

Diffraction des Rayons X dans le 'Cas de Trois Rayons Forts'. II. Influence de l'Absorption et du Facteur de Diffusion Atomique

PAR Y. HÉNO

Laboratoire de Chimie Physique, 11 rue Pierre Curie, Paris 5^e, France

ET P. P. EWALD

*Polytechnic Institute of Brooklyn, Brooklyn, N. Y. 11201, U.S.A.
and 19 Fordyce Road, New Milford, Conn. 06776, U.S.A.*

(Reçu le 12 juin 1967)

The second part of an investigation of the conditions of X-ray propagation in a crystal for a three beam case is described. In the first part, the crystal was supposed to be built of non-absorbing point-atoms. In this part, these are replaced by absorbing atoms of finite size described by complex atomic scattering factors. The dynamical equations are studied without any restrictions as far as possible: at the beginning no limit is put either to the number n of strong rays or to the strength of absorption. The theory is then further specialized to the cases of two strong rays and of three non-coplanar strong rays under the hypothesis of small absorption. It is then possible to show that, also including absorption, a relation holds between the closest approach of the surface of dispersion to the Laue point and the extent to which absorption is reduced (Borrmann effect). Finally, the theory is applied to two special cases relating to germanium crystals in which the double Borrmann effect has been observed, the simultaneous reflexions (111/111) and (111/T11). For the first of these, the six sheets of the surface of dispersion are illustrated as they develop for varying wavelengths. Curves for the six corresponding absorption coefficients are drawn.

Introduction

Dans la partie I (Ewald & Héno, 1968) de cet travail, nous avons étudié la *surface de dispersion* (SurfDisp) correspondant au cas où trois ondes 'fortes' se propagent dans le cristal, en nous plaçant dans l'hypothèse où les atomes diffusants sont considérés comme ponctuels et non absorbants. Dans cette partie (II), les atomes sont considérés comme des entités étendues et absorbantes et décrits par l'intermédiaire des facteurs de diffusion atomiques dont les parties réelles f' et imaginaires f'' sont responsables respectivement de la diffusion et de l'absorption.

Dans le premier chapitre, les conséquences de l'introduction de ces facteurs de diffusion complexes sur les équations de la théorie dynamique sont étudiées. La généralité des considérations est maintenue aussi loin que possible: d'une part, aucune restriction n'est faite *a priori* sur le nombre n d'ondes fortes se propageant dans le cristal; d'autre part, du moins au début des calculs, l'absorption peut ne pas être tenue pour faible. La théorie est ensuite développée plus profondément, dans l'hypothèse où la partie imaginaire f'' des facteurs de diffusion atomiques est suffisamment petite devant la partie réelle pour que l'absorption puisse être considérée comme faible; il est alors possible de ne conserver que la première puissance du rapport f''/f' . Bien que la théorie puisse être alors développée sans restriction sur le nombre n d'ondes 'fortes', ce nombre est cependant restreint, pour la simplicité de l'exposé; à deux ou trois ('cas à deux ou trois rayons'). On peut

alors montrer que l'idée intuitive, appliquée dans la partie I, du lien de l'importance de l'effet Borrmann à la proximité de la surface de dispersion au point de Laue, a un support théorique aussi dans le cristal absorbant, et qu'une construction géométrique existe pour le coefficient d'absorption.

Dans les deux chapitres suivants, les 'cas à deux rayons' et 'trois rayons' sont plus explicitement étudiés, en ce qui concerne l'équation de la surface de dispersion et l'expression du coefficient d'absorption.

Dans les deux derniers chapitres enfin, deux cas spéciaux relatifs au cristal de germanium, où le double effet Borrmann a été observé, sont discutés.

Dans cette partie les conventions d'écriture et la méthode utilisée suivent d'assez près celles de la partie I (Ewald & Héno, 1968) dont les formules citées sont rappelées sous la forme [I] [].

1. INTRODUCTION DANS LES EQUATIONS DE LA THEORIE DYNAMIQUE DES FACTEURS DE DIFFUSION ATOMIQUES

A. Introduction des grandeurs complexes

Dans les équations de la dynamique [I] [29]:

$$S_{h'} = \sum_h \alpha_{h'-h} r_h S_{h \perp K_h}, \quad (1)$$

les paramètres $\alpha_{h'-h}$ sont définis par (cf. [I], [27], [28]):

$$\alpha_{h'-h} = A_{h'-h}/A \quad (2)$$

où:

$$\left. \begin{aligned} A_{h'-h} &= -\frac{1}{v_a} F_{h'-h} \frac{e^2}{mc^2} \frac{\lambda_0^2}{\pi} \\ \text{et} \quad A &= -\frac{1}{v_a} F_0 \frac{e^2}{mc^2} \frac{\lambda_0^2}{\pi} \end{aligned} \right\} \quad (2')$$

Les facteurs de structure cristallins $F_{h'-h}$ et F_0 sont définis à partir des facteurs de diffusion atomiques $f_{h'-h}^s$ et f_0^s , considérés comme des grandeurs complexes, par:

$$\left. \begin{aligned} F_{h'-h} &= \sum_s f_{h'-h}^s \exp\{-j(\mathbf{h}' - \mathbf{h}, \mathbf{x}^s)\} \\ \text{et} \quad F_0 &= \sum_s f_0^s \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Les paramètres de résonance ([I] [16]):

$$r_h = \frac{Ak_0^2}{\mathbf{K}_h^2 - k_0^2} \quad (4)$$

et les paramètres qui s'en déduisent ([I] [19]):

$$\tau_h = 1 - 1/r_h \quad (4')$$

sont aussi des grandeurs complexes, ainsi que \mathbf{K}_h , et K défini par:

$$A = \frac{K^2 - k_0^2}{k_0^2} \quad (4'')$$

où $k_0 = 1/\lambda_0$ est supposé réel.

Par la suite, nous décomposerons toutes les grandeurs complexes en leurs parties réelles et imaginaires, affectant les premières de l'indice ' et les secondes de l'indice ''.

Nous décomposerons enfin $F_{h'-h}$ en deux parties, en général complexes, $F_{h'-h}^d$ et $iF_{h'-h}^a$ qui contiennent respectivement les parties réelle (diffusion) et imaginaire (absorption) des facteurs de diffusion atomiques:

$$\left. \begin{aligned} F_{h'-h} &= F_{h'-h}^d + iF_{h'-h}^a \\ F_{h'-h}^d &= F_{h'-h}^{d*} = \sum_s f_{h'-h}^{d*} \exp\{-j(\mathbf{h}' - \mathbf{h}, \mathbf{x}^s)\} \\ F_{h'-h}^a &= F_{h'-h}^{a*} = \sum_s f_{h'-h}^{a*} \exp\{-j(\mathbf{h}' - \mathbf{h}, \mathbf{x}^s)\} \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

Pour F_0 cette décomposition est la même que celle en parties réelle et imaginaire

$$F_0 = F_0' + i F_0'' \quad (6)$$

En utilisant (2) et (2') on déduit:

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{h'-h} &= \alpha_{h'-h}^d + i\alpha_{h'-h}^a \\ \alpha_{h'-h}^d &= \alpha_{h'-h}^{d*} = \left[\frac{F_{h'-h}^d}{F_0'} + \frac{F_0''}{F_0'} \frac{F_{h'-h}^a}{F_0'} \right] / \left[1 + \left(\frac{F_0''}{F_0'} \right)^2 \right] \\ \alpha_{h'-h}^a &= \alpha_{h'-h}^{a*} = \left[\frac{F_{h'-h}^a}{F_0'} - \frac{F_0''}{F_0'} \frac{F_{h'-h}^d}{F_0'} \right] / \left[1 + \left(\frac{F_0''}{F_0'} \right)^2 \right] \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

décomposition qui satisfait à:

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{h'-h}^d &= \frac{F_{h'-h}^d}{F_0'} + \frac{F_0''}{F_0'} \alpha_{h'-h}^a \\ \alpha_{h'-h}^a &= \frac{F_{h'-h}^a}{F_0'} - \frac{F_0''}{F_0'} \alpha_{h'-h}^d \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

Les parties $\alpha_{h'-h}^d$ et $\alpha_{h'-h}^a$ sont déterminées principalement l'une par la diffusion l'autre par l'absorption si nous considérons F_0''/F_0' comme petit. Mais (7) et (8) sont strictes, donc indépendants de cette hypothèse.

B. Introduction du coefficient d'absorption

Dans un champ optique élémentaire qui se propage à l'intérieur d'un cristal absorbant, toutes les ondes composantes doivent diminuer de la même manière en amplitude. Dans le cas contraire, une condition d'équilibre entre les amplitudes établie en un endroit quelconque se verrait enfreinte plus loin. Les composantes imaginaires \mathbf{K}_h des vecteurs d'onde, qui jouent le rôle de vecteurs d'amortissement, doivent donc avoir la même grandeur et la même direction pour toutes les valeurs de h . Nous écrivons pour ce vecteur commun:

$$\mathbf{K}_h'' = K'' \mathbf{N} \quad (9)$$

où \mathbf{N} est un vecteur unité de direction indéterminée pour le moment.

L'amplitude d'une onde plane de vecteur d'onde \mathbf{K}_h est donc de la forme:

$$A \exp\{j(\mathbf{K}_h, \mathbf{x})\} = A \exp\{j(\mathbf{K}_h', \mathbf{x})\} \exp\{-2\pi K''(\mathbf{N}, \mathbf{x})\}$$

qui met en évidence le coefficient d'amortissement de l'amplitude dans la direction \mathbf{N} :

$$\bar{\mu} = 2\pi K'' \quad (10)$$

Le coefficient d'amortissement du flux d'énergie correspondant est:

$$\bar{\bar{\mu}} = 2\bar{\mu} = 4\pi K''; \quad (11)$$

c'est la quantité habituellement mesurée et désignée sous le nom de coefficient d'absorption.

C. Introduction d'une notation condensée

Comme dans la première partie, nous nous placerons toujours dans le cas où la quantité A [cf. (2')] peut être considérée comme très petite, à savoir $|A|$ de l'ordre de 10^{-4} ou moins, donc telle qu'on puisse en négliger les ordres supérieurs.

Nous écrivons ainsi d'après (4''):

$$K = k_0(1 + \frac{1}{2}A') + i\frac{1}{2}k_0A'' \quad (12)$$

qui met en évidence que la partie imaginaire de K est très inférieure à sa partie réelle. Nous négligerons donc dans ce qui suit les carrés de (K''/K') .

Nous aurons de même [cf. (9)]:

$$\mathbf{K}_h = \mathbf{K}_h' + iK''\gamma_h \quad (13)$$

où: $K_h' = |\mathbf{K}_h'|$, K_h est le scalaire complexe défini par: $K_h^2 = \mathbf{K}_h^2$, et où nous avons posé:

$$\gamma_h = \cos \angle(\mathbf{K}_h', \mathbf{N}) \quad (14)$$

Sous la même hypothèse, on voit facilement que (4') se réduit à:

$$\tau_h = \frac{K - K_h}{K - k_0}, \quad (15)$$

dont la décomposition en parties réelle et imaginaire s'écrit :

$$\left. \begin{aligned} \tau'_h &= \left[T'_h + \frac{F''_0}{F'_0} T''_h \right] / \left[1 + \left(\frac{F''_0}{F'_0} \right)^2 \right] \\ \tau''_h &= \left[T''_h - \frac{F''_0}{F'_0} T'_h \right] / \left[1 + \left(\frac{F''_0}{F'_0} \right)^2 \right] \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

où nous avons posé :

$$\left. \begin{aligned} T'_h &= \frac{k_0(1 + \frac{1}{2}A') - K'_h}{\frac{1}{2}k_0A'} \\ T''_h &= \frac{F''_0}{F'_0} \left(1 - \frac{\bar{\mu}\gamma_h}{\mu_0} \right) \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

introduisant :

$$\mu_0 = 2\pi k_0 A'' \quad (18)$$

dont nous verrons la signification physique en § H.

Nous constatons sur (16) que τ'_h et τ''_h ont des formes respectivement analogues à celles de $\alpha_{h'-h}^d$ et $\alpha_{h'-h}^a$ [cf. (7)], vérifiant d'ailleurs des relations semblables à (8), à savoir :

$$\left. \begin{aligned} \tau'_h &= T'_h + \frac{F''_0}{F'_0} \tau''_h \\ \tau''_h &= T''_h - \frac{F''_0}{F'_0} \tau'_h \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

Par la suite, nous utiliserons cette analogie d'écriture, pour simplifier les équations, introduisant la notation condensée :

$$\left. \begin{aligned} \beta_{h'-h} &= \alpha_{h'-h} \text{ si } h' \neq h \\ &= \tau_h \text{ si } h' = h \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

et la décomposition :

$$\left. \begin{aligned} \beta_{h'-h} &= \beta_{h'-h}^d + i\beta_{h'-h}^a \\ \beta_{h'-h}^d &= \beta_{h'-h}^{d*} = \left[b_{h'-h}^d + \frac{F''_0}{F'_0} b_{h'-h}^a \right] / \left[1 + \left(\frac{F''_0}{F'_0} \right)^2 \right] \\ \beta_{h'-h}^a &= \beta_{h'-h}^{a*} = \left[b_{h'-h}^a - \frac{F''_0}{F'_0} b_{h'-h}^d \right] / \left[1 + \left(\frac{F''_0}{F'_0} \right)^2 \right] \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

qui satisfait à :

$$\left. \begin{aligned} \beta_{h'-h}^d &= b_{h'-h}^d + \frac{F''_0}{F'_0} \beta_{h'-h}^a \\ \beta_{h'-h}^a &= b_{h'-h}^a - \frac{F''_0}{F'_0} \beta_{h'-h}^d \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

où :

$$\left. \begin{aligned} b_{h'-h}^d &= \frac{F_{h'-h}^d}{F'_0} \text{ si } h' \neq h \\ &= T'_h \text{ si } h' = h \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

et :

$$\left. \begin{aligned} b_{h'-h}^a &= \frac{F_{h'-h}^a}{F'_0} \text{ si } h' \neq h \\ &= T''_h \text{ si } h' = h \end{aligned} \right\} \quad (23')$$

D. Résolution des équations de la théorie dynamique dans le 'cas à n rayons',

l'absorption n'étant pas supposée nécessairement petite

Rappelons brièvement cette résolution (cf. [I] § 7 et 8). Introduisons dans (1) la décomposition :

$$\mathbf{S}_h = \mathbf{T}_h + \lambda_h \mathbf{s}_h \quad (24)$$

où les composantes transversales \mathbf{T}_h des amplitudes de structure \mathbf{S}_h sont reliées aux composantes \mathbf{E}_h du champ électrique par :

$$\mathbf{E}_h = \frac{1}{v_a} \frac{1}{A} r_h \mathbf{T}_h. \quad (25)$$

Si l'on pose, pour simplifier l'écriture, h' (ou h) = 1, 2, ..., n , (1) s'écrit explicitement :

$$\left. \begin{aligned} (r_1 - 1)\mathbf{T}_1 + \alpha_{12}r_2\mathbf{T}_2 + \dots + \alpha_{1n}r_n\mathbf{T}_n &= \lambda_1\mathbf{s}_1 \\ \alpha_{21}r_1\mathbf{T}_1 + (r_2 - 1)\mathbf{T}_2 + \dots + \alpha_{2n}r_n\mathbf{T}_n &= \lambda_2\mathbf{s}_2 \\ \dots \dots \dots \\ \alpha_{n1}r_1\mathbf{T}_1 + \alpha_{n2}r_2\mathbf{T}_2 + \dots + (r_n - 1)\mathbf{T}_n &= \lambda_n\mathbf{s}_n \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

(1) Si tous les λ_i sont nuls, la condition de compatibilité de (26) s'écrit :

$$D_0 \equiv \begin{vmatrix} \tau_1 & \alpha_{12} & \dots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \tau_2 & \dots & \alpha_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \dots & \tau_n \end{vmatrix} = 0, \quad (27)$$

où nous avons utilisé (4') et supposé la non-annulation des r_i . Les vecteurs \mathbf{T}_i , solutions de (26), sont alors des vecteurs parallèles; les vecteurs \mathbf{K}_i , qui leur sont respectivement perpendiculaires, sont donc coplanaires. (2) Si l'un au moins des λ_i est différent de zéro, avec les mêmes conventions que précédemment, les solutions de (26) peuvent s'écrire :

$$\left. \begin{aligned} D_0 r_1 \mathbf{T}_1 &= \begin{vmatrix} \lambda_1 \mathbf{s}_1 & \alpha_{12} & \dots & \alpha_{1n} \\ \lambda_2 \mathbf{s}_2 & \tau_2 & \dots & \alpha_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \lambda_n \mathbf{s}_n & \alpha_{n2} & \dots & \tau_n \end{vmatrix} ; \\ D_0 r_2 \mathbf{T}_2 &= \begin{vmatrix} \tau_1 & \lambda_1 \mathbf{s}_1 & \dots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \lambda_2 \mathbf{s}_2 & \dots & \alpha_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \alpha_{n1} & \lambda_n \mathbf{s}_n & \dots & \tau_n \end{vmatrix} ; \\ \dots \dots \dots \\ D_0 r_n \mathbf{T}_n &= \begin{vmatrix} \tau_1 & \alpha_{12} & \dots & \lambda_1 \mathbf{s}_1 \\ \alpha_{21} & \tau_2 & \dots & \lambda_2 \mathbf{s}_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \dots & \lambda_n \mathbf{s}_n \end{vmatrix} . \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

(28) conduit alors pour les λ_i au système d'équations linéaires :

le théorème d'Euler, que dans le cas particulier où $D(\beta_{jk}^a) = 0$:

$$\sum_{(jk)} \beta_{jk}^a \frac{\partial D(\beta_{jk}^a)}{\partial \beta_{jk}^a} = 0, \quad (39)$$

d'où l'on déduit, en tenant compte de (22):

$$\sum_{(jk)} \beta_{jk}^a \frac{\partial D}{\partial \beta_{jk}^a} \equiv \sum_{(jk)} b_{jk}^a \frac{\partial D}{\partial \beta_{jk}^a}. \quad (40)$$

F. Représentation géométrique

Comme dans la partie I, le point caractéristique \mathbf{T} , point de départ des n vecteurs \mathbf{K}'_h , parties réelles des vecteurs d'onde \mathbf{K}_h , qui se terminent aux n points: (1), ..., (n) du réseau réciproque, est décrit par une équation vectorielle de la forme:

$$\mathbf{T} = \mathbf{L}_0 + \frac{1}{2} K' A' \mathbf{v}, \quad (41)$$

où \mathbf{v} est un vecteur réel, d'ordre de grandeur unité, et où le point L_0 a été défini dans le cas où $n=3$.

Pour définir (41) plus généralement, nous distinguerons deux cas:

(1) *Tous les vecteurs \mathbf{K}'_h sont coplanaires.*

C'est toujours le cas si $n=2$ ou, quel que soit n , si les coefficients λ_i des équations de la dynamique sont tous nuls (cf. § D); il peut se produire accidentellement quand, l'un au moins des λ_i étant différent de zéro, $n \geq 3$.

Si $n=2$, L_0 est défini comme le point situé à la même distance K' des deux points (1) et (2) du réseau réciproque. De (41) on déduit facilement, en introduisant les deux vecteurs unités \mathbf{s}_1 et \mathbf{s}_2 dirigés respectivement suivant $L_0(1)$ et $L_0(2)$:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{K}'_1 &= K'[\mathbf{s}_1 - \frac{1}{2} A' \mathbf{v}] \\ \mathbf{K}'_2 &= K'[\mathbf{s}_2 - \frac{1}{2} A' \mathbf{v}] \end{aligned} \right\} \quad (42)$$

Soient \mathbf{t}_1 et \mathbf{t}_2 les deux vecteurs réciproques à \mathbf{s}_1 et \mathbf{s}_2 , donc définis par:

$$(\mathbf{s}_i, \mathbf{t}_j) = \delta_{ij} \quad (43)$$

Rapportons le vecteur \mathbf{v} aux axes \mathbf{t}_i , posant:

$$\mathbf{v} = T'_1 \mathbf{t}_1 + T'_2 \mathbf{t}_2. \quad (44)$$

On en déduit que:

$$T'_1 = \frac{K' - K'_1}{K' - k_0} \quad \text{et} \quad T'_2 = \frac{K' - K'_2}{K' - k_0}, \quad (45)$$

sous réserve de l'approximation toujours faite jusqu'ici que $|A'| \ll 1$. D'après (15) et (17), les coordonnées T'_i définies par (44) coïncident donc avec les variables T'_i qui entrent dans les équations de la théorie dynamique.

