p$  et  $m$  sont remplies, il peut y avoir une onde  $\vec{k}_m$  se propageant dans le cristal comme s'il y avait eu réflexion sur  $m$ , alors qu'en réalité cette onde provient de la réflexion de l'onde  $p$  sur  $(m-p)$ . On observera donc, dans la région angulaire correspondant à la réflexion sur  $m$ , une ligne noire se détachant sur un fond blanc. (Le fond continu étant en effet absent puisqu'il n'y a pas réflexion sur le plan  $m$ ).

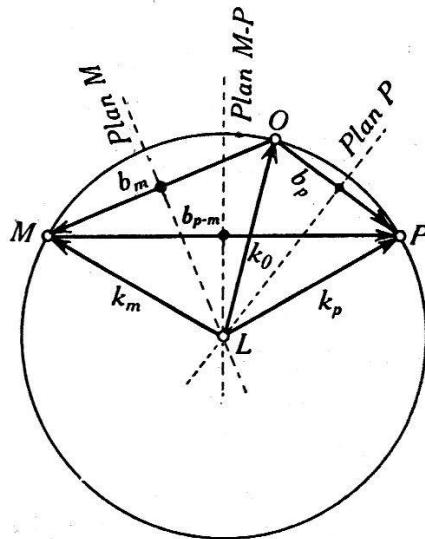


Fig. 3.

#### Réflexion simultanée dans le réseau réciproque.

Les trois ondes de vecteurs  $\vec{k}_o$ ,  $\vec{k}_p$ ,  $\vec{k}_m$  se propagent dans un réseau infini.  $O$ ,  $P$ ,  $M$  sont des points du réseau réciproque,  $L$  est le point de Laue, la sphère est la sphère de propagation. Les trois ondes peuvent être considérées comme dues à des réflexions,  $\vec{k}_m$  par exemple comme due à  $\vec{k}_o$  réfléchi sur le plan  $M$  ou à  $\vec{k}_p$  réfléchi sur  $M-P$ .

Nous allons maintenant supposer que tous les  $\psi$  sont égaux. En posant

$$w_j = \frac{\varepsilon_j}{\psi_j}$$

les équations (5) deviennent:

$$\left. \begin{aligned} (1 - 2w_o) D_o + D_p + D_m &= 0 \\ D_o + (1 - 2w_p) D_p + D_m &= 0 \\ D_o + D_p + (1 - 2w_m) D_m &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Pour que ces équations homogènes et linéaires pour les  $D$  soient

compatibles, il faut que le déterminant des coefficients soit nul, ce qui donne l'équation

$$2 w_o w_p w_m - w_o w_p - w_p w_m - w_m w_o = 0 \quad (7)$$

Nous montrerons plus loin que  $w_m$  et  $w_p$  sont des fonctions linéaires de  $w_o$ . Par conséquent, l'équation (7) est du troisième degré en  $w_o$ , elle a donc trois solutions  $w_o^1$ ,  $w_o^2$  et  $w_o^3$ . Ce qui veut dire qu'une onde de fréquence  $\nu = k/c$  et de direction donnée peut se décomposer en trois ondes dont les vecteurs d'ondes ont les grandeurs

$$\begin{aligned} k_o^1 &= k(1 + w_o^1 \psi) \\ k_o^2 &= k(1 + w_o^2 \psi) \\ k_o^3 &= k(1 + w_o^3 \psi). \end{aligned} \quad (8)$$

Vers chacun des points  $M$  et  $P$ , on obtient aussi trois ondes associées à celles décrites ci-dessus et dont les vecteurs d'ondes sont donnés par l'équation (4) en remplaçant  $k_o$  par les valeurs (8).

### 3. Surfaces de Dispersion.

Si l'onde  $k_o$  se propage dans le cristal dans une direction un peu différente de celle considérée précédemment, la sphère de propagation est déplacée. Mais aussi longtemps que les points  $M$  et  $P$  du réseau réciproque restent relativement près de celle-ci (ce qui n'a lieu que pour de très petits déplacements angulaires de  $k_o$ ), il y a encore de l'énergie dans les ondes  $k_m$  et  $k_p$ . Pour chacune des orientations de  $k_o$  on a, d'après l'équation (7), trois valeurs  $k_o^1$ ,  $k_o^2$ ,  $k_o^3$ . Les origines de ces trois vecteurs d'onde décrivent dans l'espace des surfaces dont les intersections avec le plan  $MOP$  sont les courbes de dispersion. Chacune de ces courbes correspond à l'une des trois solutions de l'équation (7).

