

Théorie dynamique de la diffraction des rayons X par les cristaux déformés

Daniel Taupin

Résumé

La théorie dynamique classique de la diffraction des rayons X est étendue au cas des cristaux ayant subi une déformation quelconque et des ondes non planes. La méthode consiste à résoudre les équations de Maxwell en considérant les déformations et la courbure des ondes comme des perturbations du premier ordre.

On obtient ainsi un système différentiel simple dont la résolution n'est en général possible que numériquement.

Une application particulière est faite au cas des cristaux courbés. On en déduit une méthode numérique simple de calcul du pouvoir réflecteur des cristaux courbés. Le résultat de mesures absolues est en bon accord avec la théorie.

On expose ensuite une méthode approximative de calcul de l'augmentation du pouvoir réflecteur due à la présence de dislocations. La comparaison avec les mesures est satisfaisante.

Enfin on donne quelques résultats de la résolution numérique directe du système fondamental dans le cas de dislocations isolées. Ceci permet de prévoir la structure des images de dislocations obtenues par transmission. Ici encore on note un accord satisfaisant avec les expériences faites par plusieurs autres auteurs.

Citer ce document / Cite this document :

Taupin Daniel. Théorie dynamique de la diffraction des rayons X par les cristaux déformés. In: Bulletin de la Société française de Minéralogie et de Cristallographie, volume 87, 4, 1964. pp. 469-511;

doi : <https://doi.org/10.3406/bulmi.1964.5769>

https://www.persee.fr/doc/bulmi_0037-9328_1964_num_87_4_5769

Fichier pdf généré le 01/02/2019

Théorie dynamique de la diffraction des rayons X par les cristaux déformés

PAR D. TAUPIN,

Laboratoire de Physique des Solides, Faculté des Sciences, Orsay, S.-et-O.

Résumé. — La théorie dynamique classique de la diffraction des rayons X est étendue au cas des cristaux ayant subi une déformation quelconque et des ondes non planes. La méthode consiste à résoudre les équations de Maxwell en considérant les déformations et la courbure des ondes comme des perturbations du premier ordre.

On obtient ainsi un système différentiel simple dont la résolution n'est en général possible que numériquement.

Une application particulière est faite au cas des cristaux courbés. On en déduit une méthode numérique simple de calcul du pouvoir réflecteur des cristaux courbés. Le résultat de mesures absolues est en bon accord avec la théorie.

On expose ensuite une méthode approximative de calcul de l'augmentation du pouvoir réflecteur due à la présence de dislocations. La comparaison avec les mesures est satisfaisante.

Enfin on donne quelques résultats de la résolution numérique directe du système fondamental dans le cas de dislocations isolées. Ceci permet de prévoir la structure des images de dislocations obtenues par transmission. Ici encore on note un accord satisfaisant avec les expériences faites par plusieurs autres auteurs.

INTRODUCTION

LES DIVERSES THÉORIES DYNAMIQUES

Au cours des dix dernières années, de nombreux auteurs ont publié dans la presse scientifique des « théories dynamiques » de la diffraction des rayons X ou des électrons par les cristaux imparfaits ou déformés. Afin de mieux mettre en évidence ce qu'apporte de nouveau la présente étude, il nous est paru utile de rappeler brièvement les principes et de classer les diverses théories dynamiques qui existent actuellement.

0-1. — LES THÉORIES DYNAMIQUES DES CRYSTaux PARFAITS ET DES ONDES PLANES

Jusqu'à maintenant, tous les auteurs se sont limités à des cristaux limités par deux faces parallèles et infinis dans les deux autres dimensions. Aussi, lorsque ce cristal est parfait et les ondes planes, le problème est-il unidimensionnel, c'est-à-dire que toutes les grandeurs ne dépendent que d'une coordonnée, l'épaisseur t , à l'exception

tion d'un facteur de phase qui s'élimine rapidement.

La plus ancienne théorie est celle de Darwin (1914), essentiellement phénoménologique ; elle revient à considérer le cristal comme un empilement de miroirs semi-réfléchissants et semi-absorbants. On compose alors en chaque point les ondes incidente et réfléchie en tenant compte des facteurs de réflexion et des différences de marche comme en optique classique. On en trouvera le développement dans James (1948). Appliquée initialement au cas de Bragg, elle a été étendue au cas de Laue par divers auteurs (Howie et Whelan, 1961).

La théorie de Laue (1931) est d'une formulation beaucoup plus compliquée puisqu'elle consiste à résoudre les équations de Maxwell dans un milieu de constante diélectrique triplement périodique. Elle conduit au résultat classique d'une infinité d'ondes dont, en général, une seule est notable : l'onde incidente légèrement réfractée. Lorsqu'on se trouve au voisinage d'une « réflexion », deux (et même plus dans certains cas particuliers) ondes sont non négligeables : l'onde

incidente et l'onde réfléchie correspondant à la réflexion considérée.

Dans ce dernier cas («cas des deux ondes») la théorie de Laue donne les mêmes résultats que celle de Darwin, à condition de prendre des valeurs convenables pour les facteurs de réflexion des plans réticulaires.

On trouve alors que, dans le cas d'un cristal en forme de plaquette (d'épaisseur éventuellement infinie), les amplitudes des deux ondes satisfont à un système différentiel du type :

$$\begin{aligned} dD_o/dt &= r_o D_o + r_H D_H & (0.1.1 \text{ a}) \\ dD_H/dt &= r_H D_o + (r_o + \alpha) D_H & (0.1.1 \text{ b}) \end{aligned}$$

r_o et r_H étant des facteurs de transmission et de réflexion, α étant l'écart à la condition de Bragg (comparer avec notre système (II.6.3), ou encore avec le système 4 de Howie et Whelan (1961)

La résolution de ce système, qui est du second ordre, conduit à une solution générale qui, pour chacune des deux ondes, est la somme de deux «champs d'onde», c'est-à-dire la somme de deux vibrations se propageant avec des vitesses de phase et des coefficients d'absorption différents, c'est-à-dire des indices de réfraction complexes différents. La répartition de ces deux champs est évidemment fixée par les conditions à la surface du cristal.

Si le cristal est infini, rien ne dépend plus de t et on trouve que les deux champs d'onde peuvent se propager indépendamment.

Plusieurs auteurs, dont Zachariasen (1945), ne passent pas par cette étape et déterminent directement la surface de dispersion, c'est-à-dire qu'ils recherchent directement dans quelles conditions une onde *exponentielle complexe* peut se propager dans un cristal infini ; ils trouvent plusieurs possibilités qu'ils combinent pour satisfaire les conditions aux limites. Cette méthode de résolution est beaucoup plus ancienne et plus élégante et la distinction peut paraître assez subtile entre les deux, dans le cas des cristaux parfaits ; elle est par contre extrêmement importante dans les cristaux perturbés, car une onde *exponentielle complexe* ne peut se propager dans un tel cristal, alors qu'il sera toujours possible d'y étendre un système différentiel du type (0.1.1).

0-2. — L'EXTENSION DES PROPRIÉTÉS DU CRISTAL PARFAIT AUX CRISTAUX DÉFORMÉS.

Les remarques précédentes nous permettent de prévoir que les diverses théories dynamiques se différencieront par la manière dont elles extra-

polent aux cristaux perturbés les résultats obtenus pour les cristaux parfaits.

Certaines théories (Penning et Polder, 1961 ; Kato, 1963 b, 1964) conservent dans le cristal déformé la notion de champ d'onde. Elles supposent en effet que les déformations varient suffisamment lentement pour que les champs d'onde restent en chaque point en état d'équilibre ; ceci revient à négliger à l'interaction qui se produit, lorsque la désorientation varie, entre les champs d'onde de manière analogue à ce qui se passe sur une surface de séparation. Polder ne considère qu'un seul champ d'onde (le moins absorbé) et ne peut donc pas rendre compte des phénomènes de Pendellösung. Par contre, Kato considère les deux champs d'onde ; de ce fait, sa théorie permet de calculer les perturbations apportées aux phénomènes de Pendellösung par la déformation du réseau, mais elle ne rend pas compte de l'existence de franges dues à l'« activation » du deuxième champ d'onde au voisinage des défauts.

D'autres théories (Cowley et Moodie, 1957, 1958, 1959 ; Kato, 1963 a ; Howie et Whelan, 1961) découpent le cristal déformé en tranches assez minces pour que les variations de désorientation y soient négligeables, d'où le nom de « théories lamellaires » qui les désigne habituellement. Elles appliquent dans chaque «lamelle» les résultats du cristal parfait en raccordant les amplitudes totales (et non plus les champs d'onde) à chaque surface de séparation. A condition que les lamelles soient prises assez minces, ces théories rendent compte, non seulement des franges de Pendellösung existant déjà dans le cristal parfait, mais aussi de celles qui sont dues à la présence d'une zone très perturbée, mais elles ne sont applicables en toute rigueur qu'à des déformations unidimensionnelles, c'est-à-dire d'un type très particulier.

Nous y rattacherons notre première théorie dynamique (1960), basée sur les mêmes hypothèses que la théorie de Darwin pour les cristaux parfaits, en supposant simplement que les relations de phase entre les ondes varient avec le plan réticulaire considéré. Bien que n'utilisant que la notion de plan réticulaire (c'est-à-dire qu'elle réduit l'épaisseur d'une lamelle à un intervalle réticulaire), elle aboutit aux mêmes résultats que les autres théories «lamellaires» (en particulier Howie et Whelan, 1961, 1962).

Contrairement à toutes ces théories, celle de Takagi (1962) ainsi que la présente ne font pas appel aux résultats obtenus pour les cristaux parfaits ; elles consistent à résoudre directement

par une méthode de perturbation au premier ordre les équations de Maxwell ou l'équation de Schrödinger dans un cristal déformé.

0-3. — LES GENRES DE DÉFORMATIONS ADMIS DANS LES DIVERSES THÉORIES DYNAMIQUES.

Comme nous l'avons remarqué plus haut, les théories « lamellaires » ne sont valables que pour des déformations ne dépendant que d'une coordonnée d'espace, à savoir l'épaisseur t . Néanmoins de nombreux auteurs ont tourné cette difficulté en faisant l'approximation de « colonne », c'est-à-dire en découpant le cristal en colonnes dans lesquelles les variations latérales des déformations sont négligeables et en y appliquant la théorie « lamellaire ». Ceci ne présente pas de grand inconvénient dans le cas de la diffraction des électrons où les angles de Bragg sont très petits ; il n'en est pas de même dans le cas des rayons X où, du fait des grands angles de Bragg, un faisceau étroit s'étale considérablement en traversant le cristal.

Aussi Kato (1963 b, 1964) a-t-il proposé de découper les colonnes non pas perpendiculairement aux faces du cristal ni parallèlement à la direction incidente, mais en suivant le trajet de l'énergie. On retrouve ainsi l'idée de Polder qui consiste à suivre un « rayon » au travers du cristal.

Nous avons, d'autre part, développé à l'occasion de notre précédente théorie dynamique un autre moyen d'étendre la validité des théories « lamellaires ». Nous avons en effet montré qu'en décomposant l'onde incidente en ondes de forme appropriée, on pouvait étendre les théories « lamellaires » à des déformations plus générales, telles que la courbure uniforme.

Dans la théorie de Takagi et dans la présente étude, il n'est fait aucune hypothèse sur le genre des déformations mais seulement sur leur ordre de grandeur : la variation relative de la déformation est supposée petite devant l'unité lorsqu'on se déplace d'un intervalle réticulaire (ce qui exclut en principe le centre d'une dislocation où cette variation atteint 100 %).

0-4. — LA PRÉSENTE THÉORIE.

Comme nous l'avons déjà signalé plus haut, c'est en réalité la solution générale des équations de Maxwell ou de l'équation de Schrödinger par une méthode de perturbation au premier ordre. Bien que développée indépendamment, elle est

très proche de celle de Takagi (1962) à ceci près que nous considérons des ondes de forme quelconque alors qu'il ne considère explicitement que des ondes planes. Il ne s'agit que d'une question de commodité de notations, car un choix convenable des conditions à l'entrée du cristal permet d'appliquer aux ondes non planes les équations des ondes planes.

Nous retrouvons comme cas particulier, au chapitre II, les théories « lamellaires » et en particulier notre précédente théorie qui se trouve ainsi justifiée par des calculs plus rigoureux.

On trouvera enfin, dans les deux derniers chapitres, des applications au calcul du pouvoir réflecteur des cristaux contenant des dislocations et au calcul des images de dislocations.

CHAPITRE I

THÉORIE GÉNÉRALE

I-1. — GÉNÉRALITÉS.

La présente théorie dynamique est une théorie générale quant au genre de déformation du milieu cristallin et quant à la forme des ondes électromagnétiques qu'elle considère. Cependant notre méthode de calcul est une « méthode de perturbation » en ce sens qu'elle considère les ondes comme différentant peu d'un système d'ondes planes et le cristal comme différentant peu du cristal parfait.

En pratique, cela veut dire que nous supposons que les courbures des surfaces d'ondes et du milieu cristallin sont beaucoup plus petites que $1/\lambda$.

Plus précisément, si \vec{W} est le vecteur déplacement (élastique), nous supposerons :

$$|\vec{W}| \text{ quelconque par rapport à } \lambda \text{ ou } d_{hkl} \\ \left| \frac{\partial W}{\partial x_i} \cdot \lambda \right| \ll \lambda \quad (\text{I.1.1})$$

ce qui revient à dire que les déformations sont beaucoup plus petites que 1 (cf. élasticité classique) :

$$\left| \frac{\partial^2 W}{\partial x_i \partial x_j} \lambda^2 \right| \ll \left| \frac{\partial W}{\partial x_i} \lambda \right| \quad (\text{I.1.2})$$

ce qui revient à dire que les variations des déformations, d'un plan réticulaire ou d'un atome à un autre, sont petites par rapport aux déforma-

tions elles-mêmes. Ceci exclut de notre théorie les déformations aléatoires où :

$$e_{xx}(\vec{x}_0) - e_{xx}(\vec{x}_0 + \vec{a}) \sim e_{xx}(\vec{x}_0) \quad (I.1.3)$$

(\vec{a} étant le vecteur qui joint deux atomes voisins).

Ces conditions sont en général satisfaites dans les cristaux peu déformés, c'est-à-dire, en gros, dans les limites de la théorie de l'élasticité.

I-2. — CHOIX DE L'EXPRESSION MATHÉMATIQUE DE L'ONDE INCIDENTE.

a) Dans le vide.

Soit D le déplacement électrique ; nous le choisissons sous la forme :

$$\vec{D} = \vec{D}_0 \exp i(\omega_0 t - 2\pi \Phi_0 \vec{r}), \quad (I.2.1)$$

\vec{r} définissant un point courant de l'espace réel, ω_0 la pulsation ; nous supposerons \vec{D}_0 et Φ_0 réels mais variables, ce qui permet de représenter n'importe quelle onde a priori, les variations de phase étant contenues dans Φ_0 . En particulier, si les ondes sont planes et le cristal parfait :

$$\Phi_0 = \vec{\beta}_0 \cdot \vec{r}.$$

\vec{D} doit vérifier les équations de Maxwell, soit encore :

$$\Delta \vec{D} + \frac{\omega_0^2}{c^2} \vec{D} = 0 \quad (I.2.2)$$

Soit :

$$\Delta \vec{D}_0 - i 4\pi \text{grad} \Phi_0 \frac{\partial \vec{D}_0}{\partial \vec{r}} - i 2\pi \vec{D}_0 \Delta \Phi_0 + (4\pi^2/\lambda^2) \vec{D}_0 - 4\pi^2 (\text{grad} \Phi_0)^2 \vec{D}_0 = 0. \quad (I.2.3)$$

Le second terme représente de manière abrégée l'expression tensorielle suivante :

$$i 4\pi \sum_i \frac{\partial \Phi_0}{\partial x_i} \frac{\partial D_0}{\partial x_i}.$$

Étant donné que nous avons supposé \vec{D}_0 réel, ainsi que Φ_0 , nous pouvons facilement séparer parties réelles et imaginaires de l'équation ci-dessus.

Nous supposerons cette onde incidente presque ou rigoureusement plane, c'est-à-dire que son

rayon de courbure est beaucoup plus grand que λ , sa longueur d'onde dans le vide.

Il est alors facile de voir, par exemple dans le cas d'une onde sphérique de rayon R , que si D_0 est la forme K/R , son gradient sera de l'ordre de K/R^2 , soit encore D_0/R , alors que l'équation (I.2.3) contient des termes de l'ordre de D_0/λ .

De même, il apparaît que $\Delta \vec{D}_0$, obtenu après une autre dérivation, sera de l'ordre de D_0/R^2 .

Comme nous limitons notre méthode de perturbations au 1^{er} ordre, nous pourrons négliger $A \vec{D}_0$ et écrire (même pour une onde non plane) :

$$|\text{grad} \Phi_0| = |\beta_0| = 1/\lambda + \text{termes du 2^e ordre.} \quad (I.2.4)$$

En considérant les parties imaginaires, il vient :

$$2 \text{grad} \Phi_0 \cdot \frac{\partial \vec{D}_0}{\partial \vec{r}} + \vec{D}_0 \Delta \Phi_0 = 0. \quad (I.2.5)$$

Ce qui montre que $\Delta \Phi_0$ est de l'ordre de $\frac{1}{\lambda R}$, ce qui était évident a priori.

b) Dans le milieu cristallin.

Contrairement à Zachariasen (1), nous donnerons à l'onde la même expression à l'intérieur du cristal, en y conservant la *même fonction* Φ_0 pour la phase, mais en faisant porter dans \vec{D}_0 la différence entre ce qui se passe dans la matière et ce qui se passerait si le cristal n'existe pas.

Ceci signifie que nous ne séparerons pas l'onde incidente totale en deux champs d'ondes (sépa-

ration évidente dans un cristal parfait, mais beaucoup moins s'il est perturbé), mais que nous considérerons une onde incidente totale d'amplitude variable \vec{D}_0 *complexe*.

En particulier, dans le cas du cristal parfait, nous aurons une seule onde pseudo-périodique, et non pas deux ondes dont les interférences donneront les « Pendellösungen ».

(1) Pour ce qui concerne le cristal parfait, nous nous référerons désormais à la théorie dynamique telle qu'elle est exposée dans le livre de Zachariasen (1945).

c) Relations à la surface de séparation.

Si nous rappelons que la constante diélectrique du cristal diffère seulement de 10^{-4} de celle du vide, différence que nous négligerons comme l'avait fait Zachariasen, nous aboutissons au fait que \vec{D}_o est continu à la surface de séparation.

I-3. — L'EXPRESSION DE L'ONDE RÉFLÉCHIE.

a) Dans le vide.

Si nous remarquons qu'une onde qui a quitté le cristal n'interfère plus avec les autres, nous voyons que sa forme a peu d'importance. En théorie, on peut évidemment la déterminer, connaissant sa valeur à chaque point de la surface de sortie.

Pour la présente étude, nous nous contenterons de déterminer sa valeur dans le cristal et à la surface de sortie.

b) Dans le cristal.

Dans le cas d'un cristal parfait et d'ondes planes nous aurions utilisé la forme classique (fonction de Bloch) :

$$\vec{D} = \sum_H \vec{D}_H \exp i(\omega_o t - 2\pi \vec{\beta}_H \cdot \vec{r})$$

avec $\vec{\beta}_H = \vec{\beta}_o + \vec{B}_H$

\vec{B}_H étant un vecteur du réseau réciproque,

$$\vec{\beta}_o = \text{grad } \Phi_o$$

(étant donné que pour un cristal parfait et des ondes planes $\Phi_o \equiv \vec{\beta}_o \cdot \vec{r}$).

Lorsque nous avons des ondes non planes et un cristal déformé, ceci n'est plus possible, car $\vec{\beta}_o$ et \vec{B}_H ne sont plus des constantes.

Pour tourner cette difficulté, nous numérotions les surfaces réticulaires du système H avec un indice n_H , croissant dans la direction \vec{B}_H telle qu'on pouvait la définir avant déformation. Nous pouvons encore définir en chaque endroit un vecteur \vec{B}_H normal aux surfaces réticulaires et tel que (fig. 1) :

$$|\vec{B}_H| = 1/d_H(\vec{r}). \quad (I.3.1)$$

On a alors, lorsqu'on passe d'une surface n_H à la suivante $n_H + 1$:

$$\Delta n = 1 = \vec{B}_H \cdot \vec{d}M. \quad (I.3.2)$$

Ceci nous amène naturellement à poser :

$$\vec{B}_H = \text{grad } n_H. \quad (I.3.3)$$

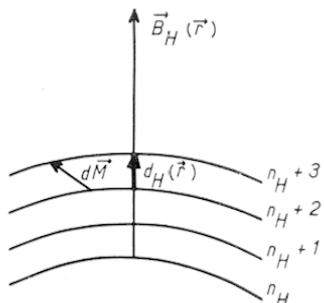


FIG. 1. — Définition de $\vec{B}_H(\vec{r})$.

En fait le gradient est un opérateur qui ne s'applique qu'à une fonction continue, mais il n'est guère difficile d'en imaginer une qui prenne des valeurs entières sur chaque plan réticulaire. Évidemment il y a une difficulté dans le cas d'une dislocation car n_H n'est plus continue ; nous la laisserons provisoirement de côté.

Nous sommes alors conduits à écrire :

$$\vec{D} = \vec{D}_H \exp i(\omega_o t - 2\pi(\Phi_o + n_H)) \\ = D_H \exp i(\omega_o t - 2\pi \Phi_H), \quad (I.3.4)$$

ce qui définit la fonction :

$$\Phi_H(\vec{r}) = \Phi_o(\vec{r}) + n_H(\vec{r}). \quad (I.3.5)$$

I-4. — EXPRESSION DE LA CONSTANTE DIÉLECTRIQUE DU CRISTAL.

Un cristal déformé n'est plus périodique par rapport à \vec{r} , mais nous pouvons considérer approximativement qu'il l'est encore par rapport à n_H , dans chaque système de plans réticulaires. Nous poserons donc :

$$\epsilon = \epsilon_o(1 + \Psi)$$

où $\Psi = \sum_H \Psi_H \exp(-i2\pi n_H)$. $(I.4.1)$

Nous conserverons pour Ψ_o et les Ψ_H les formules classiques :

$$\Psi_o = -\frac{\lambda^2 R_e}{\pi V} F(0) \quad (I.4.2)$$

$$\Psi_H = -\frac{\lambda^2 R_e}{\pi V} F(H) \quad (I.4.3)$$

$F(0)$ est le facteur de structure dans la direction incidente :

$$\begin{aligned} F(0) &= Z \text{ (nombre d'électrons par maille)} \\ &+ \text{termes (complexes) dus à la dispersion anomale (absorption en particulier)} \end{aligned} \quad (I.4.4)$$

$F(H)$ est le facteur de structure dans la direction réfléchie :

$$\begin{aligned} F(H) &= \text{facteur de structure classique} \\ &+ \text{termes (complexes) dus à la dispersion anomale} \end{aligned} \quad (I.4.5)$$

V : volume de la maille

R_e : rayon classique de l'électron ($2,82 \cdot 10^{-13}$ cm)

λ : longueur d'onde dans le vide.

Remarquons que les Ψ_o, Ψ_H sont complexes, sauf pour un cristal sans absorption.

I-5. — ÉQUATIONS FONDAMENTALES.