Si $n > 2$, L_0 étant défini à partir de deux points du réseau réciproque, par exemple (1) et (2), et tous les vecteurs \mathbf{K}'_h étant décrits à partir des vecteurs \mathbf{s}_1 et \mathbf{s}_2 , il est facile de montrer que les n variables T'_i qui en-

trent dans les équations de la théorie dynamique s'expriment, sous réserve éventuellement d'un terme constant, comme des combinaisons linéaires de T'_1 et T'_2 .

(2) *Tous les vecteurs d'onde \mathbf{K}'_h ne sont pas coplanaires*

Ce cas ne peut se produire que si $n \geq 3$ et que l'un au moins des coefficients λ_i n'est pas nul.

Si $n=3$, c'est le cas traité dans la partie I où L_0 a été défini. Les trois vecteurs \mathbf{K}'_1 , \mathbf{K}'_2 , et \mathbf{K}'_3 satisfont à:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{K}'_1 &= K'[\mathbf{s}_1 - \frac{1}{2} A' \mathbf{v}] \\ \mathbf{K}'_2 &= K'[\mathbf{s}_2 - \frac{1}{2} A' \mathbf{v}] \\ \mathbf{K}'_3 &= K'[\mathbf{s}_3 - \frac{1}{2} A' \mathbf{v}] \end{aligned} \right\} \quad (46)$$

Le vecteur \mathbf{v} est rapporté aux vecteurs $\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{t}_3$, réciproques des vecteurs $\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \mathbf{s}_3$, donc définis par (43); il s'écrit:

$$\mathbf{v} = T'_1 \mathbf{t}_1 + T'_2 \mathbf{t}_2 + T'_3 \mathbf{t}_3, \quad (47)$$

d'où l'on déduit facilement:

$$T'_1 = \frac{K' - K'_1}{K' - k_0}; \quad T'_2 = \frac{K' - K'_2}{K' - k_0}; \quad T'_3 = \frac{K' - K'_3}{K' - k_0}, \quad (48)$$

toujours sous l'approximation: $|A'| \ll 1$.

D'après (15) et (17), les coordonnées T'_i définies par (47) coïncident donc, comme dans le cas $n=2$, avec les variables T'_i qui entrent dans les équations de la théorie dynamique.

Si $n > 3$, comme dans le cas des vecteurs \mathbf{K}'_h coplanaires, L_0 étant défini à partir de trois points du réseau réciproque, par exemple (1), (2) et (3), et tous les vecteurs \mathbf{K}'_h étant décrits à partir de \mathbf{s}_1 , \mathbf{s}_2 et \mathbf{s}_3 , les n variables T'_i qui entrent dans les équations de la théorie dynamique s'expriment, sous réserve éventuellement d'un terme constant, comme des combinaisons linéaires de T'_1, T'_2, T'_3 .

Remarque: Dans la suite du présent travail, nous serons amenés à nous limiter au 'cas à deux rayons' et au 'cas à trois rayons' non coplanaires, réservant le cas à trois rayons coplanaires et le cas à plus de trois rayons à une autre publication. Nous traiterons donc seulement le cas où les variables T'_i qui entrent dans les équations de la théorie dynamique sont des variables indépendantes.

G. Interprétation de l'équation $\mathbf{D}=0$ - Cas général

D'après les équations (20), (21), (7), (8), (16), (17), nous voyons que les conditions de compatibilité des équations de la théorie dynamique (37) peuvent être considérées comme des équations par rapport aux variables T'_i et $\bar{\mu}$, dépendant des paramètres γ_i , F_0 et F_{jk} . Plus précisément, les variables T'_i et les paramètres γ_i n'étant pas nécessairement indépendants [cf. § F],* nous pouvons écrire:

* Dans le cas où les variables T'_i ne sont pas indépendantes, il en est de même pour les γ_i qui dépendent linéairement de deux ou trois d'entre eux.

$$\left. \begin{aligned} D' &\equiv \mathcal{D}'(T'_i, \bar{\mu}; \gamma_i, F'_0, F''_0, F^d_{jk}, F^a_{jk})=0 \\ D'' &\equiv \mathcal{D}''(T'_i, \bar{\mu}; \gamma_i, F'_0, F''_0, F^d_{jk}, F^a_{jk})=0 \\ \text{où: } i &= 1, 2 \text{ ou } 1, 2, 3 \text{ suivant le cas de rayons tous} \\ &\text{coplanaires ou non.} \end{aligned} \right\} (49)$$

Si l'on reporte dans la première équation l'expression de $\bar{\mu}$ en fonction des T'_i , tirée de la seconde, l'équation ainsi obtenue:

$$\overline{\mathcal{D}'}(T'_i; \gamma_i, F'_0, F''_0, F^d_{jk}, F^a_{jk})=0$$

permet de décrire la position du point caractéristique T [cf. § F]; c'est l'équation de la surface de dispersion (corrigée éventuellement de l'absorption). Cette surface est du $p^{\text{ième}}$ degré [n ou $n(n-1)$].

(49) permet donc, en principe, même si l'absorption est forte, d'obtenir d'une part le lieu géométrique du point caractéristique T , et d'autre part le coefficient d'absorption $\bar{\mu}$ correspondant à chaque position de T . Nous verrons plus loin que l'élimination de $\bar{\mu}$ entre les deux équations (49) s'obtient aisément dans le cas où l'absorption n'est pas trop grande.

H. 'Cas à un rayon'.

Introduction du coefficient d'absorption ordinaire

Dans le 'cas à un rayon', il existe un seul vecteur d'onde \mathbf{K}_1 auquel correspond le paramètre $\gamma_1 = \cos \angle(\mathbf{K}_1, \mathbf{N})$, une seule variable $\tau_1 = \frac{K - K_1}{K - k_0}$, et seulement les paramètres F'_0 et F''_0 .

L'équation $D=0$ se réduit à l'équation (27), à savoir:

$$\tau_1=0$$

d'où:

$$\tau'_1=0 \quad \tau''_1=0$$

ou encore d'après (19):

$$T'_1=0 \quad T''_1=0. \quad (50)$$

Le coefficient d'absorption correspondant $\bar{\mu}$ s'écrit donc, d'après (17):

$$\bar{\mu} = \mu_0 / \gamma_1$$

et le coefficient d'absorption suivant la direction d'incidence \mathbf{K}'_1 est:

$$\bar{\mu} \cos(\mathbf{K}'_1 \mathbf{N}) = \bar{\mu} \gamma_1 = \mu_0. \quad (51)$$

L'expression μ_0 , définie par (18), est donc le *coefficient d'absorption ordinaire*.

Par la suite, nous exprimerons le coefficient d'absorption $\bar{\mu}$ par rapport au coefficient d'absorption ordinaire μ_0 , posant:

$$\mu = \bar{\mu} / \mu_0. \quad (52)$$

L'écriture de T''_h se réduit ainsi à [cf. (17)]:

$$T''_h = \frac{F''_0}{F'_0} (1 - \mu \gamma_h). \quad (53)$$

$$(a) \quad D' \equiv D(T'_i; a^d_{jk}) = 0$$

$$(b) \quad D'' \equiv \sum_i T''_i \frac{\partial D(T'_i; a^d_{jk})}{\partial T'_i} + \sum_{(jk)} \frac{F''_0}{F^d_{jk}} a^d_{jk} \frac{\partial D(T'_i; a^d_{jk})}{\partial a^d_{jk}} = 0 \quad (57)$$

I. Remarque sur les points Lo et La

Dans la partie I, où l'absorption n'était pas considérée, les points La et Lo ont été définis comme les *points caractéristiques* T correspondant respectivement au cas cinématique et au cas dynamique à rayons découplés, c'est-à-dire sans couplage entre eux.

Dans nos nouvelles notations, ils correspondent à:

Lo : $v=0$, $K'_i=K'$; donc $T'_i=0$ (pour $i=1, 2$ ou $1, 2, 3$)

La : $K'_i=k_0$ pour $i=1, 2$ ou $1, 2, 3$; d'où: $v = \sum_{i=1}^{2 \text{ ou } 3} t_i$,

c'est-à-dire: $T'_i=1$ (pour $i=1, 2$ ou $1, 2, 3$).

Si l'on tient compte de l'absorption, Lo et La sont définis respectivement par:

Lo : $\tau_i=0$; d'où $K_i=K$ ($i=1, 2$ ou $1, 2, 3$).

Il lui correspond bien: $K'_i=K'$; $T'_i=0$ et $\bar{\mu} \gamma_i = \mu_0$; le coefficient d'absorption est bien celui du 'cas à un rayon'.

La : $\tau_i=1$; d'où $K_i=k_0$ ($i=1, 2$ ou $1, 2, 3$).

Il lui correspond bien: $K'_i=k_0$ et $\bar{\mu}=0$.

J. Interprétation de l'équation $D=0$

Cas d'une absorption faible

Jusqu'ici nous n'avons pas fait usage de l'hypothèse d'une absorption faible; dans ce qui suit, nous supposons que:

$$\frac{F''_0}{F'_0} \ll 1 \quad \text{et} \quad \frac{F^a_{jk}}{F'_0} \ll 1. \quad (54)$$

En négligeant $\left(\frac{F''_0}{F'_0}\right)^2$ et $\left(\frac{F^a_{jk}}{F'_0}\right)^2$ et les termes d'ordres supérieurs, D' et D'' se réduisent à leurs premiers termes respectifs [cf. (38)]:

$$\left. \begin{aligned} D' &\equiv D(\beta^d_{jk})=0 \\ D'' &\equiv \sum_{(jk)} b^a_{jk} \frac{\partial D}{\partial \beta^d_{jk}} = 0 \end{aligned} \right\} (55)$$

où nous avons utilisé (40).

D'autre part, d'après (22), β^d_{jk} se réduit à b^d_{jk} ; (55) peut donc encore s'écrire:

$$\left. \begin{aligned} D' &\equiv D(b^d_{jk})=0 \\ D'' &\equiv \sum_{(jk)} b^a_{jk} \frac{\partial D(b^d_{jk})}{\partial b^d_{jk}} = 0 \end{aligned} \right\} (56)$$

où b^d_{jk} et b^a_{jk} sont donnés par (23) et (23').

Les deux équations (56) donnent respectivement l'équation de la surface de dispersion et l'expression du coefficient d'absorption. Elles s'écrivent plus explicitement:

où nous avons posé :

$$a_{jk}^d = \frac{F_{jk}^d}{F_0^d}. \quad (58)$$

Nous rappelons que l'expression $D(T'_i; a_{jk}^d)$ s'obtient à partir de l'expression $D(\tau_i; \alpha_{jk})$ donnée par (30) ou (27) en y remplaçant τ_i par T'_i [cf. (17)] et α_{jk} par a_{jk}^d [cf. (58)].

À partir de maintenant, nous nous limiterons aux 'cas à deux rayons' ou 'à trois rayons non coplanaires'. Les variables T'_i sont donc indépendantes ainsi que les γ_i qui interviennent dans les T'_i .

(57a) est l'équation de la surface de dispersion rapportée aux axes t_i

(57b) s'écrit, en explicitant T'_i [cf. (53)] :

$$\mu = \frac{\sum_i \frac{\partial D}{\partial T'_i}}{\sum_i \gamma_i \frac{\partial D}{\partial T'_i}} \left[1 + \frac{F_0^d}{F_0^d} \frac{\sum_{(jk)} \frac{F_{jk}^d}{F_{jk}^d} a_{jk}^d \frac{\partial D}{\partial a_{jk}^d}}{\sum_i \frac{\partial D}{\partial T'_i}} \right], \quad (59)$$

où les sommations sur i portent sur $i=1, 2$ ou $i=1, 2, 3$.

Si l'on tient compte de (32) et (5), on constate que :

$$\sum_{(jk)} \frac{F_{jk}^d}{F_{jk}^d} a_{jk}^d \frac{\partial D}{\partial a_{jk}^d} \equiv \sum_{\substack{(jk) \\ j < k}} \frac{F_{jk}^d}{F_{jk}^d} a_{jk}^d \frac{\partial D}{\partial a_{jk}^d} + *, \quad (60)$$

relation qui peut permettre de simplifier le calcul de μ .

Nous remarquons que le crochet [] qui intervient dans l'expression de μ ne dépend pas de la direction \mathbf{N} , perpendiculaire aux plans d'équiamplitude, mais dépend seulement de l'équation de la surface de dispersion que, pour simplifier l'écriture, nous écrirons par la suite : $D=0$.

K. Coefficient d'absorption dans la direction du flux d'énergie

Les composantes suivant les vecteurs \mathbf{s}_i de la normale unité \mathbf{n} à la surface de dispersion au point (T'_i) sont respectivement proportionnelles à $\partial D / \partial T'_i$; en effet :

$$\text{Grad } D(T'_i; a_{jk}^d) = \sum_i \frac{\partial D}{\partial T'_i} \mathbf{s}_i. \quad (61)$$

D'autre part, le vecteur \mathbf{N} , perpendiculaire aux plans d'équiamplitude, satisfait à :

$$\mathbf{N} = \sum_i \gamma_i \mathbf{t}_i. \quad (62)$$

Enfin, mesurant les distances en unités de $\frac{1}{2}K'A'$ (quantité négative) on voit que :

$$\text{LoLa} = - \sum_i \mathbf{t}_i \quad (63)$$

et :

$$\text{LoT} = - \sum_i T'_i \mathbf{t}_i, \quad (64)$$

où T est un point caractéristique quelconque, donc un point quelconque de la surface de dispersion.

De (61) à (64), on déduit facilement :

$$\frac{\sum_i \frac{\partial D}{\partial T'_i}}{\sum_i \gamma_i \frac{\partial D}{\partial T'_i}} = \frac{(-\text{LoLa}, \mathbf{n})}{\cos \angle(\mathbf{N}, \mathbf{n})} \quad (65)$$

et :

$$\frac{\sum_i T'_i \frac{\partial D}{\partial T'_i}}{\sum_i \frac{\partial D}{\partial T'_i}} = \frac{(\text{LoT}, \mathbf{n})}{(\text{LoLa}, \mathbf{n})}. \quad (66)$$

Le coefficient d'absorption μ_n mesuré suivant la direction de \mathbf{n} , est relié à μ par :

$$\mu_n = \mu \cos \angle(\mathbf{N}, \mathbf{n}). \quad (67)$$

Donc, d'après (59) et (65) :

$$\mu_n = (-\text{LoLa}, \mathbf{n}) [], \quad (68)$$

qui met en évidence que, dans le cas d'une absorption faible, le coefficient d'absorption mesuré selon la direction de la normale à la surface de dispersion, ne dépend pas de l'orientation des plans d'équiamplitude, mais dépend seulement des caractères de la surface de dispersion au point considéré*.

D'autre part, nous savons que le flux d'énergie \mathbf{S} correspondant à un point caractéristique donné de la surface de dispersion est tel que (Batterman & Cole, 1964) :

$$\mathbf{S} = \sum_h |\mathbf{E}_h|^2 \mathbf{s}_h \quad (69)$$

où les $|\mathbf{E}_h|$ sont les modules des n composantes du champ électrique correspondant.

De plus, Kato (1958) et Ewald (1958), en faisant intervenir respectivement le vecteur de Poynting et la vitesse de groupe, ont pu montrer indépendamment que ce vecteur \mathbf{S} avait, dans l'hypothèse où l'on ne tient pas compte de l'absorption, la direction de la normale \mathbf{n} à la surface de dispersion au point considéré.

En conséquence, le coefficient d'absorption mesuré selon la direction du flux d'énergie, n'est autre que μ_n , pourvu que l'on choisisse la direction de \mathbf{n} telle que toutes les directions \mathbf{s}_h forment des angles aigus avec elle.

L. Coefficient d'absorption dans le cas du cristal semi-infini

On sait que, dans le cristal semi-infini, les plans d'équiamplitude sont parallèles à la surface du cristal. La direction de \mathbf{N} est donc bien déterminée, à savoir celle de la normale unité intérieure $\bar{\mathbf{n}}$ à la surface du cristal (Fig. 1). Par conséquent, le coefficient d'absorption correspondant $\bar{\mu}_n$ est donné par (59) où les γ_i sont tels que :

$$\gamma_i = \cos \angle(\mathbf{K}'_i, \bar{\mathbf{n}}). \quad (70)$$

Dans le cas du cristal semi-infini, on est amené à particulariser l'un des vecteurs d'onde, celui que nous caractériserons par l'indice 1, à savoir \mathbf{K}'_1 , comme cor-

* Ce résultat reste vrai dans le 'cas à n rayons'.

respondant à la continuation à l'intérieur du cristal du vecteur d'onde extérieur \mathbf{K}_0 (cf. Fig. 1). Nous appellerons le coefficient d'absorption mesuré suivant la direction d'incidence $\mu)_{eff}$ [cf. le $\mu_0)_{eff}$ de Batterman & Cole (1964); $\mu)_{eff}$ est relié à $\bar{\mu}_n$ par:

$$\mu)_{eff} = \gamma_1 \bar{\mu}_n, \quad (71)$$

où: $\gamma_1 = \cos \angle(\mathbf{K}'_1, \bar{\mathbf{n}}) \simeq \cos \angle(\mathbf{K}_0, \bar{\mathbf{n}})$.

Dans le cas particulier où la face d'entrée du cristal est parallèle au plan des vecteurs \mathbf{h}_2 et \mathbf{h}_3 , on a

$$\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_3 = \gamma;$$

nous désignerons ce cas sous le nom de *découpage symétrique* du cristal, pour lequel nous déduisons de (59) et (70):

$$\bar{\mu}_n)_{sym} = \frac{1}{\gamma} [] \quad (72)$$

On a de même

$$\mu)_{eff\ sym} = []. \quad (73)$$

M. Interprétation géométrique du coefficient d'absorption (absorption faible)

La parenthèse qui intervient dans l'expression des différents coefficients d'absorption [cf. (59)] peut encore s'écrire:

$$[] = 1 + \frac{\sum_{(jk)} a_{jk}^d \frac{\partial D}{\partial a_{jk}^d}}{\sum_i \frac{\partial D}{\partial T_i}} - \frac{\sum_{(jk)} \left[1 - \frac{F'_0}{F''_0} \frac{F_{jk}^a}{F_{jk}^d} \right] a_{jk}^d \frac{\partial D}{\partial a_{jk}^d}}{\sum_i \frac{\partial D}{\partial T_i}}$$

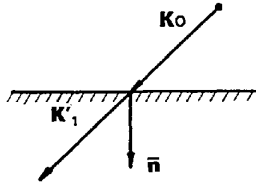


Fig. 1. Particularisation du vecteur d'onde \mathbf{K}'_1 dans le cas du cristal semi-infini.

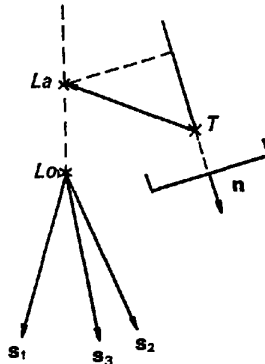


Fig. 2. Interprétation géométrique du coefficient d'absorption (absorption faible $\mu_n \simeq (-\mathbf{TLa}, \mathbf{n})$).

dont le second terme est, d'après le théorème d'Euler, égal à [cf. (39)]:

$$-\frac{\sum_i T'_i \frac{\partial D}{\partial T'_i}}{\sum_i \frac{\partial D}{\partial T'_i}}$$

ou encore, d'après (66), à

$$\frac{-(\mathbf{LoT}, \mathbf{n})}{(\mathbf{LoLa}, \mathbf{n})}.$$

On a par conséquent:

$$[] = 1 - \frac{\sum_i T'_i \frac{\partial D}{\partial T'_i}}{\sum_i \frac{\partial D}{\partial T'_i}} - B \quad (74)$$

ou encore:

$$[] = \frac{(\mathbf{TLa}, \mathbf{n})}{(\mathbf{LoLa}, \mathbf{n})} - B \quad (75)$$

où:

$$B = \frac{\sum_{(jk)} \left[1 - \frac{F'_0}{F''_0} \frac{F_{jk}^a}{F_{jk}^d} \right] a_{jk}^d \frac{\partial D}{\partial a_{jk}^d}}{\sum_i \frac{\partial D}{\partial T_i}}.$$

Remarque: Dans la partie I, nous avons vu que si, dans le cas à trois rayons, le point caractéristique T s'éloigne à l'infini sur l'une des couches de la surface de dispersion dans une direction \mathbf{t}_i ($T'_i \rightarrow \infty$), on retrouve le cas à 2 rayons. On voit de même que si le point caractéristique T s'éloigne à l'infini sur l'une des couches de la surface de dispersion dans la direction de plan $(\mathbf{t}_j, \mathbf{t}_k)$ ($T'_j \rightarrow \infty$; $T'_k \rightarrow \infty$), la parenthèse $[]$ tend vers l'unité. \mathbf{n} tend alors, en effet, vers le vecteur \mathbf{s}_i ; $(\mathbf{LoLa}, \mathbf{n})$ et $(\mathbf{TLa}, \mathbf{n})$ tendent vers -1 et B tend vers zéro, ce dernier résultat étant obtenu en considérant les infiniment grands d'ordres supérieurs par rapport à l'ensemble des T'_i . Il s'ensuit que μ_n tend vers l'unité et μ vers $[\cos \angle(\mathbf{N}, \mathbf{s}_i)]^{-1} = 1/\gamma_i$; on retrouve donc bien le 'cas à un rayon'.