Ces courbes de dispersion déterminent pour une onde de fréquence et de direction donnée se propageant dans le cristal, a) la grandeur du vecteur de cette onde, et b) les vecteurs des ondes dynamiquement associées à celle-ci et nécessaires pour satisfaire aux équations de MAXWELL. En effet, à l'onde  $k_o^1$  (vecteur ayant son origine sur une des courbes de dispersion et son extrémité sur un des points du réseau réciproques) sont nécessairement associées les ondes dont les vecteurs sont

$$\vec{k}_m^1 = \vec{k}_o^1 + \vec{b}_m \quad \text{et} \quad \vec{k}_p^1 = \vec{k}_o^1 + \vec{b}_p$$

Comme nous l'avons dit, seul un domaine angulaire extrêmement restreint intervient et, pour tracer les courbes de dispersion, nous agrandirons l'échelle autour du centre de la sphère de propagation environ un million de fois.

Choisissons tout d'abord une fréquence telle que la sphère de propagation passe exactement par les trois points  $MOP$ . Soit  $N$  cette fréquence, le rayon de la sphère est alors  $K = N/c$ . Nous appellerons point de LAUE  $L$  le centre de la sphère. Pour pouvoir tracer les courbes de dispersion données par (7), il est nécessaire

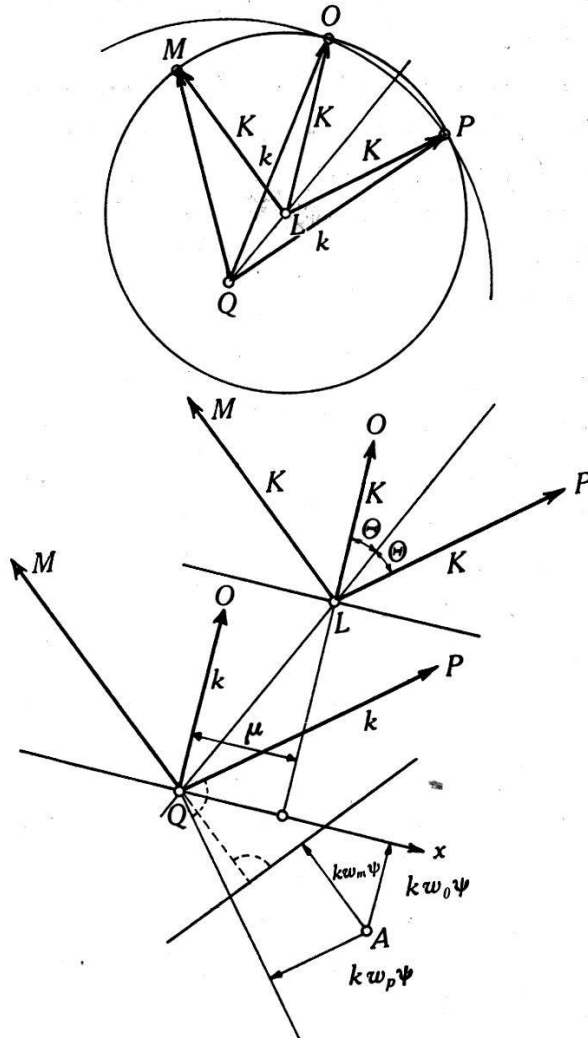


Fig. 4.