Comme il est d'usage pour les théories dynamiques, nous partirons des équations de Maxwell, en ignorant les parties statiques de sorte que :

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \vec{D} &= 0 & \operatorname{div} \vec{B} &= 0 & \vec{B} &= \mu_o \vec{H} \\ \operatorname{rot} \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} & \operatorname{rot} \vec{H} &= \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} & \vec{D} &= \epsilon_o (1 + \Psi) \vec{E} \end{aligned} \quad (I.5.1)$$

ce qui donne (compte tenu du fait que $\Psi \ll 1$) :

$$\operatorname{rot} \operatorname{rot} (1 - \Psi) \vec{D} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \vec{D}^2}{\partial t^2} = \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \vec{D}. \quad (I.5.2)$$

a) Calcul de $(1 - \Psi) \vec{D}$.

\vec{D} est la somme des champs de l'onde incidente et des ondes réfléchies. Pour donner à \vec{D} une forme unique nous écrirons :

$$\vec{D} = \sum_H \vec{D}_H \exp(i\omega_o t - i2\pi\Phi_H), \quad (I.5.3)$$

H prenant entre autres la valeur 0, pour l'onde incidente, avec la convention :

$$n_o \equiv 0. \quad (I.5.4)$$

Compte tenu de (I.4.1), on en déduit :

$$(1 - \Psi) \vec{D} = \exp i\omega_o t \left\{ \sum_H \vec{D}_H \exp(-i2\pi\Phi_H) \right\} \quad (I.5.5)$$

$$= \sum_K \sum_L \Psi_K \vec{D}_L \exp(-i2\pi(n_K + \Phi_L)). \quad (I.5.5)$$

Dans le cas du cristal parfait nous avons :

$$\vec{B}_H + \vec{B}_K = \vec{B}_{H+K}.$$

Nous aurons maintenant l'extension de cette relation :

$$n_K + n_L = n_{K+L}. \quad (I.5.6)$$

ce qui donne finalement :

$$(1 - \Psi) \vec{D} = \exp i\omega_o t \sum_H (\vec{Q}_H) \exp(-i2\pi\Phi_H) \quad (I.5.7)$$

en posant :

$$\vec{Q}_H = \vec{D}_H - \sum_L \Psi_{H-L} \vec{D}_L. \quad (I.5.8)$$

b) Calcul de $\operatorname{rot} \operatorname{rot} (1 - \Psi) \vec{D}$.

Nous utiliserons la formule classique :

$$\operatorname{rot} \operatorname{rot} = -\vec{\Delta} + \operatorname{grad} \operatorname{div} \quad (I.5.9)$$

ce qui peut s'écrire :

$$\operatorname{rot} \operatorname{rot} \vec{E}_i = \frac{\partial^2 \vec{E}_i}{\partial x_k \partial x_k} + \frac{\partial^2 \vec{E}_k}{\partial x_i \partial x_k} \quad (I.5.10)$$

avec :

$$\epsilon_o \vec{E} = (1 - \Psi) \vec{D}. \quad (I.5.11)$$

En omettant dorénavant le terme $\exp(i\omega_o t)$ et en rappelant que nous avons posé :

$$\begin{aligned} \beta_o &= \operatorname{grad} \Phi_o; & B_H &= \operatorname{grad} n_H; \\ \beta_H &= \operatorname{grad} \Phi_H = \beta_o + B_H, \end{aligned} \quad (I.5.12)$$

nous obtenons, pour le terme H :

$$\begin{aligned} \epsilon_o \frac{\partial \vec{E}_H}{\partial x_k} &= \exp(-i2\pi\Phi_H) \frac{\partial \vec{Q}_H}{\partial x_k} \\ &- i2\pi \vec{Q}_H \beta_{Hk} \exp(-i2\pi\Phi_H). \end{aligned} \quad (I.5.13)$$

En dérivant cette expression et en remarquant que (1) :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \beta_{Hk} = \frac{\partial^2 \Phi_H}{\partial x_i \partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \beta_{Hi} \quad (I.5.14)$$

(1) On trouvera les détails du calcul dans la version intégrale de cette thèse (Taupin, 1964.).

nous obtenons finalement :

$$\begin{aligned} \text{rot rot } (1 - \Psi) \vec{D} = & \\ \sum_H \exp(-i 2 \pi \Phi_H) \{ & 4 \pi^2 (\beta_H^2 \vec{Q}_H - (\vec{\beta}_H \cdot \vec{Q}_H) \vec{\beta}_H) \\ + i 4 \pi \vec{\beta}_H \frac{\partial \vec{Q}_H}{\partial \vec{r}} - i 2 \pi \text{grad}(\vec{Q}_H \cdot \vec{\beta}_H) \\ - i 2 \pi \vec{\beta}_H \text{div} \vec{Q}_H + i 2 \pi \vec{Q}_H \Delta \Phi_H - \Delta \vec{Q}_H \\ + \text{grad div. } \vec{Q}_H \} & . \quad (I.5.15) \end{aligned}$$

c) **Détermination des équations fondamentales.**

De (I.5.2) et (I.5.15), on tire :

$$\begin{aligned} \frac{4 \pi^2}{\lambda^2} \sum_H \vec{D}_H \exp(-i 2 \pi \Phi_H) = & \\ \sum_H \{ \dots \} \exp(-i 2 \pi \Phi_H) & . \quad (I.5.16) \end{aligned}$$

Nous avons ici une équation à une infinité d'inconnues, les \vec{D}_H . Nous lèverons cette indétermination de manière mathématiquement artificielle, mais physiquement évidente, en séparant les termes relatifs aux diverses ondes réfléchies, c'est-à-dire en identifiant les coefficients des exponentielles.

D'autre part, nous sommes surtout intéressés par la valeur algébrique de \vec{D}_H , plus que par son orientation précise ; aussi ferons-nous le produit scalaire de chacun des membres de (I.5.16) par \vec{Q}_H .

$$\begin{aligned} 0 = 4 \pi^2 \{ & \beta_H^2 Q_H^2 - \beta_o^2 (\vec{D}_H \cdot \vec{Q}_H) - (\vec{Q}_H \cdot \vec{\beta}_H)^2 \} \\ + i 2 \pi \vec{\beta}_H \cdot \text{grad} \vec{Q}_H^2 + i 2 \pi \{ & Q_H^2 \Delta \Phi_H \\ - \vec{Q}_H \cdot \text{grad} (\vec{\beta}_H \cdot \vec{Q}_H) - (\vec{\beta}_H \cdot \vec{Q}_H) \text{div} \vec{Q}_H \\ + \vec{Q}_H \cdot \text{grad div} \vec{Q}_H - \vec{Q}_H \cdot \Delta \vec{Q}_H \} & . \quad (I.5.17) \end{aligned}$$

Posons maintenant :

$$\alpha_H = \lambda^2 (B_H^2 + 2 \vec{\beta}_o \cdot \vec{B}_H) . \quad (I.5.18)$$

D'après la définition de \vec{B}_H (I.3.1), il vient alors :

$$\alpha_H = \lambda^2 \left\{ \frac{1}{d_H^2(\vec{r})} - \frac{2 \sin \theta}{\lambda d_H(\vec{r})} \right\} . \quad (I.5.19)$$

Définissons en chaque endroit un angle de Bragg théorique $\theta_b(\vec{r})$ (différent de l'angle effectif θ) tel que :

$$\lambda = 2 d_H(\vec{r}) \sin \theta_b(\vec{r}) . \quad (I.5.20)$$

La signification géométrique de α_H est alors simple, on trouve en effet :

$$\alpha_H = 2 \sin 2 \theta_b (\theta_b - \theta) . \quad (I.5.21)$$

α_H est donc une quantité, petite devant l'unité, mesurant en chaque endroit du cristal l'écart à la condition de Bragg. α_H n'est constant que dans un cristal non déformé recevant des ondes planes. En exprimant $\vec{\beta}_H$ en fonction de α_H dans (I.5.17) il vient :

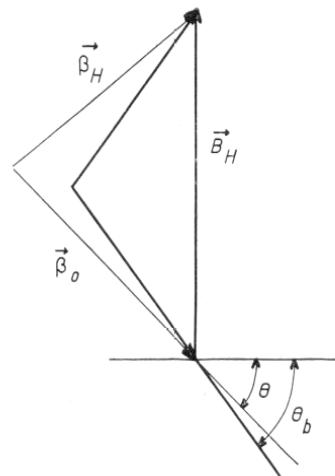


FIG. 2. — Définition de θ_b .

$$\begin{aligned} 0 = 4 \pi^2 \beta_o^2 \alpha_H Q_H^2 - \beta_o^2 \sum_L \Psi_{H-L} \vec{D}_L \cdot \vec{Q}_H \\ - (\vec{Q}_H \cdot \vec{\beta}_H)^2 + i 2 \pi \{ & Q_H^2 \Delta \Phi_H - \vec{Q}_H \cdot \text{grad} (\vec{\beta}_H \cdot \vec{Q}_H) \\ - (\vec{\beta}_H \cdot \vec{Q}_H) \text{div} \vec{Q}_H + \vec{Q}_H \cdot \text{grad div} \vec{Q}_H - \vec{Q}_H \cdot \Delta \vec{Q}_H \} & . \quad (I.5.22) \end{aligned}$$

Nous avons maintenant un système d'équations (pour chaque valeur de l'indice triple H) dont les termes sont petits devant Q_H^2/λ^2 . Nous n'en conserverons que les parties principales (1^{er} ordre).

A cet effet, nous allons étudier l'ordre de grandeur des divers termes de (I.5.22) (nous désignerons par η une quantité $\ll 1$).

1) terme $\beta_o^2 \alpha_H Q_H^2$:

Nous avons $\alpha_H \ll 1$, donc $\beta_o^2 \alpha_H Q_H^2 \sim \frac{Q^2}{\lambda^2} \cdot \eta$

2) terme $\beta_o^2 \Psi_{H-L} \vec{D}_L \cdot \vec{Q}_H$:

$\Psi_{H-L} \ll 1$ donc $\beta_o^2 \Psi_{H-L} \vec{D}_L \cdot \vec{Q}_H \sim \frac{Q^2}{\lambda^2} \cdot \eta$

3) terme $(\vec{Q}_H \cdot \vec{\beta}_H)^2$:

Les ondes étant, au moins approximativement, transversales :

$$\vec{Q}_H \cdot \vec{\beta}_H \sim \frac{Q_H}{\lambda} \eta; (\vec{Q}_H \cdot \vec{\beta}_H)^2 \sim \frac{Q^2}{\lambda^2} \cdot \eta^2$$

4) terme $\vec{\beta}_H \cdot \vec{\text{grad}} \vec{Q}_H^2$:

Q_H^2 varie peu sur une distance de l'ordre de λ , donc :

$$\vec{\beta}_H \cdot \vec{\text{grad}} \vec{Q}_H^2 \sim \frac{Q^2}{\lambda^2} \cdot \eta$$

5) terme $Q_H^2 \Delta \Phi_H$:

Nous avons vu que $\Delta \Phi_o$ (donc aussi $\Delta \Phi_H$) est de l'ordre de $\frac{1}{\lambda R} \sim \frac{\eta}{\lambda^2}$, donc :

$$Q_H^2 \Delta \Phi_H \sim \frac{Q^2}{\lambda^2} \cdot \eta$$

6) terme $\vec{Q}_H \cdot \vec{\text{grad}} (\vec{\beta}_H \cdot \vec{Q}_H)$:

$\vec{\beta}_H \cdot \vec{Q}_H \sim \frac{Q}{\lambda} \cdot \eta$. De plus, ces quantités varient lentement, donc :

$$\vec{Q}_H \cdot \vec{\text{grad}} (\vec{\beta}_H \cdot \vec{Q}_H) \sim \frac{Q^2}{\lambda^2} \eta^2$$

7) terme $(\vec{\beta}_H \cdot \vec{Q}_H) \text{div} \vec{Q}_H$:

$\vec{\beta}_H \cdot \vec{Q}_H \sim \frac{Q}{\lambda} \eta$. D'autre part, Q_H variant peu sur une distance de l'ordre de λ , $\text{div} \vec{Q}_H \ll \frac{Q}{\lambda}$. Donc :

$$(\vec{\beta}_H \cdot \vec{Q}_H) \text{div} \vec{Q}_H \sim \frac{Q^2}{\lambda^2} \eta^2$$

8) terme $\vec{Q}_H \cdot \vec{\text{grad}} \text{div} \vec{Q}_H$:

$\text{div} \vec{Q}_H \sim \frac{Q}{\lambda} \eta$ et, de plus, varie peu sur une distance de l'ordre de λ , donc :

$$\vec{Q}_H \cdot \vec{\text{grad}} \text{div} \vec{Q}_H \sim \frac{Q^2}{\lambda^2} \eta^2$$

9) terme $\vec{Q}_H \cdot \Delta \vec{Q}_H$:

$$\Delta \vec{Q}_H \sim \vec{\text{grad}} \text{div} \vec{Q}_H, \text{ donc } \vec{Q}_H \cdot \Delta \vec{Q}_H \sim \frac{Q^2}{\lambda^2} \eta^2.$$

Puisque nous ne conservons que les parties principales, nos équations se ramènent aux termes 1, 2, 4, 5.

Nous poserons :

$$\vec{D}_L \cdot \vec{D}_H = D_L D_H \cos X_{HL}. \quad (I.5.23)$$

Alors, en divisant toute l'équation relative à H par D_H (D_H étant la mesure algébrique de \vec{D}_H), nous obtenons :

$$0 = \alpha_H D_H - \sum_L \Psi_{H-L} D_L \cos X_{HL} + \frac{i \lambda^2}{2 \pi} (2 \vec{\beta}_H \cdot \vec{\text{grad}} D_H + D_H \Delta \Phi_H). \quad (I.5.24)$$

Étant donné que dans ce système toutes les quantités sont du même ordre, nous pouvons nous permettre désormais diverses approximations simplificatrices. En particulier, nous pouvons remplacer β_H , β_o par leur valeur moyenne constante. Les seules variables qui subsistent sont :

1) α_H , c'est-à-dire l'écart local à la condition de Bragg (calculé compte tenu de l'état de déformation local) ;

2) $\Delta \Phi_H = \Delta \Phi_o + \Delta n_H$

3) $D_{H,L}$ etc.

I-6. — ÉQUATIONS FONDAMENTALES DANS LE CAS DE DEUX ONDES.

Nous supposerons désormais, pour plus de simplicité, que seules deux ondes (o et H) ont une importance notable et, d'autre part, que le cristal a un centre de symétrie, c'est-à-dire que :

$$\Psi_H = \Psi_{\bar{H}}. \quad (I.6.1)$$

D'autre part, nous pouvons remarquer dans (I.5.24) que Ψ_H est toujours associé à $\cos X_{HO}$, qui est le facteur de polarisation. Afin de nous débarrasser de ce cosinus, nous introduisons les deux directions principales de polarisation :

— \vec{D} dans le plan d'incidence ($\cos X_{HO} = \cos 2\theta$)

— \vec{D} perpendiculaire au plan d'incidence ($\cos X_{HO} = 1$).

Nous étudierons séparément ces deux cas et nous conviendrons désormais d'inclure le $\cos X_{HO}$ éventuel dans Ψ_H .

Pour une même réflexion, nous aurons donc deux valeurs possibles de Ψ_H , à savoir Ψ_{H1} et Ψ_{H2} avec la relation :

$$\Psi_{H1} = \Psi_{H2} \cos 2\theta. \quad (I.6.2)$$

Soient \vec{s}_o et \vec{s}_H des vecteurs unitaires, dans les directions o (incidente) et H (réfléchie) respectivement. Nous aurons donc :

$$\vec{s}_o = \lambda \vec{\beta}_o; \quad \vec{s}_H = \lambda \vec{\beta}_H. \quad (I.6.3)$$

Nous poserons donc :

$$\vec{r} = x_o \vec{s}_o + x_H \vec{s}_H$$

(pour un point quelconque du plan d'incidence).

Nous pouvons alors écrire notre système fondamental, dans le cas de deux ondes (cas général, à l'exception des réflexions multiples ou interdites) :

l'origine O ne subit ni déformation ni déplacement, alors :

$$\vec{B}_H(O) = \vec{B}_H^*. \quad (I.7.1a)$$

D'autre part :

$$\vec{r} = \vec{r}^* + \vec{W}. \quad (I.7.1b)$$

D'où :

$$\vec{n}_H = \vec{B}_H(O) \cdot (\vec{r} - \vec{W}). \quad (I.7.2)$$

Il vient alors :

$$\vec{B}_H = \vec{\text{grad}} \vec{n}_H = \vec{B}_H(O) - \vec{\text{grad}} \{ \vec{B}_H(O) \cdot \vec{W} \}. \quad (I.7.3)$$

De même que nous avons introduit \vec{W} , vecteur

$$i \frac{\lambda}{\pi} \frac{\partial D_H}{\partial x_H} = \Psi_o D_H + \Psi_H D_o - \alpha_H D_H - \frac{2 \lambda^2}{2 \pi} D_H (\Delta \Phi_H) \quad (I.6.4)$$

$$i \frac{\lambda}{\pi} \frac{\partial D_o}{\partial x_o} = \Psi_o D_o + \Psi_H D_H - \frac{i \lambda^2}{2 \pi} D_o (\Delta \Phi_o) \quad (I.6.5)$$

Remarquons que ce système d'équations différentielles partielles est très analogue à celui de Takagi (1962) à part le terme en $\Delta \Phi$, très souvent négligeable en fait lorsque le rayon de courbure du cristal est nettement plus grand que la distance d'extinction.

Enfin, en accord avec Takagi, nous remarquons que ce système différentiel est un problème plan qui peut être résolu dans chaque plan d'incidence indépendamment.

La déformation est surtout introduite dans α_H ; $\Delta \Phi_H$ représente surtout les variations d'amplitude dues à la courbure des ondes.

I-7. — EXPLICITATION DES ÉQUATIONS FONDAMENTALES.

a) Évaluation de α_H .

Il nous faut d'abord exprimer n_H en fonction de \vec{W} .

Considérons le cristal avant déformation. Représentons par \vec{r}^* la position d'un point courant défini par \vec{r} après déformation. De même, soit \vec{B}_H^* la valeur de \vec{B}_H avant déformation (cf. I.3). Nous avons alors :

$$n_H = \vec{B}_H^* \cdot \vec{r}^*. \quad (I.7.1)$$

Supposons que, dans la déformation du cristal,

déplacement du cristal, nous introduirons $v(r)$ représentant la différence entre l'onde réelle et l'onde plane tangente à l'origine :

$$\Phi_o = \beta_o(O) \cdot r - v(r) \quad \text{avec} \quad \frac{\partial v(O)}{\partial x_{i,j,k}} = 0 \quad (I.7.4)$$

d'où :

$$\vec{\beta}_o = \vec{\text{grad}} \Phi_o = \vec{\beta}_o(O) - \vec{\text{grad}} v \quad \text{avec :} \quad |\vec{\text{grad}} v| \ll |\vec{\beta}_o|. \quad (I.7.5)$$

Il vient alors :

$$\begin{aligned} \alpha_H &= \lambda^2 \{ B_H(O)^2 + \vec{\text{grad}}^2 (B_H(O) \cdot \vec{W}) \} \\ &\quad \text{négligeable} \\ &- 2 \vec{B}_H(O) \cdot \vec{\text{grad}} (\vec{B}_H(O) \cdot \vec{W}) + 2 \vec{\beta}_o(O) \cdot \vec{B}_H(O) \\ &\quad + 2 \vec{\text{grad}} v \cdot \vec{\text{grad}} (\vec{B}_H(O) \cdot \vec{W}) \\ &\quad \text{négligeable} \\ &- 2 \vec{\beta}_o(O) \cdot \vec{\text{grad}} (\vec{B}_H(O) \cdot \vec{W}) - 2 \vec{B}_H(O) \cdot \vec{\text{grad}} v \}. \end{aligned} \quad (I.7.6)$$

Les premier et quatrième termes représentent $\alpha_H(O)$, qui est une constante dépendant de l'orientation totale du cristal. D'où, étant donné que

$$\vec{\beta}_H = \vec{\beta}_o + \vec{B}_H : \quad (I.7.7)$$

$$\begin{aligned} \alpha_H &= \alpha_H(O) - 2 \lambda^2 \{ \vec{\beta}_H(O) \cdot \vec{\text{grad}} \vec{B}_H(O) \cdot \vec{W} \\ &\quad + \vec{B}_H(O) \cdot \vec{\text{grad}} v \}. \end{aligned} \quad (I.7.8)$$

D'autre part (cf. I.2.4), $|\beta_o|$ est constant au 2^e ordre près, donc :

$$|\vec{\beta}_o(O) \cdot \vec{\text{grad}} v| \ll |\vec{\beta}_o(O)| |\vec{\text{grad}} v| \quad (I.7.9)$$

et par suite :

$$\begin{aligned} \vec{B}_H(O) \cdot \vec{\text{grad}} v &\simeq \{\vec{B}_H(O) + \vec{\beta}_o(O)\} \cdot \vec{\text{grad}} v \\ &= \vec{B}_H(O) \cdot \vec{\text{grad}} v \text{ (au 2^e ordre près)} \end{aligned} \quad (I.7.10)$$

ce qui permet de modifier l'expression (I.7.8) en

$$\alpha_H = \alpha_H(O) - 2\lambda^2 \vec{\beta}_o(O) \cdot \vec{\text{grad}} (v + \vec{B}_H(O) \cdot \vec{W}) \quad (I.7.11)$$

soit encore :

$$\alpha_H = \alpha_H(O) - 2\lambda \frac{\partial}{\partial x_H} (v + \vec{B}_H(O) \cdot \vec{W}) \quad (I.7.12)$$

b) Évaluation de $\Delta \Phi_o$ et $\Delta \Phi_H$.

D'après (I.7.4) :

$$\Delta \Phi_o = -\Delta v. \quad (I.7.13)$$

D'après (I.7.2) :

$$\Delta n_H = -\Delta \{\vec{B}_H(O) \cdot \vec{W}\} = -\vec{B}_H(O) \cdot \vec{W} \quad (I.7.14)$$

et

$$\Delta \Phi_H = -\Delta (v + \vec{B}_H(O) \cdot \vec{W}) \quad (I.7.15)$$

En posant finalement :

$$\Psi_H = \Psi'_H (1 + i\alpha) \quad (\Psi'_H \text{ réel}) \quad (I.7.16)$$

$$x_H = -\frac{\lambda A_H}{\pi \Psi'_H} \quad (I.7.17)$$

$$x_o = -\frac{\lambda A_o}{\pi \Psi'_H} \quad (I.7.18)$$

$$\Phi = \pi \{v + \vec{B}_H(O) \cdot \vec{W}\} \quad (I.7.19)$$

$$\Delta_A = \frac{\lambda^2}{\pi^2 \Psi'^2_H} \Delta \quad (I.7.20)$$

(ce qui revient à calculer le laplacien dans un système de coordonnées où l'unité de longueur est

$-\frac{\lambda}{\pi \Psi'_H}$ (> 0 en général), on trouve :

Rappelons que :

$$\Delta(\pi v) = \Delta(\pi \Phi) \sim \frac{1}{\lambda R}. \quad (I.7.22)$$

En prenant comme ordres de grandeur :

$$\begin{aligned} \lambda &= 1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ cm} \\ R &= 1 \text{ cm} \\ \Psi'_H &= 10^{-5} \end{aligned}$$

on trouve :

$$\Psi'_H \Delta_A (\pi v) \simeq 10^{-3}. \quad (I.7.23)$$

En général, ceci est nettement plus petit que la partie imaginaire de :

$$-\frac{\Psi_o}{\Psi'_H},$$

c'est-à-dire quelque chose de proportionnel à l'absorption.

En pratique, cela veut dire que nous pourrons négliger le laplacien lorsque les rayons de courbures seront nettement plus grands que la distance d'absorption, c'est-à-dire que les variations d'intensité dues au « $\frac{1}{r^2}$ » seront négligeables devant l'absorption vraie.

I-8. — EXPRESSION DU POUVOIR RÉFLECTEUR INTÉGRÉ.