Si les différents rapports F_{jk}^a/F_{jk}^d peuvent être considérés comme suffisamment voisins de F''_0/F'_0 pour que l'on puisse négliger, en première approximation, les différentes parenthèses qui interviennent dans B , on a:

$$[] \simeq \frac{(\mathbf{TLa}, \mathbf{n})}{(\mathbf{LoLa}, \mathbf{n})}$$

d'où:

$$\left. \begin{aligned} \mu &\simeq [\cos \angle(\mathbf{N}, \mathbf{n})]^{-1} (-\mathbf{TLa}, \mathbf{n}) \\ \mu_n &\simeq (-\mathbf{TLa}, \mathbf{n}) \\ \bar{\mu}_n)_{sym} &\simeq \frac{1}{\gamma} \left[1 - \frac{(\mathbf{LoT}, \mathbf{n})}{(\mathbf{LoLa}, \mathbf{n})} \right] \end{aligned} \right\} \quad (77)$$

Sous réserve de l'approximation mentionnée, le coefficient d'absorption est donc relié directement à la

distance à laquelle la surface de dispersion passe du point de Laue. En particulier, le coefficient d'absorption mesuré suivant la direction du flux d'énergie, est égal à la projection sur la normale à la surface de dispersion au point caractéristique considéré, du vecteur joignant ce point au point de Laue (Fig. 2).

D'autre part, pour les *points principaux*, à savoir les points d'intersection de la surface de dispersion avec l'axe principal ($T'_i = T'$ quel que soit i), on a :

$$\bar{\mu}_m)_{\text{sym}} \simeq \frac{1}{\gamma} [1 - T'] \quad (78)$$

$$\text{et } \mu)_{\text{eff sym}} \simeq 1 - T', \quad (79)$$

relations qui permettent de calculer, en première approximation, l'importance de l'effet Borrmann (simple et double) (Borrmann, 1951; 1965) et justifient l'hypothèse plus intuitive faite à la fin de la partie I.

Nous verrons dans le paragraphe qui suit que l'hypothèse: B négligeable est beaucoup plus justifiée si le cristal ne comporte qu'un seul type d'atomes que dans le cas général. Nous constaterons aussi que dans ce dernier cas une interprétation géométrique plus correcte que (77) et (78) devient possible.

N. Cristal composé d'un seul type d'atomes

$F_{h'-h}^d$ et $F_{h'-h}^a$ se réduisent à :

$$\left. \begin{aligned} F_{h'-h}^d &= F_{h'-h}^{d*} = f_{h'-h}^d \sum_s \exp\{-j(\mathbf{h}' - \mathbf{h}, \mathbf{x}_s)\} \\ F_{h'-h}^a &= F_{h'-h}^{a*} = f_{h'-h}^a \sum_s \exp\{-j(\mathbf{h}' - \mathbf{h}, \mathbf{x}_s)\} \end{aligned} \right\} \quad (80)$$

où nous avons utilisé :

$$f_{h'-h}^d = f_{h-h}^d \text{ et } f_{h'-h}^a = f_{h-h}^a. \quad (81)$$

Introduisons le 'facteur cristallin' :

$$G_{h'-h} = G_{h-h}^* = \frac{\sum_s \exp\{-j(\mathbf{h}' - \mathbf{h}, \mathbf{x}_s)\}}{\sum_s 1}; \quad (82)$$

α_{jk}^d et α_{jk}^a peuvent s'écrire [cf. (8)] :

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{jk}^d &= \alpha_{kj}^{d*} = \frac{f_{jk}^d}{f_0^d} G_{jk} + \frac{f_0^d}{f_0^d} \alpha_{jk}^a \\ \alpha_{jk}^a &= \alpha_{kj}^{a*} = \frac{f_{jk}^a}{f_0^a} G_{jk} - \frac{f_0^a}{f_0^a} \alpha_{jk}^d \end{aligned} \right\} \quad (83)$$

En particulier :

$$\alpha_{jk}^d = \alpha_{kj}^{d*} = \frac{f_{jk}^d}{f_0^d} G_{jk}. \quad (84)$$

D'une manière générale, les nombres complexes n'interviennent maintenant que par l'intermédiaire des 'facteurs cristallins' G_{jk} .

Dans le cas d'une absorption faible l'équation de la surface de dispersion se réduit donc à [cf. (57)] :

$$D(T'_i; \alpha_{jk}^d) \equiv D\left((T'_i; \frac{f_{jk}^d}{f_0^d} G_{jk})\right) = 0, \quad (85)$$

et dans l'expression des coefficients d'absorption [cf. (59)], la sommation $\sum_{(jk)}$ se réduit à :

$$\begin{aligned} \frac{F_0'}{F_0''} \sum_{(jk)} \frac{F_{jk}^a}{F_{jk}^d} \alpha_{jk}^d \frac{\partial D}{\partial \alpha_{jk}^d} &= \frac{f_0'}{f_0''} \sum_{(jk)} \frac{f_{jk}^a}{f_{jk}^d} \alpha_{jk}^d \frac{\partial D}{\partial \alpha_{jk}^d} \\ &= \frac{f_0'}{f_0''} \sum_{j < k} \frac{f_{jk}^a}{f_{jk}^d} \left(\alpha_{jk}^d \frac{\partial D}{\partial \alpha_{jk}^d} + * \right). \end{aligned} \quad (86)$$

Considérons successivement le 'cas à deux rayons' et le 'cas à trois rayons non coplanaires'.

(a) Dans le 'cas à deux rayons' la sommation sur (jk) se réduit à un seul terme, à savoir :

$$\frac{f_0'}{f_0''} \frac{f_{12}^a}{f_{12}^d} \left(\alpha_{12}^d \frac{\partial D}{\partial \alpha_{12}^d} + * \right)$$

qui, d'après le théorème d'Euler, est égal à :

$$- \frac{f_0'}{f_0''} \frac{f_{12}^a}{f_{12}^d} \sum_{i=1,2} T'_i \frac{\partial D}{\partial T'_i}.$$

Le coefficient d'absorption s'écrit donc [cf. (59)] :

$$\mu = \frac{\sum_{i=1,2} \frac{\partial D}{\partial T'_i}}{\sum_{i=1,2} \gamma_i \frac{\partial D}{\partial T'_i}} \left[1 - \frac{f_0'}{f_0''} \frac{f_{12}^a}{f_{12}^d} \sum_{i=1,2} T'_i \frac{\partial D}{\partial T'_i} \right], \quad (87)$$

l'équation de la surface de dispersion étant :

$$D(T'_1, T'_2; \frac{f_{12}^a}{f_0^d} G_{12}) = 0. \quad (88)$$

Etant données les propriétés de symétrie de l'équation $D=0$, le changement de variables :

$$T'_i = T_i \frac{f_{12}^a}{f_0^d} \quad (89)$$

conduit à :

$$D\left(T'_1, T'_2; \frac{f_{12}^a}{f_0^d} G_{12}\right) \equiv \left(\frac{f_{12}^a}{f_0^d}\right)^2 D(T_1, T_2; G_{12}) = 0. \quad (90)$$

Pour simplifier l'écriture par la suite, nous écrirons pour l'équation de la surface de dispersion, exprimée dans les variables T_i :

$$D(T_1, T_2; G_{12}) \equiv F(T_1, T_2; G_{12}) = 0, \quad (91)$$

sans oublier que $F(T_1, T_2; G_{12})$ s'obtient formellement à partir de $D(\tau_i; \alpha_{jk})$ en y remplaçant τ_i par T_i et α_{jk} par G_{jk} .

En utilisant les relations évidentes :

$$\sum_{i=1,2} T'_i \frac{\partial D}{\partial T'_i} \equiv \left(\frac{f_{12}^a}{f_0^d}\right)^2 \sum_{i=1,2} T_i \frac{\partial F}{\partial T_i} \quad (92)$$

et :

$$\sum_{i=1,2} \frac{\partial D}{\partial T'_i} \equiv \left(\frac{f_{12}^a}{f_0^d}\right) \sum_{i=1,2} \frac{\partial F}{\partial T_i}, \quad (92')$$

on peut écrire:

$$\mu = \frac{\sum_{i=1,2} \frac{\partial F}{\partial T_i}}{\sum_{i=1,2} \gamma_i \frac{\partial F}{\partial T_i}} \left[1 - \frac{f_{12}''}{f_0''} \frac{\sum_{i=1,2} T_i \frac{\partial F}{\partial T_i}}{\sum_{i=1,2} \frac{\partial F}{\partial T_i}} \right]. \quad (93)$$

L'introduction du point $\mathcal{L}a$ tel que $T_i=1$ (donc $T'_i = f'_{12}/f'_0$) quel que soit i , permet d'écrire (93) sous la forme:

$$\mu = \frac{f'_0}{f'_{12}} \frac{(-\mathbf{Lo}\mathcal{L}a, \mathbf{n})}{\cos \angle(\mathbf{N}, \mathbf{n})} \left[1 + \frac{f'_{12}}{f'_0} \frac{(\mathbf{Lo}\mathbf{T}, \mathbf{n})}{(-\mathbf{Lo}\mathcal{L}a, \mathbf{n})} \right], \quad (94)$$

ou encore:

$$\mu = \frac{f'_0}{f'_{12}} [\cos \angle(\mathbf{N}, \mathbf{n})]^{-1} \left[(-\mathbf{T}\mathcal{L}a, \mathbf{n}) + \left(1 - \frac{f'_{12}}{f'_0} \right) \times (\mathbf{T}\mathbf{Lo}, \mathbf{n}) \right] \simeq \frac{f'_0}{f'_{12}} [\cos \angle(\mathbf{N}, \mathbf{n})]^{-1} (-\mathbf{T}\mathcal{L}a, \mathbf{n}), \quad (95)$$

f'_{12}/f'_0 étant généralement très peu différent de l'unité, du moins pour les bas ordres de réflexion.

Il s'ensuit en particulier:

$$\begin{aligned} \mu_n &= \mu \cos \angle(\mathbf{N}, \mathbf{n}) \\ &\simeq \frac{f'_0}{f'_{12}} (-\mathbf{T}\mathcal{L}a, \mathbf{n}). \end{aligned} \quad (96)$$

(95) et (96) mettent en évidence que c'est la distance de la surface de dispersion au point $\mathcal{L}a$, homothétique du point de Laue \mathbf{La} par rapport au point de Lorentz \mathbf{Lo} , dans le rapport f'_{12}/f'_0 , qui est reliée au coefficient d'absorption (cf. Fig. 3).

Dans le cas de la 'découpe' symétrique du cristal, on a en particulier [cf. (72), (73), (93)]:

$$\left. \begin{aligned} \bar{\mu}_n)_{\text{sym}} &= \frac{1}{\gamma} \left[1 - \frac{f'_{12}}{f'_0} \frac{\sum_{i=1,2} T_i \frac{\partial F}{\partial T_i}}{\sum_{i=1,2} \frac{\partial F}{\partial T_i}} \right] \\ \mu)_{\text{eff sym}} &= \gamma \bar{\mu}_n)_{\text{sym}}. \end{aligned} \right\} \quad (97)$$

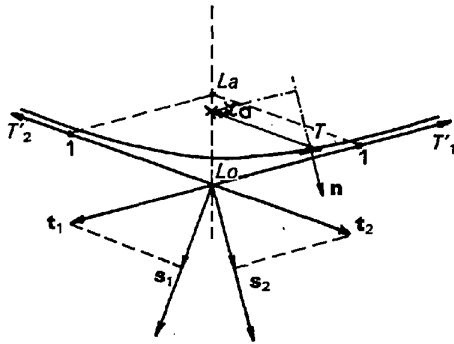


Fig. 3. Interprétation géométrique du coefficient d'absorption (absorption faible) dans le 'cas à deux rayons' si le cristal est composé d'un seul type d'atomes. $\mu_n \simeq (f'_0/f'_{12})(-\mathbf{T}\mathcal{L}a, \mathbf{n})$.

Les points principaux définis par: $T'_i = T'$ satisfont donc, d'après (89), à $T_i = T \equiv T'f'_0/f'_{12}$, les valeurs de T étant solution de:

$$F(T, T; G_{12}) = 0. \quad (98)$$

Les coefficients d'absorption correspondants sont donc, d'après (97):

$$\left. \begin{aligned} \bar{\mu}_n)_{\text{sym}} &= \frac{1}{\gamma} \left[1 - \frac{f'_{12}}{f'_0} T \right] \\ \mu)_{\text{eff sym}} &= 1 - \frac{f'_{12}}{f'_0} T \end{aligned} \right\} \quad (99)$$

Notons que, moyennant l'hypothèse d'une absorption faible, (97) et (99) sont des relations rigoureuses.

(b) Dans le 'cas à trois rayons', la sommation sur (jk) se réduit à trois termes, d'où l'expression du coefficient d'absorption [cf. (59)]:

$$\mu = \frac{\sum_{i=1}^3 \frac{\partial D}{\partial T'_i}}{\sum_{i=1}^3 \gamma_i \frac{\partial D}{\partial T'_i}} \left[1 + \frac{f'_{12}}{f'_0} \frac{f'_{12} (a_{12}^4 \frac{\partial D}{\partial a_{12}^4} + *)}{\sum_{i=1}^3 \frac{\partial D}{\partial T'_i}} + C + C \right] \quad (100)$$

l'équation de la surface de dispersion étant:

$$D(T'_i; a_{jk}^4) \equiv D\left(T'_i; \frac{f'_{jk}}{f'_0} G_{jk}\right) (i \text{ ou } j \text{ ou } k = 1, 2, 3). \quad (101)$$

Comme dans le 'cas à deux rayons', un changement de variables adéquat permet de simplifier (100) et (101). Pour celui-ci, nous distinguerons toutefois deux cas, selon que tous les α_{jk} sont différents de zéro, ou que l'un d'entre eux est nul (le cas où deux sont nuls étant sans intérêt).

(i) Tous les α_{jk} sont différents de zéro

Posons:

$$f'_{12}/f'_0 = f'_3; C; C; \quad (102)$$

et introduisons le changement de variables:

$$T'_1 = T_1 \frac{f'_2 f'_3}{f'_1}; C; C. \quad (103)$$

Étant données les propriétés de symétrie de l'équation $D=0$, on a:

$$D\left(T'_i; \frac{f'_{jk}}{f'_0} G_{jk}\right) \equiv (f'_1 f'_2 f'_3)^2 D(T_i; G_{jk}) = 0. \quad (104)$$

Pour simplifier l'écriture, nous poserons comme dans le 'cas à deux rayons':

$$D(T_i; G_{jk}) = F(T_i; G_{jk})$$

et écrirons l'équation de la surface de dispersion, exprimée avec les variables T_i :

$$F(T_i; G_{jk}) = 0 \quad (105)$$

sans oublier que $F(T_i; G_{jk})$ s'obtient formellement à partir de $D(\tau_i; \alpha_{jk})$ en y remplaçant τ_i par T_i et α_{jk} par G_{jk} .

Exprimée en fonction des variables T_i , (100) s'écrit :

$$\mu = \frac{\frac{\partial F}{\partial T_1} \frac{f'_1}{f'_2 f'_3} + C + C}{\gamma_1 \frac{\partial F}{\partial T_1} \frac{f'_1}{f'_2 f'_3} + C + C} \left[1 + \frac{\frac{f''_{12}}{f'_0} \frac{1}{f'_3} \left(G_{12} \frac{\partial F}{\partial G_{12}} + * \right) + C + C}{\frac{\partial F}{\partial T_1} \frac{f'_1}{f'_2 f'_3} + C + C} \right], \quad (106)$$

(1) Si l'on néglige la correction due à la diffusion, posant :

$$f'_1 = 1 \text{ et } f''_{jk} = f''_0,$$

les variables T'_i coïncident avec les variables T_i ; l'expression de μ se réduit à :

$$\mu = \frac{\sum_{i=1}^3 \frac{\partial F}{\partial T_i}}{\sum_{i=1}^3 \gamma_i \frac{\partial F}{\partial T_i}} \left[1 + \frac{\sum_{\substack{(jk) \\ j < k}} \left(G_{jk} \frac{\partial F}{\partial G_{jk}} + * \right)}{\sum_{i=1}^3 \frac{\partial F}{\partial T_i}} \right],$$

c'est-à-dire d'après le théorème d'Euler :

$$\mu = \frac{\sum_{i=1}^3 \frac{\partial F}{\partial T_i}}{\sum_{i=1}^3 \gamma_i \frac{\partial F}{\partial T_i}} \left[1 - \frac{\sum_{i=1}^3 T_i \frac{\partial F}{\partial T_i}}{\sum_{i=1}^3 \frac{\partial F}{\partial T_i}} \right] \quad (107)$$

d'où :

$$\mu = [\cos \angle(\mathbf{N}, \mathbf{n})]^{-1} (-\mathbf{TLa}, \mathbf{n}), \quad (108)$$

d'interprétation géométrique évidente.

Notons que ce cas peut correspondre en particulier à celui d'une 'base écroulée' ('collapsed' base).

(2) Si l'on introduit une correction moyenne de diffusion, posant :

$$\left. \begin{aligned} f'_{jk} &= f' = \frac{1}{3}(f'_{12} + C + C) \\ f''_{jk} &= f'' = \frac{1}{3}(f''_{12} + C + C) \end{aligned} \right\} \quad (109)$$

le changement de variables (103) devient :

$$T'_i = \frac{f'_i}{f'_0} T_i \quad (110)$$

et le coefficient d'absorption s'écrit :

$$\mu = \frac{\frac{\partial F}{\partial T_1} \frac{f'_1}{f'^2} + \left(\frac{\partial F}{\partial T_2} + \frac{\partial F}{\partial T_3} \right) \frac{1}{f'_1}}{\gamma_1 \frac{\partial F}{\partial T_1} \frac{f'_1}{f'^2} + \left(\gamma_2 \frac{\partial F}{\partial T_2} + \gamma_3 \frac{\partial F}{\partial T_3} \right) \frac{1}{f'_1}} \left[1 + \frac{f'_0}{f'_0} \frac{\frac{f''_{12}}{f'_{12}} \left[G_{12} \frac{\partial F}{\partial G_{12}} + G_{13} \frac{\partial F}{\partial G_{13}} + * \right] + \frac{f''_{23}}{f'_{23}} \left[G_{23} \frac{\partial F}{\partial G_{23}} + * \right]}{\frac{\partial F}{\partial T_1} \frac{f'_1}{f'^2} + \left(\frac{\partial F}{\partial T_2} + \frac{\partial F}{\partial T_3} \right) \frac{1}{f'_1}} \right] \quad (118)$$

$$\mu = \frac{\sum_{i=1}^3 \frac{\partial F}{\partial T_i}}{\sum_{i=2}^3 \gamma_i \frac{\partial F}{\partial T_i}} \left[1 - \frac{f''}{f'_0} \frac{\sum_{i=1}^3 T_i \frac{\partial F}{\partial T_i}}{\sum_{i=1}^3 \frac{\partial F}{\partial T_i}} \right] \quad (111)$$

après utilisation du théorème d'Euler.