La figure du haut montre les deux sphères de propagation de rayons  $K$  (point de Laue  $L$ ) et  $k$  (point de Laue  $Q$ ). La figure inférieure redonne ce qui se passe autour du point  $L$  avec une échelle agrandie un million de fois environ. Les sphères tracées autour des points  $O P M$  (absentes dans la figure supérieure) dégénèrent dans leurs plans tangents. La quantité  $\mu$  sert à déterminer la fréquence de l'onde  $k$  par rapport à celle de  $K$ ,  $\Theta$  est l'angle de BRAGG. Le point  $A$  est supposé placé sur une combe de dispersion, son abscisse  $x$  est mesurée à partir du point  $Q$ .

de connaître  $w_m$  et  $w_p$  en fonction de  $w_o$  et de l'orientation de  $\vec{k}_o$  dans le cristal. Le calcul nous est facilité par le fait que les  $\varepsilon_j$  comme les  $\psi_j$  sont petits et qu'à l'échelle considérée les sphères tracées à partir des points  $OMP$  autour de  $L$  dégénèrent en leurs plans tangents (voir fig. 4).

Nous désirons connaître les courbes de dispersion non seulement pour l'onde de fréquence  $N$ , mais aussi pour des ondes de fréquences voisines de celle-ci. En effet, de même qu'une onde de fréquence donnée peut être « réfléchiée » par un plan réticulaire dans tout un petit domaine angulaire, les ondes de tout un petit domaine de fréquence seront « réfléchiées » simultanément par les deux plans  $M$  et  $P$ .

L'onde de vecteur  $k = \nu/c$  ( $\nu$  fréquence considérée) donnera, pour la « réflexion » sur le plan  $P$ , un nouveau point de LAUE  $Q$  (à égale distance ( $k$ ) de  $O$  et  $P$ ). Si l'on appelle  $\mu/k$  (voir fig. 4) l'angle qu'il faut ajouter à l'angle de BRAGG  $\Theta$  (pour la fréquence  $N$ ) pour avoir le nouvel angle de BRAGG pour la fréquence  $\nu$ , on voit facilement que

$$k = K \left( 1 + \frac{\mu}{K} \operatorname{ctg} \Theta \right).$$

D'autre part, soit  $A$  un point de la courbe de dispersion pour la fréquence  $\nu$ . La distance de  $A$  aux sphères de rayon  $k$  tracées à partir des points  $MOP$  vaut respectivement  $k\psi w_o$ ,  $k\psi w_m$ ,  $k\psi w_p$ . On voit alors que

$$\left. \begin{aligned} w_p &= w_o \cos 2\Theta - x' \sin 2\Theta \\ w_m &= w_o \cos 2\Theta + x' \sin 2\Theta - \mu' \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

avec  $x' = \frac{x}{k\psi}$   $\mu' = \frac{\mu}{k\psi} \frac{2 \sin 2\Theta}{1 - \cos 2\Theta}$

et en remplaçant dans (7) on trouve

$$\left. \begin{aligned} &2 w_o^3 \cos 2\Theta - w_o^2 \cos 2\Theta (\cos 2\Theta + 2 + 2\mu') \\ &+ w_o [2 x' \sin 2\Theta (\mu' - x' \sin 2\Theta) + \mu' (1 + \cos 2\Theta)] \\ &+ x' \sin 2\Theta (x' \sin 2\Theta - \mu') = 0. \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

Cette équation nous permet de calculer  $w_o$  en fonction de  $x$ , c'est-à-dire en fonction de l'orientation de l'onde dans le cristal pour une valeur de  $\mu$  donnée, ou autrement dit pour chaque longueur d'onde. Pour résoudre l'équation (10), nous avons procédé graphiquement en traçant les courbes de dispersion. Ces courbes sont données dans la figure (5) pour différentes valeurs de  $\mu$ . Il y a trois branches correspondant à chacune des racines de l'équation du troisième degré (10). Ces branches s'approchent asymptotiquement des sphères de rayon  $k(1 + \frac{1}{2}\psi)$  ayant leurs centres aux points  $MOP$ . On voit en effet dans les équations fondamentales que lorsque les points  $M$  et  $P$  par exemple sont

éloignés de la sphère de propagation, seule l'intensité de l'onde  $O$  n'est pas négligeable et que, par conséquent, les équations se réduisent à

$$\left(1 - 2 \frac{\varepsilon_o}{\psi}\right) = 0 \quad \text{ou} \quad \varepsilon_o = \frac{\psi}{2}.$$