C'est par définition :

$$\text{PR ou } R_H^{\theta} = \int_{\theta_b - L}^{\theta_b + L} \frac{W_H(\Delta s')}{W_o(\Delta s)} d\theta \quad (I.8.1)$$

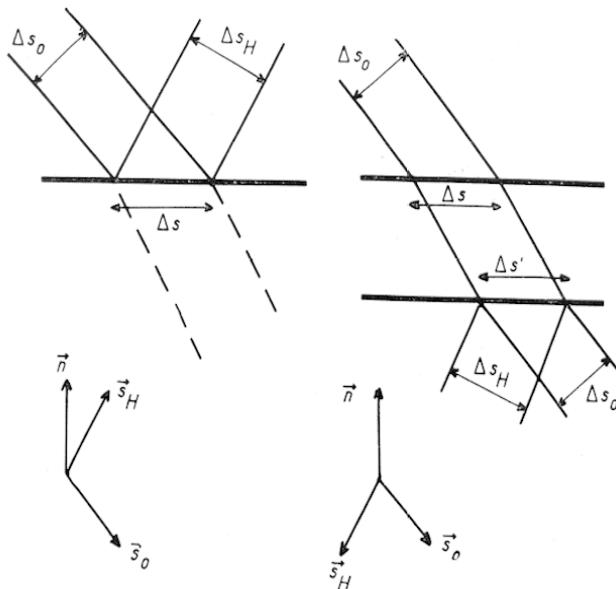
$W_o(\Delta s)$ est la quantité d'énergie reçue (par unité de temps) par une portion Δs de la surface d'entrée ; $W_H(\Delta s')$ est la quantité d'énergie réfléchie par une portion $\Delta s'$ de la surface de sortie. Dans le cas de Bragg $\Delta s \equiv \Delta s'$; dans le cas de Laue, $\Delta s' = \Delta s$ si les faces d'entrée et sortie sont parallèles.

Or :

$$\begin{aligned} W_H(\Delta s') &= |D_H^2| \Delta s_H \\ W_o(\Delta s) &= |D_o^2| \Delta s_o. \end{aligned} \quad (I.8.2)$$

$$i \frac{\partial D_H}{\partial A_H} = \left(\frac{\alpha_H(O)}{\Psi'_H} + 2 \frac{\partial \Phi}{\partial A_H} - \frac{\Psi_o}{\Psi'_H} \right) D_H - (1 + i\alpha) D_o - \frac{i \Psi'_H}{2} D_H \Delta_A \Phi \quad (I.7.21a)$$

$$i \frac{\partial D_o}{\partial A_o} = \left(-\frac{\Psi_o}{\Psi'_H} \right) D_o - (1 + i\alpha) D_H - \frac{i \Psi'_H}{2} D_o \Delta_A (\pi v) \quad (I.7.21b)$$

FIG. 3. — Définition des Δs .

Posons : \vec{n} = vecteur unitaire normal aux surfaces d'entrée et sortie :

$$\begin{aligned} \gamma_n &= \vec{n} \cdot \vec{s}_H \\ \gamma_o &= \vec{n} \cdot \vec{s}_o \end{aligned} \quad (I.8.3)$$

Il vient alors :

$$R_H = \int_{\theta_b - L}^{\theta_b + L} \frac{|D_{H(\text{sortie})}^2 \gamma_H|}{|D_{o(\text{entrée})}^2 \gamma_o|} d\theta \quad (I.8.4)$$

La quantité L , arbitraire, doit simplement être assez grande pour que tout le domaine de réflexion soit couvert.

On peut également exprimer le PR en fonction de $\alpha_H(0)$. Compte tenu de (I.5.25), il vient :

$$R_H^0 = \frac{1}{2|\sin 2\theta_b|} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|\gamma_H D_{H(\text{sortie})}^2|}{|\gamma_o D_{o(\text{entrée})}^2|} d\alpha_H \quad (I.8.5)$$

CHAPITRE II

ÉTUDE D'UN CAS PARTICULIER : D_o ET D_H NE DÉPENDENT QUE D'UNE VARIABLE D'ESPACE

Dans le cas d'une plaquette cristalline à faces parallèles, ou bien d'un cristal d'épaisseur infinie et limité par un plan, on peut chercher une solution pour laquelle D_o et D_H ne dépendent que d'une seule variable :

$$t = \vec{n} \cdot \vec{r},$$

\vec{n} étant un vecteur unitaire normal à la surface d'entrée (et à celle de sortie par conséquent) ; nous conviendrons que $t < 0$ dans le cristal et $t = 0$ à la surface.

Mais cette condition n'est pas satisfaite en général et elle implique certaines conditions quant à la forme de l'onde incidente et au type de déformation du réseau cristallin. Toutefois nous connaissons au moins un cas trivial où cette condition est satisfaite, à savoir le cas de la réflexion d'un système d'ondes planes sur un cristal parfait.

L'intérêt de la présente étude est qu'elle conduit à une importante simplification des calculs. En particulier, nous verrons que le nombre des variables d'espace de notre système se réduit de 2 à 1 et même 0 dans le cas d'un gradient de déformation constant dans un cristal infiniment épais (cas de la courbure cylindrique ou sphérique d'un cristal épais).

Nous verrons que la forme de l'onde incidente (définie par v) est alors définie pour chaque type de formation, mais nous devrons *admettre* que toute onde incidente peut être décomposée en superposition d'ondes de ce type particulier que nous appellerons « ondes propres ».

Il est alors évident que lorsque de telles « ondes propres » sont possibles, le rapport de réflexion et, par suite, le pouvoir réflecteur intégré seront constants *sur toute la surface* du cristal.

II-1. — CALCUL DE $\frac{d\alpha_H}{dt}$.

Remarquons que, pour un cristal parfait, α_H est une constante dans tout le cristal mais dépendant de l'angle exact d'incidence en un point donné (de référence, par exemple l'origine O) ; par contre, $d\alpha_H/dt$ ne dépend plus de l'angle exact d'incidence, mais de l'état de déformation (défini par \vec{W}) et de la forme de l'onde incidence (définie par v).

Nous allons établir maintenant une relation simple entre \vec{W} et $\text{grad } \alpha_H$. Nous avons :

$$|\text{grad } \Phi_o| = \frac{1}{\lambda} \text{ au } 2^{\text{e}} \text{ ordre près (cf. I.2.4),}$$

donc :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \sum_k \left(\frac{\partial v}{\partial x_k} + \frac{\partial (\vec{\beta}_o \cdot \vec{r})}{\partial x_k} \right)^2 = 0 \quad (II.1.1)$$

$$\frac{\partial^2 v}{\partial x_i \partial x_k} \left(\frac{\partial v}{\partial x_k} + \beta_{o k} \right) = 0 \quad (II.1.2)$$

mais :

$$\left| \frac{\partial v}{\partial x_k} \right| \ll |\beta_{ok}|, \quad (II.1.3)$$

d'où :

$$\beta_{ok} \frac{\partial^2 v}{\partial x_i \partial x_k} = 0. \quad (II.1.4)$$

D'autre part (cf. I.7.12) :

$$\frac{\partial \alpha_H}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ -2\lambda s_{hk} \frac{\partial}{\partial x_k} (v + \vec{B}_H(O) \cdot \vec{W}) \right\} \quad (II.1.5)$$

En multipliant scalairement par \vec{s}_o et en tenant compte de (II.1.4), on voit que les termes en v s'annulent, d'où :

$$\vec{s}_o \cdot \vec{\text{grad}} \alpha_H = -2\lambda s_{hk} s_{oj} \frac{\partial^2 \{\vec{B}_H(O) \cdot \vec{W}\}}{\partial x_k \partial x_j} \quad (II.1.6)$$

Nous remarquerons que cette formule ne fait pas intervenir la forme de l'onde incidente. Si, en particulier, nous choisissons la forme de l'onde incidente de sorte que α_H ne dépende que de t (nous verrons ultérieurement sous quelles conditions c'est possible), nous aurons :

$$\vec{\gamma}_o \frac{d\alpha_H}{dt} = -2 s_{hk} s_{oj} (s_{hi} - s_{oi}) \frac{\partial^2 W_i}{\partial x_j \partial x_k} \quad (II.1.7)$$

$$(\vec{\gamma} = \vec{n} \cdot \vec{s}_o, \quad \vec{\gamma}_H = \vec{n} \cdot \vec{s}_H). \quad (II.1.8)$$

II-2. — ÉVALUATION DE Δv ET $\Delta \vec{W}$.

Si nous nous reportons à (I.7.23), nous voyons que Δv et $\Delta \vec{W}$ seront toujours négligeables, car les courbures élastiques dépassent très rarement 10^{-1} cm^{-1} ($R = 10 \text{ cm}$, alors que les longueurs d'absorption sont toujours inférieures à 1 mm).

Ceci ne serait pas valable dans le cas de dislocations, mais nous verrons que, de toute façon, il est possible d'appliquer à une dislocation les considérations du présent chapitre.

Nous négligerons donc les laplaciens Δv et $\Delta \vec{W}$ dans le reste de ce chapitre II.

II-3. — LES « ONDES PROPRES ».

Nous appelons « onde propre » une onde incidente telle que α_H ne dépende que de t .

Ceci présente un intérêt pratique, spécialement dans le cas où nous nous intéressons au pouvoir réflecteur intégré plus qu'à la figure de diffraction pour une onde de forme et d'orientation bien définies.

En général, le faisceau incident est assez divergent et la figure de diffraction est la superposition d'une infinité de figures dues aux divers vecteurs d'ondes contenus dans le faisceau incident.

Dans les théories classiques, on décompose ce faisceau en ondes planes ; nous préférons le décomposer en « ondes propres » dont nous étudions séparément la réflexion et que nous additionnons à la sortie, comme d'habitude.

La principale caractéristique de notre méthode est que le type d'onde choisi pour cette décomposition dépend (s'il existe) du genre de déformation du cristal. Bien évidemment, il se ramène à un système d'ondes planes dans un cristal non déformé.

Mais il faut que notre système d'« ondes propres » soit complet, c'est-à-dire que n'importe quelle onde incidente puisse être représentée comme une somme d'« ondes propres ». Nous n'avons pu l'établir mathématiquement, aussi l'avons-nous *admis* en nous appuyant sur les faits suivants :

- il existe une « onde propre » pour une direction de normale donnée, en un point donné ;
- les ondes « propres » satisfont aux équations de Maxwell ;
- elles ne présentent pas de point d'accumulation, tout au moins dans la partie intéressante de l'espace.

Cependant, il y a, quant à la déformation du cristal, une condition que nous établirons au § II.3.b). Mais préalablement, nous allons étudier la détermination de l'« onde propre » ayant en un point donné une normale déterminée.

a) Détermination de l'« onde propre ».

L'origine étant arbitraire, nous la prendrons comme point où la normale est imposée. Donc $\vec{\beta}_o(O)$ est connu. Ce qui est inconnu est v (sachant que $\frac{\partial v}{\partial x_i}(O) = 0$) : il nous reste donc à déterminer les dérivées seconde de v .

Elles satisfont tout d'abord à (II.1.4), soit :

$$\frac{\partial^2 v}{\partial x_i \partial x_k} s_{ok} = 0 \quad (3 \text{ équations}). \quad (\text{II.3.1})$$

Puis, en écrivant que $\vec{\text{grad}} \alpha_H$ est parallèle à \vec{n} : (nous conviendrons $x_3 = t$) :

$$\frac{\partial^2 v}{\partial x_i \partial x_1} s_{Hi} = - \frac{\partial^2 (\vec{B}_H(O) \cdot \vec{W})}{\partial x_i \partial x_1} s_{Hi} \quad (\text{II.3.2a})$$

$$\frac{\partial^2 v}{\partial x_i \partial x_2} s_{Hi} = - \frac{\partial^2 (\vec{B}_H(O) \cdot \vec{W})}{\partial x_i \partial x_2} s_{Hi}. \quad (\text{II.3.2b})$$

Nous avons donc 5 équations pour 6 inconnues (les 6 dérivées secondes). Pourvu qu'un déterminant au moins ne s'annule pas, la solution est possible ; elle n'est pas unique.

Si l'on se place dans un système d'axes particulier, x, y, z (Oz étant parallèle à B_H et Oy normal au plan d'incidence), on voit que le système peut toujours être résolu, de manière univoque pour 5 des dérivées secondes de v ; la sixième, $\frac{\partial^2 v}{\partial y^2}$, n'y figurant pas, est par contre totalement indéterminée.

Ceci est en accord avec notre remarque que le système (I.6.4 et 5) est bidimensionnel : la courbure de l'onde propre dans le plan normal au plan d'incidence est indéterminée.

b) Condition d'existence des ondes propres.

Le paragraphe précédent II.3.a) nous a permis de calculer les dérivées secondes de v , c'est-à-dire, en gros, la courbure de l'onde, mais ceci ne s'applique qu'en un point donné.

L'onde ainsi calculée est donc « propre » en un point, mais pas a priori dans le cristal entier.

Or, pour une onde propre, nous savons que $\frac{d\alpha_H}{dt}$ ne dépend que de \vec{W} . Il faut donc que cette

fonction de \vec{W} ne dépende que de t dans tout le cristal. En effet :

$$\frac{\partial \alpha_H}{\partial x_1} \equiv 0 \text{ entraîne } \frac{\partial^2 \alpha_H}{\partial x_1 \partial t} \equiv 0$$

$$\text{donc que : } \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{\partial \alpha_H}{\partial t} \right) \equiv 0 \quad (\text{II.3.3})$$

Une condition d'existence des « ondes propres » est donc que :

$$\frac{\partial^2 (\vec{W} \cdot \vec{B}_H)}{\partial x_i \partial x_j} s_{oi} s_{Hi} \equiv f(t). \quad (\text{II.3.4})$$

Ceci ne peut se produire pour des valeurs quelconques de s_o et s_H que si :

$$\frac{\partial^2 W_k}{\partial x_i \partial x_j} = C^{tes} \quad (\text{II.3.5})$$

sauf :

$$\frac{\partial^2 W_k}{\partial t^2} = f(t). \quad (\text{II.3.6})$$

Néanmoins il se peut que des déformations ne satisfaisant pas à ces conditions donnent lieu à des « ondes propres » pour des réflexions particulière, en particulier si certains s_{Hi} ou s_{oi} s'annulent.

II-4. — SIGNIFICATION GÉOMÉTRIQUE DE (II.1.7)

Nous nous proposons maintenant de trouver une expression géométriquement simple du second membre de (II.1.7). Pour cela, nous utiliserons notre système d'axes particuliers x, y, z , lié aux plans réflecteurs.

On trouve :

$$\gamma_o \frac{d \alpha_H}{dt} = -2 \lambda \left\{ \cos^2 \theta \frac{\partial^2 (\vec{W} \cdot \vec{B}_H)}{\partial x^2} - \sin^2 \theta \frac{\partial^2 (\vec{W} \cdot \vec{B}_H)}{\partial z^2} \right\}. \quad (\text{II.4.1})$$

Appelons R_i le rayon de courbure de la section des plans réflecteurs par le plan d'incidence, compté positivement pour une concavité tournée dans la direction de \vec{B}_H ; en appelant e_{zz} l'extension dans la direction Oz ($\parallel B_H$), il vient :

$$\gamma_o \frac{d \alpha_H}{dt} = 4 \sin \theta \left(\frac{\partial e_{zz}}{\partial z} \sin^2 \theta - \frac{\cos^2 \theta}{R_i} \right) \quad (\text{II.4.2})$$

Nous voyons maintenant clairement que seules les déformations dans le plan d'incidence interviennent. De plus, les déformations interviennent ici par leurs dérivées. Elles n'interviennent directement que dans $\alpha_H(O)$, c'est-à-dire qu'elles s'ajoutent à la désorientation globale du cristal. Il est en effet évident qu'un cristal parfait en traction pure reste toujours parfait, mais avec des paramètres légèrement modifiés.

En conclusion, le pouvoir réflecteur intégré ne sera modifié que par le *gradient des déformations*, et non par les déformations elles-mêmes.

II-5. — LES CRISTAUX COURBÉS.

La présente théorie s'applique à n'importe quelle déformation à gradient constant dans un cristal. Nous nous intéresserons maintenant à un cas expérimentalement simple, celui de la courbure cylindrique avec le plan d'incidence normal aux génératrices du cylindre, dont un autre avantage est que la forme des ondes propres est géométriquement évidente.

i) *Détermination géométrique des « ondes propres ».*

Une plaquette de cristal non déformée reste évidemment identique à elle-même après la translation dans son plan de surface.

De même, une plaquette courbée reste identique après rotation autour de l'axe de courbure Ω . Si donc nous envoyons sur cette plaquette une onde dont toutes les normales (rayons) se déduisent les unes des autres par rotation autour du même axe de courbure Ω , tous les angles d'incidences seront égaux, à une même profondeur. Donc les « ondes propres » seront théoriquement des développantes de cercle. En pratique, vu que le rayon de courbure est toujours grand devant les dimensions du cristal, nous pourrons dire que ce sont des cylindres d'axe P (fig. 4).

ii) *Les déformations.*

Soit R le rayon de courbure, positif si Ω est du côté $t > 0$ ($t = 0$ à la surface d'entrée et décroît vers l'intérieur du cristal),

Ox dans le plan d'incidence et perpendiculaire à Ot ,

Oy parallèle à l'axe de courbure.

Si nous supposons les contraintes aux limites telles que la courbure soit rigoureusement cylindrique, nous arrivons à :

$$W_x = -\frac{tx}{R}, \quad W_y = 0, \quad W_t = \frac{1}{2} \left(\frac{x^2}{R} + K \frac{t^2}{R} \right) \quad (II.5.1)$$

avec :

$$(II.5.2)$$

$$K = \frac{\lambda^* + 2\mu^*}{\lambda^*} \quad (\text{coefficient de Poisson})$$

(μ^* et λ^* étant les coefficients de Lamé).

iii) *Expression de $d\alpha_H/dt$.*

Posons (cf. Zachariasen (1945), éq. 3.115) :

$$b = \frac{n \cdot s_o}{n \cdot s_H} = \frac{\gamma_H}{\lambda_o} \quad (II.5.3)$$

On trouve alors :

(II.5.4)

$$\frac{d\alpha_H}{dt} = \frac{2(b-1)}{bR} (1 - b\gamma_H^2 + bK\gamma_H^2).$$

En particulier, dans le cas de *Bragg symétrique*, $b = 1$, $\gamma_H = \sin \theta$, d'où :

$$\frac{d\alpha_H}{dt} = \frac{4}{R} (\cos^2 \theta - K \sin^2 \theta). \quad (II.5.5)$$

(comparer avec II.4.2).

C'est cette expression qui nous a servi lors de l'étude expérimentale que nous avons limitée au cas de Bragg symétrique.

Par contre, dans le cas de Laue symétrique :

$$b = 1 \text{ et } \frac{d\alpha_H}{dt} = 0. \quad (II.5.6)$$

Par conséquent, le pouvoir réflecteur intégré est le même que pour un cristal non courbé. Les angles changent, mais pas les intensités. Ceci est géométriquement presque évident puisque dans ce cas, les plans réflecteurs sont toujours plans sans toutefois rester parallèles. Donc θ et d varient, mais il est à remarquer que la quantité $(d \sin \theta)$ reste constante.

Néanmoins, selon Polder (1961) ce phénomène ne se produit que si nous sommes dans le cas de Laue symétrique à la minute près, ce qui est rarement réalisé, ne serait-ce que du fait de la taille du cristal. En fait, à cause de l'effet Borrman, les intensités sont extrêmement sensibles aux légères distorsions et cette non-variation du PR est très difficile à observer.

Remarque. Il est possible d'établir géométriquement la relation (II.5.5). Lorsqu'on se déplace, le long d'un rayon, dans le sens des t croissants, son angle d'incidence varie de (fig. 4) :

$$d\theta = - \left| \frac{d\ell}{R} \right| = - \frac{dt}{R \tan \theta_b} \quad (II.5.7)$$

D'autre part (cf. II.5.1) :

$$\frac{dW_t}{dt} = \frac{d(d_H)}{dt} = \frac{K dt}{R} \quad (II.5.8)$$

Or, en différenciant la relation de Bragg, il vient :

$$\frac{d(d_H)}{dt} = - \frac{d\theta_b}{\tan \theta_b} \quad (II.5.9)$$

d'où :

$$\frac{d\theta_b}{dt} = -\frac{K}{R} \operatorname{tg} \theta_b \quad (\text{II.5.10})$$

dans lequel α_H est donné par :

$$\alpha_H = \alpha_H(0) + \int_0^t \left(\frac{d\alpha_H}{dt} \right) dt, \quad (\text{II.6.4})$$

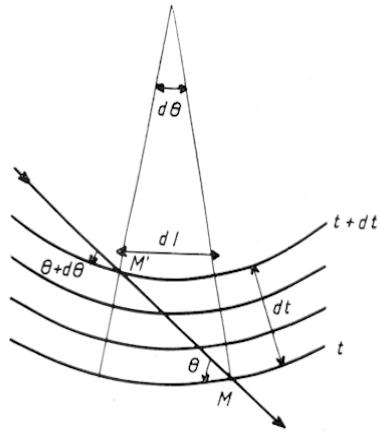


FIG. 4. — Calcul géométrique de $d\alpha_H/dt$.

Or, d'après (I.5.21) :

$$\frac{d\alpha_H}{dt} = 4 \sin \theta_b \cos \theta_b \left(\frac{d\theta_b}{dt} - \frac{d\theta}{dt} \right). \quad (\text{II.5.11})$$

En remplaçant de $d\theta_b/dt$ et $d\theta/dt$ par leurs expressions respectives (II.5.7) et (II.5.10), on retrouve (II.5.5).

II-6. — LE SYSTÈME DIFFÉRENTIEL POUR UNE « ONDE PROPRE ».

Nous remarquons tout d'abord que :

$$t = \gamma_o x_o + \gamma_H x_H. \quad (\text{II.6.1})$$

d'où :

$$\frac{\partial}{\partial x_H} = \gamma_H \frac{d}{dt} \quad \frac{\partial}{\partial x_o} = \gamma_o \frac{d}{dt} \quad (\text{II.6.2})$$

Nous reprendrons maintenant les équations (I.6.4 et 5) qui nous donneront, en négligeant les laplacians (cf. (I.7.22) et § II.2, le système :

$$i \frac{\lambda \gamma_H}{\pi} \frac{d D_H}{dt} = \Psi_o D_H + \Psi_H D_o - \alpha_H D_H$$

$$i \frac{\lambda \gamma_o}{\pi} \frac{d D_o}{dt} = \Psi_o D_o + \Psi_H D_H$$

(II.6.3 a et b)

$d\alpha_H/dt$ étant donné par l'une des formules précédemment établies (selon le cas).

II-7. — LES CONDITIONS AUX LIMITES.

Un autre problème se pose maintenant, celui des constantes d'intégration. Deux cas se présentent :

a) Cas de Laue ($b > 0$).

- i) $D_H = 0$ pour $t = 0$ (entrée)
- ii) $D_o = D'_o$ pour $t = 0$ (entrée)

(D'_o est la valeur de D_o à l'extérieur du cristal, immédiatement au-dessus de la surface).

On remarquera que D_H et D_o sont connus au même point. L'intégration, si elle n'est pas possible algébriquement, sera numériquement simple car le point de départ est parfaitement connu : n'importe quelle méthode de « pas à pas » sera applicable. Elle donnera, de plus, directement les résultats d'un même problème pour des épaisseurs croissantes, d'où une économie considérable lors du calcul numérique sur ordinateur.

b) Cas de Bragg ($b < 0$).