Comme dans le 'cas à deux rayons', l'introduction du point $\mathcal{L}a$ tel que $T_i = 1$ (donc $T'_i = f'/f'_0$) permet d'écrire (111) sous la forme :

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{f'_0}{f''} [\cos \angle(\mathbf{N}, \mathbf{n})]^{-1} [(-\mathbf{TLa}, \mathbf{n}) + (1 - f''/f'_0)(\mathbf{TLo}, \mathbf{n})] \\ &\simeq \frac{f'_0}{f''} [\cos \angle(\mathbf{N}, \mathbf{n})]^{-1} (\mathbf{TLa}, \mathbf{n}), \end{aligned} \quad (112)$$

d'interprétation géométrique évidente.

Pour une 'découpe symétrique' on a en particulier :

$$\left. \begin{aligned} \bar{\mu}_n)_{\text{sym}} &= \frac{1}{\gamma} \left[1 - \frac{f''}{f'_0} \frac{\sum_{i=1}^3 T_i \frac{\partial F}{\partial T_i}}{\sum_{i=1}^3 \frac{\partial F}{\partial T_i}} \right] \\ \mu)_{\text{eff sym}} &= \gamma \bar{\mu}_n)_{\text{sym}}. \end{aligned} \right\} \quad (113)$$

Les points principaux : $T'_i = T'$ (d'où $T_i = T \equiv T'f'_0/f'$) satisfont à :

$$F(T, T, T; G_{jk}) = 0, \quad (114)$$

et les coefficients d'absorption correspondants sont, d'après (113) :

$$\left. \begin{aligned} \bar{\mu}_n)_{\text{sym}} &= \frac{1}{\gamma} \left[1 - \frac{f''}{f'_0} T \right] \\ \mu)_{\text{eff sym}} &= 1 - \frac{f''}{f'_0} T. \end{aligned} \right\} \quad (115)$$

(3) Dans le cas particulier où $s_{12} = s_{13}$, cas d'espèce considéré dans les applications, on a : $f'_{12} = f'_{13}$ et $f''_{12} = f''_{13}$. Posons :

$$\frac{f'_{12}}{f'_0} = \frac{f'_{13}}{f'_0} = f', \text{ conservant la notation } f'_i = \frac{f'_{23}}{f'_0}. \quad (116)$$

Le changement de variables (103) devient :

$$T'_1 = T_1 \frac{f'^2}{f'_1}; \quad T'_2 = T_2 f'_1; \quad T'_3 = T_3 f'_1. \quad (117)$$

La droite $T_1 = T_2 = T_3 = T$ ne coïncide plus avec l'axe principal : $T'_1 = T'_2 = T'_3 = T'$ comme dans le cas (2).

Le coefficient d'absorption s'écrit :

Si l'on fait l'approximation $f'_{12}=f'_{23}$ et $f''_{12}=f''_{23}$, on retrouve évidemment une expression analogue à (111) et ses conséquences.

(ii) *L'un des α_{jk} est nul; par exemple α_{23}*

Introduisons le changement de variables:

$$T'_1 = T_1 \sqrt{f'_2 f'_3}; \quad T'_2 = T_2 \sqrt{f'_2 f'_3} \frac{f'_3}{f'_2}; \quad T'_3 = T_3 \sqrt{f'_2 f'_3} \frac{f'_2}{f'_3}. \quad (119)$$

On constate aisément que:

$$D(T'_i; \frac{f'_{jk}}{f'_0} G_{jk}) \equiv f'^2_2 f'^2_3 D(T_i; G_{jk}).$$

Nous poserons encore:

$$D(T_i; G_{jk}) = F(T_i; G_{jk})$$

où $F(T_i; G_{jk})$ s'obtient à partir de $D(\tau_i; \alpha_{jk})$ en y remplaçant τ_i par T_i et α_{jk} par G_{jk} .

L'équation de la surface de dispersion s'écrit donc:

$$F(T_i; G_{jk}) = 0. \quad (120)$$

Exprimé en fonction des variables T_i , (100) s'écrit:

$$\mu = \frac{\frac{\partial F}{\partial T_1} + \frac{f'_2}{f'_3} \frac{\partial F}{\partial T_2} + \frac{f'_3}{f'_2} \frac{\partial F}{\partial T_3}}{\gamma_1 \frac{\partial F}{\partial T_1} + \gamma_2 \frac{f'_2}{f'_3} \frac{\partial F}{\partial T_2} + \gamma_3 \frac{f'_3}{f'_2} \frac{\partial F}{\partial T_3}} \left[1 + \frac{f'_0}{f'_0} \frac{f''_{12}}{f''_{12}} \left(G_{12} \frac{\partial F}{\partial G_{12}} + * \right) + \frac{f''_{13}}{f''_{13}} \left(G_{13} \frac{\partial F}{\partial G_{13}} + * \right) \right] \frac{1}{\sqrt{f'_2 f'_3} \left[\frac{\partial F}{\partial T_1} + \frac{f'_2}{f'_3} \frac{\partial F}{\partial T_2} + \frac{f'_3}{f'_2} \frac{\partial F}{\partial T_3} \right]} \quad (121)$$

(1) *Si l'on néglige la correction due à la diffusion*, on retrouve (107) et ses conséquences.

(2) *Si l'on introduit une correction moyenne de diffusion*, posant:

$$f'_{12}=f'_{13}=f' = \frac{1}{2}(f'_{12}+f'_{13}) \\ f''_{12}=f''_{13}=f'' = \frac{1}{2}(f''_{12}+f''_{13}),$$

on retrouve (111) et ses conséquences.

(3) *Dans le cas particulier où $s_{12}=s_{13}$* , cas d'espèce considéré dans les applications, on a: $f'_{12}=f'_{13}$ et $f''_{12}=f''_{13}$. Posons:

$$f'_2=f'_3=f'.$$

Le changement de variables (119) se réduit à:

$$T'_i = f' T_i. \quad (122)$$

L'expression de μ s'écrit [cf. (121)]:

$$\mu = \frac{\sum_{i=1}^3 \frac{\partial F}{\partial T_i}}{\sum_{i=1}^3 \gamma_i \frac{\partial F}{\partial T_i}} \left[1 - \frac{f''_{12}}{f''_0} \frac{\sum_{i=1}^3 T_i \frac{\partial F}{\partial T_i}}{\sum_{i=1}^3 \frac{\partial F}{\partial T_i}} \right], \quad (123)$$

après utilisation du théorème d'Euler.

Comme dans les cas précédents, introduisons le point $\mathcal{L}a$, homothétique de $\mathbf{L}a$, par rapport à $\mathbf{L}o$ dans le rapport f' . (123) s'écrit:

$$\mu = \frac{1}{f'} [\cos \angle(\mathbf{N}, \mathbf{n})]^{-1} \left[(-\mathbf{T}\mathbf{L}a, \mathbf{n}) + \left(1 - \frac{f''_{12}}{f''_0} (\mathbf{T}\mathbf{L}o, \mathbf{n}) \right) \right] \quad (124)$$

$$\simeq \frac{1}{f'} [\cos \angle(\mathbf{N}, \mathbf{n})]^{-1} (-\mathbf{T}\mathbf{L}a, \mathbf{n}), \quad (124')$$

f''_{12}/f''_0 étant généralement très peu différent de l'unité. Il s'ensuit en particulier:

$$\mu_n = \mu \cos \angle(\mathbf{N}, \mathbf{n}) \\ \simeq \frac{1}{f'} (-\mathbf{T}\mathcal{L}a, \mathbf{n}), \quad (125)$$

d'interprétation géométrique évidente.

En cas de 'découpage symétrique' on a:

$$(\bar{\mu}_n)_{\text{sym}} = \frac{1}{\gamma} \left[1 - \frac{f''_{12}}{f''_0} \frac{\sum_{i=1}^3 T_i \frac{\partial F}{\partial T_i}}{\sum_{i=1}^3 \frac{\partial F}{\partial T_i}} \right] \quad (126)$$

d'où: $\mu)_{\text{eff sym}} = \gamma \bar{\mu}_n)_{\text{sym}}$.

Les points principaux définis par $T'_i = T'$ satisfont, d'après (122), à $T_i = T \equiv T'/f'$ et sont donc solutions de:

$$F(T, T, T; G_{jk}) = 0. \quad (127)$$

Les coefficients d'absorption correspondants sont, d'après (126):

$$\left. \begin{aligned} (\bar{\mu}_n)_{\text{sym}} &= \frac{1}{\gamma} \left[1 - \frac{f''_{12}}{f''_0} T \right] \\ \mu)_{\text{eff sym}} &= 1 - \frac{f''_{12}}{f''_0} T. \end{aligned} \right\} \quad (128)$$

Sous l'hypothèse d'une absorption faible, (123), (124), (126) et (128) sont des expressions *rigoureuses*.

2. 'CAS À DEUX RAYONS'

Les équations (26) se réduisent à

$$\left. \begin{aligned} (r_1 - 1)\mathbf{T}_1 + r_2 \alpha_{12} \mathbf{T}_2 &= \lambda_1 \mathbf{s}_1 \\ r_1 \alpha_{21} \mathbf{T}_1 + (r_2 - 1)\mathbf{T}_2 &= \lambda_2 \mathbf{s}_2 \end{aligned} \right\} \quad (129)$$

qui comportent les deux solutions.

(1) $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$

\mathbf{T}_1 et \mathbf{T}_2 sont parallèles, donc aussi \mathbf{E}_1 et \mathbf{E}_2 . C'est le cas de la polarisation σ . (27) se réduit à:

$$D_0 \equiv \tau_1 \tau_2 - \alpha_{12} \alpha_{21} = 0$$

et:

$$\mathbf{E}_2 = -\frac{\tau_1}{\alpha_{12}} \mathbf{E}_1 = -\frac{\alpha_{21}}{\tau_2} \mathbf{E}_1,$$

d'où

$$|\mathbf{E}_2|^2/|\mathbf{E}_1|^2 = |\tau_1|/|\tau_2|.$$

(2) *L'un au moins des λ_i est différent de zéro*
(30) se réduit à :

$$D \equiv \tau_1 \tau_2 - s_{12}^2 \alpha_{12} \alpha_{21} = 0,$$

et (28) conduit à :

$$\left. \begin{aligned} D_{0r_1} \mathbf{T}_1 &= \tau_2 [\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2 / s_{12}] \lambda_1 \\ D_{0r_2} \mathbf{T}_2 &= \alpha_{21} [s_{12} \mathbf{s}_2 - \mathbf{s}_1] \lambda_2. \end{aligned} \right\}$$

\mathbf{E}_1 et \mathbf{E}_2 sont donc des combinaisons linéaires de \mathbf{s}_1 et \mathbf{s}_2 . C'est le cas de la polarisation π . On vérifie facilement que :

$$|\mathbf{E}_2|^2/|\mathbf{E}_1|^2 = |\tau_1|/|\tau_2|.$$

Les deux solutions peuvent se grouper en une seule :

$$\left. \begin{aligned} D(\tau_i; \alpha_{jk}) &\equiv \tau_1 \tau_2 - P^2 \alpha_{12} \alpha_{21} = 0 \\ |\mathbf{E}_2|^2/|\mathbf{E}_1|^2 &= |\tau_1|/|\tau_2|. \end{aligned} \right\} \quad (130)$$

où $\begin{cases} P=1 & (\text{polarisation } \sigma) \\ P=s_{12}^2 & (\text{polarisation } \pi) \end{cases}$

Dans le cas d'une absorption faible, l'équation de la surface de dispersion s'écrit donc [cf. (57)] :

$$D(T'_i; a_{jk}^d) \equiv T'_1 T'_2 - P^2 |a_{12}^d|^2 = 0. \quad (131)$$

Sous la même approximation, $|\tau_1|/|\tau_2| = T'_1/T'_2$, T'_1 et T'_2 étant toujours de même signe. Les composantes suivant \mathbf{s}_1 et \mathbf{s}_2 de la normale \mathbf{n} à la surface de dispersion étant, d'après 1, § K et (131), respectivement proportionnelles à T'_2 et T'_1 , on vérifie bien que le vecteur flux d'énergie \mathbf{S} a la direction de \mathbf{n} [cf. (69), (130)].

D'autre part, d'après (59), on a pour le coefficient d'absorption :

$$\mu = \frac{T'_2 + T'_1}{\gamma_1 T'_2 + \gamma_2 T'_1} \left[1 - \frac{F'_0}{F_0} \frac{P^2 |a_{12}^d|^2 \left(\frac{F_{12}''}{F_{12}^d} + * \right)}{T'_2 + T'_1} \right] \quad (132)$$

qui peut encore s'écrire :

$$\mu = \frac{T'_2 + T'_1}{\gamma_1 T'_2 + \gamma_2 T'_1} \left[1 - \frac{2T'_1 T'_2}{T'_2 + T'_1} \frac{F'_0}{F_0} \frac{1}{2} \left(\frac{F_{12}''}{F_{12}^d} + * \right) \right] \quad (132')$$

Remarquons que l'on a :

$$\mathbf{n} = \frac{|T'_2| \mathbf{s}_1 + |T'_1| \mathbf{s}_2}{\sqrt{T_1'^2 + T_2'^2 + 2T_1' T_2' s_{12}}}.$$

Si le cristal est composé d'un seul type d'atomes, l'équation de la surface de dispersion exprimée dans les variables T_i [cf. (89) et (90)] s'écrit :

$$D(T_i; G_{jk}) \equiv F(T_i; G_{jk}) = T_1 T_2 - P^2 |G_{12}|^2 = 0, \quad (133)$$

et l'expression de μ se réduit à [cf. (93)] :

$$\mu = \frac{T_2 + T_1}{\gamma_1 T_2 + \gamma_2 T_1} \left[1 - \frac{f_{12}''}{f_0''} \frac{2T_1 T_2}{T_2 + T_1} \right]. \quad (134)$$

Dans le cas où $\gamma_1 = \gamma_2$:

$$\bar{\mu}_n)_{\text{sym}} = \frac{1}{\gamma} \left[1 - \frac{f_{12}''}{f_0''} \frac{2T_1 T_2}{T_1 + T_2} \right] \quad (135)$$

où

$$\gamma = \cos \frac{1}{2} \angle(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2); \quad (135')$$

d'où pour les points principaux solutions de :

$$T^2 - P^2 |G_{12}|^2 = 0, \quad (136)$$

$$\bar{\mu}_n)_{\text{sym}} = \frac{1}{\gamma} \left[1 - \frac{f_{12}''}{f_0''} T \right].$$

3. 'CAS A TROIS RAYONS NON COPLANAIRES'

La condition de compatibilité des équations de la théorie dynamique (30) se réduit à (cf. [II] [39]) :

$$\begin{aligned} D(\tau_i; \alpha_{jk}) &\equiv \tau_{123}^2 - \tau_{123} \{ \tau_1 \alpha_{23} \alpha_{32} (1 + s_{23}^2) + \text{C} + \text{C} \} \\ &- \tau_{123} 2\text{C} (s_{123} - \Sigma s_{jk}^2) + 2s_{123} \{ \tau_{12} \alpha_{2331} \alpha_{1332} + \text{C} + \text{C} \} \\ &+ \{ \tau_{12} \alpha_{2331} \alpha_{1332} (1 - s_{12}^2) + \text{C} + \text{C} \} \\ &+ \{ \tau_1^2 \alpha_{23}^2 \alpha_{32}^2 s_{23}^2 + \text{C} + \text{C} \} - 2\text{C} \{ \tau_1 \alpha_{23} \alpha_{32} (s_{123} + s_{23}^2) + \text{C} \\ &+ \text{C} \} + (2\text{C})^2 s_{123} - \alpha_{123} \alpha_{321} v_s^2 = 0 \end{aligned} \quad (137)$$

où :

$$2\text{C} = \alpha_{123} + \alpha_{321}, \quad (137')$$

et dans l'écriture de laquelle nous avons utilisé les mêmes conventions que dans I.

Dans le cas d'une absorption faible, l'équation de la surface de dispersion s'écrit donc [cf. (57)] :

$$\begin{aligned} D(T'_i; a_{jk}^d) &\equiv T_{123}'^2 - T_{123}' \{ T_2' |a_{23}^d|^2 (1 + s_{23}^2) + \text{C} + \text{C} \} \\ &- T_{123}' 2\text{C}^d (s_{123} - \Sigma s_{jk}^2) + 2s_{123} \{ T_{12}' |a_{2331}^d|^2 + \text{C} + \text{C} \} \\ &+ \{ T_{12}' |a_{2331}^d|^2 (1 - s_{12}^2) + \text{C} + \text{C} \} + \{ T_1'^2 |a_{23}^d|^4 s_{23}^2 + \text{C} + \text{C} \} \\ &- 2\text{C}^d \{ T_1' |a_{23}^d|^2 (s_{123} + s_{23}^2) + \text{C} + \text{C} \} \\ &+ (2\text{C}^d)^2 s_{123} - |a_{123}^d|^2 v_s^2 = 0 \end{aligned} \quad (138)$$

où :

$$2\text{C}^d = a_{123}^d + a_{321}^d; \quad (138')$$

et le coefficient d'absorption μ est donné par [cf. (59)] :

$$\mu = \frac{\sum_{i=1}^3 \frac{\partial D}{\partial T_i'}}{\sum_{i=1}^3 \gamma_i \frac{\partial D}{\partial T_i'}} \left[1 + \frac{F'_0}{F_0} \frac{\left[\frac{F_{23}^a}{F_{23}^d} a_{23}^d \frac{\partial D}{\partial a_{23}^d} + \text{C} + \text{C} \right] + *}{\sum_{i=1}^3 \frac{\partial D}{\partial T_i'}} \right] \quad (139)$$

où :

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial D}{\partial T_1'} &= 2T_{123}' T_{23}' - T_{23}' \{ T_1' |a_{23}^d|^2 (1 + s_{23}^2) + \text{C} + \text{C} \} \\ &- T_{123}' |a_{23}^d|^2 (1 + s_{23}^2) - T_{23}' 2\text{C}^d (s_{123} - \Sigma s_{jk}^2) \\ &+ 2s_{123} \{ T_2' |a_{1332}^d|^2 + T_3' |a_{1223}^d|^2 \} + T_2' |a_{1332}^d|^2 (1 - s_{12}^2) \\ &+ T_3' |a_{1223}^d|^2 (1 - s_{13}^2) + 2T_1' |a_{23}^d|^4 s_{23}^2 \\ &- 2\text{C}^d |a_{23}^d|^2 (s_{123} + s_{23}^2) \\ \frac{\partial D}{\partial T_2'} &= \text{C}; \quad \frac{\partial D}{\partial T_3'} = \text{C}. \end{aligned} \right\} \quad (140)$$

et:

$$\left. \begin{aligned} a_{23}^d \frac{\partial D}{\partial a_{23}^d} &= -|a_{23}^d|^2(T'_{12} - |a_{12}^d|^2)(T'_{13} - |a_{13}^d|^2) \\ &\quad - s_{123}\{a_{123}^d T'_{123} + a_{123}^d(T'_1 |a_{23}^d|^2 + C + C)\} \\ &\quad + 2C^d T'_1 |a_{23}^d|^2 - 2T'_1 |a_{23}^d|^2 (|a_{12}^d|^2 T'_3 + |a_{31}^d|^2 T'_2) \\ &\quad - 2(a_{123}^d)^2 + s_{23}^2 \{ |a_{23}^d|^2 [T_1'^2 |a_{23}^d|^2 - 2C^d T'_1 \\ &\quad + |a_{3112}^d|^2] + [T'_{23} - |a_{23}^d|^2] [a_{123}^d T'_1 - |a_{23}^d|^2 T_1'^2] \} \\ &\quad + s_{31}^2 (T'_{31} - |a_{31}^d|^2) (a_{123}^d T'_2 - |a_{1223}^d|^2) \\ &\quad + s_{12}^2 (T'_{12} - |a_{12}^d|^2) (a_{123}^d T'_3 - |a_{2331}^d|^2) \\ a_{31}^d \frac{\partial D}{\partial a_{31}^d} &= C; \quad a_{12}^d \frac{\partial D}{\partial a_{12}^d} = C. \end{aligned} \right\} (141)$$

Si le cristal est composé d'un seul type d'atomes, (138) et (139) se réduisent à (101) et (100) faciles à expliciter.

(1) Si tous les α_{jk} sont différents de zéro, l'équation de la surface de dispersion s'écrit [cf. (105)]:

$$F(T_i; G_{jk}) \equiv D(T_i; G_{jk}) = 0 \quad (142)$$

et peut donc s'obtenir facilement à partir de (138) en y remplaçant T'_i par T_i et a_{jk}^d par G_{jk} .