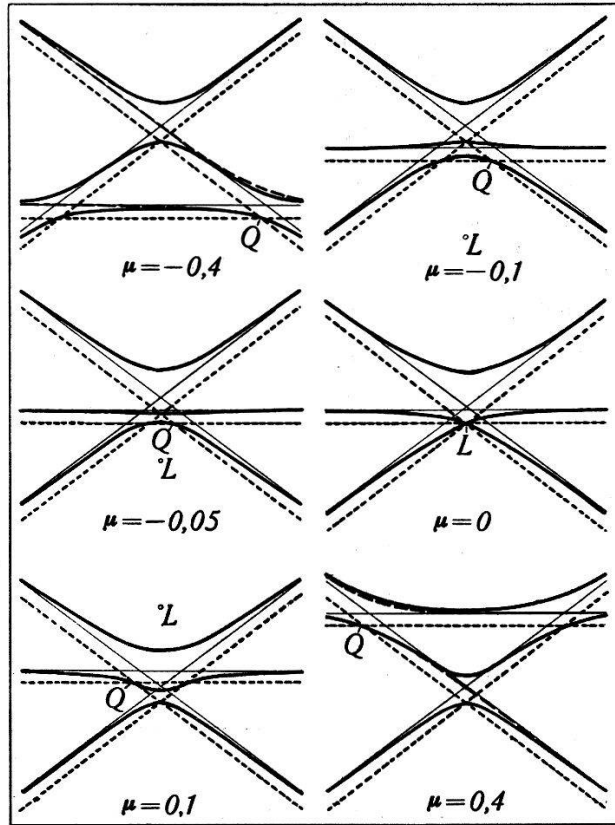


Fig. 5.

Les courbes sont tracées pour un angle de Bragg de  $\Theta = 13^{\circ} 26'$ . Les asymptotes sont des cercles de rayon  $k + \frac{1}{2}\psi$  ayant comme centres les points  $O$ ,  $P$  et  $M$ . Les droites en pointillé sont des cercles concentriques de rayon  $k$ .  $L$  est le point de Laue pour la double réflexion,  $Q$  les points de Laue relatifs aux autres fréquences. Sur la première et la dernière courbe, nous avons indiqué, en trait pointillé, la courbe de dispersion qu'on aurait obtenue en l'absence de l'autre plan réflecteur.

#### 4. Cristal fini. Conditions aux limites.

Nous désirons connaître maintenant l'intensité des ondes sortant du cristal après avoir été diffractées par celui-ci, l'intensité de l'onde incidente étant donnée. Nous supposons que le cristal a la forme d'une plaque à faces parallèles.

La première condition aux limites à réaliser concerne les vitesses de propagation. On sait que lorsqu'une onde passe d'un milieu dans un autre, les composantes tangentielles des vitesses



dans les deux milieux doivent être égales. Si une onde de vecteur  $\vec{k}$  tombe sur le cristal, les vecteurs  $k_o^1, k_o^2, k_o^3$  (en spécifiant maintenant que l'indice 0 se réfère à l'onde incidente) correspondant aux trois solutions de l'équation (10), doivent avoir même composante tangentielle que  $\vec{k}$ . Si donc, à partir du point 0 du réseau réciproque, on trace le vecteur  $-\vec{k}$  et que, par l'extrémité de ce vecteur, on fasse passer une normale à la surface du cristal, les vecteurs  $\vec{k}_o$  devront nécessairement avoir leur origine sur cette droite. Nous savons d'autre part qu'ils doivent avoir leur origine sur les surfaces de dispersion, par conséquent les origines seront déterminées par les intersections de la normale avec les surfaces de dispersion. L'onde incidente à l'intérieur du cristal se divisera donc en trois ondes  $\vec{k}_o^1, \vec{k}_o^2, \vec{k}_o^3$  de directions et de longueurs d'ondes différentes et chacune des ondes « réfléchies » sera de même constituée par trois ondes  $\vec{k}_p^1, \vec{k}_p^2, \vec{k}_p^3$  et  $\vec{k}_m^1, \vec{k}_m^2, \vec{k}_m^3$ .

En réalité, un des trois groupes  $\vec{k}_o^i, \vec{k}_p^i, \vec{k}_m^i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) forme une solution dynamiquement stable des équations de MAXWELL. La nécessité de l'existence des trois groupes simultanément provient des conditions aux limites qu'on ne peut satisfaire avec trois ondes seulement.