- i) $D_H = 0$ pour $t = t_{max}$ (soit à la surface inférieure) (si le cristal est infiniment épais, $-t_{max} = -\infty$).
- ii) $D_o = D'_o$ pour $t = 0$.

Ici les conditions initiales ne correspondent plus au même point et une méthode de « pas à pas » ne sera donc plus applicable.

Nous examinerons ultérieurement un changement de variables qui permet de contourner cette difficulté (§ II.10).

II-8. — ÉQUATIONS RÉDUITES.

Pour plus de simplicité, nous allons définir un certain nombre de variables réduites, en général très proches de celles utilisées par Zachariasen (1945) dans son calcul.

$$\Psi_o = \Psi'_o + i \Psi''_o \quad (II.8.1)$$

$$\Psi_H = \Psi'_H + i \Psi''_H = \Psi'_H (1 + i \kappa) \quad (II.8.2)$$

$$D_o = Q_o \frac{\exp(-i \Psi'_o \pi t / \lambda \gamma_o)}{\sqrt{|\gamma_o|}} = Q_o \frac{\exp(-i \Psi'_o \pi t / \lambda \gamma_o)}{\sqrt{|\gamma_o|}} \cdot \exp\left(-\frac{\mu t}{2 \gamma_o}\right) \quad (II.8.3)$$

$$D_H = Q_H \frac{\exp(-i \Psi'_H \pi t / \lambda \gamma_o)}{\sqrt{|\gamma_H|}} = Q_H \frac{\exp(-i \Psi'_H \pi t / \lambda \gamma_o)}{\sqrt{|\gamma_H|}} \cdot \exp\left(-\frac{\mu t}{2 \gamma_o}\right) \quad (II.8.4)$$

$$y = \frac{1}{2} \frac{(1-b) \Psi'_o + b \alpha_H}{-\Psi'_H \sqrt{|b|}} \quad (\sim \text{écart à la condition de Bragg}) \quad (II.8.5)$$

$$g = \frac{1}{2} \frac{-\Psi'_H \sqrt{|b|}}{(1-b) \Psi''_o} \quad (\sim \text{absorption}) \quad (II.8.6)$$

$$A = -\frac{\gamma_H A_H + \gamma_o A_o}{\sqrt{|\gamma_o \gamma_H|}} \quad (\sim \text{profondeur}) \quad (II.8.7)$$

$$\epsilon = \frac{b}{|b|} = \begin{cases} +1 & \text{dans le cas de Laue} \\ -1 & \text{dans le cas de Bragg} \end{cases} \quad (II.8.8)$$

(II.6.5) devient alors :

$$-i \frac{d Q_H}{d A} = 2 Q_H (y + ig) + \epsilon (1 + i \kappa) \quad (II.8.9 \ a)$$

$$-i \frac{d Q_o}{d A} = (1 + i \kappa) Q_H. \quad (II.8.9 \ b)$$

Étant donné que Ψ'_H est négatif (sauf si $\theta > 45^\circ$) A croît en sens inverse de t , donc vers l'intérieur du cristal.

D'autre part, l'introduction des $\sqrt{|\gamma|}$ dans (II.8.3) s'explique si l'on se reporte au § I.8. On voit alors que le rapport de réflexion (en amplitudes) sera simplement donné par :

$$X = Q_H / Q_o \quad (II.8.10)$$

Enfin, le terme exponentiel introduit dans Q correspond d'une part à l'absorption vraie du rayon incident pendant son trajet dans le cristal jusqu'à la profondeur t et d'autre part aux changements de phase dus à la constance diélectrique du cristal en dehors de toute réflexion.

Rappelons enfin que le facteur de polarisation ($= 1$ ou $\cos 2\theta$) est contenu dans Ψ'_H , Ψ'_H , Ψ''_H (cf. (I.6.2)).

Pour compléter ce système, nous remarquons que :

$$\frac{d A}{d y} = \frac{dy}{d \alpha_H} \frac{d \alpha_H}{dt} \frac{dt}{d A}.$$

Soit, tous calculs faits :

$$c(A) = \frac{dy}{dA} = -\frac{\epsilon \lambda}{\pi \Psi'_H^2} \frac{\partial^2 W_k}{\partial x_i \partial x_j} s_{oi} s_{Hj} (s_{Hk} - s_{ok}), \quad (II.8.11)$$

d'où :

$$y(A) = y(A=0) + \int_0^A c(A) dA. \quad (II.8.12)$$

II-9. — POUVOIRS RÉFLECTEURS INTÉGRÉS. EXPRESSION EN FONCTION DES VARIABLES RÉDUITES.

Lorsqu'on résoud pratiquement le système (II.8.9), le paramètre représentant la désorientation globale n'est ni θ_o , ni $\alpha_H(0)$, mais évidemment $y(A=0) = y_o$. On sera donc amené à calculer des intégrales réduites R_H^y avec :

$$PR = R_H^{\theta} = R_H^y \frac{\partial y_o}{\partial \theta_o} = R_H^y \frac{|\Psi'_H|}{\sqrt{|b|} \sin 2\theta} \quad (II.9.1)$$

Nous allons donner ci-dessous les expressions de R_H^y dans les cas de Laue et Bragg.

a) Cas de Laue.

$$R_H^y = \exp(\mu t_o / \gamma_o) \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{Q_H(A_{max})}{Q_o(A=0)} \right|^2 dy_o \quad (II.9.2)$$

b) Cas de Bragg.

Dans ce cas, l'exponentielle disparaît :

$$R_H^y = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{Q_H}{Q_o} \right|^2 dy_o. \quad (II.9.3)$$

II-10. ÉTUDE PARTICULIÈRE DU CAS DE BRAGG

Nous remarquerons ici que seul nous intéresse le rapport :

$$X(0) = \frac{Q_H(0)}{Q_o(0)} = \frac{D_H(0)}{D_o(0)} \sqrt{\frac{|\gamma_H|}{|\gamma_o|}} \quad (II.10.1)$$

à la surface supérieure. Afin de nous débarrasser des difficultés présentées au § II.7 b), nous utiliserons $X(A)$ comme inconnue dans tout le cristal.

Le système (II.8.9) donne, par division par Q_H et Q_o :

$$(II.10.2)$$

$$-i \frac{1}{Q_H} \frac{dQ_H}{dA} = 2(y + ig) - (1 + ix) \frac{1}{X}$$

$$-i \frac{1}{Q_o} \frac{dQ_o}{dA} = X(1 + ix). \quad (II.10.3)$$

Par soustraction membre à membre on en déduit l'équation dans le cas Bragg :

$$(II.10.4)$$

$$i \frac{dX}{dA} = X^2(1 + ix) - 2X(y + ig) + (1 + ix)$$

avec pour condition initiale :

$$X = 0 \text{ pour } A = A_{max}. \quad (II.10.5)$$

L'intégration sera désormais possible par « pas à pas » en partant de A_{max} vers $A = 0$.

Remarquons que $X(A)$ ne dépend que de ce qui se passe entre A et A_{max} . La résolution « pas à pas » donne donc en une seule fois les pouvoirs réflecteurs pour des épaisseurs croissantes, d'où une économie considérable de temps de calcul (cf. cas de Laue, § II.7.a).

II-11. — CAS DE BRAGG. ÉPAISSEUR INFINIE. COURBURE UNIFORME.

Nous admettrons que l'épaisseur d'un cristal peut être considérée comme infinie lorsque l'éner-

gie sortant de l'autre côté du cristal peut être négligée. Ceci fait intervenir la transmission anormale, sauf dans le cas symétrique où elle a lieu parallèlement à la surface. En fait, dès que le cristal est un peu déformé, l'importance de l'effet Borrman diminue très vite et nous admettrons que l'épaisseur est infinie lorsque :

$$|t_{max}| \gg \frac{1}{\mu}, \quad (II.11.1)$$

ce qui est très souvent réalisé, car $1/\mu$ est de l'ordre de 0,1 mm dans les cas les plus défavorables.

Le cas présent est donc assez fréquent. C'est pourquoi nous l'étudierons séparément.

La condition initiale devient :

$$(II.11.2)$$

$$t = -\infty \text{ ou } A = -\Psi'_H. \infty \rightarrow X = 0.$$

D'autre part, du fait de la courbure uniforme :

$$y = y(0) + cA. \quad (II.11.3)$$

Mais dans (II.11.3) seul y est bien défini, $y(0)$ et A sont arbitraires et dépendent du choix de l'origine, c'est-à-dire, ici, la surface.

Or, nous avons vu au paragraphe précédent que la surface est elle aussi arbitraire puisque, en tout point, X ne dépend que de ce qui se passe au-dessous. Donc une seule résolution, de $A = -\infty$ à $+\infty$, nous donnera tous les états possibles de la surface lorsque y_o varie de $-\infty$ à $+\infty$. Ceci n'est vrai que parce que le cristal est d'épaisseur infinie, donc que la distance à la surface inférieure est inchangée même si l'on se déplace dans le cristal. Ceci veut dire que X ne dépend plus de A que par l'intermédiaire de y , donc que :

$$\frac{\partial X}{\partial A} = c \frac{\partial X}{\partial y} = c \frac{\partial X}{\partial y_o} \quad (II.11.4)$$

Le système (II.10.4) s'écrit donc :

$$i c \frac{dX}{dy} = X^2(1 + ix) - 2X(y + ig) + (1 + ix)$$

$$(II.11.5)$$

Conditions aux limites :

Remarquons que g est du signe de Ψ'_H (Ψ''_o est négatif). D'où, compte tenu de (II.11.2) :

$$X = 0 \text{ pour } y = -c.g. \infty \quad (II.11.6)$$

Du fait de l'intérêt expérimental du cas où cette équation s'applique, nous nous sommes plus particulièrement intéressés à sa résolution⁽¹⁾ nous avons consacré un chapitre spécial aux résultats ainsi obtenus et à leur vérification expérimentale.

Remarque. Nous avons déjà établi cette équation dans une précédente théorie (1960) mais nous avions par erreur négligé x . De plus, cette précédente théorie était limitée au cas de Bragg symétrique.

CHAPITRE III

CRISTAUX COURBÉS ÉLASTIQUEMENT RÉSULTATS ET PARTIE EXPÉRIMENTALE

III-1. — FORME DE LA COURBE DE RÉFLEXION.

Nous avons réuni (fig. 5 et suivantes) quelques exemples montrant l'influence de c et de x sur la forme de la courbe de réflexion. Afin de mettre en évidence l'influence de c et de x , nous avons groupé sur une même page les courbes correspondant à une même valeur de $|c|$.

Il est facile de démontrer que, lorsque $x = 0$,

$$X(c, y) = X(c, -y) \quad (\text{III.1.1})$$

et que, par suite, dans ce cas, R_h^y et le pouvoir réflecteur ne dépendent pas du signe de c . Aussi n'avons-nous présenté les courbes pour $x = 0$ que pour un seul signe de c .

Afin de faciliter la comparaison, nous avons orienté l'axe des y en sorte que $y \in g$ soit toujours positif vers la droite.

On trouvera donc successivement sur chaque figure les courbes :

$$\begin{aligned} c &= |c|, & x &= 0 \\ c &= |c|, & x &= |g| \\ c &= -|c|, & x &= |g|. \end{aligned}$$

On constate que :

a) lorsque $|c| < 0,01$ (fig. 6), la courbe de réflexion ne diffère pratiquement pas de celle du cristal non déformé ;

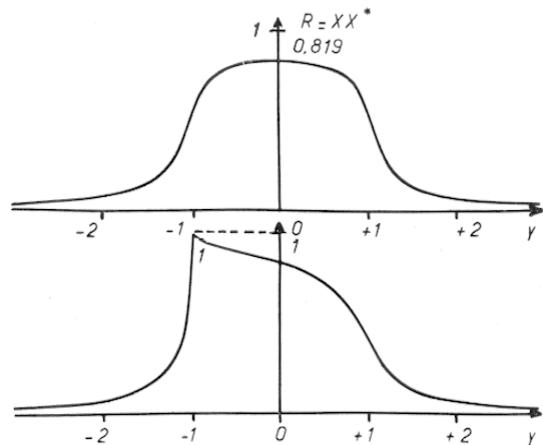


FIG. 5. — Courbes de réflexion pour $c = 0$ (cristal non déformé — ondes planes), $g = -0,1$.
(haut) $x = 0$. (bas) $x = 0,1$.

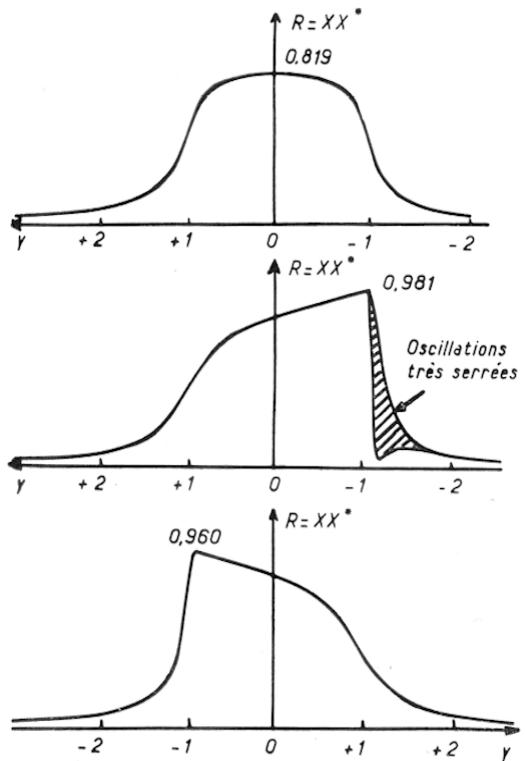


FIG. 6. — Courbes de réflexion pour $c = \pm 0,01$ (ondes propres), $g = -0,1$.
(haut) $x = 0$; $c = 0,01$. (milieu) $x = 0,1$; $c = 0,01$.
(bas) $x = 0,1$; $c = -0,01$.

b) lorsque $|c| \simeq 0,1$ (fig. 7), la courbe comporte, du côté ($y \in g > 0$) une « queue » oscillante, décroissant en moyenne comme :

$$e^{-4gy/c}$$

tandis que la partie de courbe comprise dans

(1) Pour les détails de la méthode de calcul, voir Taupin (1964), thèse ch. III.

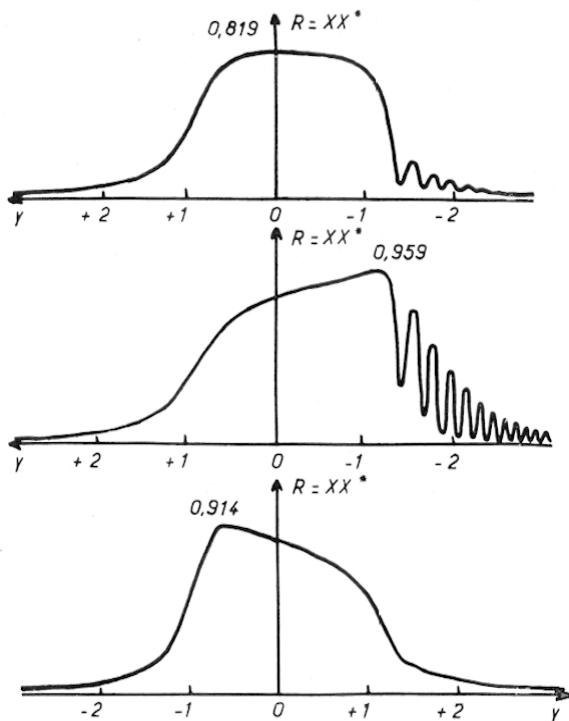


FIG. 7. — Courbes de réflexion pour $c = \pm 0.1$ (ondes propres), $g = -0.1$.
 (haut) $x = 0$; $c = 0.1$. (milieu) $x = 0.1$; $c = 0.1$.
 (bas) $x = 0.1$; $c = -0.1$.

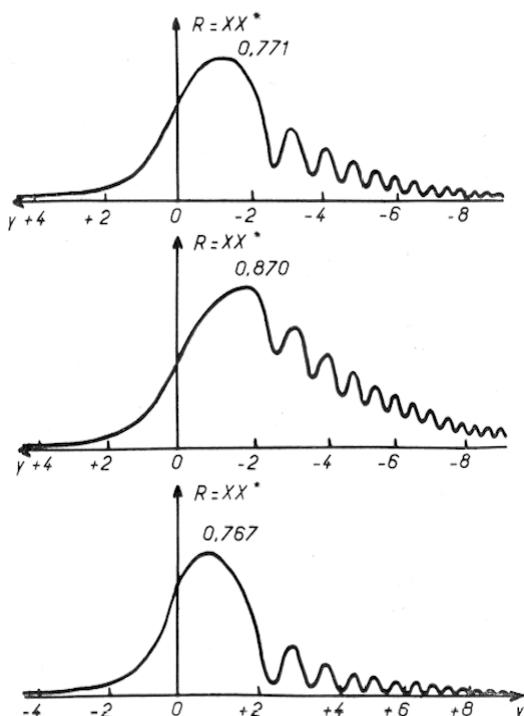


FIG. 8. — Courbes de réflexion pour $c = \pm 1$ (ondes propres) $g = -0.1$.
 (haut) $x = 0$; $c = 1$. (milieu) $x = 1$; $c = 1$.
 (bas) $x = 1$; $c = -1$.

l'intervalle $(-1, +1)$ reste pratiquement inchangée;

c) lorsque $|c| > 1$, le maximum principal décroît et se déplace vers la droite ($y \propto g > 0$), tandis que la « queue » s'allonge en donnant une courbe de réflexion large et aplatie (fig. 8 et 9).

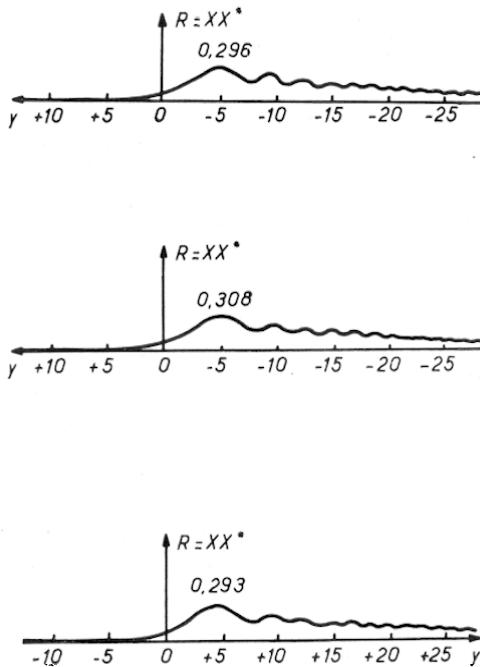


FIG. 9. — Courbes de réflexion pour $c = \pm 10$ (ondes propres), $g = -0.1$.
 (haut) $x = 0$; $c = 10$. (milieu) $x = 10$; $c = 10$.
 (bas) $x = 10$; $c = -10$.

III-2. — EXPLICATION PHYSIQUE DES RÉSULTATS.

Pour bien comprendre, il importe de se rappeler que X est en réalité fonction de y_0 et de A , mais que dans notre cas :

$$X = X(y_0 + cA),$$

ce qui peut se représenter par un diagramme tridimensionnel (fig. 10).

Si nous faisons une coupe par le plan $A = A_0$, nous aurons la courbe de réflexion « rocking curve » à la profondeur A_0 .

Au contraire, si nous faisons une coupe à y_0 constant, nous aurons une image de l'état du cristal (fixe) pour une expérience donnée, en fonction de la profondeur.

Du fait de l'infinité de l'épaisseur, toutes les sections parallèles dérivent l'une de l'autre par translation (changement d'origine) et les sections $y_0 = c^{te}$ et $A = c^{te}$ sont affines (rapport d'affi-

nité = c). Nous expliquerons donc les résultats de la courbe $A = c^t$ en nous reportant à ce qui de passe à $y_0 = c^t$ dans tout le cristal.

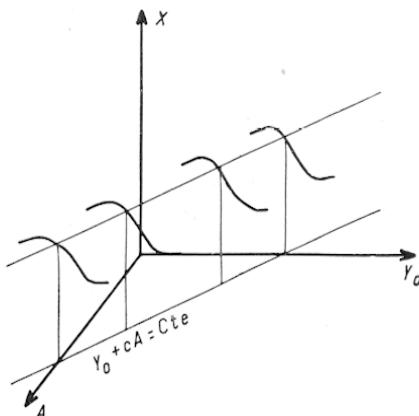


FIG. 10. — Variation de X en fonction de y_0 et de A .

Nous appellerons « cristal parfait tangent » en un point A au cristal déformé le cristal parfait qui aurait dans tout son volume les mêmes paramètres et la même désorientation, c'est-à-dire le même y que le cristal déformé au point A .

Le fait que (II.10.4) ne contienne pas explicitement la dérivée dy/dA montre que le cristal déformé se comporte comme un empilement de couches parfaites tangentes au cristal déformé. Donc nous aurons le droit, pour de petites épaisseurs, de dire que le cristal déformé se comporte comme le cristal parfait tangent (abrégé CPT) (1).

À une certaine profondeur $A_0 \simeq -\frac{y_0}{c}$ nous aurons $-1 < y < +1$, donc le CPT y sera en position de réflexion totale ; cette couche réfléchira donc intensément (fig. 11).

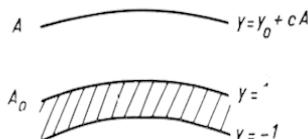


FIG. 11. — La région hachurée est celle où le « Cristal Parfait Tangent » est en position de réflexion totale.

Mais si nous nous plaçons en A (entre 0 et A_0), nous serons hors du domaine de réflexion totale

(1) Ce qui veut seulement dire que la différentielle dX relative à un déplacement dA se calcule comme si la couche d'épaisseur dA était parfaite, mais non pas, comme l'admettent plusieurs auteurs (Penning & Polder, 1961 ; Kato, 1963, 1964), que la fonction X (y, A) y est la même. En d'autres termes, on a le droit d'extrapoler au cristal imparfait les équations du cristal parfait, mais non leurs solutions.

et par contre dans un domaine où se produisent les « Pendellösungen ». Nous aurions donc des franges qui iront en s'amortissant. Mais la période des franges de Pendellösung varie (dans ce cas de Bragg) comme $\sqrt{y^2 - 1}$ approximativement.

Il y a, de plus, absorption vraie sur le trajet aller et retour de A à A_0 , ce qui donne une décroissance de l'« effet » de la couche en A_0 qui se traduit par un terme $e^{-\alpha A}$, soit $e^{-\alpha y/c}$. Ainsi s'explique la forme des courbes (fig. 12).

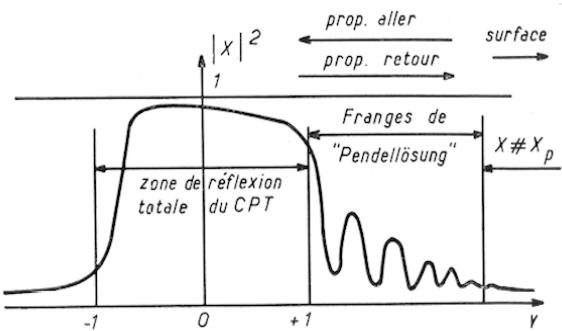


FIG. 12. — Les diverses parties de la courbe de réflexion.

III-3. — VARIATION DE R_H^y ET DU POUVOIR RÉFLECTEUR (1).

b) Influence des signes de c , α , g sur R_H^y .