Le coefficient d'absorption μ est donné par (106) où les dérivées partielles $\partial F/\partial T_i$ s'obtiennent à partir de (140) en y remplaçant T'_i par T_i et a_{jk}^d par G_{jk} . Les termes contenant les dérivées partielles $\partial F/\partial G_{jk}$ s'obtiennent de même à partir de (141); plus précisément:

$$\left. \begin{aligned} \left[G_{13} \frac{\partial F}{\partial G_{23}} + * \right] \\ = -2|G_{23}|^2(T_{12} - |G_{12}|^2)(T_{31} - |G_{31}|^2) \\ - s_{123}\{2C[T_{123} + 3|G_{23}|^2 T_1 + |G_{31}|^2 T_2 \\ + |G_{12}|^2 T_3] - 4T_1 |G_{23}|^2 [|G_{12}|^2 T_3 + |G_{31}|^2 T_2] \\ + 4|G_{123}|^2 - 2(2C')^2\} + 2s_{23}^2 \{ |G_{23}|^2 [T_1^2 |G_{23}|^2 \\ - 2C' T_1 + |G_{3112}|^2] + (T_{23} - |G_{23}|^2) (\frac{1}{2} 2C' T_1 \\ - |G_{23}|^2 T_1^2) \} + s_{31}^2 (T_{31} - |G_{31}|^2) (2C' T_2 - 2|G_{1223}|^2) \\ + s_{12}^2 (T_{12} - |G_{12}|^2) (2C' T_3 - 2|G_{2331}|^2); \\ \left[G_{31} \frac{\partial F}{\partial G_{31}} + * \right] = C; \quad \left[G_{12} \frac{\partial F}{\partial G_{12}} + * \right] = C. \end{aligned} \right\} (143)$$

où:

$$2C' = G_{123} + G_{321}. \quad (143')$$

(2) Si l'un des α_{jk} , par exemple α_{23} , est nul, l'équation de la surface de dispersion exprimée avec les variables T_i [cf. (119)] s'écrit:

$$\begin{aligned} F(T_i; G_{jk}) \equiv D(T_i; G_{jk}) &\equiv T_{123}^2 - T_{123}[T_2 |G_{31}|^2 (1 + s_{31}^2) \\ &\quad + T_3 |G_{12}|^2 (1 + s_{12}^2)] + 2s_{123} T_{23} |G_{3112}|^2 + T_{23} |G_{3112}|^2 (1 - s_{23}^2) \\ &\quad + T_2^2 |G_{31}|^4 s_{31}^2 + T_3^2 |G_{12}|^4 s_{12}^2 = 0, \end{aligned} \quad (144)$$

et le coefficient d'absorption μ est donné par (121) où:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial T_1} &= T_{23}[T_2(T_{31} - |G_{31}|^2) + T_3(T_{12} - |G_{12}|^2) \\ &\quad - s_{12}^2 |G_{12}|^2 T_3 - s_{31}^2 |G_{31}|^2 T_2] \\ \frac{\partial F}{\partial T_2} &= T_3(T_{31} - |G_{31}|^2)(T_{12} - |G_{12}|^2) + T_{123}(T_{31} \\ &\quad - |G_{31}|^2) + 2s_{123} |G_{3112}|^2 T_3 - s_{12}^2 |G_{12}|^2 T_3 T_{31} \\ &\quad - s_{23}^2 |G_{3112}|^2 T_3 - 2s_{31}^2 |G_{31}|^2 T_2 (T_{31} - |G_{31}|^2) \\ \frac{\partial F}{\partial T_3} &\text{ s'obtient à partir de } \frac{\partial F}{\partial T_2} \text{ en permutant les} \\ &\text{ indices 2 et 3} \end{aligned} \right\} (145)$$

et:

$$\left. \begin{aligned} \left(G_{12} \frac{\partial F}{\partial G_{12}} + * \right) &= -2|G_{12}|^2 T_{23} (T_{13} - |G_{13}|^2) \\ &\quad + 4s_{123} |G_{3112}|^2 T_{23} - 2s_{23}^2 |G_{3112}|^2 T_{23} \\ &\quad - 2s_{12}^2 |G_{12}|^2 T_3^2 (T_{12} - 2|G_{12}|^2) \\ \left(G_{31} \frac{\partial F}{\partial G_{31}} + * \right) &\text{ s'obtient à partir de} \\ \left(G_{12} \frac{\partial F}{\partial G_{12}} + * \right) &\text{ en permutant les indices 2 et 3.} \end{aligned} \right\} (146)$$

Dans le cas particulier où $s_{12} = s_{13}$, l'équation de la surface de dispersion se réduit à:

$$\begin{aligned} F(T_i; G_{jk}) \equiv T_{123}^2 - T_{123}(1 + s^2)[T_2 |G_{31}|^2 + T_3 |G_{12}|^2] \\ + T_{23}(2s^2 s' + 1 - s'^2) |G_{3112}|^2 + s^2 [T_2^2 |G_{31}|^4 \\ + T_3^2 |G_{12}|^4] = 0, \end{aligned} \quad (147)$$

où nous avons posé:

$$\left. \begin{aligned} s_{12} = s_{13} = s \\ s_{23} = s' \end{aligned} \right\} (148)$$

et le coefficient d'absorption est donné par (123), où seules interviennent les dérivées partielles $\partial F/\partial T_i$:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial T_1} &= T_{23}[T_2(T_{31} - |G_{31}|^2) + T_3(T_{12} - |G_{12}|^2) \\ &\quad - s^2(|G_{12}|^2 T_3 + |G_{31}|^2 T_2)] \\ \frac{\partial F}{\partial T_2} &= T_3(T_{31} - |G_{31}|^2)(T_{12} - |G_{12}|^2) + T_{123}(T_{31} \\ &\quad - |G_{31}|^2) + 2s^2 s' |G_{3112}|^2 T_3 - s^2 |G_{12}|^2 T_3 T_{31} \\ &\quad - s'^2 |G_{3112}|^2 T_3 - 2s^2 |G_{31}|^2 T_2 (T_{31} - |G_{31}|^2) \\ \frac{\partial F}{\partial T_3} &\text{ s'obtient à partir de } \frac{\partial F}{\partial T_2} \text{ en permutant les} \\ &\text{ indices 2 et 3.} \end{aligned} \right\} (149)$$

Les points principaux satisfont à:

$$\begin{aligned} F(T; G_{jk}) \equiv T^2 [T^4 - T^2 \{ (1 + s_{31}^2) |G_{31}|^2 + (1 + s_{12}^2) |G_{12}|^2 \} \\ + (2s_{123} + 1 - s_{23}^2) |G_{3112}|^2 + |G_{31}|^4 s_{31}^2 + |G_{12}|^4 s_{12}^2] = 0, \end{aligned} \quad (150)$$

qui, dans le cas particulier où $s_{12} = s_{13}$, se réduit à:

$$\begin{aligned} T^2 [T^4 - T^2 (1 + s^2) (|G_{31}|^2 + |G_{12}|^2) \\ + (2s^2 s' + 1 - s'^2) |G_{3112}|^2 + s^2 (|G_{31}|^4 + |G_{12}|^4)] = 0. \end{aligned} \quad (151)$$

4. PREMIER CAS PARTICULIER DES CRISTAUX DE SILICIUM ET GERMANIUM

Les trois points en jeu du réseau réciproque sont caractérisés par les trois vecteurs $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2, \mathbf{h}_3$ dont les valeurs sont schématisées ci dessous:

$$000 \mathbf{h}_1 \quad 111 \mathbf{h}_2 \quad 1\bar{1}1 \mathbf{h}_3 \quad 020 \mathbf{h}_2 - \mathbf{h}_3. \quad (152)$$

D'après [I] § 10.1, nous sommes dans le cas où: $\alpha_{23} = \alpha_{32} = 0$. D'autre part, on voit facilement que:

$$s_{12} = s_{13} = 1 - \frac{3}{2}\beta^2 \quad s_{23} = 1 - 2\beta^2, \quad (153)$$

si l'on introduit:

$$\beta = \lambda/a = 1/aK, \quad (154)$$

où a est le paramètre du réseau cristallin.

L'équation de la surface de dispersion et l'expression du coefficient d'absorption sont donc données, sous l'hypothèse d'une absorption faible, par (147), (123) et (149) où:

$$s = 1 - \frac{3}{2}\beta^2 \quad s' = 1 - 2\beta^2. \quad (155)$$

$$|G_{12}|^2 = |G_{13}|^2 = \frac{1}{2}, \quad (156)$$

ce qui met en évidence que les expressions dépendent du seul paramètre β^2 .

Equation de la surface de dispersion - Expression du coefficient d'absorption

L'équation de la surface de dispersion exprimée en fonction des variables T_i s'écrit donc:

$$F(T_i; \beta^2) \equiv T_{123}^2 - (1 + s^2)T_{123} \frac{T_2 + T_3}{2} + \frac{s^2 s'}{2} T_{23} + \frac{1 - s'^2}{4} T_{23} + \frac{s^2}{4} (T_2^2 + T_3^2) = 0, \quad (157)$$

ou, sous une forme légèrement différente:

$$F(T_i; \beta^2) \equiv T_{23}(T_{13} - \frac{1}{2})(T_{12} - \frac{1}{2}) + \frac{s^2 s'}{2} T_{23} - \frac{s^2}{2} T_2^2(T_{31} - \frac{1}{2}) - \frac{s^2}{2} T_3^2(T_{12} - \frac{1}{2}) - \frac{s'^2}{4} T_{23} = 0. \quad (157')$$

On en déduit facilement:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial T_1} &= T_{23} \left[T_2(T_{31} - \frac{1}{2}) + T_3(T_{12} - \frac{1}{2}) - \frac{s^2}{2} (T_2 + T_3) \right] \\ \frac{\partial F}{\partial T_2} &= T_3(T_{31} - \frac{1}{2})(T_{12} - \frac{1}{2}) + T_{123}(T_{31} - \frac{1}{2}) \\ &\quad + \frac{s^2 s'}{2} T_3 - \frac{s^2}{2} T_3^2 T_1 - s^2 T_2(T_{31} - \frac{1}{2}) - \frac{s'^2}{4} T_3 \\ \frac{\partial F}{\partial T_3} & \text{ s'obtient à partir de } \frac{\partial F}{\partial T_2} \text{ en permutant les} \\ &\quad \text{indices 2 et 3,} \end{aligned} \right\} \quad (158)$$

d'où:

$$\sum_{i=1}^3 T_i \frac{\partial F}{\partial T_i} = T_{23}[T_1(T_2 + T_3) - 1] - 2s^2 s' T_{23} + s^2 T_2^2(T_{31} - 1) + s^2 T_3^2(T_{12} - 1) + s'^2 T_{23} \quad (159)$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial F}{\partial T_i} &= (T_2 + T_3)(T_{13} - \frac{1}{2})(T_{12} - \frac{1}{2}) + (T_1 + T_3)T_{23}(T_{12} - \frac{1}{2}) \\ &\quad + (T_1 + T_2)T_{23}(T_{13} - \frac{1}{2}) + \frac{s^2 s'}{2} (T_2 + T_3) - s^2 T_2(T_{13} - \frac{1}{2}) - \frac{s^2}{2} T_2^2(T_1 + T_3) \\ &\quad - s^2 T_3(T_{12} - \frac{1}{2}) - \frac{s^2}{2} T_3^2(T_1 + T_2) - \frac{s'^2}{4} (T_2 + T_3), \end{aligned} \quad (160)$$

qui permettent d'obtenir facilement l'expression de μ [cf. (123)].

Rappelons que les variables T_i sont reliées aux variables T'_i qui caractérisent la position du point caractéristique T par:

$$T'_i = T_i f' \quad (161)$$

où:

$$f' = f'_{12}/f'_0 = f'_{13}/f'_0.$$

L'axe principal $LoLa$ a donc pour équation: $T_1 = T_2 = T_3$; et les composantes de la normale à la surface de dispersion sont données par (158).

D'autre part, on voit facilement que le plan $T_2 = T_3$ est un plan de symétrie pour la surface de dispersion.

Intersection de la surface de dispersion avec son plan de symétrie. Composantes du champ électrique et coefficient d'absorption correspondants

Posons: $T_2 = T_3 = T$ (= ou $\neq T_1$).

L'intersection de la surface de dispersion avec son plan de symétrie a pour équations:

$$\left. \begin{aligned} T_2 = T_3 = T \\ T^2 \left[T_1 T - \frac{1}{2} - \frac{s'}{2} \right] \left[T_1 T - \frac{1}{2} - s^2 + \frac{s'}{2} \right] = 0. \end{aligned} \right\} \quad (162)$$

Elle se décompose donc en une droite double et deux hyperboles.

Composantes du champ électrique

Elles s'obtiennent facilement à partir des équations (25) et (28). Si $T_1 T - \frac{1}{2} - \frac{s'}{2} = 0$ (l'une des hyperboles),

$$\left. \begin{aligned} r_1 \mathbf{T}_1 f T (T_1 T - 1) &= \lambda_3 \alpha^* T (s_2 - s_3) \\ r \mathbf{T}_2 f T (T_1 T - 1) &= \lambda_3 (\alpha^*)^2 (-s' s_2 + s_3) \\ r \mathbf{T}_3 f T (T_1 T - 1) &= \lambda_3 \frac{1}{2} (-s_2 + s' s_3) \end{aligned} \right\} \quad (163)$$

où:

$$f = f_{12}/f_0; \quad r = r_2 = r_3; \quad \alpha = (1/\sqrt{2}) \exp(i\pi/4).$$

Les trois vecteurs de polarisation sont donc alors dans le plan défini par les vecteurs \mathbf{s}_2 et \mathbf{s}_3 .

De (163) on déduit:

$$\frac{|\mathbf{E}_2|^2}{|\mathbf{E}_1|^2} = \frac{|\mathbf{E}_3|^2}{|\mathbf{E}_1|^2} = \frac{T_1}{2T}. \quad (164)$$

Si: $T_1T - \frac{1}{2} - s^2 + \frac{s'}{2} = 0$ (l'autre hyperbole),

$$\left. \begin{aligned} r_1 \mathbf{T}_1 f T (T_1 T - 1) &= \lambda_1 T^2 \left[\mathbf{s}_1 - \frac{1}{2s} \mathbf{s}_2 - \frac{1}{2s} \mathbf{s}_3 \right] \\ r \mathbf{T}_2 f T (T_1 T - 1) &= -\lambda_1 \alpha^* T \left[\mathbf{s}_1 - \frac{s^2 - 2s'}{2s} \mathbf{s}_2 - \frac{1}{2s} \mathbf{s}_3 \right] \\ r \mathbf{T}_3 f T (T_1 T - 1) &= -\lambda_1 \alpha T \left[\mathbf{s}_1 - \frac{1}{2s} \mathbf{s}_2 - \frac{s^2 - 2s'}{2s} \mathbf{s}_3 \right] \end{aligned} \right\} \quad (165)$$

d'où l'on déduit encore (164).

Si $T^2 = 0$ (la droite double), on obtient enfin:

$$\frac{|\mathbf{E}_2|^2}{|\mathbf{E}_1|^2} = \frac{|\mathbf{E}_3|^2}{|\mathbf{E}_1|^2} = \infty. \quad (166)$$

Composantes de la normale à la surface de dispersion

On obtient facilement à partir de (158):

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial T_1} &= -T^3(s^2 - s') \\ \frac{\partial F}{\partial T_2} &= \frac{\partial F}{\partial T_3} = -T^2 T_1 \frac{s^2 - s'}{2} \end{aligned} \right\} \text{ si } T_1 T - \frac{1}{2} - \frac{s'}{2} = 0$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial T_1} &= T^3(s^2 - s') \\ \frac{\partial F}{\partial T_2} &= \frac{\partial F}{\partial T_3} = T^2 T_1 \frac{s^2 - s'}{2} \end{aligned} \right\} \text{ si } T_1 T - \frac{1}{2} - s^2 + \frac{s'}{2} = 0$$

donc, le long de l'une et l'autre hyperbole:

$$\frac{\partial F / \partial T_2}{\partial F / \partial T_1} = \frac{\partial F / \partial T_3}{\partial F / \partial T_1} = \frac{T_1}{2T}, \quad (167)$$

résultat en accord avec (164).

Notons que, sur les hyperboles:

$$\mathbf{n} \propto \mathbf{s}_1 + \frac{T_1}{2T} (\mathbf{s}_2 + \mathbf{s}_3). \quad (167')$$

Enfin:

$$\frac{\partial F}{\partial T_1} = \frac{\partial F}{\partial T_2} = \frac{\partial F}{\partial T_3} = 0, \text{ si } T = 0$$

mais:

$$\frac{\partial F / \partial T_2}{\partial F / \partial T_1} = \frac{\partial F / \partial T_3}{\partial F / \partial T_1} = \infty, \text{ en accord avec (166).} \quad (168)$$

On vérifie donc bien que le flux d'énergie est dirigé, pour chaque point caractéristique T , suivant la normale \mathbf{n} .

Coefficient d'absorption

D'après (123) et (167), on a facilement pour les points de la surface de dispersion situés sur les *hyperboles* intersections avec le plan de symétrie:

$$\mu = \frac{2(T + T_1)}{2\gamma_1 T + T_1(\gamma_2 + \gamma_3)} \left[1 - \frac{f''_{12}}{f''_0} \frac{2TT_1}{T + T_1} \right]. \quad (169)$$

Pour la 'découpe symétrique' de la face d'entrée du cristal, on a de même:

$$\left. \begin{aligned} \bar{\mu}_n)_{\text{sym}} &= \frac{1}{\gamma} \left[1 - \frac{f''_{12}}{f''_0} \frac{2TT_1}{T + T_1} \right] \\ \mu)_{\text{eff sym}} &= \gamma \bar{\mu}_n)_{\text{sym}} \end{aligned} \right\} \quad (170)$$

Pour les points intersections sur la *droite double*, on a enfin:

$$\left. \begin{aligned} \mu &= \frac{2}{\gamma_2 + \gamma_3} \\ \bar{\mu}_n)_{\text{sym}} &= \frac{1}{\gamma} \\ \mu)_{\text{eff sym}} &= 1 \end{aligned} \right\} \quad (171)$$

Cas particulier des points principaux

Ils satisfont à:

$$T_1 = T_2 = T_3 = T;$$

d'où, d'après (162), ils correspondent aux solutions de:

$$T^2 \left[T^2 - \frac{1}{2} - \frac{s'}{2} \right] \left[T^2 - \frac{1}{2} - s^2 + \frac{s'}{2} \right] = 0, \quad (172)$$

c'est-à-dire:

$$\left. \begin{aligned} T^2 = 0 \quad T^2 = \frac{1+s'}{2} \quad T^2 = s^2 + \frac{1-s'}{2} \\ \qquad \qquad \qquad = 1 - \beta^2 \quad \qquad \qquad = (1 - \beta^2)^2 + \frac{5}{4}\beta^4 \end{aligned} \right\} \quad (172')$$

en utilisant (155).

Pour les points principaux, correspondant à $T \neq 0$, on obtient facilement à partir de (164), (169), (170):

$$\frac{|\mathbf{E}_2|^2}{|\mathbf{E}_1|^2} = \frac{|\mathbf{E}_3|^2}{|\mathbf{E}_1|^2} = \frac{1}{2} \quad (173)$$

et

$$\left. \begin{aligned} \mu &= \frac{4}{2\gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3} \left[1 - \frac{f''_{12}}{f''_0} T \right] \\ \bar{\mu}_n)_{\text{sym}} &= \frac{1}{\gamma} \left[1 - \frac{f''_{12}}{f''_0} T \right], \\ \text{d'où } \mu)_{\text{eff sym}} &= 1 - \frac{f''_{12}}{f''_0} T, \end{aligned} \right\} \quad (174)$$

en accord avec Hildebrandt (1966).

Pour les points principaux correspondants à $T^2 = 0$, on a de même:

$$\left. \begin{aligned} \frac{|\mathbf{E}_2|^2}{|\mathbf{E}_1|^2} &= \frac{|\mathbf{E}_3|^2}{|\mathbf{E}_1|^2} = \infty \\ \mu &= \frac{2}{\gamma_2 + \gamma_3}; \quad \bar{\mu}_n)_{\text{sym}} = \frac{1}{\gamma}, \text{ d'où } \mu)_{\text{eff sym}} = 1. \end{aligned} \right\} (175)$$

On retrouve donc bien (128).