Comme la constante diélectrique du cristal est très peu différente de l'unité, on pourra confondre  $\vec{D}$  et  $\vec{E}$  et ne pas tenir compte, dans l'expression, des conditions aux limites du changement de direction des ondes à l'entrée ou à la sortie du cristal.

Les conditions aux limites s'écrivent alors à la surface d'entrée

$$\begin{aligned} D_o^1 + D_o^2 + D_o^3 &= D_o^e \\ D_m^1 + D_m^2 + D_m^3 &= 0 \\ D_p^1 + D_p^2 + D_p^3 &= 0 \end{aligned} \quad (11)$$

en se rappelant que les indices supérieurs se réfèrent aux trois racines de l'équation (10).  $D_o^e$  est l'amplitude de l'onde incidente à l'extérieur du cristal.

D'autre part, les équations (6) nous donnent, pour chaque valeur de  $w_o w_p$  et  $w_m$  les rendant compatibles, les valeurs de  $D_p/D_o$  et  $D_m/D_o$ . On obtient en effet:

$$\frac{D_p}{D_o} = \frac{w_m}{2 w_m w_p - w_p - w_m} = -\frac{w_o}{w_p} = \alpha \quad \frac{D_m}{D_o} = -\frac{w_o}{w_m} = \beta. \quad (12)$$

Les valeurs de  $w_o w_p$  et  $w_m$  pour chaque direction de l'onde incidente peuvent être mesurées sur les courbes de dispersion de la

figure (5). En effet, les points d'intersection de la normale à la face du cristal avec les courbes de dispersion se trouvent à une distance  $k\psi w_o^1, k\psi w_m^1, k\psi w_p^1$ , etc. des sphères de rayon  $k$  ayant pour centres les points  $MOP$ .

Les équations (11) deviennent:

$$\begin{aligned} D_o^1 + D_o^2 + D_o^3 &= D_o^e \\ \alpha_1 D_o^1 + \alpha_2 D_o^2 + \alpha_3 D_o^3 &= 0 \\ \beta_1 D_o^2 + \beta_2 D_o^2 + \beta_3 D_o^3 &= 0 \end{aligned}$$

d'où l'on tire directement:

$$\frac{D_o^1}{D_o^e} = \frac{\alpha_2 \beta_3 - \alpha_3 \beta_2}{\alpha_2 \beta_3 - \alpha_3 \beta_2 + \alpha_1 \beta_2 - \alpha_2 \beta_1 + \alpha_3 \beta_1 - \alpha_1 \beta_3} \quad (13)$$

et des expressions semblables pour  $D_o^2/D_o^e$  et  $D_o^3/D_o^e$ . Les relations (12) nous permettent aussi de calculer facilement les amplitudes relatives des ondes diffractées.

Les trois ondes dénotées par les indices supérieurs 1, 2, 3 ont des vitesses de propagation très semblables et elles se propagent dans des directions très peu différentes les unes des autres. A l'intérieur du cristal, elles donneront donc lieu à un phénomène de battement (quasi-périodique en général). A la face de sortie du cristal, l'amplitude de l'onde sortante sera donnée par la somme des trois amplitudes des ondes 1, 2, 3. On voit que, suivant l'épaisseur du cristal, cette amplitude sera variable. Cependant, comme, expérimentalement, les ondes incidentes ne sont jamais réellement planes, ce phénomène n'a pas été observé. Pour calculer l'intensité des ondes sortantes, nous prendrons donc la moyenne de l'intensité en fonction de l'épaisseur du cristal, ou, ce qui revient au même, nous ajouterons simplement les intensités (au lieu des amplitudes)

$$I_p = \left(\frac{D_p^1}{D_o^e}\right)^2 + \left(\frac{D_p^2}{D_o^e}\right)^2 + \left(\frac{D_p^3}{D_o^e}\right)^2 \quad (14)$$