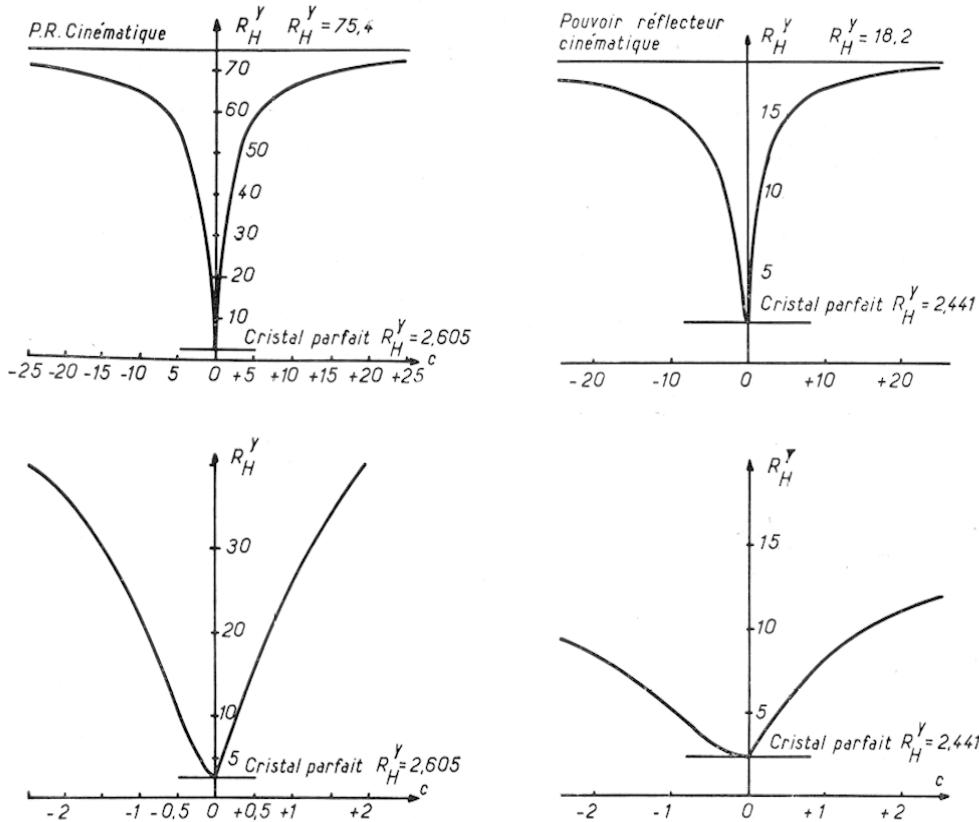
L'équation (II.11.5) est invariante si l'on change simultanément les signes de g , X et y ; par conséquent R_H^y n'est pas affecté par un changement de signe de g .

Par contre, R_H^y est affecté par un changement de signe de α ou de c , mais pas si c et α sont inversés simultanément. Étant donné qu'en pratique, α est toujours positif, seul le signe de c nous intéresse.

Nous avons tracé (fig. 13) les variations de R_H^y en fonction de c pour la réflexion (400) de la radiation $Mo K\alpha$ (polarisation normale au plan d'incidence). On peut constater que la courbe n'est que faiblement dissymétrique et que, par suite, l'influence de α est faible, sauf pour les petites valeurs de c .

On remarque de R_H^y ($c > 0$) est toujours plus grand que R_H^y ($-c$) et que le minimum a lieu pour une valeur légèrement négative de c . Pour autant que nous puissions faire confiance à la

(1) On trouvera des tables numériques de R_H^y ainsi que des divers paramètres (α , g , Ψ_0 , Ψ_H , etc...) dans la version intégrale (Taupin, 1964).

FIG. 13. — Variation de R_H^y en fonction de c (silicium, réflexion 400 ||).

(haut) Radiation MoK α (fortes distorsions).
 (bas) Radiation MoK α (faibles distorsions).

(haut) Radiation CuK α (fortes distorsions).
 (bas) Radiation CuK α (faibles distorsions).

précision de nos calculs numériques, il semble que le minimum ait lieu pour :

$$c \simeq -x \quad (\text{III.3.1})$$

c) Influence de $|c|$.

Pour $|c| \simeq 1$, et pour les réflexions pour lesquelles le PR cinématique est beaucoup plus grand que le PR dynamique, R_H^y est à peu près proportionnel à $|c|$:

$$R_H^y \simeq \left| \frac{c}{4g} \right|. \quad (\text{III.3.2})$$

Pour $|c| \gg 1$, on constate une « saturation » et R_H^y tend vers sa valeur cinématique (en la dépassant, semble-t-il, quelque peu) :

$$R_H^y (c = \infty) = \left| \frac{\pi}{4g} \right|. \quad (\text{III.3.3})$$

III-4. — ÉTUDE EXPÉRIMENTALE.

Nous nous sommes limités à l'étude du cas de Bragg symétrique, courbure cylindrique, avec

des cristaux de silicium taillés suivant la direction 100. Nous avons donc choisi la réflexion (400). En ce qui concerne la radiation, nous avons choisi celle dont l'absorption vraie était la plus faible de façon à augmenter le contraste entre PR dynamique (cristal non déformé) et PR cinématique. Aussi avons-nous utilisé la radiation Mo K α .

Dans ces conditions (cas de Bragg symétrique)

$$c = + \frac{2\lambda \sin \theta}{\pi \Psi_H^2} (\cos^2 \theta - K \sin^2 \theta) \times \frac{I}{R_c} \quad (\text{III.4.1})$$

R_c étant le rayon de courbure,

$$K \text{ un coefficient élastique} = \frac{\lambda^* + 2\mu^*}{\lambda^*} \simeq 0,3 \quad (\text{cf. (II.5.2).})$$

De même :

$$\text{PR} = R_H^0 = \frac{|\Psi_H^*|}{|\sin 2\theta|} R_H^y. \quad (\text{III.4.2})$$

Pour des raisons pratiques nous n'avons pu étudier la courbure des cristaux que pour une convexité tournée vers le faisceau incident. C'est-à-dire que c est négatif dans nos expériences.

a) Mesure du pouvoir réflecteur.

Nous avons utilisé la méthode originale de Bragg. L'échantillon est placé au centre d'un goniomètre et réglé de sorte que l'axe soit contenu dans la face du cristal (400). Le faisceau incident, produit avec un monochromateur à cristal courbé, est focalisé également sur l'axe du goniomètre, c'est-à-dire sur la surface du cristal. Ainsi, lorsque le cristal tourne, c'est toujours la même portion de la surface qui est éclairée.

Un compteur de Geiger est rendu solidaire du cristal, de façon à faire avec lui un angle égal à θ . Le cristal oscille donc autour d'une position moyenne faisant un angle égal à θ avec le faisceau incident (dont la divergence est de l'ordre du degré), à la même vitesse que le compteur (et non pas vitesse moitié, comme dans les spectromètres classiques).

Le cristal étant toujours relativement parfait, c'est toujours la même partie du compteur qui reçoit les rayons réfléchis (fig. 14).

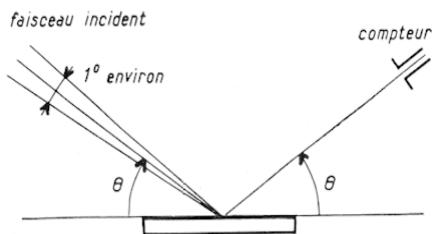


FIG. 14. — Mesure expérimentale du pouvoir réflecteur.

Le montage porte-échantillon a été remplacé par un montage de flexion circulaire (fig. 15).

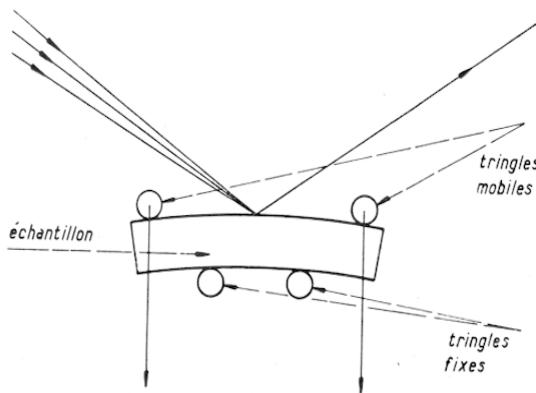


FIG. 15. — Dispositif de flexion circulaire.

Les efforts appliqués variaient de 5 à 850 g (rupture). Les échantillons avaient une épaisseur de 0,4 mm environ sur 10 × 20 mm environ.

Les courbures ont été calculées, connaissant le couple de flexion et les constantes élastiques du silicium.

Afin de faire des mesures absolues de PR, nous avons étalonné le faisceau direct avant chaque série de mesures, en plaçant le compteur, fixe, dans le faisceau direct, avec des feuilles d'argent ou d'aluminium d'absorption connue.

La vitesse de rotation ω étant connue, le PR est donné par : $PR = N\omega/N_0$,

N = nombre de coups comptés pendant un aller, à vitesse ω ;

N_0 = nombre de coups dans le faisceau direct pendant l'unité de temps.

N. B. — Nous avons fait attention à ce que le faisceau direct, lors de l'étalonnage, tombe dans la même partie du compteur que le faisceau réfléchi : il suffit pour cela de faire tourner le compteur exactement de 2θ par rapport à une réflexion, et non pas de rechercher l'intensité maximale dans le faisceau direct.

La précision de nos mesures de l'ordre de 5 %. Les erreurs semblent d'ailleurs venir surtout des instabilités du tube (tube scellé, mais dont l'échauffement semble déplacer périodiquement le foyer, donc le réglage du monochromateur).

b) Résultats expérimentaux.

On voit que l'accord entre expérience et résultats théoriques est excellent pour des courbures moyennes (de $2 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ à $5 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$). Remarquons que ce sont des mesures absolues et que tous les paramètres sont connus ; nous n'avions donc aucun paramètre à ajuster (fig. 16).

Lorsque le cristal n'est pas déformé (aucun effort appliqué), son pouvoir réflecteur est supérieur à la valeur calculée. Ceci s'explique aisément par la présence de dislocations et autres défauts, donc de zones fortement déformées.

Par contre, lorsque les courbures sont grandes, le PR mesuré est inférieur au PR théorique. De plus, les mesures sont moins reproductibles. Il est probable que nous avons alors des déformations plastiques avec déplacement de dislocations. Il est alors probable que les contraintes ne sont plus réparties uniformément.

Dans ces conditions, la courbe (fig. 13) étant convexe, le PR moyen est inférieur au PR qui correspondrait à la courbure moyenne.

Par contre, ceci ne se produit pas dans la zone centrale où le PR est fonction linéaire de la courbure.

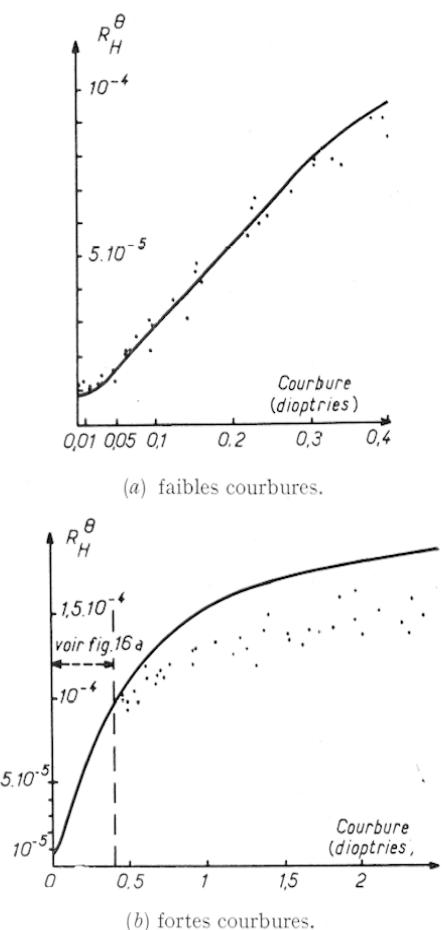


FIG. 16. — Comparaison entre pouvoirs réflecteurs théoriques et expérimentaux en fonction de la courbure (silicium — réflexion 400 — radiation MoK α)

CHAPITRE IV
SECTIONS EFFICACES
DE DISLOCATIONS
(CAS DE BRAGG SYMÉTRIQUE)

IV-1. — INTRODUCTION.

Nous ne nous proposons pas, dans le présent chapitre, de faire des calculs rigoureux, mais de trouver une approximation grossière de l'augmentation du pouvoir réflecteur d'un cristal provoquée par la présence d'un certain nombre de dislocations. Pour cela, nous allons définir la section efficace d'une dislocation isolée :

$$\sigma = \int \{PR(M) - PR(c=0)\} d\vec{M}^2 \quad (IV.1.1)$$

L'intégrale est, en principe, étendue à toute la surface du cristal, infinie en pratique.

PR(M) est une fonction compliquée du point M de la surface, mais nous admettons que :

$$PR(M) = PR\{c(M)\} \quad (IV.1.2)$$

où la fonction PR(c) est celle calculée aux chapitres II et III (fig. 13 en particulier).

c(M) est la valeur de c calculée au point M, d'après (II.8.11) :

$$c = \frac{\lambda}{\pi \Psi_H^2} \frac{\partial^2 W_k}{\partial x_i \partial x_j} s_{oi} s_{hi} (s_{hk} - s_{ok}). \quad (IV.1.3)$$

Ceci revient à admettre que chaque point de la surface réfléchit comme s'il était plongé dans un cristal ayant uniformément le même gradient de déformation. Ceci est faux au voisinage d'une dislocation, mais nous pouvons espérer qu'assez loin de celle-ci, les hypothèses sont grossièrement vérifiées.

IV-2. — EXPRESSION GÉNÉRALE DE σ .

Soit \vec{d} le vecteur unitaire porté par la ligne de dislocation. Il convient de distinguer ce vecteur du Burgers \vec{b} car ces deux vecteurs ne sont parallèles que pour une dislocation « vis ».

Avant d'entrer dans le détail de l'expression des déformations autour d'une dislocation, nous remarquerons les faits suivants :

Les dérivées secondes de \vec{W} (qui interviennent dans l'expression de (IV.1.3)) sont de la forme :

$$\frac{\partial^2 W_k}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{I}{r^2} \{W_{ii}^{k1} \cos 2\Phi + W_{ii}^{k2} \sin 2\Phi + W_{ij}^{k1} \cos 4\Phi + W_{ij}^{k2} \sin 4\Phi\} \quad (IV.2.1)$$

(en appelant r la distance du point M à la ligne de dislocation et Φ son angle polaire autour de la même ligne).

Nous nous limitons ici aux déformations élastiques du premier ordre en supposant, pour simplifier, le cristal élastiquement isotrope.

c est donc de la forme :

$$c = \frac{I}{r^2} \frac{\{c \cos 2\Phi + c^2 \sin 2\Phi + c^3 \cos 4\Phi + c^4 \sin 4\Phi\}}{f(\Phi)} \quad (IV.2.2)$$

D'autre part :

$$\frac{d \vec{M}^2}{\text{surface}} = \frac{r dr d\Phi}{n \cdot \vec{d}} \quad (\text{IV.2.3})$$

D'où :

$$\sigma = \frac{I}{n \cdot \vec{d}} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \mathcal{R}(c) r dr d\Phi \quad (\text{IV.2.4})$$

avec :

$$R_H^y(c) - R_H^y(0) = \mathcal{R}(c) \quad (\text{IV.2.5})$$

Cette intégrale pose quelques difficultés lorsqu'on essaie de la calculer directement car $\mathcal{R}(c)$ est, au voisinage de $c = 0$, de la forme (en admettant que $\mathcal{R}(c)$ soit dérivable pour $c = 0$) :

$$\mathcal{R}(c) = a c + b c^2 \dots$$

soit :

$$\frac{a f(\Phi)}{r^2} + \frac{b f^2(\Phi)}{r^4} + \dots$$

ce qui fait que notre intégrale ne converge pas.

Aussi poserons-nous, ce qui revient à modifier légèrement la définition de σ :

$$\sigma = \left| \frac{\Psi'_H}{(n \cdot \vec{d}) \sin 2\theta} \right| \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \sqrt{\frac{|f(\Phi)|}{r}} \mathcal{R}(c) r dr d\Phi \quad (\text{IV.2.6})$$

En posant :

$$\frac{\mathcal{R}(c) + \mathcal{R}(-c)}{2} = \mathcal{S}(c) \quad (\text{IV.2.7})$$

On trouve finalement :

$$\sigma = \left| \frac{\Psi'_H}{2(n \cdot \vec{d}) \sin 2\theta} \right| \int_0^\infty \frac{\mathcal{S}(c) dc}{c^2} \int_0^{2\pi} |f(\Phi)| d\Phi \quad (\text{IV.2.8})$$

Pour les détails du calcul voir Taupin (1964), par. V.2.

IV-3. — EXPRESSION DÉTAILLÉE DE σ .

Nous définirons un système d'axes orthonormés \vec{d}_i , liés à la dislocation. Nous prendrons \vec{d}_3 parallèle à la direction de la ligne de dislocation, et nous choisirons \vec{d}_1 et \vec{d}_2 tels que le vecteur de Burgers \vec{b} soit contenu dans le plan (\vec{d}_1, \vec{d}_3).

En comptant l'angle polaire Φ à partir de \vec{d}_1 , les composantes du déplacement \vec{W} sont données, dans le système \vec{d}_i , par les formules classiques (Read, 1953) :

$$W^1 = \frac{B^1}{2\pi} \left(\Phi + \frac{\sin 2\Phi}{4(I-v)} \right) \quad (\text{IV.3.1})$$

$$W^2 = -\frac{B^1}{2\pi} \left\{ \frac{I-2v}{2(I-v)} \text{Log} r + \frac{\cos 2\Phi}{4(I-v)} \right\} \quad (\text{IV.3.2})$$

$$W^3 = -\frac{2\pi}{B^3} \Phi \quad (\text{IV.3.3})$$

En dérivant ces expressions, nous trouvons finalement :

$$\sigma = \left| \frac{a\lambda}{8\pi^2(I-v)\cos\theta\Psi'_H} \right| \Sigma \cdot \frac{F}{n \cdot \vec{d}_3} \quad (\text{IV.3.4})$$

avec :

$$\Sigma = \int_0^\infty \frac{\mathcal{S}'(c) dc}{c^2} \quad (\text{IV.3.5})$$

et

$$F = \int_0^{2\pi} |U_{ij}^{kp} \Phi_p s_{H_i} s_{o_j} n_k| d\Phi \quad (\text{IV.3.6})$$

où s_{H_i} , s_{o_j} , n_k sont respectivement les composantes, dans le système \vec{d}_i , de \vec{s}_H (vecteur unitaire réfléchi), \vec{s}_o (vecteur unitaire incident) et \vec{n} (vecteur unitaire normal à la surface du cristal) et où :

$$\begin{aligned} \Phi_1 &= \cos 2\Phi, & \Phi_3 &= \sin 2\Phi, \\ \Phi_2 &= \cos 4\Phi, & \Phi_4 &= \sin 4\Phi. \end{aligned} \quad (\text{IV.3.7})$$

La matrice des U_{ij}^{kp} est donnée par le tableau I.

Dans ces expressions, seul $\frac{F}{n \cdot \vec{d}_3}$ fait intervenir la géométrie de la dislocation ; les autres termes ne dépendent que de la réflexion choisie.

Les intégrales Σ et F ne sont, en pratique, calculables que numériquement.

Le calcul de F ne pose aucun problème de principe. Pour une dislocation et une réflexion données, il n'est nécessaire de calculer le produit tensoriel qu'une fois, étant donné que seul Φ , dépend de Φ , par contre le calcul de Σ présente quelques difficultés du fait que $\mathcal{S}(c) = 0$ pour $c = 0$. Nous avons donc calculé la limite du rapport :

$$\frac{\mathcal{S}(c)}{c^2}$$

lorsque c tend vers zéro.

TABLEAU I.

Si l'on se rapporte au paragraphe IV.2., on voit que :

$$\lim_{c \rightarrow 0} \frac{\mathcal{S}'(c)}{c^2} = \frac{1}{2} \frac{d^2 \mathcal{R}'(c)}{dc^2} = \frac{1}{2} \frac{d^2}{dc^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{X} \mathbf{X}^* dy \quad (\text{IV.3.8})$$

soit encore :

$$\lim_{c \rightarrow 0} \frac{\mathcal{S}'(c)}{c^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial c^2} (\mathbf{X} \mathbf{X}^*) \right\} dy. \quad (\text{IV.3.9})$$

En développant cette expression il vient :

$$\lim_{c \rightarrow 0} \frac{\mathcal{S}'(c)}{c^2} = \int_{0}^{+\infty} \left\{ \text{part. réelle} \left(\mathbf{X}^* \frac{\partial^2 \mathbf{X}}{\partial c^2} \right) + \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial c} \right|^2 \right\} dy \quad (\text{IV.3.10})$$

$\partial^2 \mathbf{X} / \partial c^2$ et $\partial \mathbf{X} / \partial c$ sont déterminés par dérivation par rapport à c et à y de l'équation fondamentale (II.11.5).

Le calcul de Σ semble alors facile, malheureusement les autres valeurs de $\mathcal{S}'(c)$ obtenues directement dans les calculs du chapitre III sont très imprécises car obtenues en divisant par un nombre petit (c), la différence de deux quantités voisines :

$$R_H^y(O) \text{ et } 1/2 [R_H^y(c) + R_H^y(-c)].$$

Aussi les valeurs de Σ finalement obtenues doivent-elles être considérées comme de grossières approximations (sans doute de 10 à 30 % d'erreur).

IV.4. — NOMBRE DE DISLOCATIONS ET POUVOIR RÉFLECTEUR.

Nous nous proposons maintenant de trouver une expression du pouvoir réflecteur d'un cristal (cas de Bragg symétrique) en fonction du nombre de dislocations. Nous supposerons leur densité suffisamment petite pour que leurs contributions à l'augmentation du PR s'ajoutent simplement. L'expression ainsi trouvée sera évidemment fonction linéaire de la densité de dislocations, donc non bornée ; or nous savons, du moins expérimentalement, que le PR doit tendre vers une limite qui est le PR cinématique. Nous pouvons donc raisonnablement prétendre que l'approximation ainsi trouvée restera acceptable tant que

le PR qu'elle donnera sera nettement inférieur au PR cinématique. En effet, au-delà, on peut prévoir qualitativement ce qui se passera : les « images » des dislocations ne seront plus séparées et se recouvriront, et la contribution de l'ensemble sera inférieure à la somme des sections efficaces.

Nous envisagerons successivement plusieurs cas :

a) Toutes les lignes de dislocation sont parallèles et de même vecteur de Burgers.

Soit N leur nombre, par unité de surface *normale* aux lignes de dislocation ; lorsque N est suffisamment petit, on peut admettre que leurs contributions à l'augmentation du PR s'ajoutent. Dans ces conditions, cette augmentation du PR est donnée par :

$$\Delta P = N \sigma (\vec{n} \cdot \vec{d}_3) \quad (\text{IV.4.1})$$

(rappelons que \vec{n} est le vecteur unitaire normal à la surface et \vec{d}_3 le vecteur unitaire porté par la ligne de dislocation).

En remplaçant σ par sa valeur, d'après (IV.3.4) :

$$\Delta P = \left| \frac{a \lambda}{8 \pi^2 (1 - v) \cos \theta \Psi'_H} \right| \Sigma N_D F. \quad (\text{IV.4.2})$$

b) Toutes les dislocations ont même vecteur de Burgers, mais leurs lignes ont des directions aléatoires uniformément réparties.

Soit $N_D d \Omega$ le nombre de dislocations dont la direction est contenue dans l'élément d'angle solide de $d \Omega$ autour d'une direction \vec{D} , par unité de surface normale à \vec{D} . Les directions étant uniformément réparties, N_D ne dépend pas de \vec{D} . Dans ces conditions, ΔP est donné par :

$$\Delta P = \left| \frac{a \lambda}{8 \pi^2 (1 - v) \cos \theta \Psi'_H} \right| \Sigma N_D \int F(\vec{D}) d. \quad (\text{IV.4.3})$$

Cette intégrale est étendue à une demi-sphère puisque les directions des dislocations ne sont pas orientées.