Remarquons que dans le cas de la 'découpeure symétrique' de la face d'entrée du cristal, le plan surface du cristal est perpendiculaire au plan (111) et au plan (1 $\bar{1}$ 1). On a :

$$\left. \begin{aligned} s &= \cos 2\theta_{111} = \cos 2\theta_{1\bar{1}1} \\ s' &= \cos 2\theta_{200} \\ \sin^2 \theta_{200} &= \frac{4}{3} \sin^2 \theta_{111} \\ \text{et } \gamma &= \sqrt{1 - \frac{3}{2} \sin^2 \theta_{111}} = \sqrt{1 - \frac{9}{8} \beta^2}. \end{aligned} \right\} (176)$$

Pour les points principaux pour lesquels $T \neq 0$, on a :

$$\mathbf{n} = \frac{1}{2\sqrt{1-\beta^2}} [\mathbf{s}_1 + \frac{1}{2}(\mathbf{s}_2 + \mathbf{s}_3)], \quad (177)$$

d'où dans ce cas :

$$\cos \angle(\mathbf{n}, \bar{\mathbf{n}}) = \frac{\gamma}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad (178)$$

d'où l'on déduit, d'après (174) :

$$\mu_n = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \left[1 - \frac{f''_{12}}{f''_0} T \right] \quad (178')$$

Pour les points principaux pour lesquels $T=0$, on a :

$$\mathbf{n} = \frac{1}{2\sqrt{1-\beta^2}} (\mathbf{s}_2 + \mathbf{s}_3);$$

(178) et (178') sont donc conservés.

Comparaison des valeurs des coefficients d'absorption relatifs aux points principaux dans les 'cas à 2 et 3 rayons'

Le 'cas à deux rayons' limite du cas étudié [cf. (152)] est :

$$\left. \begin{aligned} 000 \mathbf{h}_1 \\ 111 \mathbf{h}_2 \end{aligned} \right\} \text{ ou } \left. \begin{aligned} 000 \mathbf{h}_1 \\ 1\bar{1}1 \mathbf{h}_2 \end{aligned} \right\} \quad (179)$$

Dans l'un et l'autre cas, l'équation de la surface de dispersion s'écrit, exprimée en variables T_i :

$$T_1 T_2 - \frac{P^2}{2} = 0 \quad \text{où : } P^2 = \begin{cases} 1 \\ \text{ou } s^2. \end{cases} \quad (180)$$

T_i est défini à partir de T'_i par la même relation (161) que dans le 'cas à trois rayons'.

Les points principaux sont donnés, d'après (180), par :

$$\left. \begin{aligned} T^2 &= \frac{1}{2} \\ T^2 &= \frac{1}{2} (1 - \frac{3}{2} \beta^2)^2. \end{aligned} \right\} \quad (181)$$

D'après (136), les coefficients d'absorption qui leur correspondent dans le cas de la 'découpeure symétrique,' satisfont à :

$$\bar{\mu}_n)_{\text{sym}} = \frac{1}{\gamma} \left(1 - \frac{f''_{12}}{f''_0} T \right), \quad \text{d'où } \mu)_{\text{eff}} = 1 - \frac{f''_{12}}{f''_0} T \quad (182)$$

où :

$$\left. \begin{aligned} \gamma &= \cos \theta_{111} = \cos \theta_{1\bar{1}1} \\ &= \sqrt{1 - \frac{3}{2} \beta^2} \end{aligned} \right\} \quad (183)$$

Sous l'hypothèse d'une absorption faible, dans le 'cas à deux rayons' et dans ce 'cas à trois rayons', les coefficients d'absorption $\mu)_{\text{eff sym}}$ sont, pour les points principaux, rigoureusement donnés par la formule :

$$\mu)_{\text{eff sym}} = 1 - \frac{f''_{12}}{f''_0} T, \quad (184)$$

où T s'exprime respectivement par (181) et (172').

Sur la Fig. 4 sont représentées les variations avec β^2 [cf. (154)] de $\mu)_{\text{eff sym}}$ pour les différents points principaux, dans les cas à deux et trois rayons, sous l'approximation $f''_{12} \approx f''_0$. Les courbes s'arrêtent respectivement aux valeurs $\beta^2 = \frac{4}{3}$, valeur à laquelle les 2 vecteurs

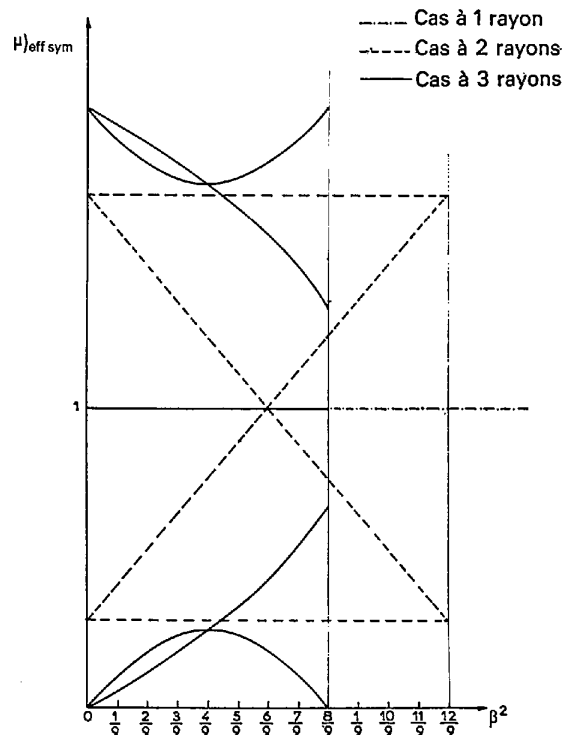


Fig. 4. Variation de $\mu)_{\text{eff sym}}$ avec β^2 dans le cas des réflexions simultanées (111/1 $\bar{1}$ 1) dans Ge et Si.

d'onde deviennent colinéaires et $\beta^2 = \frac{8}{9}$, valeur à laquelle les 3 vecteurs d'onde deviennent coplanaires. Dans le 'cas à un rayon', le point caractéristique est confondu avec Lo ($T=0$) et $\mu)_{\text{eff sym}} = 1$.

Dans le 'cas à deux rayons' et dans ce 'cas à trois rayons', l'équation de la surface de dispersion exprimée en fonction des variables T_i , coïncide rigoureusement avec l'équation exprimée en fonction des variables T'_i qui définissent la position du point caractéristique que l'on obtiendrait si l'on négligeait l'influence du facteur de diffusion atomique [$f'_{12}=f'_{13}=1$; cf. (161)], c'est à dire l'équation considérée dans I. En conséquence, l'expression $(1 - f''_{12}/f''_0 T)$ représente, au facteur $f''_{12}/f''_0 \neq 1$ près, la distance du point principal en jeu au point de Laue, dans l'hypothèse faite dans I; et les nombres donnés à la fin de I, pour cette distance, coïncident effectivement avec les valeurs de $\mu)_{\text{eff sym}}$ correspondantes.

Remarquons que [cf. (161)]:

$$\left(1 - \frac{f''_{12}}{f''_0} T\right) = \frac{1}{f'} \left(f' - \frac{f''_{12}}{f''_0} T'\right), \quad (185)$$

où, au facteur f''_{12}/f''_0 près, la parenthèse représente la distance du point principal en jeu au point La , défini plus haut, qui est le point homothétique du point de



Fig. 5. Interprétation géométrique du coefficient d'absorption (absorption faible) pour les points principaux, dans le cas des réflexions individuelles et simultanées 111 et $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ dans Ge et Si. $\mu)_{\text{eff. sym}} \simeq (1/f') |\mathcal{L}a T|$ où: $f' = f'_{12}/f'_0 = f'_{13}/f'_0$.

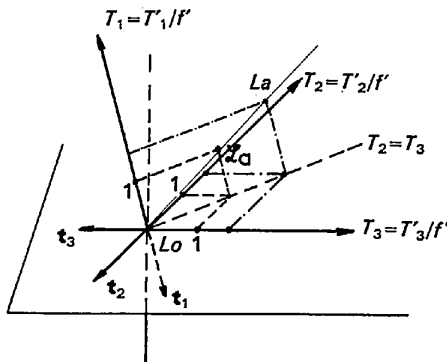


Fig. 6. Système d'axes auquel est rapportée la surface de dispersion dans le cas des réflexions simultanées (111/ $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$) dans Ge et Si.

Laue par rapport au point de Lorentz dans le rapport f' . On a donc (cf. Fig. 5)

$$\mu)_{\text{eff sym}} \simeq \frac{1}{f'} |\mathcal{L}a T|.$$

Construction de la surface de dispersion

L'équation de la surface de dispersion est donnée par (157) où [cf. (161)]:

$$T_i = T'_i / f'. \quad (186)$$

Nous construirons la surface de dispersion en T_1, T_2, T_3 ; il nous sera toujours possible, à l'aide de (186), de revenir aux vraies variables T'_1, T'_2, T'_3 .

Les points La et La' sont définis respectivement par: $T_i = 1/f'$ et $T_i = 1$, quel que soit i (cf. Fig. 6).

Les trièdres s_1, s_2, s_3 et t_1, t_2, t_3 ayant été choisis droits par hypothèse (cf. I), le trièdre des coordonnées T'_1, T'_2, T'_3 (donc aussi T_1, T_2, T_3) est nécessairement gauche, l'unité de longueur choisie $\frac{1}{2}K'A'$ étant négative.

D'après (157) et (155), l'équation de la surface de dispersion dépend du seul paramètre β^2 qui varie entre 0 et 8/9.

Le plan bissecteur de l'angle LoT_3, LoT_2 est un plan de symétrie pour la surface et contient l'axe LoT_1 .

L'origine Lo est un centre d'inversion pour la surface. Il suffit donc, par exemple, de construire la surface pour les valeurs positives de T_i ; une symétrie par rapport à l'origine donnera la surface pour les valeurs négatives de T_i .

D'autre part, l'origine est un point double et le cône des tangentes à l'origine est constitué par l'ensemble des deux plans d'équation:

$$s^2 \left(\frac{T_2}{T_3}\right)^2 + (1 + 2s^2 s' - s'^2) \frac{T_2}{T_3} + s^2 = 0. \quad (187)$$

(187) est donc aussi l'équation des tangentes à l'origine des courbes intersections de la surface avec les différents plans: $T_1 = \text{constante}$.

Enfin, (187) est la courbe intersection de la surface avec le plan $T_1 = 0$, courbe qui se réduit donc à deux droites.

Si l'on suppose T_1 différent de zéro, on peut écrire l'équation de la surface de dispersion (157') sous la forme:

$$T_{12} T_{13} (T_{13} - \frac{1}{2})(T_{12} - \frac{1}{2}) + \frac{s^2 s'}{2} T_{12} T_{13} - \frac{s^2}{2} T_{12}^2 (T_{13} - \frac{1}{2}) - \frac{s^2}{2} T_{13}^2 (T_{12} - \frac{1}{2}) - \frac{s'^2}{4} T_{12} T_{13} = 0, \quad (188)$$

qui met en évidence que l'équation peut s'exprimer en fonction des seules variables T_{12} et T_{13} :

$$T_1^2 F(T_1, T_2, T_3; \beta^2) \equiv G(T_{12}, T_{13}; \beta^2) = 0. \quad (189)$$

La construction d'une *seule courbe* suffit donc pour avoir la surface de dispersion *pour chaque valeur de β^2* ; à savoir la 'courbe universelle' construite en coordonnées T_{12}, T_{13} , représentant les variations de (189). Elle décrit l'intersection de la surface de dispersion avec *tout* plan $T_1 = \text{constante}$.

Pour un point *quelconque* M de la 'courbe universelle', les produits $T_1 T_3$ et $T_1 T_2$ sont constants (*cf.* Fig. 7). Il en est de même de la distance OM joignant le point M à l'origine O , donc du produit $T_1 z$, si l'on désigne par z la distance joignant le point M_{T_1} correspondant dans un plan donné $T_1 = \text{constante}$, au point N_{T_1} intersection de ce plan avec l'axe LoT_1 . Il s'ensuit donc que le lieu du point M_{T_1} , quand T_1 varie, est une branche d'hyperbole située dans un plan passant par LoT_1 et de directions asymptotiques évidentes.

Les figures (8) à (18) représentent la 'courbe universelle' donnant les variations de (189) pour une suite de valeurs de β^2 : 0,074; 0,10; $\frac{2}{3}$; $\frac{1}{2}$; $\frac{4}{5}$; 0,5; $\frac{5}{6}$; $\frac{2}{3}$; $\frac{7}{8}$; $\frac{4}{5}$; 0,84. La première de ces valeurs correspond à $\lambda Cu K\alpha$ dans le germanium ($a = 5,65 \text{ \AA}$).

Sur chaque figure est indiquée, en particulier, la position du point $\mathcal{L}a$: elle est obtenue en faisant $T_{12} = T_{13} = 1$ sous réserve que, dans l'échelle, on suppose $T_1 = 1$.

Sur chaque figure est aussi schématisée la position respective des axes LoT_1, LoT_2, LoT_3 , caractérisés par les angles θ et φ , dont les figures (19) et (20) donnent les variations avec β^2 , sous réserve que φ soit considéré comme positif ou négatif suivant que LoT_1 fait avec LoT_2 et LoT_3 un angle aigu ou obtus.

θ et φ sont définis par:

$$\cos \varphi = \frac{\beta \sqrt{8-9\beta^2}}{2 \sqrt{1-\beta^2}} \text{ avec } \left\{ \begin{array}{l} \varphi \geq 0 \text{ si } \beta^2 \geq \frac{2}{3} \\ \varphi < 0 \text{ si } \beta^2 < \frac{2}{3} \end{array} \right\} \quad (190)$$

$$\left. \begin{array}{l} \cos \theta = \frac{2}{\sqrt{3} \sqrt{4-3\beta^2}} \\ \sin \theta = \frac{\sqrt{8-9\beta^2}}{\sqrt{3} \sqrt{4-3\beta^2}} \end{array} \right\} \quad (190')$$

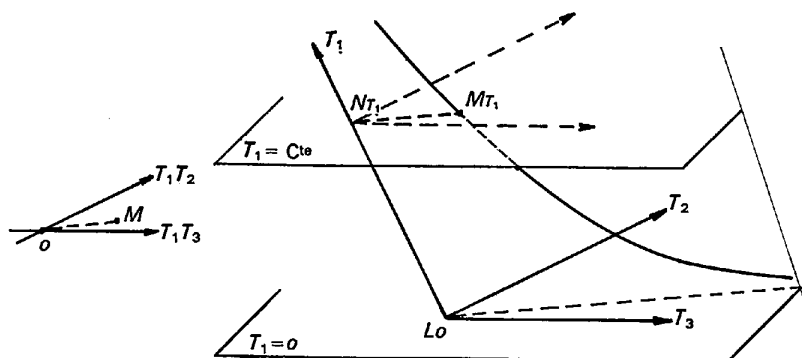


Fig. 7. Représentation schématique de la construction de la surface de dispersion dans le cas des réflexions (111/111) dans Ge et Si.

Enfin, on représente dans la Fig. 21 comment se construit dans l'espace réciproque la surface de dispersion pour la valeur $\beta^2 = 1/3$ à partir de la Fig. 11.

5. DEUXIEME CAS PARTICULIER DES CRISTAUX DE SILICIUM ET GERMANIUM

Les trois points en jeu du réseau réciproque sont maintenant caractérisés par:

$$000 \mathbf{h}_1 \quad 111 \mathbf{h}_2 \quad \bar{1}\bar{1}1 \mathbf{h}_3 \quad 220 \mathbf{h}_2 - \mathbf{h}_3 \quad (191)$$

qui met en évidence que $\alpha_{23} \neq 0$. On a toujours $s_{12} = s_{13}$. Nous poserons:

$$\left. \begin{array}{l} s_{12} = s_{13} = 1 - \frac{3}{2}\beta^2 = s \\ s_{23} = 1 - 4\beta^2 = s' \end{array} \right\} \quad (192)$$

Equation de la surface de dispersion. Expression du coefficient d'absorption

L'équation de la surface de dispersion exprimée en fonction des variables T_i , s'écrit, d'après (142):

$$\begin{aligned} F(T_i; \beta^2) &\equiv (T_{23} - 1)(T_{13} - \frac{1}{2})(T_{12} - \frac{1}{2}) \\ &+ s^2 s' (1 - T_2)(1 - T_3) (\frac{1}{2} - T_1) - \frac{s^2}{2} (T_{13} - \frac{1}{2})(1 - T_2)^2 \\ &- \frac{s^2}{2} (T_{12} - \frac{1}{2})(1 - T_3)^2 - s'^2 (T_{23} - 1)(\frac{1}{2} - T_1)^2 = 0 \end{aligned} \quad (193)$$

où les variables T_i sont reliées aux variables T'_i , caractérisant la position des points caractéristiques par [*cf.* (117)]:

$$T'_1 = T_1 \frac{f''_2}{f'_1}; \quad T'_2 = T_2 f'_1; \quad T'_3 = T_3 f'_1 \quad (194)$$

où:

$$f' = \frac{f'_{12}}{f'_0} = \frac{f'_{13}}{f'_0} \text{ et } f'_1 = \frac{f'_{23}}{f'_0} \quad (194')$$

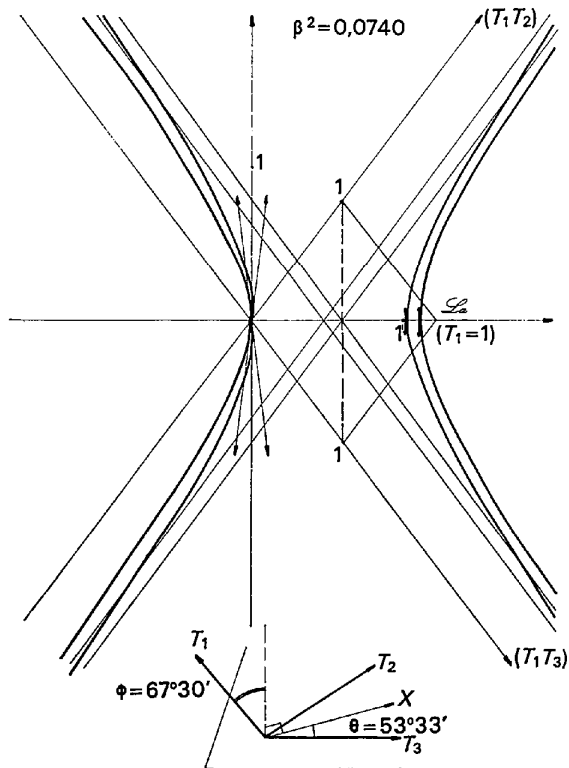


Fig. 8

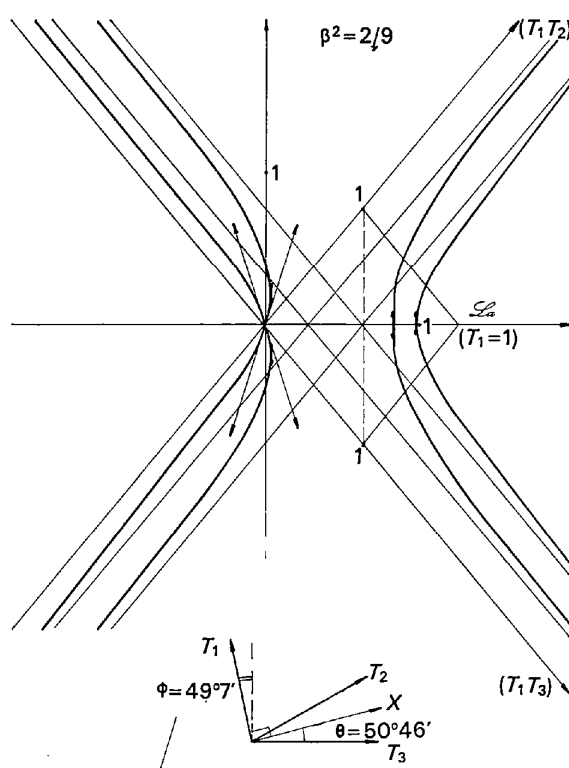


Fig. 10

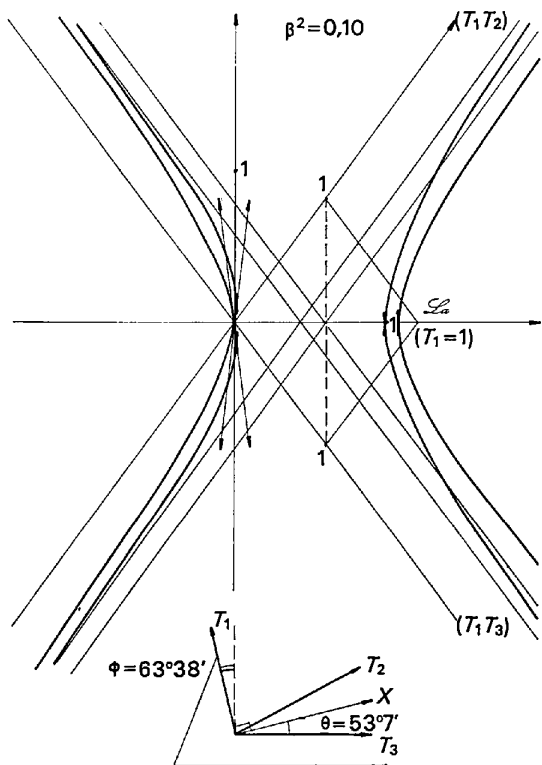


Fig. 9

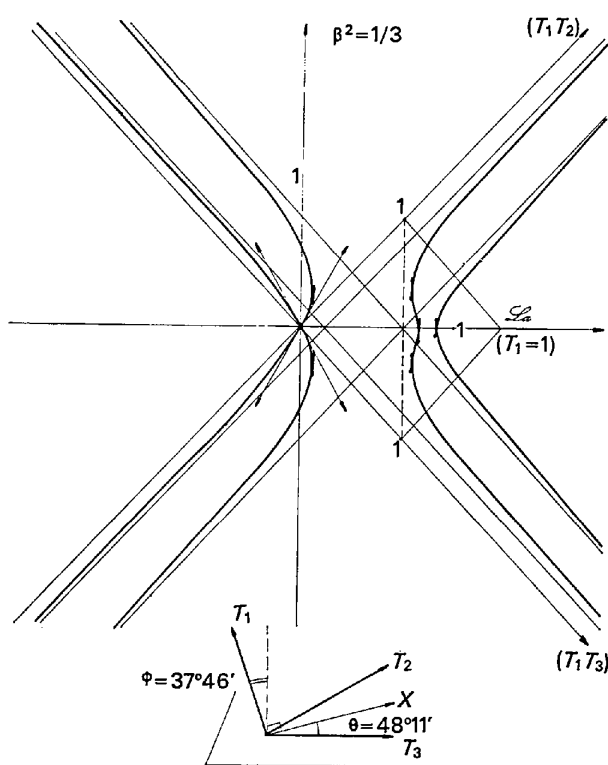


Fig. 11

Figs. 8 à 11. 'Courbe universelle' relative au cas des réflexions simultanées (111/111) dans le germanium, représentant l'intersection de la surface de dispersion avec tout plan $T_1 = \text{constante}$ pour $\beta^2 = 0,074; 0,10; 2/9; 1/3$.