Dans les figures 6, nous avons tracé l'intensité relative des ondes réfléchies sur le plan  $P$  en fonction de l'angle de réflexion, et cela pour différentes longueurs d'ondes (dénotées par  $\mu$ ). On remarquera tout d'abord que le maximum de l'intensité se déplace régulièrement avec la longueur d'onde. La réflexion simultanée sur  $M$  a pour effet principal de soustraire de l'énergie à la réflexion sur  $P$ , ce qu'on voit nettement pour  $\mu = -0,05$  et dans la figure du haut, dans laquelle on a tracé à la fois la courbe de réflexion en l'absence de réflexion sur  $M$  et la courbe avec réflexion sur  $M$  (pour  $\mu = 0$ ). On voit aussi qu'une sorte de maximum secondaire

se produit, qui ne se déplace pas lorsque la longueur d'onde change. Ce maximum provient de l'énergie « rendue » par le plan  $M$ . La réflexion sur le plan  $P$  est donc à la fois diminuée et étalée par la présence de la réflexion sur  $M$ . A mesure que la longueur d'onde envisagée s'éloigne de la longueur d'onde caractéristique pour la réflexion simultanée ( $\mu = 0$ ), on voit que la courbe de réflexion redevient semblable à ce qu'elle aurait été en l'absence de réflexion sur  $M$ .

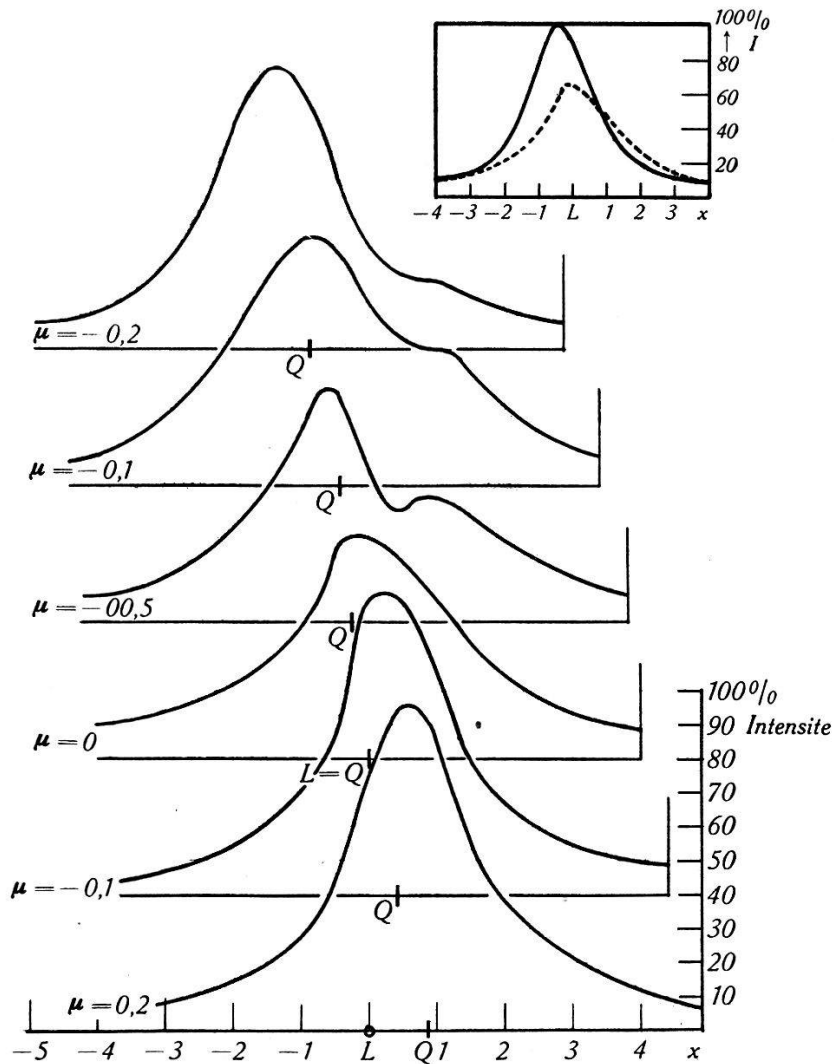


Fig. 6.

Répartition de l'intensité dans la direction de diffraction.