La relation entre N_D et le nombre N_s de dislocations qui coupent la surface du cristal (par

unité de surface) est très simple à calculer ; en effet :

$$N_s = \int N_D (\vec{n} \cdot \vec{d}_3) d\Omega \quad (\text{IV.4.4})$$

(int. étendue à une demi-sphère)

soit :

$$N = \int_{\alpha=0}^{2\pi} \int_{\beta=0}^{\pi/2} \sin \alpha \cos \alpha d\alpha d\beta \quad \text{IV.4.5}$$

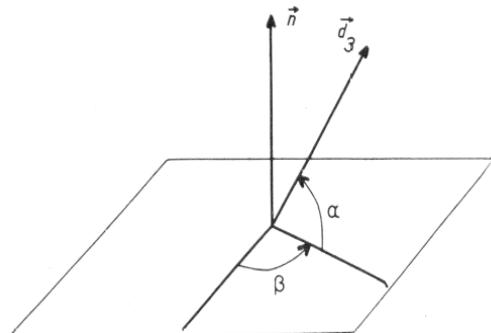


FIG. 17. — Définition de la direction d'une ligne de dislocation.

d'où :

$$N_s = \pi N_D \quad (\text{IV.4.6})$$

En posant :

$$F_{\text{moyen}} = \frac{1}{2\pi} \int_{1/2 \text{ sphère}} F(d_3) d\Omega \quad (\text{IV.4.7})$$

on a finalement :

$$\boxed{\Delta P = \left| \frac{a\lambda}{4\pi^2(1-v) \cos \theta \psi_H} \right| \sum N_s F_{\text{moyen}}} \quad (\text{IV.4.8})$$

c) Les vecteurs de Burgers sont différents.

On ne peut en général admettre que les vecteurs de Burgers soient uniformément répartis car en réalité ils prennent un très petit nombre de valeurs discontinues. Néanmoins la formule (IV.4.8) reste valable à condition de prendre pour F_{moyen} la valeur moyenne pour les diverses valeurs possibles du vecteur de Burgers.

TABLEAU II.

Sections efficaces des dislocations dans le silicium. Vecteurs de Burgers // (110).

SECTIONS EFFICACES MOYENNES POUR TOUTES DISLOCATIONS (110).

	MoK α //	MoK α \perp	CuK α //	CuK α \perp	FeK α //	FeK α \perp
III	$1,6440 \cdot 10^{-9}$	$1,6216 \cdot 10^{-9}$	$1,2128 \cdot 10^{-10}$	$1,0715 \cdot 10^{-10}$	$6,4727 \cdot 10^{-11}$	$5,1450 \cdot 10^{-11}$
220	$1,9735 \cdot 10^{-9}$	$1,7858 \cdot 10^{-9}$	$1,9510 \cdot 10^{-10}$	$9,6718 \cdot 11^{-11}$	$1,2813 \cdot 10^{-10}$	$3,8176 \cdot 10^{-11}$
400	$2,0099 \cdot 10^{-9}$	$1,6713 \cdot 10^{-9}$	$1,8967 \cdot 10^{-10}$	$4,8817 \cdot 10^{-11}$	$1,2914 \cdot 10^{-10}$	$2,6942 \cdot 10^{-13}$
333	$1,4235 \cdot 10^{-9}$	$1,2394 \cdot 10^{-9}$	$9,5594 \cdot 10^{-11}$	$2,5481 \cdot 10^{-12}$	$8,3087 \cdot 10^{-11}$	$5,3716 \cdot 10^{-11}$

SECTIONS EFFICACES MOYENNES POUR LES DEUX POLARISATIONS.

	MoK α	CuK α	FeK α
III	$1,6328 \cdot 10^{-9}$	$1,1421 \cdot 10^{-10}$	$5,8088 \cdot 10^{-11}$
220	$1,8796 \cdot 10^{-9}$	$1,4591 \cdot 10^{-10}$	$8,3154 \cdot 10^{-11}$
400	$1,8406 \cdot 10^{-9}$	$1,1924 \cdot 10^{-10}$	$6,4797 \cdot 10^{-11}$
333	$1,3315 \cdot 10^{-9}$	$4,9071 \cdot 10^{-11}$	$6,8401 \cdot 10^{-11}$

DENSITÉS DE DISLOCATIONS DONNANT UNE AUGMENTATION DE 100 % DU P. R.

	MoK α	CuK α	FeK α
III	$1,1388 \cdot 10^4$	$3,1927 \cdot 10^5$	$7,3355 \cdot 10^5$
220	$7,2384 \cdot 10^3$	$1,7552 \cdot 10^5$	$3,4417 \cdot 10^5$
400	$4,4118 \cdot 10^3$	$1,1378 \cdot 10^5$	$2,2828 \cdot 10^5$
333	$2,6828 \cdot 10^3$	$1,1574 \cdot 10^5$	$2,8248 \cdot 10^5$

DENSITÉS DE DISLOCATIONS CORRESPONDANT AU P. R. CINÉMATIQUE.

	MoK α	CuK α	FeK α
III	$3,0244 \cdot 10^5$	$1,8681 \cdot 10^6$	$2,6235 \cdot 10^6$
220	$2,2697 \cdot 10^5$	$1,1473 \cdot 10^6$	$1,3742 \cdot 10^6$
400	$1,1539 \cdot 10^5$	$6,1813 \cdot 10^5$	$9,2654 \cdot 10^5$
333	$3,9926 \cdot 10^4$	$4,1759 \cdot 10^5$	$5,6605 \cdot 10^5$

IV-5. — ÉTUDE EXPÉRIMENTALE.

Nous avons mesuré le pouvoir réflecteur de quelques cristaux de silicium taillés parallèlement à (100) à l'aide du montage précédemment décrit. Comme précédemment, nous avons utilisé la radiation MoK α afin d'avoir le maximum de contraste entre le cristal parfait et les cristaux imparfaits.

Les cristaux nous ont été fournis déjà attaqués, et par suite, nous n'avons eu qu'à compter les piqûres d'attaque au microscope pour connaître la densité de dislocations en diverses régions de chacun de ces cristaux. Ensuite une attaque violente faisait disparaître les piqûres de la surface (pour éviter des effets d'ombre).

Mais, si nous connaissons la densité des dislocations dans nos échantillons, leur orientation nous était inconnue et il était peu probable qu'elles soient uniformément réparties comme nous l'avons supposé dans la présente théorie. Afin d'éliminer, au moins partiellement, cet inconvénient, nous avons fait pour chaque cristal plusieurs mesures en le faisant tourner dans son plan et nous avons pris la moyenne. Nous avons trouvé les résultats suivants :

TABLEAU III.

DENSITÉ DE DISLOCATIONS (en cm^{-2})	POUVOIR RÉFLECTEUR
43 000	$7,45 \cdot 10^{-5}$
10 000	$2,02 \cdot 10^{-5}$
315	$0,97 \cdot 10^{-5}$
820	$1,00 \cdot 10^{-5}$

On trouvera (fig. 18) la comparaison entre ces résultats expérimentaux et la droite théorique calculée d'après les considérations précédentes.

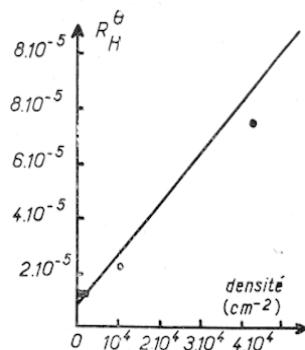


FIG. 18. — Comparaison entre pouvoirs réflecteurs théoriques et expérimentaux en fonction de la densité de dislocations. (réflexion 400 — silicium — radiation MoK α).

L'accord est inespéré, vu l'imprécision du comptage de ces dislocations et les nombreuses approximations que nous avons faites dans la présente théorie.

IV-6. — COMPARAISON AVEC LES MESURES FAITES PAR D'AUTRES AUTEURS.

Patel, Wagner et Moss (1962) ont fait des mesures de pouvoirs réflecteurs de cristaux de silicium contenant des quantités variables de dislocations. Nous reproduisons ci-après leurs résultats ainsi que les valeurs calculées théoriquement par notre méthode.

TABLEAU IV.

Radiation MoK α , réflexion 111.

DENSITÉ	PR EXPÉRIMENTAL	PR THÉORIQUE
100	$1,82 \cdot 10^{-5}$	$1,86 \cdot 10^{-5}$
$2 \cdot 10^4$	$3,25 \cdot 10^{-5}$	$5,13 \cdot 10^{-5}$
$3 \cdot 10^5$	$4,03 \cdot 10^{-5}$	$50,9 \cdot 10^{-5}$

Radiation MoK α , réflexion 333.

DENSITÉ	PR EXPÉRIMENTAL	PR THÉORIQUE
100	$0,49 \cdot 10^{-5}$	$0,38 \cdot 10^{-5}$
$2 \cdot 10^4$	$0,963 \cdot 10^{-5}$	$3,05 \cdot 10^{-5}$
$3 \cdot 10^5$	$1,46 \cdot 10^{-5}$	$40,7 \cdot 10^{-5}$

Radiation CuK α , réflexion 111.

DENSITÉ	PR EXPÉRIMENTAL	PR THÉORIQUE
100	$4,21 \cdot 10^{-5}$	$3,66 \cdot 10^{-5}$
$2 \cdot 10^4$	$4,68 \cdot 10^{-5}$	$3,89 \cdot 10^{-5}$
$3 \cdot 10^5$	$4,65 \cdot 10^{-5}$	$7,11 \cdot 10^{-5}$

Radiation CuK α , réflexion 333.

DENSITÉ	PR EXPÉRIMENTAL	PR THÉORIQUE
100	$1,11 \cdot 10^{-5}$	$1,07 \cdot 10^{-5}$
$2 \cdot 10^4$	$1,41 \cdot 10^{-5}$	$1,25 \cdot 10^{-5}$
$3 \cdot 10^5$	$1,34 \cdot 10^{-5}$	$3,85 \cdot 10^{-5}$

L'accord entre nos prévisions et ces résultats expérimentaux est nettement moins bon qu'avec nos mesures personnelles. Ceci peut être dû au fait que les auteurs n'ont pas fait tourner les échantillons dans leur plan, ce qui donne une beaucoup plus grande importance à l'orientation des dislocations.

On remarque d'autre part que, pour le cristal de densité $2 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-2}$, les résultats expérimentaux sont inférieurs aux prévisions pour la radiation MoK α alors qu'ils sont supérieurs pour la radiation CuK α . Ceci peut évidemment s'expliquer par le fait que les auteurs n'ont pas remis les cristaux au même endroit dans les deux cas ;

on peut néanmoins remarquer que la présente théorie considère, quelle que soit la densité de dislocations, que la contribution de chacune d'elles est la même que si elle était isolée. En réalité, il convient de limiter le domaine d'intégration (IV.1.1) à une distance de l'ordre de la moitié de celle qui sépare deux dislocations voisines. Si nous considérons une densité de $2 \cdot 10^4$, la distance moyenne entre dislocations est de l'ordre de 70μ . Nous avons essayé, afin de voir l'influence de cette restriction, de recalculer les pouvoirs réflecteurs en limitant l'intégration à une distance de 35μ (en pratique, nous avons borné les limites d'intégration de Σ (IV.3.5)). Nous avons trouvé que les sections efficaces étaient assez nettement réduites, dans le cas du molybdène et dans le cas des réflexions faibles, c'est-à-dire dans les cas où la contribution des faibles distorsions était grande. Nous avons trouvé :

	EXPÉRIMENTAL	THÉORIQUE
MoK α 111.....	$3,25 \cdot 10^{-5}$	$4,29 \cdot 10^{-5}$
MoK α 333.....	$0,963 \cdot 10^{-5}$	$1,51 \cdot 10^{-5}$
CuK α 111.....	$4,68 \cdot 10^{-5}$	$3,89 \cdot 10^{-5}$
CuK α 333.....	$1,41 \cdot 10^{-5}$	$1,22 \cdot 10^{-5}$

Quant aux mesures concernant le cristal de densité $3 \cdot 10^5$, elles sont en net désaccord avec notre théorie dans le cas du molybdène, mais il est alors certain que les images des dislocations se recouvrent. Par contre, l'ordre de grandeur n'est pas trop mauvais pour la radiation du cuivre et ceci s'explique encore par le fait que dans ce cas, les contributions des dislocations sont beaucoup plus concentrées au centre (du fait de la moindre sensibilité de cctc radiation aux faibles courbures) et que leur recouvrement est moindre.

IV-7. — APPLICATIONS PRATIQUES.

La première application pratique de cette étude qui vient à l'esprit est à la mesure de la densité de dislocations dans les cristaux. Alors que la méthode classique nécessite un polissage soigné suivi d'une attaque assez délicate à mettre au point, auxquels s'ajoute un comptage au microscope particulièrement pénible, la mesure d'un pouvoir réflecteur absolu peut se faire en une demi-heure environ, pourvu que l'on dispose d'une face de cristal à peu près plane. Une attaque est également nécessaire, mais étant donné qu'elle ne doit pas être sélective, une attaque violente mais rapide fait très bien l'affaire.

Afin d'apprécier la sensibilité de cette méthode, nous avons calculé (tableau II) le nombre de dislocations correspondant à un pouvoir réflecteur double de celui du cristal parfait. Les calculs ont été faits en prenant, pour chaque réflexion du silicium, la moyenne des PR et des sections efficaces correspondant aux deux polarisations principales.

On trouvera aussi dans le même tableau les valeurs des densités de dislocations qui correspondent, si notre présente approximation était encore valable, au pouvoir réflecteur cinématique ; elles donnent en pratique un ordre de grandeur de la limite supérieure d'utilisation de cette méthode.

On remarque (tableau II) que le maximum de sensibilité correspond non pas aux réflexions les plus intenses, mais aux plus faibles (333). Par contre le domaine d'utilisation est d'autant plus vaste que la réflexion est plus intense et que l'absorption est plus faible (maximum de contraste entre cristal parfait et cristal idéalement imparfait).

Il est possible de trouver une explication intuitive à ce phénomène : si les rayons X ne « visitent » qu'une très faible épaisseur de cristal, les déphasages dus aux imperfections seront négligeables et l'intensité réfléchie n'en sera pas affectée. Or c'est ce qui se produit pour les réflexions intenses pour lesquelles la distance d'extinction est petite. Par contre, si une réflexion est faible, l'épaisseur « visitée » sera grande et l'influence des défauts considérables, à condition toutefois que l'absorption reste faible. Il y a donc en pratique un compromis à trouver entre les raies les plus intenses et les réflexions interdites.

On peut constater (tableau II) que les domaines d'utilisation se recouvrent de manière satisfaisante, surtout si les échantillons sont taillés suivant 111, auquel cas on dispose de 6 possibilités s'étendant de 350 à quelques millions de dislocations par centimètre carré (en admettant que les mesures de PR permettent de distinguer une augmentation de 10 % du PR).

Néanmoins, on ne peut espérer voir moins de quelques centaines de dislocations par centimètre carré, ce qui est déjà énorme pour certaines utilisations. La présente méthode est en particulier inutilisable pour vérifier l'absence complète de dislocations dans un échantillon. Dans ce dernier cas, il faut utiliser des méthodes photographiques (Lang).

Une deuxième application, corollaire de la première, concerne le cas où l'on veut *ne pas voir* les défauts, c'est-à-dire assimiler le cristal à un

cristal parfait, même s'il ne l'est pas : on a alors intérêt à utiliser les réflexions les plus intenses (111 et la radiation CuK α par exemple).

scopie électronique ou par la méthode de Lang (1958). Pour comparer nos calculs avec ces dernières méthodes, il faudrait intégrer les résultats sur toute la largeur d'une réflexion, ce que nous n'envisagerons pas ici.

CHAPITRE V

CALCUL DE L'IMAGE D'UNE DISLOCATION (CAS DE LAUE SYMÉTRIQUE)

V-1. — INTRODUCTION.

Nous nous proposons, dans le présent chapitre, d'étudier plus en détail l'image produite par une dislocation isolée. Il est bien évident qu'en réalité les considérations du chapitre II ne s'appliquent pas au cas d'une dislocation ; en particulier la quantité :

$$f = \frac{\partial^2 (\vec{W} \cdot \vec{B}_H)}{\partial x_i \partial x_j} s_{oi} s_{Hj} \quad (V.1.1)$$

dépend visiblement de 2 ou 3 coordonnées d'espace (cf. § II.3) et qu'il est par conséquent impossible de définir un système d'ondes « propres » au voisinage d'une dislocation, sauf pour des orientations très particulières de celle-ci.

En conséquence, nous devons nous reporter

V-2. — NOUVELLE FORMULATION DU SYSTÈME FONDAMENTAL.

Ce qui nous intéresse le plus actuellement est non pas le phénomène global (diffraction des rayons X par une portion de cristal contenant une dislocation) mais plutôt la perturbation qu'apporte cette dislocation par rapport à un cristal parfait qui serait placé dans les mêmes conditions.

Il est, d'autre part, commode de manier des fonctions qui, dans les régions non perturbées (c'est-à-dire à l'infini) tendent vers des constantes simples (0 ou 1 par exemple), ce qui n'est pas le cas pour D_o ou D_H , même pour un cristal parfait.

Nous choisirons donc un « état de référence » (par exemple un cristal parfait placé dans les mêmes conditions) et nous étudierons le rapport des amplitudes. Nous appellerons donc \bar{D}_o et \bar{D}_H les valeurs que prennent respectivement D_o et D_H dans l'état de référence. Elles satisfont donc aux équations :

$$i \frac{\partial \bar{D}_H}{\partial A_H} = \left(\frac{\alpha_H(O)}{\Psi'_H} - \frac{\Psi_o}{\Psi'_H} \right) \bar{D}_H - h \bar{D}_o - i \frac{\Psi'_H}{2} \bar{D}_H \Delta_A (\pi v) \quad (V.2.1a)$$

$$i \frac{\partial \bar{D}_o}{\partial A_o} = \left(- \frac{\Psi_o}{\Psi'_H} \right) \bar{D}_o - h \bar{D}_H - i \frac{\Psi'_H}{2} \bar{D}_o \Delta_A (\pi v) \quad (V.2.1b)$$

au système général (I.6.4 et 5 ou, mieux, I.7.21 a et b).

Devant la relative complexité des déformations introduites par une dislocation, nous avons préféré, dans la présente étude, nous limiter au cas de Laue symétrique.

Il est bien évident cependant qu'aucun obstacle majeur ne s'oppose à une étude plus générale, si ce n'est la complexité des calculs.

Les calculs que nous ferons concerneront un cristal éclairé par un faisceau rigoureusement parallèle et monochromatique. Les expériences qui devront leur être comparées sont donc essentiellement celles faites avec un double spectromètre (Authier, 1961) plutôt que celles faites en micro-

en posant :

$$h = 1 + i \times = \Psi_H / \Psi'_H. \quad (V.2.2)$$

Nous poserons maintenant :

$$T_o = D_o / \bar{D}_o; \quad T_H = D_H / \bar{D}_H \quad (V.2.3)$$

et :

$$\bar{X} = \bar{D}_H / \bar{D}_o. \quad (V.2.4)$$

En divisant respectivement (I.7.21 b) et (I.7.21 b) par D_H et \bar{D}_o , (V.2.1 a) et (V.2.1 b) par \bar{D}_H et \bar{D}_o , et en retranchant membre à membre, il vient :

$$i \frac{\partial T_H}{\partial A_H} = T_H \left\{ 2 \frac{\partial (\pi \vec{W} \cdot \vec{B}_H)}{\partial A_H} - i \frac{\Psi'_H}{2} \Delta_A (\pi \vec{W} \cdot \vec{B}_H) \right\} + \frac{h}{\bar{X}} (T_H - T_o) \quad (V.2.5 \ a)$$

$$i \frac{\partial T_o}{\partial A_o} = h \bar{X} (T_o - T_H). \quad (V.2.5 \ b)$$

Du fait même de leur définition, il est évident que l'écart entre T_o (ou T_H) et l'unité seront une mesure de la perturbation apportée par la dislocation.

Remarque. Nous avons établi le système en « comparant » un cristal perturbé à un cristal parfait placé dans les mêmes conditions. Nous pouvons maintenant considérer que les deux cristaux reçoivent des ondes de même forme, avec la même orientation, mais avec des répartitions différentes (nous négligeons la diffraction de Fresnel).

Pourvu que les (πv) puissent être considérés comme identiques, le système (V.2.5) est encore valable.

La conséquence est que nous pourrons prendre comme référence n'importe quel état du cristal parfait correspondant à la même forme et direction de propagation de l'onde incidente.

De même ceci nous permettra de comparer de façon « expressive » deux répartitions d'ondes dans un cristal parfait (par exemple : comparaison d'une onde plane limitée et d'une autre illimitée).

V-3. — RAPPEL DE QUELQUES PROPRIÉTÉS DU CRISTAL PARFAIT.

CHOIX DE L'ÉTAT DE RÉFÉRENCE (ONDES PLANES)

Nous introduirons deux coordonnées d'espace différentes des A_o et A_H :

$$A = A_H + A_o \quad (\text{cf. II.8.7}) \quad (V.3.1)$$

$$B = A_H - A_o \quad (V.3.2)$$

Dans un cristal parfait ne recevant que des ondes planes, \bar{D}_H et \bar{D}_o ne dépendent que de A . Le système (V.2.1) devient alors :

$$i \frac{d \bar{D}_H}{d A} = \left\{ \frac{\alpha_H}{\Psi'_H} - \frac{\Psi_o}{\Psi'_H} \right\} \bar{D}_H - h \bar{D}_o \quad (V.3.3 \ a)$$

$$i \frac{d \bar{D}_o}{d A} = - \frac{\Psi'_H}{\Psi'_H} \bar{D}_o - h \bar{D}_H. \quad (V.3.3 \ b)$$

En divisant respectivement par \bar{D}_H et \bar{D}_o et

en retranchant membre à membre, on trouve :

$$i \frac{d \bar{X}}{d A} = h \bar{X}^2 - 2y \bar{X} - h, \quad (V.3.4)$$

équation dans laquelle nous avons posé :

$$y = - \frac{\alpha_H}{2 \Psi'_H} \quad (\text{cf. II.8.5}). \quad (V.3.5)$$

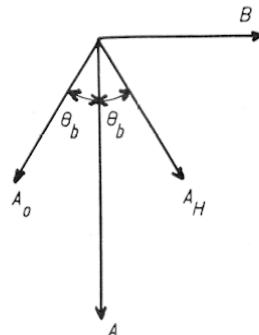


FIG. 19. — Relation entre les systèmes d'axes (A_o, A_H) et (A, B) .

Pour résoudre l'équation (V.3.4) qui est à rapprocher de (II.10.4), un calcul simple conduit à :

$$\frac{\bar{X} - \bar{X}_1}{\bar{X} - \bar{X}_2} = K e^{-2iA\sqrt{y^2 + h^2}} \quad (V.3.6)$$

Nous avons posé :

$$\bar{X}_1 = \frac{y + \sqrt{y^2 + h^2}}{h} \quad (V.3.7 \ a)$$

$$\bar{X}_2 = \frac{y - \sqrt{y^2 + h^2}}{h} \quad (V.3.7 \ b)$$

Convenons que la partie imaginaire du radical est du *signe opposé* à celui de Ψ'_H : rappelons également que, lorsque Ψ'_H est négatif, A croît de la surface d'entrée vers la surface de sortie des rayons. C'est-à-dire, lorsqu'on s'éloigne de la face d'entrée :

$$A \rightarrow -\Psi'_H \cdot \infty \quad (V.3.8)$$

par suite, la partie réelle de l'exposant de (V.3.6) tend vers $+\infty$.