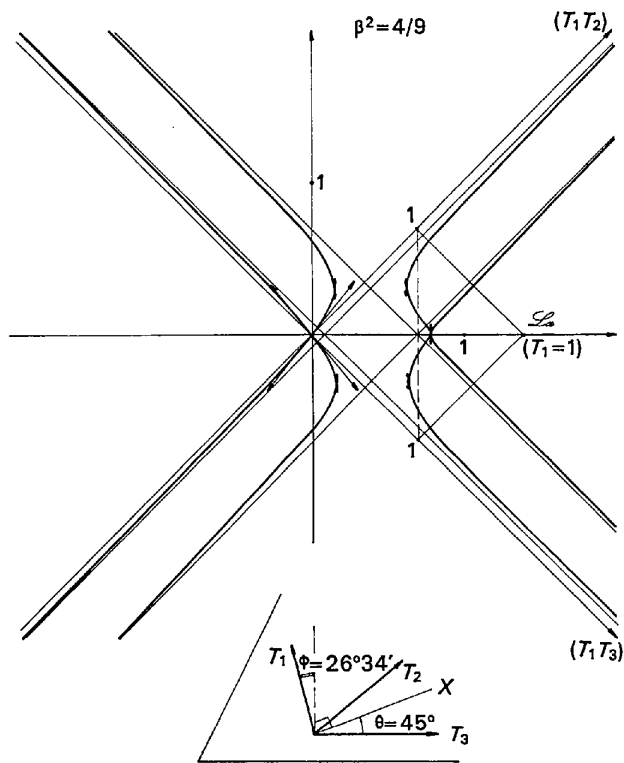


Fig. 12

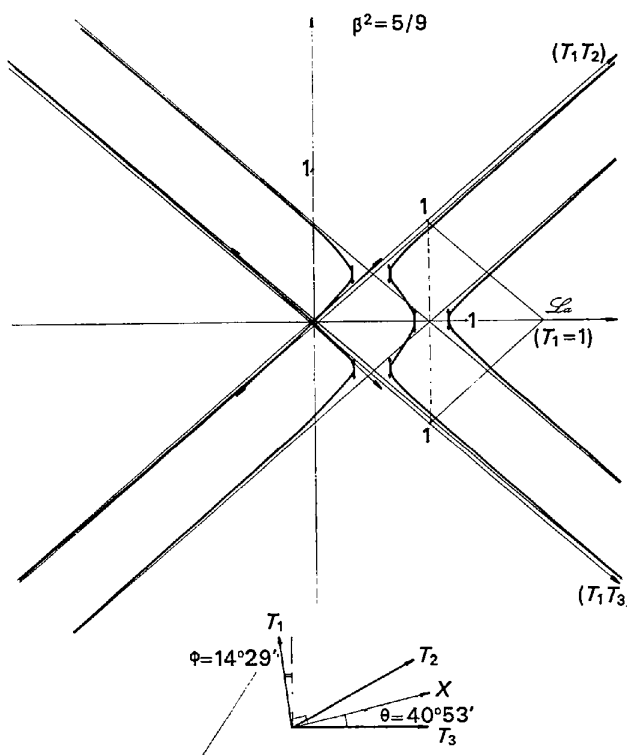


Fig. 14

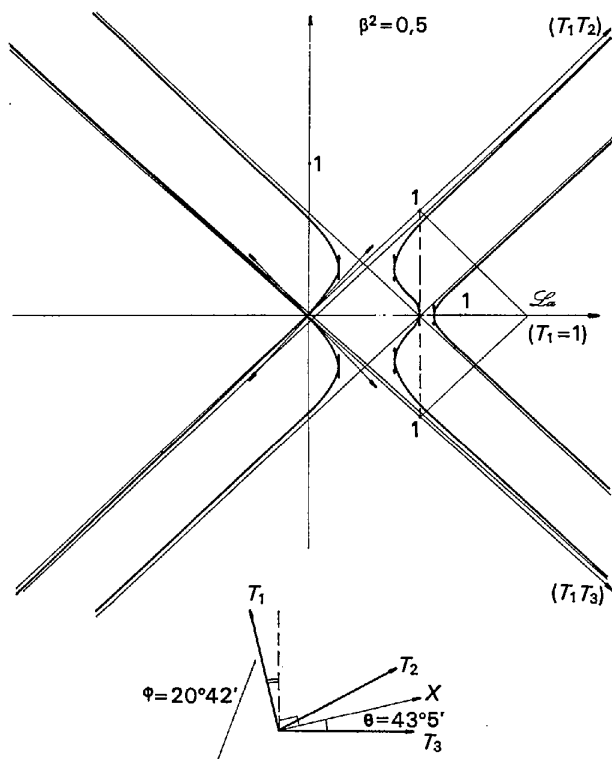


Fig. 13

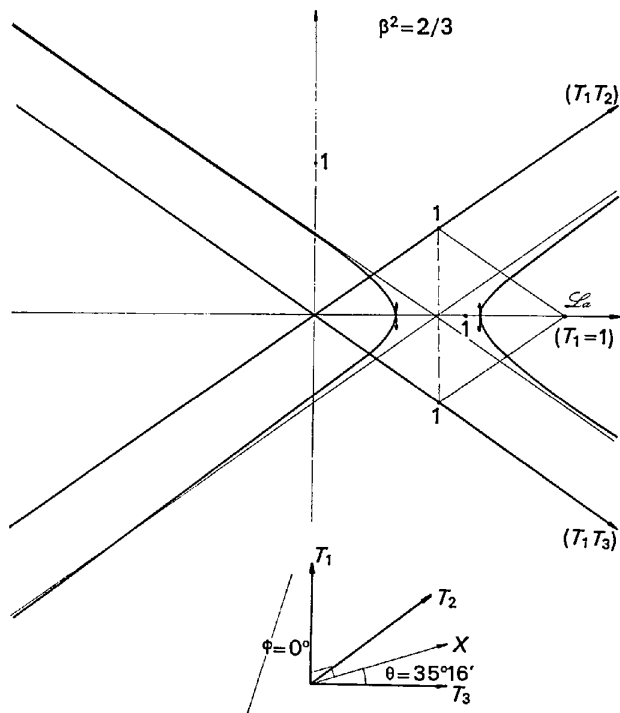


Fig. 15

Figs. 12 à 15 'Courbe universelle' relative au cas des réflexions simultanées (111/1T1) dans le germanium, représentant l'intersection de la surface de dispersion avec tout plan $T_1 = \text{constante}$, pour $\beta^2 = 4/9; 0,5; 5/9; 2/3$.

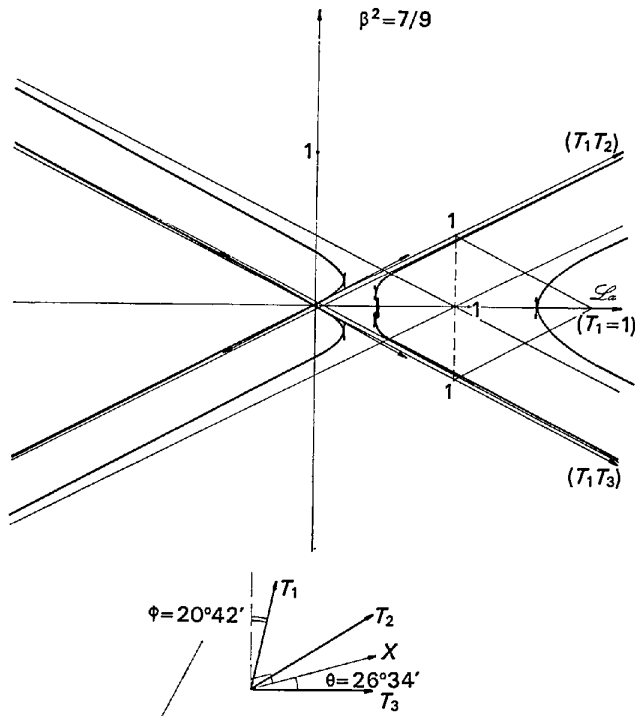


Fig. 16

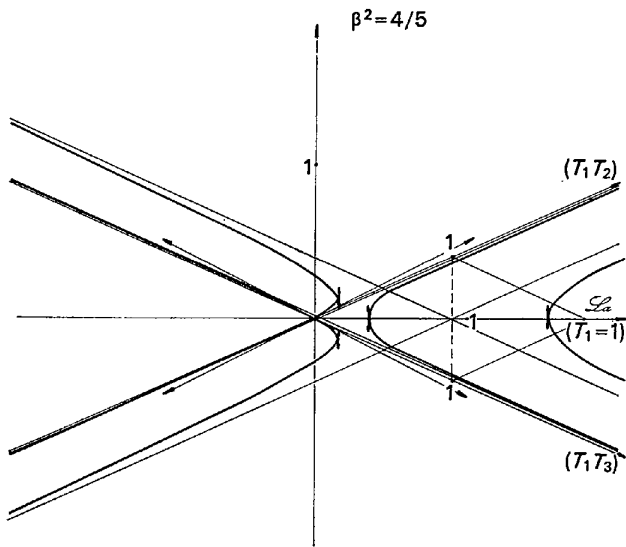


Fig. 17

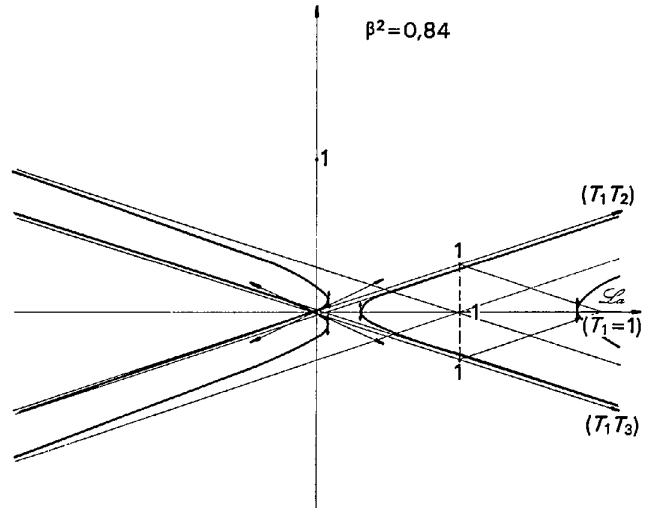


Fig. 18

Figs. 16 à 18. 'Courbe universelle' relative au cas des réflexions simultanées (111/1T1) dans le germanium, représentant l'intersection de la surface de dispersion avec tout plan $T_1 = \text{constante}$, pour $\beta^2 = 7/9; 4/5; 0,84$.

De (193), on déduit facilement :

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial T_1} &= T_3(T_{12}-\frac{1}{2})(T_{23}-1) + T_2(T_{23}-1)(T_{13}-\frac{1}{2}) \\ &\quad - s^2 s'(1-T_2)(1-T_3) - \frac{s^2}{2} T_3(1-T_2)^2 \\ &\quad - \frac{s^2}{2} T_2(1-T_3)^2 + 2s'^2(T_{23}-1)(\frac{1}{2}-T_1) \\ \frac{\partial F}{\partial T_2} &= T_3(T_{13}-\frac{1}{2})(T_{12}-\frac{1}{2}) + T_1(T_{23}-1)(T_{13}-\frac{1}{2}) \\ &\quad - s^2 s'(1-T_3)(\frac{1}{2}-T_1) + s^2(1-T_2)(T_{13}-\frac{1}{2}) \\ &\quad - \frac{s^2}{2} T_1(1-T_3)^2 - s'^2 T_3(\frac{1}{2}-T_1)^2 \\ \frac{\partial F}{\partial T_3} & \text{ s'obtient à partir de } \frac{\partial F}{\partial T_2} \text{ en permutant} \\ &\quad \text{les indices 2 et 3 ;} \end{aligned} \right\} (195)$$

d'où, d'après (194), les grandeurs respectivement proportionnelles aux composantes de la normale à la surface de dispersion :

$$\frac{\partial F}{\partial T_1} \left(\frac{f'_1}{f''} \right)^2, \frac{\partial F}{\partial T_2} \text{ et } \frac{\partial F}{\partial T_3}. \quad (196)$$

Le plan $T_2 = T_3$ (d'où $T'_2 = T'_3$) est encore un plan de symétrie pour la surface de dispersion, mais l'axe principal ($T'_1 = T'_2 = T'_3$), n'est plus confondu avec l'axe $T_1 = T_2 = T_3$.

Le coefficient d'absorption est donné par (118) où :

$$\left. \begin{aligned} - \left[G_{12} \frac{\partial F}{\partial G_{12}} + G_{13} \frac{\partial F}{\partial G_{13}} + * \right] &= (T_{23}-1)(T_{12}-\frac{1}{2}) \\ &+ (T_{23}-1)(T_{13}-\frac{1}{2}) - 2s^2 s'(1-T_2)(1-T_3)(\frac{1}{2}-T_1) \\ &\quad - s^2 s'(1-T_2)(1-T_3) + s^2(1-T_2)^2(T_{13}-\frac{1}{2}) \\ &\quad - \frac{s^2}{2} (1-T_2)^2 + s^2(1-T_3)^2(T_{12}-\frac{1}{2}) \\ &\quad - \frac{s^2}{2} (1-T_3)^2 + 2s'^2(\frac{1}{2}-T_1)(T_{23}-1) \\ - \left[G_{23} \frac{\partial F}{\partial G_{23}} + * \right] &= 2(T_{13}-\frac{1}{2})(T_{12}-\frac{1}{2}) \\ &\quad - s^2 s'(1-T_3)(\frac{1}{2}-T_1) - s^2 s'(1-T_2)(\frac{1}{2}-T_1) \\ &\quad + s^2 s' T_1(1-T_2)(1-T_3) + s^2(1-T_2)(T_{13}-\frac{1}{2}) \\ &\quad + s^2(1-T_3)(T_{12}-\frac{1}{2}) - 2s'^2 T_2(\frac{1}{2}-T_1)(T_{23}-1) \\ &\quad - 2s'^2(\frac{1}{2}-T_1)^2. \end{aligned} \right\} (197)$$

Intersection de la surface de dispersion avec l'axe principal

$$T'_1 = T'_2 = T'_3 = T',$$

donc, d'après (194) :

$$T_1 \left(\frac{f'_1}{f''} \right)^2 = T_2 = T_3 = T = \frac{T'}{f_1}. \quad (198)$$

Les points d'intersection satisfont donc à :

$$(T-1)[(T+1)(\alpha T^2 - \frac{1}{2})^2 + s^2 s'(T-1)(\frac{1}{2} - \alpha T) - s^2(T-1)(\alpha T^2 - \frac{1}{2}) - s'^2(T+1)(\frac{1}{2} - \alpha T)^2] = 0, \quad (199)$$

où nous avons posé :

$$\alpha = (f'_1/f'')^2, \quad (199')$$

qui met en évidence que la surface de dispersion coupe l'axe principal en particulier au point :

$$T'_1 = T'_2 = T'_3 = f'_1. \quad (200)$$

On déduit facilement de (195) qu'en ce point :

$$\frac{\partial F}{\partial T_1} = 0 \text{ et } \frac{\partial F}{\partial T_2} = \frac{\partial F}{\partial T_3} \neq 0;$$

d'où, d'après (196), (69) et § 1, K :

$$\frac{|E_2|^2}{|E_1|^2} = \frac{|E_3|^2}{|E_1|^2} = \infty. \quad (201)$$

D'autre part, d'après (118), le coefficient d'absorption en ce point est donné par :

$$\mu = \frac{2}{\gamma_2 + \gamma_3} \left[1 - \frac{f''_{23}}{f''_0} \right], \quad (202)$$

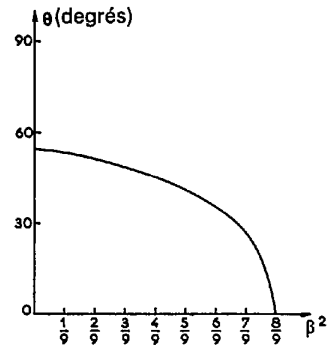


Fig. 19. Variation de θ avec β^2 .

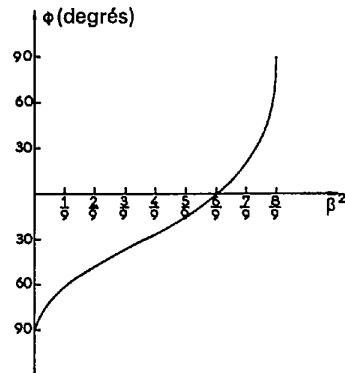


Fig. 20. Variation de ϕ avec β^2 .

Tableau 1. Les valeurs de T et les valeurs de $\mu)_{eff\ sym}$ correspondantes

T	$\mu)_{eff\ sym}^*$	limite de $\mu)_{eff\ sym}$ ($f_{12}'' = f_{23}'' = f_0''$)	$1 - T$
1	$1 - \frac{f_{23}''}{f_0''}$	0	0
0,6359	$1 - 0,8987 \frac{f_{12}''}{f_0''} + 0,2719 \frac{f_{23}''}{f_0''}$	0,3732	0,3641
-1,3392	$1 + 0,8137 \frac{f_{12}''}{f_0''} + 0,5185 \frac{f_{23}''}{f_0''}$	2,3322	2,3392
0,7521	$1 - 0,2352 \frac{f_{12}''}{f_0''} - 0,5155 \frac{f_{23}''}{f_0''}$	0,2493	0,2479
0,5383	$1 - 0,5877 \frac{f_{12}''}{f_0''} + 0,0730 \frac{f_{23}''}{f_0''}$	0,4853	0,4617
-1,5864	$1 + 0,7975 \frac{f_{12}''}{f_0''} + 0,7808 \frac{f_{23}''}{f_0''}$	2,5783	2,5864

* Pour déterminer la valeur de α , nous avons utilisé les valeurs des facteurs de diffusion atomiques calculées par Freeman (1959), dans lesquelles nous avons introduit la correction de diffusion anormale de Hönl (James, 1950).