La ligne blanche est formée, dans le fond continu, par la superposition des distributions d'énergie ci-dessus. Cette distribution est donnée en fonction de l'angle de réflexion  $x$ . Nous l'avons tracée pour différentes fréquences, données par  $\mu$ , dans le cas des courbes de dispersion de la figure 5. La normale à la surface du cristal a été choisie de façon à former avec les rayons X incidents un angle de  $26^{\circ} 35'$  et avec les rayons X diffractés un angle de  $63^{\circ} 56'$ .

La figure du haut donne la répartition de l'intensité pour une réflexion simple des rayons X, comparée à celle pour  $\mu = 0$  (ligne pointillée).

### 5. *Largeur et intensité de la ligne blanche.*

Comme nous l'avons dit précédemment, les lignes blanches se forment dans le spectre continu. Pour avoir une mesure de leur largeur et de leur intensité, il faut comparer, pour les longueurs d'ondes considérées, l'énergie arrivant réellement en un point du fond continu avec celle qui serait arrivée si la réflexion simultanée n'avait pas eu lieu. Pour chaque longueur d'onde, nous pouvons tracer (grâce à des figures semblables à celles du haut de la fig. 6) la différence entre l'intensité en présence de la réflexion simultanée et en son absence. On trouve alors que, d'un côté l'énergie est fortement diminuée, elle a été enlevée par la réflexion sur l'autre plan, tandis que de l'autre elle est plus grande qu'elle ne l'aurait été par « simple » réflexion.

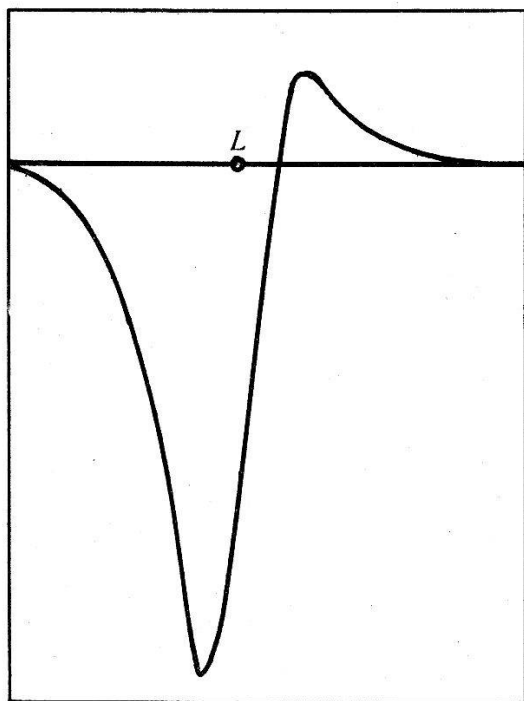


Fig. 7.

Forme de la ligne blanche  $L$  = position de la ligne blanche dans la théorie élémentaire.

Pour obtenir l'intensité de la ligne blanche dans le spectre continu, il faudrait prendre l'intégrale pour chaque angle de sortie de toutes les intensités des différentes longueurs d'onde arrivant suivant l'angle considéré. Le calcul graphique que nous avons employé ne nous a pas permis d'effectuer cette intégration. Par contre, la forme de la ligne blanche et sa largeur peuvent être obtenues en additionnant pour chaque angle de sortie les différences positives ou négatives entre les courbes d'intensité dues à une réflexion simple et celles dues à une réflexion simultanée.

Dans la fig. 7, on voit la forme de la ligne blanche obtenue par ce procédé. Cette ligne est asymétrique et son maximum d'intensité ne coïncide pas avec la longueur d'onde donnée par la théorie élémentaire. D'autre part, la ligne blanche est bordée d'une ligne noire adjacente, recevant donc plus d'énergie que le spectre continu avoisinant (plus d'énergie que s'il y avait eu réflexion simple et non simultanée). Nous avons pu vérifier théoriquement que la position et l'intensité de cette ligne noire dépendent des conditions géométriques de la réflexion. C'est bien là ce que nous avons observé expérimentalement d'une façon qualitative. Remarquons encore que la largeur de la ligne blanche est du même ordre de grandeur que la largeur de réflexion simple d'une seule longueur d'onde.

Des mesures expérimentales plus précises sont en cours pour vérifier quantitativement les résultats théoriques de cette étude.

Université de Genève, Laboratoire de Physique.

---