L'effet de notre convention de signe pour $\sqrt{y^2 + h^2}$ est donc que \bar{X} tendra toujours vers \bar{X}_2 .

Le cas $\bar{X} = \bar{X}_1$ ou \bar{X}_2 correspond à l'existence d'un seul « champ d'onde » dans le cristal. \bar{X}_2 correspond donc à celui des deux « champs d'onde » qui est le moins absorbé. Ce cas est physiquement important car il se produit chaque fois que les rayons X doivent traverser une épaisseur importante de matière (effet Borrman) ; il présente l'avantage d'être mathématiquement simple : \bar{X}_2 est constant. Aussi l'avons-nous choisi comme « état de référence » dans la suite de ce chapitre. Nous aurons donc :

$$\bar{X} = \frac{y - \sqrt{y^2 + h^2}}{h} \quad (V.3.9)$$

$$\frac{1}{\bar{X}} = -\frac{y + \sqrt{y^2 + h^2}}{h} \quad (V.3.10)$$

D'où la nouvelle expression de (V.2.5) :

En reportant dans (V.3.3) la valeur de \bar{X} , on trouve :

$$\bar{D}_H = \bar{D}_H (A = A_E) \cdot e^{i(A - A_E) \left(\frac{\Psi_o}{\Psi_H} + y - \sqrt{y^2 + h^2} \right)} \quad (V.3.14a)$$

$$\bar{D}_o = \bar{D}_o (A = A_E) \cdot e^{i(A - A_E) \left(\frac{\Psi_o}{\Psi_H} + y - \sqrt{y^2 + h^2} \right)} \quad (V.3.14b)$$

Il suffit alors de se reporter aux définitions (V.2.3) de T_o et T_H pour retrouver les valeurs de D_o et D_H .

VI-4. — RÉSOLUTION APPROCHÉE DE (V.3.11) AU VOISINAGE IMMÉDIAT D'UNE DISLOCATION.

\vec{W} est une fonction multiforme avec un point singulier situé sur la dislocation (cf. IV.3.1, 2, 3). Par suite, la quantité :

$$Y_H = \frac{\partial (\pi \vec{W} \cdot \vec{B}_H)}{\partial A_H} - i \frac{\Psi_H}{4} \Delta_A (\pi \vec{W} \cdot \vec{B}_H) \quad (V.4.1)$$

$$i \frac{\partial T_H}{\partial A_H} = T_H \left[2 \frac{\partial (\pi \vec{W} \cdot \vec{B}_H)}{\partial A_H} - i \frac{\Psi_H}{2} \Delta_A (\pi \vec{W} \cdot \vec{B}_H) \right] + (y + \sqrt{y^2 + h^2}) (T_o - T_H) \quad (V.3.11a)$$

$$i \frac{\partial T_o}{\partial A_o} = (y - \sqrt{y^2 + h^2}) (T_o - T_H). \quad (V.3.11b)$$

C'est ce système que nous résoudrons lors du calcul pratique de l'image d'une dislocation. Les conditions aux limites sont en général assez simples. En particulier, lorsque la dislocation est située assez profondément pour qu'un seul champ d'onde lui parvienne :

$$T_o = T_H = 1 \text{ pour } A \ll 0 \quad (V.3.12)$$

(nous prenons l'origine des axes A sur la dislocation).

Si par contre, elle est située près de la surface d'entrée ($A = A_E$), nous prendrons :

$$T_o = 1, T_H = 0 \text{ pour } A = A_E. \quad (V.3.13)$$

Remarquons que le choix de la valeur 1 est arbitraire, les équations étant linéaires en D_H et D_o .

Pour terminer ce paragraphe, nous indiquerons la formule qui permet, après résolution de (V.3.11), de remonter aux valeurs de D_H et D_o .

devient infini sur la ligne de dislocation. On peut alors négliger dans (V.3.11) les autres termes. Il reste alors :

$$i \frac{\partial T_H}{\partial A_H} = 2 T_H Y_H. \quad (V.4.2)$$

D'où une approximation permettant de calculer T_H en M' connaissant T_H en M situé sur la même droite $A_o = \text{Cte}$ (fig. 20) :

$$T_H(M') = T_H(M) e^{-2\pi \vec{B}_H \cdot \{\vec{W}(M) - \vec{W}(M')\}} \\ - \frac{\Psi_H}{2} \int_M^{M'} \Delta_A (\vec{W} \cdot \vec{B}_H) dA_H \quad (V.4.3)$$

Remarquons que \vec{W} est multiforme et défini à \vec{b} (vecteur de Burgers) près ; or, si la réflexion H est permise, ce que nous supposons, la projection de \vec{b} sur \vec{B}_H est nécessairement un nombre

entier de fois l'intervalle d_H ; le produit $\vec{b} \cdot \vec{B}_H$ est donc un nombre entier et, par suite, la fonction :

$$e^{-i 2 \pi \vec{B}_H \cdot \vec{W}} \quad (V.4.4)$$

devient uniforme.

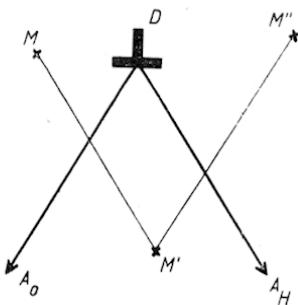


FIG. 20. — Résolution en M' connaissant M et M'' .

Ceci justifie donc a posteriori la liberté que nous avons prise avec la rigueur mathématique en appliquant à des fonctions multiformes un système d'équations obtenues en supposant bornées et petites les dérivées. Il est certes évident que les calculs que nous ferons seront faux au voisinage immédiat de la dislocation, mais nous pouvons raisonnablement espérer que l'influence de cette région est faible et que les résultats seront valables pour le reste du cristal.

En ce qui concerne T_o , nous avons admis qu'il restait constant sur une même droite $A_H = \text{Cte}$, c'est-à-dire que :

$$T_o(M') = T_o(M''). \quad (V.4.5)$$

On peut maintenant se demander quelle est la signification des approximations de ce présent paragraphe. Il est facile de voir qu'elles reviennent à négliger les termes $(T_H - T_o)$, c'est-à-dire les termes qui résultent des interactions entre onde incidente et onde réfléchie, c'est-à-dire encore que nous négligeons l'influence de la matière au voisinage de la dislocation. Physiquement, cela paraît assez légitime quand on remarque que cette région est excessivement perturbée et, sauf exception, très éloignée de la condition de Bragg et que, par conséquent, l'interaction entre les ondes y est effectivement négligeable.

Ce que nous faisons consiste simplement à faire correctement les calculs de phase, afin de pouvoir reprendre valablement les calculs lors de la rentrée dans des régions moins perturbées.

V-5. — CAS PARTICULIER : DISLOCATION COIN.

Nous nous contenterons ici de donner les expressions des quantités :

$$(2 \pi \vec{B}_H \cdot \vec{W}) \text{ et } \frac{\partial}{\partial A_H} (2 \pi \vec{B}_H \cdot \vec{W})$$

dont nous avons besoin lors de la résolution numérique de (V.3.11), dans le cas d'une dislocation coin dont le vecteur de Burgers est parallèle ou perpendiculaire aux plans réflecteurs. Nous partirons des équations (IV.3.1) et suivantes en faisant un changement convenable de coordonnées pour passer au système (A, B). Le laplacien décroît beaucoup plus vite que l'autre terme lorsqu'on s'éloigne de la dislocation ; aussi l'avons-nous négligé dans les présents calculs. Nous nous réservons d'étudier son influence au cours d'une étude ultérieure.

a) Vecteur de Burgers \vec{b} parallèle à \vec{B}_H (c'est-à-dire à l'axe B).

En se reportant à la figure 21 on voit que l'angle polaire Φ est donné par :

$$\Phi = \text{arctg} \left(-\frac{A \cos \theta}{B \sin \theta} \right) \quad (V.5.1)$$

ou, mieux :

$$\Phi = \text{Arg} (B \sin \theta, -A \cos \theta) \quad (V.5.2)$$

en convenant d'appeler $\text{Arg} (x, y)$ l'angle que fait le vecteur de composantes x et y avec l'axe

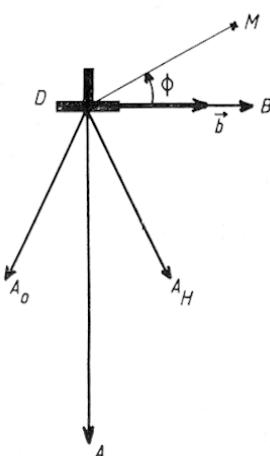


FIG. 21. — Définition de Φ lorsque $\vec{b} \parallel \vec{B}_H$.

des x , cet angle étant défini à 2π près (contrairement à l'arctg.). (IV.3.1) donne alors :

$$2\pi \vec{B}_H \cdot \vec{W} = (\bar{b} \bar{B}_H) \left\{ \text{Arg} (B \sin \theta, -A \cos \theta) - \frac{AB \sin^2 \theta}{4(\iota - v)(A^2 \cos^2 \theta + B^2 \sin^2 \theta)^2} \right\} \quad (\text{V.5.3})$$

d'où :

$$Y_H = \frac{\partial (\pi \vec{B}_H \cdot \vec{W})}{\partial A_H} = \bar{b} \bar{B}_H \frac{(A - B) \sin \theta \cos \theta \{A^2 \cos^2 \theta (\iota - 2v) + B^2 \sin^2 \theta (3 - 2v)\}}{4(\iota - v)(A^2 \cos^2 \theta + B^2 \sin^2 \theta)^2} \quad (\text{V.5.4})$$

Nota. Nous avons appelé \bar{b} et \bar{B}_H les mesures algébriques des vecteurs \vec{b} et \vec{B}_H sur leurs axes respectifs.

On remarquera que, dans ce cas, les surfaces réticulaires sont continues et que $\vec{W} \cdot \vec{B}_H$ n'est plus multiforme.

b) Vecteur de Burgers parallèle aux plans réflecteurs.

La figure 22 montre que :

$$\Phi = \text{Arg} (A \cos \theta, B \sin \theta).$$

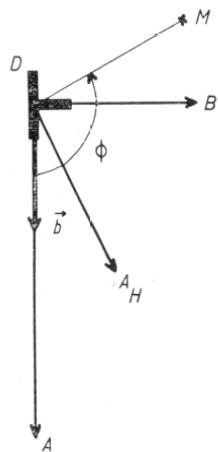


FIG. 22. — Définition de Φ lorsque $b \neq A \vee B$.

(IV.3.2) devient alors :

V-6. — RÉSULTATS.

On trouvera, fig. 23 et suivantes, quelques résultats calculés par une méthode de « pas à pas » à deux dimensions. Ces figures représentent, en courbes de niveau, les valeurs de $|T_0^2|$ ou $|T_H^2|$. L'axe A (profondeurs croissantes) est vertical et l'axe B (transversal) horizontal.

Ces courbes ayant été directement produites par l'imprimante de l'ordinateur 1107 de la Faculté d'Orsay, nous avons été obligés de donner une倾inclusion constante aux directions incidente et réfléchie (axes A_0 et A_H) ; il s'ensuit que les échelles horizontale et verticale sont différentes. Le quadrillage correspond à l'unité de longueur du système de coordonnées réduites, soit :

$$-\frac{\lambda}{\pi \psi'_H}.$$

On remarquera que les figures 23 et 24 qui correspondent respectivement à T_0 et T_H dans le

$$2\pi \vec{W} \cdot \vec{B}_H = -\frac{\bar{b} \bar{B}_H}{4(\iota - v)} \left\{ (\iota - 2v) \log r^2 + \frac{A^2 \cos^2 \theta - B^2 \sin^2 \theta}{r^2} \right\} \quad (\text{V.5.5})$$

avec : $r^2 = A^2 \cos^2 \theta + B^2 \sin^2 \theta$. (V.5.6)

D'où :

cas d'une dislocation située à une grande profondeur, donc ne recevant qu'un seul champ d'onde, sont à peu près symétriques l'une par

$$Y_H = \frac{\partial (\pi \vec{W} \cdot \vec{B}_H)}{\partial A_H} = \frac{(\bar{b} \bar{B}_H) (A^3 \cos^4 \theta (2v - \iota) + A^2 B \cos^2 \theta \sin^2 \theta (2v + \iota) + AB^2 \cos^2 \theta \sin^2 \theta (2v + 3) + B^3 \sin^4 \theta (2v - \iota))}{4(\iota - v)(A^2 \cos^2 \theta + B^2 \sin^2 \theta)^2} \quad (\text{V.5.7})$$

rapport à l'autre. Il est facile de voir qu'elles devraient l'être rigoureusement puisque, lorsque $y = 0$, le champ d'onde se propage suivant une direction verticale et que le plan de symétrie de la dislocation est également vertical. Les écarts à la symétrie nous donnent donc une mesure de la précision de notre méthode de calcul.

Remarquons en effet que notre système fondamental n'est pas symétrique car l'onde o est particularisée par rapport aux autres et, en particulier, que sa phase dans le vide est prise comme référence. Les résultats que nous devons obtenir ne sont donc symétriques qu'en module et il est alors évident que les erreurs n'ont aucune raison d'être symétriques. En se reportant au paragraphe V.4, il est facile de mettre en évidence que les phases sont nettement différentes entre l'onde o et l'onde H ; en effet, au voisinage immédiat de la dislocation, on peut voir que la phase de T_H varie très rapidement alors que celle de T_o est pratiquement constante.

La première chose qui apparaît sur ces figures est l'allure oscillante des intensités. Il s'agit là d'un phénomène de battement bien connu entre les deux champs d'onde (Pendellösung); on peut l'interpréter physiquement ici en disant que le second champ d'onde est « réveillé » par la présence du défaut, lequel perturbe l'état d'équilibre que constitue l'existence d'un seul champ d'onde.

On remarquera en particulier, en comparant les figures 25 et 26 relatives aux radiations $MoK\alpha$ et $FeK\alpha$ respectivement, que ces oscillations s'amortissent d'autant plus vite que le coefficient d'absorption est grand.

Ces oscillations sont en pratique assez rarement observées, sauf dans le cas de dislocations proches de la surface inférieure du cristal ou, ce qui revient au même, dans le cas d'échantillons assez minces. Elles ont pu néanmoins être observées, en particulier par Authier et Lang (1964). On remarquera que certaines dislocations sont nettement ponctuées, indépendamment des franges d'égale épaisseur, d'un seul côté. Ces oscillations sont également visibles sur certaines photos prises par la méthode de Lang; l'intensité y est alors intégrée mais il y a néanmoins un certain accord entre les phases des oscillations qui restent faiblement visibles à côté de l'image directe des dislocations (Authier, 1964).

On constate, d'autre part, à l'aplomb de la dislocation, une ombre très marquée alors qu'il y a accumulation de lumière sur un bord, puis sur les deux. On retrouve encore ici des phénomènes de contraste « noir-blanc » et « noir-blanc-

noir » prévus qualitativement par plusieurs auteurs (Authier, 1961; Kambe, 1963; Howie et Whelan, 1961, 1962) et souvent observés tant en rayons X qu'en microscopie électronique. C'est ce que l'on convient habituellement de nommer « image dynamique » de la dislocation, par opposition à l'image directe, essentiellement lumineuse, due à la réflexion des rayons situés hors du domaine de réflexion. Ce contraste a été observé en particulier par Authier (1961). On remarquera sur ses photos de nombreuses images dynamiques de largeurs différentes. Ces différences de largeurs sont dues aux différentes distances séparant les dislocations de la face de sortie: on remarquera en effet sur les figures 23, 24, 25 et 26 que l'écart entre les zones noires (c'est-à-dire lumineuses) croît avec l'éloignement de la dislocation, tout en restant nettement inférieure à l'écartement des deux directions o et H . On peut également constater que le trajet de la lumière est courbe au voisinage de la dislocation, mais qu'il tend vers la verticale (direction de propagation du champ d'onde initial).

La figure 25 relative à la radiation du molybde est un peu différente; ceci est dû au fait que l'angle de Bragg est petit (10°) et que, par suite, la figure est considérablement dilatée horizontalement. De plus, l'absorption étant très faible, le deuxième champ d'onde est peu amorti.

Les figures 27 et 28 représentent les résultats calculés pour $y = 1$, c'est-à-dire à la limite de la zone de réflexion totale. On sait que l'on a dans ce cas une dissymétrie, même dans le cristal parfait, entre l'onde O et l'onde H . En effet, les équations (V.3.9) et (V.3.10) nous permettent de calculer le rapport des amplitudes des ondes o et H . Nous trouvons :

$$\frac{\bar{D}_o^2}{\bar{D}_H^2} = \left| \frac{1 + \sqrt{1 + (1 + ik)^2}}{(1 + ik)} \right|^2 \simeq 4.5 \quad (V.6.1)$$

La ligne 27 correspondant à l'onde o représente donc le champ clair (lumineux) et la figure 28 le champ sombre. Alors que le champ clair est peu contrasté (léger contraste « noir-blanc »), le champ sombre montre une ponctuation lumineuse très intense, se propageant approximativement dans la direction normale de l'onde H . Nous retrouverons donc ici un cas limite entre l'image dynamique (photos prises à l'angle de Bragg rigoureux) et l'image directe due à l'ensemble des rayons et surtout ceux situés hors de la réflexion.

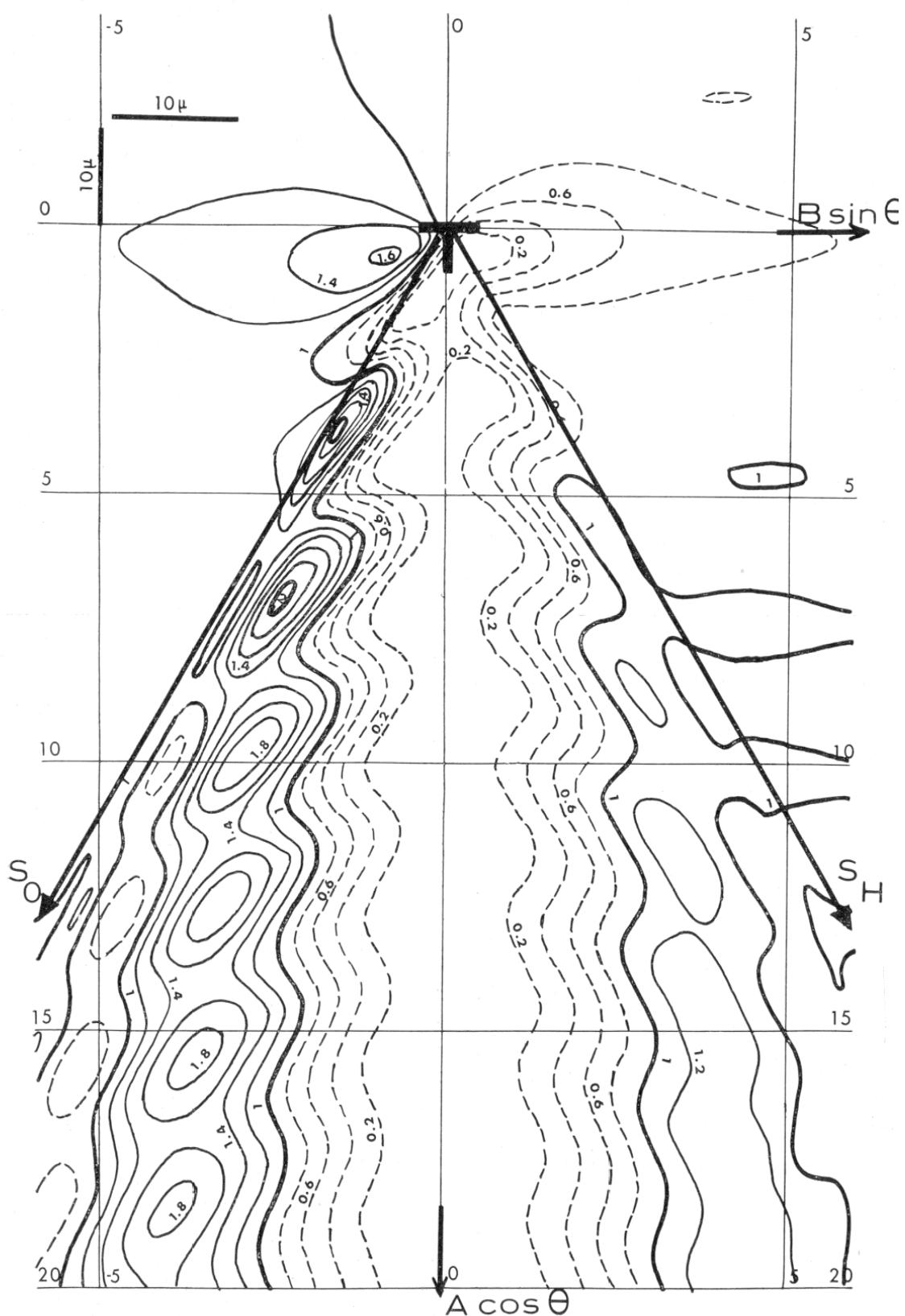


FIG. 23. — Intensité de l'onde incidente $|T_0|^2$ (silicium — réflexion 220 — radiation CuK α — $y = 0$).

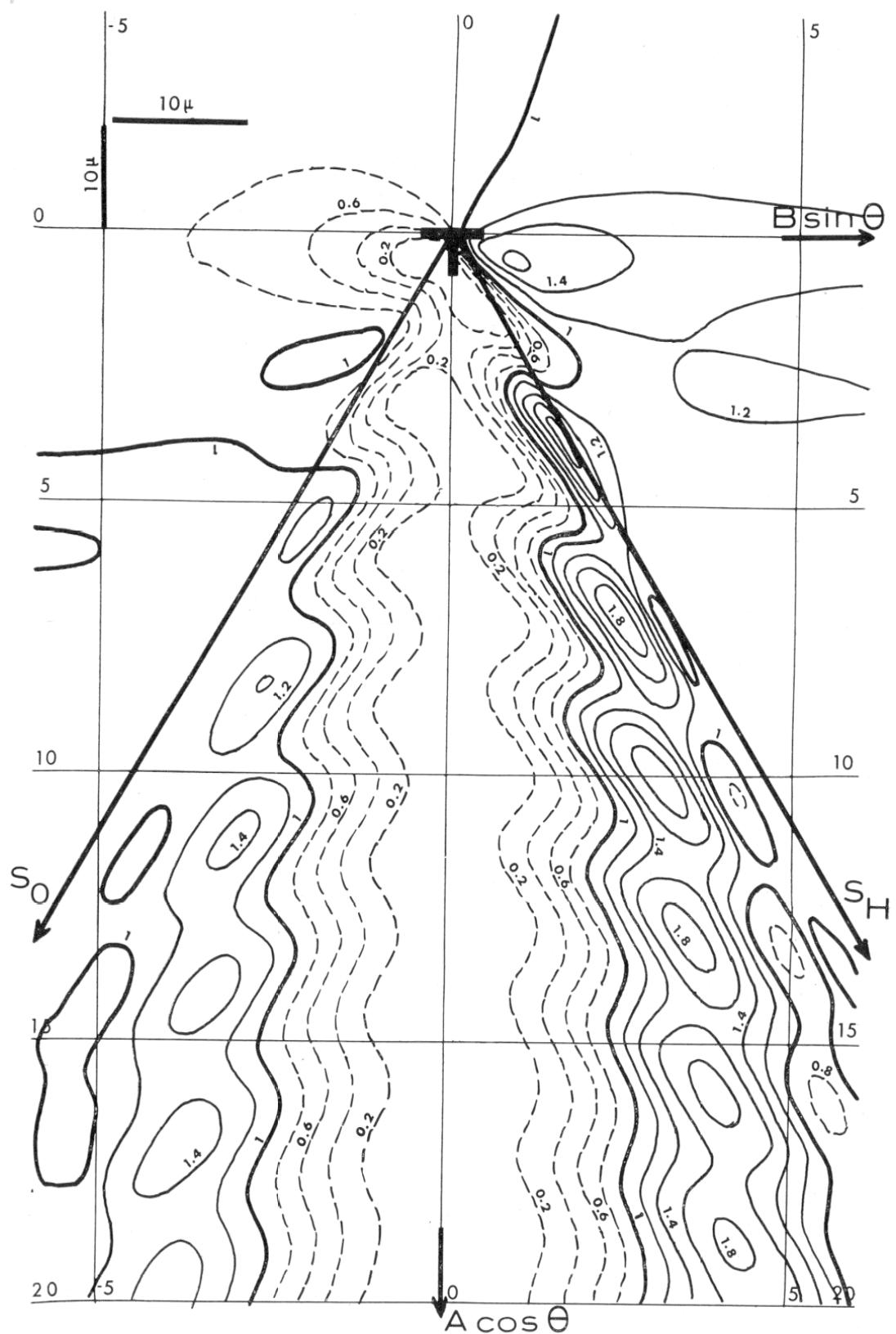


FIG. 24. — Intensité de l'onde réfléchie $|T_H|^2$ (silicium — réflexion 220 — radiation CuK α — $y = 0$).