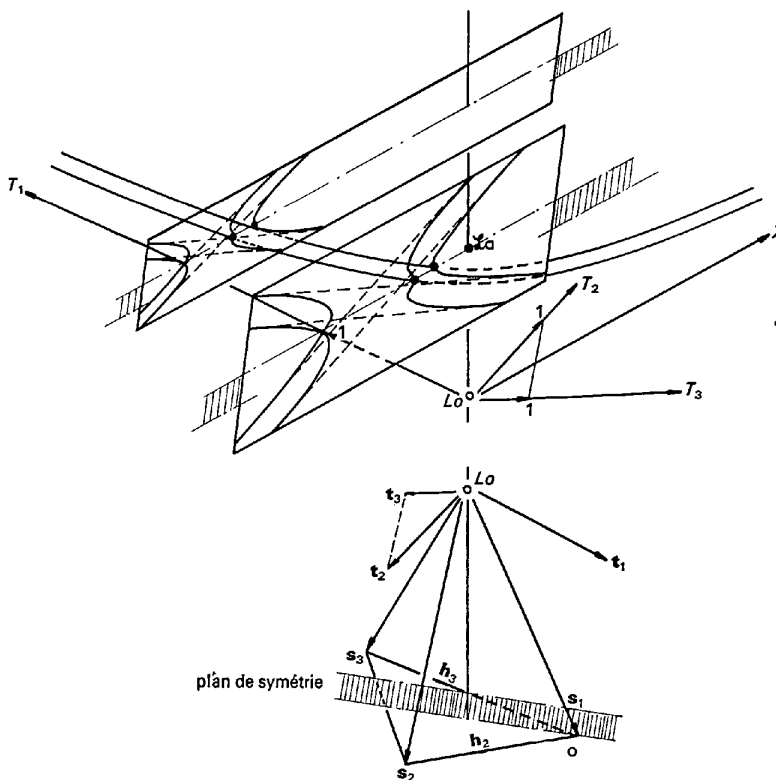


Fig. 21. Représentation schématique de la surface de dispersion dans le cas des réflexions simultanées (111/1T1) dans le germanium pour $\beta^2 = 1/3$. La moitié inférieure montre le point Lo , d'où sont issus les trois vecteurs unités s_1, s_2, s_3 et leurs vecteurs réciproques t_1, t_2, t_3 , en tenant compte qu'il y a un plan de symétrie contenant s_1 . Dans la moitié supérieure, on répète le point Lo et construit les axes T_1, T_2, T_3 de sens inverses des t_i , ainsi que le point La ($T_1 = T_2 = T_3 = 1$). Deux intersections de la surface de dispersion avec des plans $T_1 = \text{Constante}$ sont figurées: $T_1 = 1$; $T_1 = 2$. Il n'y a qu'une différence d'échelle entre elles.

d'où:

$$\bar{\mu}_n)_{\text{sym}} = \frac{1}{\gamma} \left[1 - \frac{f''_{23}}{f''_0} \right] \text{ et } \mu)_{\text{eff sym}} = 1 - \frac{f''_{23}}{f''_0}, \quad (203)$$

avec:

$$\gamma = \sqrt{1 - \frac{9}{4}\beta^2}. \quad (203')$$

**Intersection de la surface
de dispersion avec la droite: $T'_2 = T'_3 = T'_1(f'_1/f')^2$**

Cette droite satisfait à:

$$T_1 = T_2 = T_3. \quad (204)$$

Elle diffère cependant de l'axe principal, avec lequel elle se confond seulement si l'on peut faire l'hypothèse: $f'_{12} = f'_{23}$, d'où $f'_1 = f'$. D'après (193), les points d'intersection satisfont donc à:

$$(T-1)[T^2 - \frac{1}{2} - s'(\frac{1}{2} - T)][(T^2 - \frac{1}{2})(T+1) + s'(T+1)(\frac{1}{2} - T) - s^2(T-1)] = 0 \quad (205)$$

où nous avons appelé T la valeur commune (204).

Si β^2 tend vers zéro, s et s' tendent vers l'unité et (205) se réduit à: $(T-1)^2(T^2 + T - 1)^2 = 0$.

Les trois racines de la troisième parenthèse de (205) tendent vers les racines des deux premières parenthèses.

De (118), (195) et (197), on déduit aisément l'expression des coefficients d'absorption, dont la forme analytique se simplifie dans le cas des trois premières racines:

Si: $T-1=0$

$$\mu = \frac{2}{\gamma_2 + \gamma_3} \left[1 - \frac{f''_{23}}{f''_0} \right] \quad (206)$$

Si: $T^2 - \frac{1}{2} - s'(\frac{1}{2} - T) = 0$

$$\mu = \frac{\alpha + \frac{T}{T+s'}}{\alpha\gamma_1 + \frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} \frac{T}{T+s'}} \left[1 - \frac{\frac{f''_{12}}{f''_0} \sqrt{\alpha(1+s')} - \frac{f''_{23}}{f''_0} s'T}{(1+\alpha)T + s'\alpha} \right] \quad (207)$$

d'où l'on déduit facilement $\mu_n)_{\text{sym}}$ et $\mu)_{\text{eff sym}}$.

Si l'on suppose $f'_{23} \simeq f'_{12}$ et $f''_{12} \simeq f''_{23}$, on vérifie facilement que les parenthèses [] se réduisent à $1 - f''_{12}/f''_0 T$ [cf. (115)].

Sur la Fig. 22 sont représentées, sous cette approximation, les variations avec β^2 , de $\mu)_{\text{eff sym}}$ pour les six points principaux. On a aussi représenté les variations correspondantes pour 'le cas à deux rayons': (111) et (111), et le 'cas à un rayon'.

Pour terminer, nous donnerons les résultats numériques relatifs au cas du *crystal de germanium et du rayonnement Cu K α* ; nous avons utilisé pour λ et a les valeurs données dans la partie I. Dans le Tableau 1, nous donnons successivement les valeurs de T solutions de (205) et les valeurs de $\mu)_{\text{eff sym}}$ correspondantes; dans les deux dernières colonnes nous donnons les valeurs de $\mu)_{\text{eff sym}}$ sous l'approximation $f''_{jk} = f''_0$, puis sous l'approximation supplémentaire: $f'_{12} = f'_{23}$.

Résumé

Dans cette seconde partie de nos études sur les conditions de coexistence de plusieurs (n) ondes planes de rayons X dans le milieu cristallin, nous avons introduit des facteurs atomiques complexes f^s , dont la partie réelle $f^{s'}$ règle la diffusion et la partie imaginaire $f^{s''}$ l'absorption, pour l'atome de sorte s . Beaucoup de quantités telles que les vecteurs d'onde, les coefficients de résonance, etc., qui sont réelles pour le réseau de dipôles considéré dans la partie I, deviennent complexes, tandis que le formalisme reste peu changé. Toutefois, la discussion ne se réduit pas simplement à la résolution des équations en parties réelles et imaginaires; on sait en

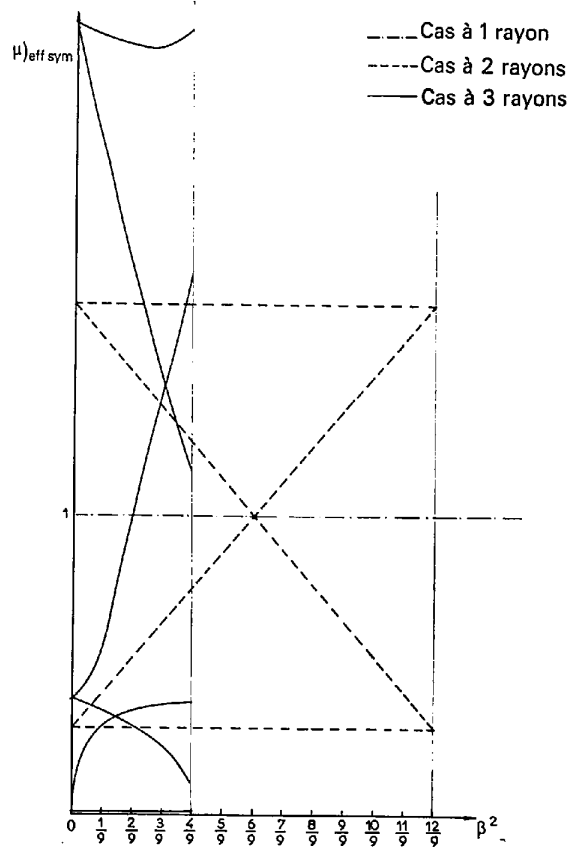


Fig. 22. Variation de $\mu)_{\text{eff sym}}$ avec β^2 dans le cas des réflexions simultanées (111/111) dans Ge et Si.

effet que, pour les f^s individuels, généralement $f^{s''} \ll f^{s'}$, mais on n'en déduit pas nécessairement, pour le facteur de structure $F_h, F_h'' \ll F_h'$, puisque F_h' peut s'annuler. Afin de préparer une approximation pour le cas d'une absorption faible, nous avons séparé F_h en deux quantités complexes, F_h^d et F_h^a [(5)], dont la première régit surtout la diffusion, et la seconde surtout l'absorption. De même, les coefficients de couplage des ondes, $\alpha_{h'-h''}$, ont été séparés de la même manière [(7)]. Cependant, jusqu'au paragraphe 1.J, on n'a pas encore supposé l'absorption faible, ni d'ailleurs restreint le nombre n des ondes considérés.

Le paragraphe 1.G montre comment s'obtient en principe le lieu géométrique du point caractéristique **T** ('tie point') d'un champ optique permis et le coefficient d'absorption pour ce champ. Par la suite, les coefficients d'absorption sont mesurés en multiples de μ_0 , le coefficient normal pour un rayon isolé (§ 1.H). La définition des points **Lo** (Lorentz) et **La** (Laue) est revue dans le paragraphe 1.I.

A partir du paragraphe 1.J, on traite l'absorption comme un effet faible comparé à la diffusion, et on se limite aux cas 'à deux rayons' ou 'trois rayons non coplanaires'. On déduit (§ 1.K) une construction géométrique pour μ_n , le coefficient rapporté à la direction du flux d'énergie d'un champ représenté par un point quelconque **T**; μ_n ne dépend que des caractères de la surface de dispersion au point **T** en jeu.

Pour un cristal semi-infini, limité par une surface plane à normale \bar{n} , on rapporte (§ 1.L) le coefficient d'absorption à cette direction ($\bar{\mu}_n$) et à la direction du rayon primaire [μ]_{eff}; on trouve les expressions de ces deux coefficients à partir de celle du coefficient fondamental μ_n , et montre (§ 1.M) que des valeurs approchées se laissent envisager par construction géométrique sur la surface de dispersion.

Dans le paragraphe 1.N, le cristal est supposé ne contenir qu'une seule sorte d'atomes (comme Ge et Si). Cela permet encore de raffiner la construction géométrique de μ_n en introduisant un point **La**, situé entre **Lo** et **La**, qui tient compte de la décroissance du pouvoir diffusif de l'atome avec l'angle de diffusion.

Les sections 2 et 3 sont respectivement consacrées aux cas 'à deux' et 'trois rayons non coplanaires', en vue d'explicitier et préciser les simplifications venant de valeurs particulières des coefficients de couplage.

Enfin les sections 4 et 5 du mémoire traitent des systèmes de rayons simultanés 111/111/020 et 111/111/220 des cristaux de germanium et silicium, systèmes tous deux symétriques. Pour le premier, on discute en détail la surface de dispersion à six nappes. Puisque, pour un cristal cubique, un seul paramètre: $\beta = \lambda/a$, détermine les angles entre les rayons et la forme de la surface de dispersion, on montre, dans une série de 'courbes universelles', le développement de la surface avec β^2 (Figs. 8-18). Le cas $\beta^2 = 0.0740$ correspond aux rayons Cu $K\alpha$ dans Ge. Chaque courbe montre l'intersection de la surface de dispersion avec un plan normal au plan de symétrie des vecteurs s_2 et s_3 qui contient

les directions parallèles à leurs vecteurs réciproques t_2 et t_3 . Pour des plans parallèles, l'intersection ne change que d'échelle et d'origine. Sur la Fig. 21, on montre la construction dans l'espace réciproque de la surface de dispersion, à partir de la 'courbe universelle' de la Fig. 11 ($\beta^2 = \frac{1}{3}$). D'autre part, sur les Figs. 4 et 22 sont représentées respectivement pour les deux systèmes de rayons simultanés, les variations avec β^2 des différentes valeurs de μ]_{eff, sym.} correspondant aux six points principaux. Sur ces diagrammes, sont aussi indiquées les valeurs prises par μ]_{eff, sym.} pour un 'seul' ou 'deux' rayons simultanés. μ]_{eff, sym.} est le rapport au coefficient ordinaire μ_0 d'un rayon isolé, du coefficient d'absorption, mesuré dans le direction du rayon incident, dans le cas où la surface du cristal est parallèle au plan des vecteurs h_2 et h_3 . Ces diagrammes mettent en évidence le comportement des six valeurs de μ avec la variation de la longueur d'onde, et son influence sur l'effet Borrmann.

Nous tenons à remercier vivement Mademoiselle Y. Cauchois, Professeur, Directeur du Laboratoire de Chimie Physique de la Faculté des Sciences de Paris, pour avoir rendu possible notre collaboration et facilité ce travail.

Liste de quelques symboles et définitions

Les définitions contenues dans la première partie sont désignées par [I, (. . .)].

- A = densité optique [I, (1)], (2').
 A_h = coefficient Fourier de la distribution de polarisabilité [I, (25)], (2').
 a_i = axes du cristal, b_i = axes réciproques.
 a_{jk}^d (58); b_{jk}^d, b_{jk}^a (23), (23').
 $2C$ [I, (38)], (137'); $2C^d$ (138'); $2C'$ (143').
 $D_0=0, D=0$ Equations de dispersion cas coplanaire, cas général (27), (30).
découpage symétrique (72)
 E_h = amplitudes des champs électriques (25), (69), (129), (130), (164).
 F_h, F_0 Facteurs de diffusion complexes de la maille (3).
 F_h^d, F_h^a Parties de F_h d'importance surtout pour la diffusion et l'absorption (5).
 f^s = facteur atomique complexe de l'atome de type s (5).
 f'_1, f'_2, f'_3 (102); f', f'' (109); f', f'_1 (116).
 G_h = 'facteur cristallin' (82).
 j = $2\pi i = 2\pi\sqrt{-1}$.
 k_0 = nombre d'onde dans le vide.
 K_h = vecteur de l'onde d'ordre h .
 K = nombre d'onde d'un seul rayon dans le cristal [I, § 4], (4').
La, Lo points de Laue et de Lorentz.
La = point de Laue réduit (94), (112), (125).
N = vecteur unité arbitraire (9).

- \mathbf{n} = нормале единица к поверхности дисперсии (61).
 $\bar{\mathbf{n}}$ = нормале единица внутренне к поверхности кристалла (70).
 r_h = коэффициент резонанса [I, (16), (28)]; (4'), (15).
 S_h = момент электрический эффективный ячейки [I, (22'), (29)], (1).
 \mathbf{S} = вектор потока энергии (Пойнтинга) (69).
 \mathbf{s}_h = вектор единицы луча порядка h .
 $s_{i\bar{k}}$ = скалярное произведение ($\mathbf{s}_i \mathbf{s}_{\bar{k}}$); s, s' для Ge 111/1 $\bar{1}$ 1 (155); 111/1 $\bar{1}$ 1 (192).
 \mathbf{T} = 'tie point', характеристический.
 $\mathbf{TLa} = \mathbf{T} \rightarrow \mathbf{La} = \mathbf{La} - \mathbf{T}$
 — та же конвенция для: $\mathbf{LoT}, \mathbf{LoLa}, \dots$
 T'_h, T''_h, T_i Координаты уменьшенные заменяющие τ_i (17), (89), (103), (119) *etc.*
 $T_{12}, T_{13} \dots = T_1 T_2, T_1 T_3 \dots$ (188).
 $\mathbf{T} = \mathbf{t}_3 - \mathbf{t}_2$ [I, (49)].
 \mathbf{t}_h = векторы взаимно обратные к \mathbf{s}_h [I, (10)], (43).
 \mathbf{v} = вектор $\mathbf{Lo} \rightarrow \mathbf{T}$ к фактору почти [I, (14)], (43).
 v_a, v_s Объемы несущиеся на \mathbf{a}_i и \mathbf{s}_i , соответственно.
 α^s = полярность атома s [I, (24)].
 $\alpha_{h'-h}$ = $\alpha_{h'h}$ коэффициент связи [I, (27)]; (2), (26).
 $\alpha_{h'}^d, \alpha_h^a$ Части α_h зависящие особенно от дифракции и поглощения (7).
 $\alpha_{1223} = \alpha_{12}\alpha_{13}$ [I, (39)], (137); $\alpha_{123} = \alpha_{12}\alpha_{23}\alpha_{31}$ [I, (38)], (137).
 $\beta = \lambda/a$ [I, (69)], (154).
 β_i = оси взаимно обратные уменьшенные [I, (57)].
 $\beta_{h'-h}$ — переменная общая в $D=0$ (20).
 $\gamma_h = \cos \angle(\mathbf{K}'_h, \mathbf{N})$ (14); назван γ для 'вырезки симметричной'.
 η_1, η_2, η_3 [I, (8), (57')].
 μ В I: индекс преломления; в II: коэффициент поглощения:
 μ_0 для единственного луча 'коэффициент обычный' (18), (51).
 $\mu \dots$ отношение коэффициента поглощения к 'коэффициент обычный' (52).
 $\mu_n, \bar{\mu}_n$ приняты в направлениях \mathbf{n} или $\bar{\mathbf{n}}$ (67), (71).
 μ_{sym} для 'вырезки симметричной' кристалла.
 μ_{eff} приняты по направлению луча первичного (71).
 τ_i = компоненты вектора \mathbf{v} [I, (19)]; τ_h (15).
 τ_{12}, τ_{123} произведения [I, (38)] (137).

Рeфeрeнцe

- BATTERMAN, B. W. & COLE, H. (1964). *Rev. Mod. Phys.* **36**, 681.
 BORRMANN, G. (1951). *Naturwissenschaften*, **38**, 330.
 BORRMANN, G. & HARTWIG, W. (1965). *Z. Kristallogr.* **121**, 401.
 EWALD, P. P. (1958). *Acta Cryst.* **11**, 888.
 EWALD, P. P. & HENO, Y. (1968). *Acta Cryst.* A **24**, 5.
 FREEMAN, A. J. (1959). *Acta Cryst.* **12**, 929.
 HILDEBRANDT, G. (1966). *Physica Stat. Sol.* **15**, K 131.
 JAMES, R. W. (1950). *The Optical Principles of the Diffraction of X-rays*, chap. 4. London: Bell.
 KATO, N. (1958). *Acta Cryst.* **11**, 885.

Acta Cryst. (1968). A **24**, 42

Геометрическая интерпретация точечных элементов симметрии и решеток Браве в четырехмерном пространстве

Т. С. Кунцевич и Н. В. Белов

Горьковский Государственный Университет имени Н. И. Добачевского, Горький, СССР

(Поступило 20 июня 1967 г.)

Twenty-four operations of symmetry in {4} are considered as being generated by a primordial (on Wulff's lines) operation of a mirror reflexion in the hyper-plane; the Bravais lattices in {4} are derived from 14 three-dimensional lattices by a synthetic method, account being taken of the new (24) elements of symmetry. A new Bravais lattice is added to Mackay & Pawley's list revised by A. M. Zamorzaev and B. V. Cekinovskij.

1. Операции симметрии в {4}

Выведенные Гурса (Goursat, 1889), Германом (Hermann, 1949), Харли (Hurley, 1951) методами теории групп 24 операции симметрии (кристаллографические) в четырехмерном пространстве можно получить геометрически, приняв в качестве основной,

порождающей операции симметрии зеркальное отражение в гиперплоскости.* В пространстве 4-х измерений (обозначаемом для краткости {4}) через любую точку A (рис. 1) вне гиперплоскости про-

* Согласно 'принципу Вульфа' (Белов, 1951а); геометрические термины взяты преимущественно из книги Мэннинга (Manning, 1956).