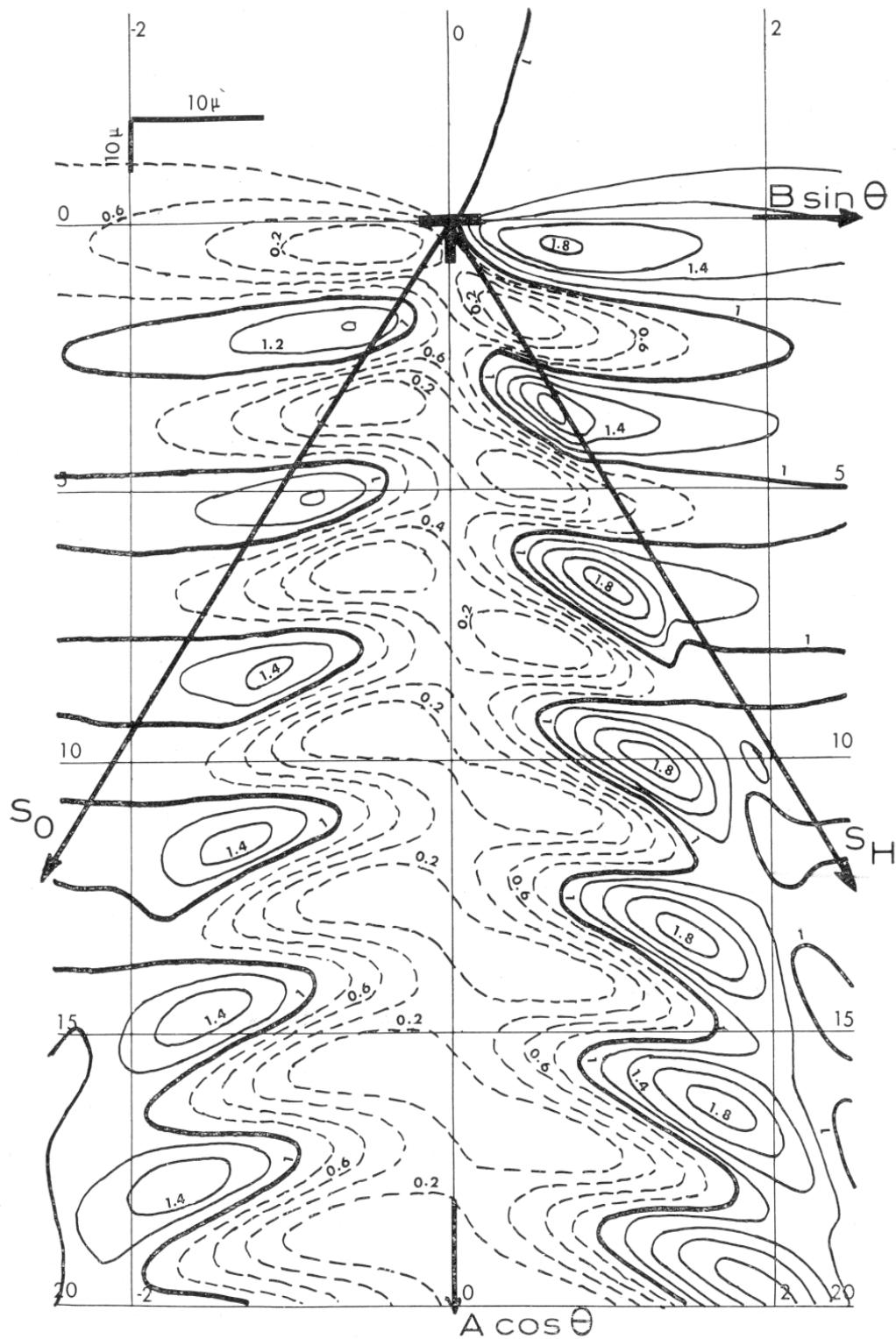


FIG. 25. — Intensité de l'onde réfléchie $|T_H|^2$ (silicium — réflexion 220 — radiation MoK α — $y = 0$).

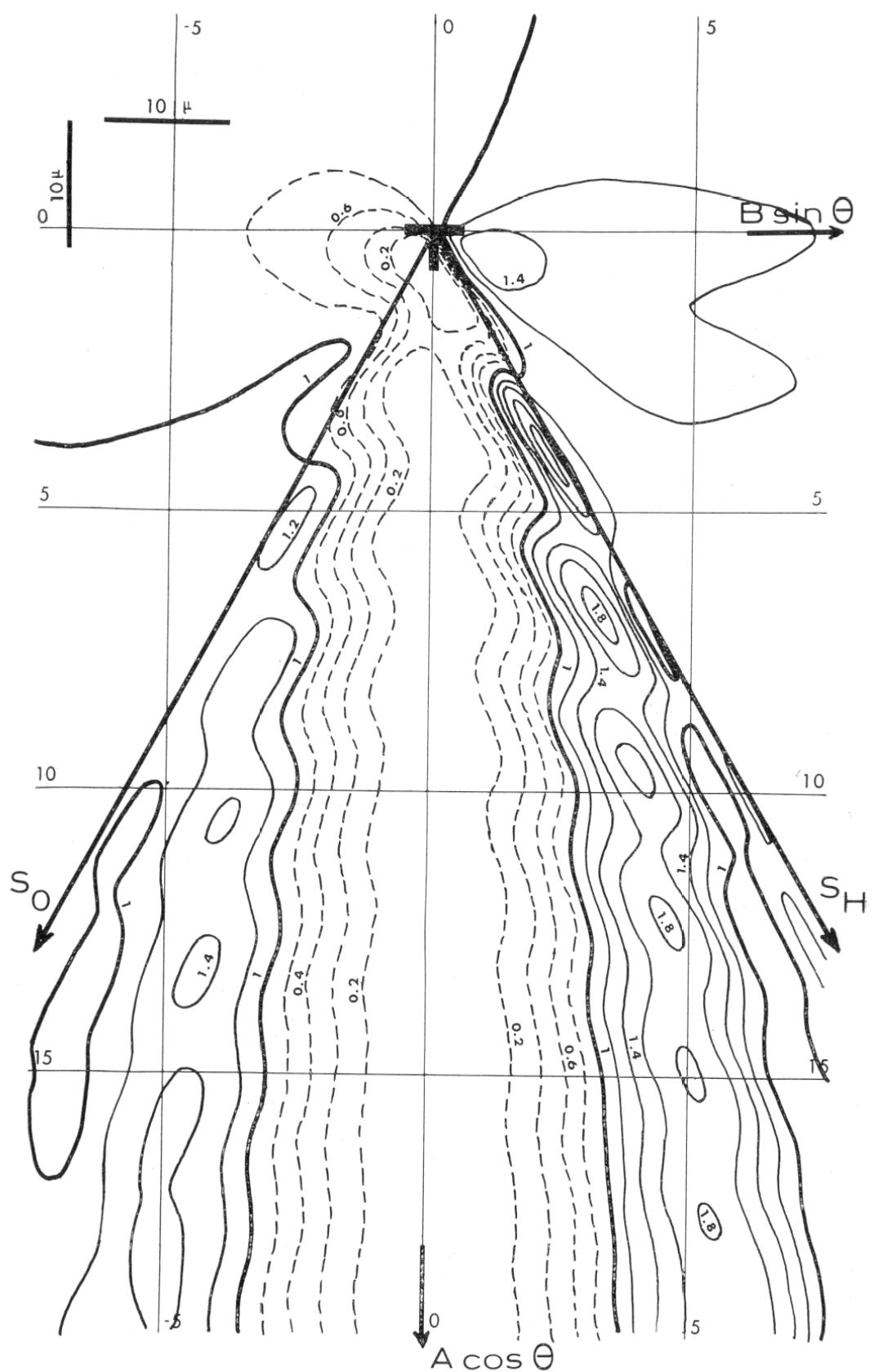


FIG. 26. — Intensité de l'onde réfléchie $|T_H|^2$ (silicium — réflexion 220 — radiation $\text{FeK}\alpha$ — $y = 0$).

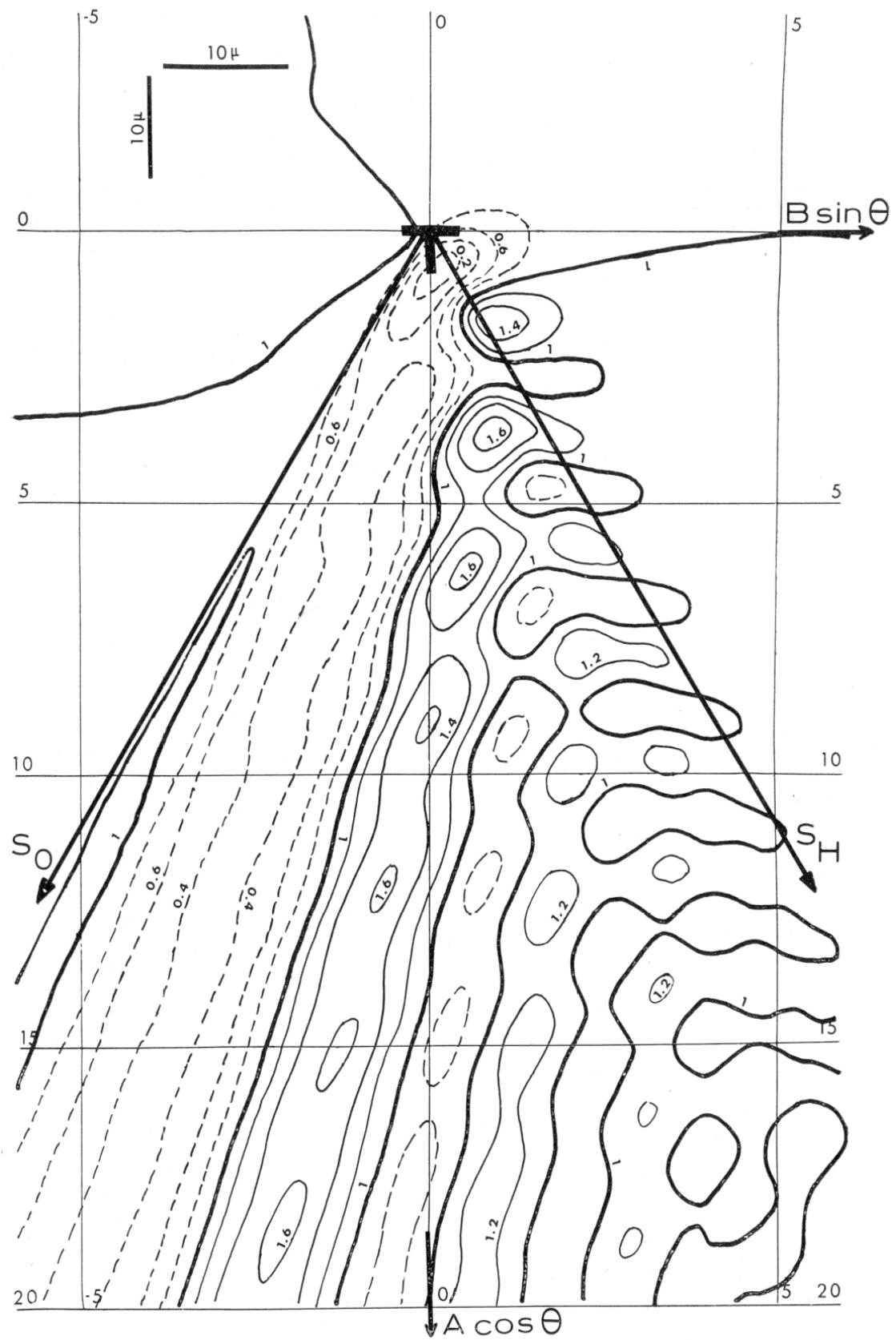


FIG. 27. — Intensité de l'onde incidente $|T_0|^2$ (silicium — réflexion 220 — radiation CuK α — $y = 1$ (champ clair).

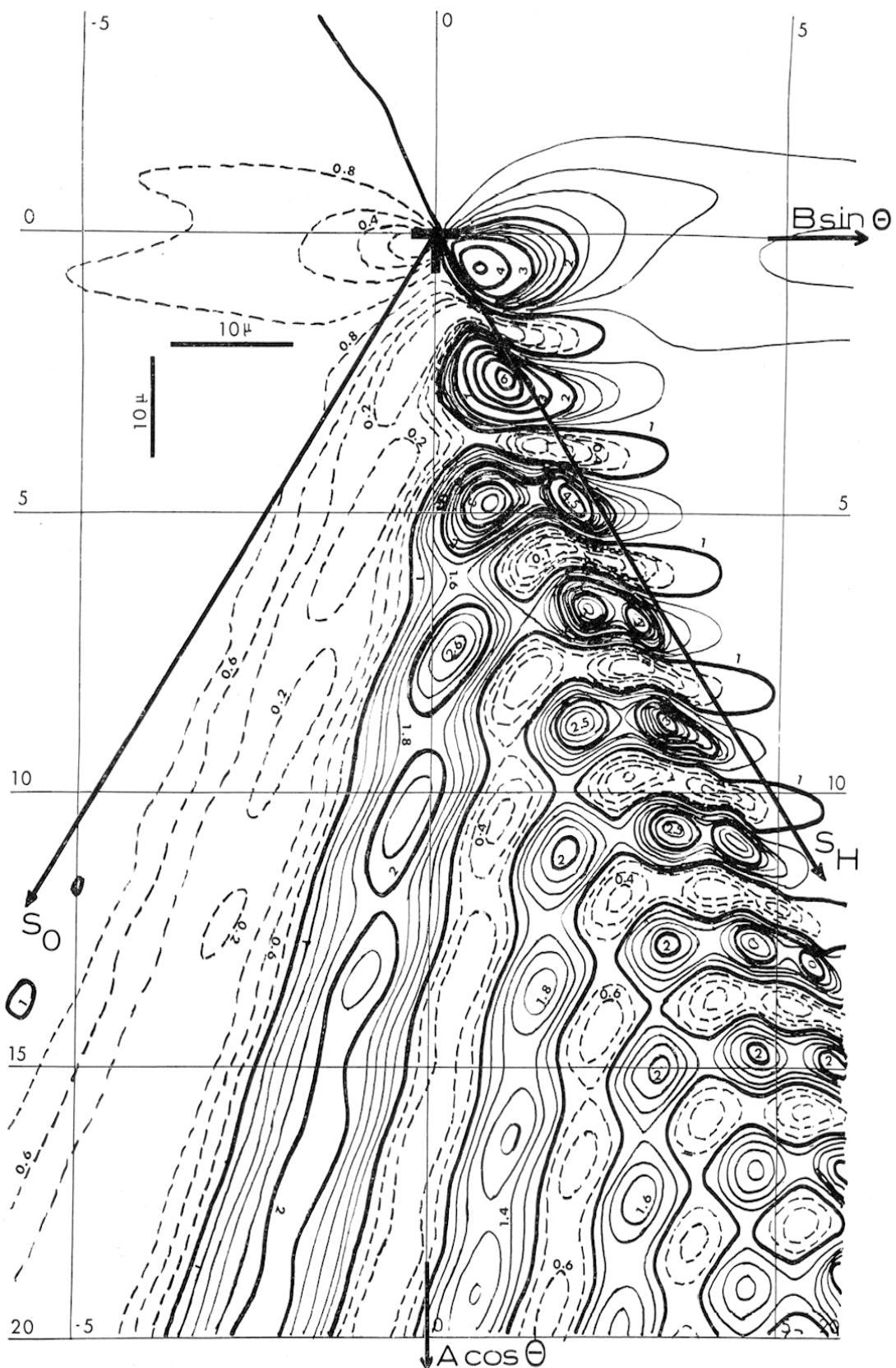


FIG. 28. — Intensité de l'onde réfléchie $|T_H|^2$ (silicium — réflexion 220 — radiation $\text{CuK}\alpha$ — $y = 1$ (champ sombre).

CHAPITRE VI
CONCLUSIONS

VI-1.

a) La présente théorie dynamique a été établie par résolution des équations de Maxwell en partant du seul principe de l'existence des réflexions sélectives. En particulier on ne trouve dans la partie fondamentale (chapitre I) que des approximations immédiatement vérifiables, à l'exclusion d'*« hypothèses »* ou d'extrapolations des propriétés des cristaux parfaits, dont les limites de validité peuvent être déterminées qu'indirectement, par une confrontation en général peu précise des résultats théoriques avec l'expérience.

b) Dans le cas de deux ondes, on obtient un système de deux équations aux dérivées partielles du premier ordre (I.6.5 et I.6.6), valable pour n'importe quel type de déformation et d'onde, à condition que les gradients de déformations et les courbures des ondes soient nettement plus petits que les vecteurs du réseau réciproque.

c) Dans le cas du cristal parfait et des ondes planes infinies, la résolution de ce système permet de retrouver immédiatement tous les résultats classiques.

d) Dans le cas des déformations unidimensionnelles, le système fondamental se ramène aux équations obtenues dans les théories lamellaires (chap. II). Nous établissons une extension de ces théories à des déformations plus générales (gradient de déformation uniforme) et en particulier au cas des cristaux courbés élastiquement.

e) Nous en déduisons une méthode pratique de calcul du pouvoir réflecteur intégré des cristaux courbés élastiquement (cas de Bragg). La comparaison des résultats numériques avec des mesures absolues (aucun paramètre inconnu donc ajustable) donne un accord très satisfaisant (silicium, réflexion 400, radiation MoK α).

f) Nous utilisons ces résultats pour calculer l'ordre de grandeur de l'augmentation du pouvoir réflecteur lorsque les cristaux contiennent une densité moyenne de dislocations. La comparaison avec les résultats expérimentaux est satisfaisante (chap. IV).

VI-2.

Nous n'avons présenté ici que quelques applications de notre théorie dynamique ; du fait

même de sa généralité, les applications *immédiates* en apparaissent dès maintenant très nombreuses ; nous en citerons quelques-unes :

a) calcul des images « simples », c'est-à-dire avec un faisceau incident rigoureusement défini, de divers types de défauts. Nous avons en effet présenté ici le calcul de l'image d'une dislocation particulière, mais il serait très intéressant d'étudier systématiquement l'influence de la nature de la dislocation sur l'image obtenue ; on pourrait également faire le calcul dans le cas de Bragg.

Parmi les autres défauts dont l'étude nous paraît également réalisable nous mentionnerons : les sous-joints, considérés non pas comme une série de dislocations parallèles mais comme une variation brusque ou continue de l'écart à la condition de Bragg, les frontières de domaines dans des cristaux presque cubiques comme le titanate de baryum, les défauts ponctuels ;

b) calcul des images « intégrées », c'est-à-dire avec un faisceau divergent (méthodes de Lang et Berg-Barett, microscopie électronique).

Les résultats ainsi obtenus dans le cas des images « simples » ou « intégrées » pourraient être appliqués à l'identification des défauts observés expérimentalement ;

c) calcul de pouvoirs réflecteurs intégrés de divers types de cristaux imparfaits, en particulier au moyen de méthodes de Monte-Carlo ;

d) calcul de la propagation de faisceaux *étroits* dans des cristaux déformés. On peut ainsi espérer retrouver par le calcul la propagation courbe mise en évidence expérimentalement par Hildebrandt (1959).

VI-3.

D'autre part, nous envisageons un certain nombre d'extensions de la présente théorie :

a) la notion de champ d'onde : bien que cette notion ne soit pas fondamentale dans notre théorie, elle nous paraît intuitivement très commode et nous nous proposons de la faire réapparaître dans les calculs numériques, et si possible dans les équations fondamentales, en utilisant la notion de « cristal parfait tangent ». Ceci permettrait une comparaison intéressante avec la théorie de Polder et la seconde théorie de Kato, en mettant en évidence mathématiquement la réapparition du deuxième champ d'onde au voisinage d'un défaut ; ceci permettrait également de préciser les limites de validité de ces deux théories ;

b) les réflexions multiples : Borrman (1964)

a récemment mis en évidence une augmentation considérable de la transmission anomale dans le cas où plusieurs nœuds du réseau réciproque se trouvent sur la sphère d'Ewald ; d'autre part

ce cas est le plus fréquent en microscopie électronique, aussi nous paraît-il intéressant d'entreprendre une étude de la propagation d'ondes multiples dans un cristal, déformé ou non.

BIBLIOGRAPHIE

- AUTHIER, (1961). — *Bull. Soc. franç. Minér. Crist.*, 84, 61.
- AUTHIER & LANG, (1964). — *Phil. Mag.* (sous presse).
- COWLEY & MOODIE, 1957. — *Acta Cryst.*, 10, 609.
- COWLEY & MOODIE, 1958. — *Proc. Phys. Soc.*, 71, 533.
- COWLEY & MOODIE, 1959. — *Acta Cryst.*, 12, 367.
- DARWIN, (1914). — *Phil. Mag.*, 27, 315, 675.
- HILDEBRANDT, (1959). — *Zeitsch. f. Krist.*, 112, 312, 340.
- HOWIE & WHELAN, (1961). — *Proc. Roy. Soc., A* 263, 217.
- HOWIE & WHELAN, (1962). — *Proc. Roy. Soc., A* 267, 206.
- JAMES, (1948). — *The Optical Principles of the Diffraction of X-Rays* (Bell & Sons, London), 35.
- KAMBE, (1963). — *Zeitsch. f. Naturforschung*, 18a, 1010.
- KATO, (1963 a). — *Acta Cryst.*, 16, 276, 282.
- KATO, (1963b). — *J. Phys. Soc. Japan*, 18, 1785.
- KATO, (1964). — *J. Phys. Soc. Japan*, 19, 67.
- LANG, (1958). — *J. Appl. Phys.*, 29, 597.
- LAUE, (1931). — *Ergeb. Exact. Naturwiss.*, 10, 133.
- PATEL, WAGNER & MOSS, (1962). — *Acta Met.*, 10, 759.
- PENNING & POLDER, (1951). — *Philips Res. Rep.*, 16, 419.
- READ, (1953). — *Dislocations in Crystals* (McGraw-Hill, New York), 122.
- TAKAGI, (1962). — *Acta Cryst.*, 12, 1311.
- TAUPIN, (1960). — *Tech. Final Rep.*, (US Air Force, Off. Sc. Res.).
- TAUPIN (1964). — Thèse, Paris.
- ZACHARIASEN, (1945). — *Theory of X-Ray Diffraction in Crystals* (Wiley & Sons, New York), 122.