

Fig. 3. Magnetization (σ gram) and $1/\chi_g$ of $\text{Fe}_{0.9}\text{Mn}_{0.9}\text{Ge}$ at 12 kilogauss.

calculated inverse susceptibility per gram, $1/\chi_g$, is also shown, although the temperature range is not wide enough for calculation of the slope.

Discussion

We have found four possible magnetic structures for $\text{Fe}_{0.9}\text{Mn}_{0.9}\text{Ge}$ from the neutron diffraction data, although we cannot resolve them by the available data. However, by considering their relation to the structures of the binary compounds, Mn_5Ge_3 (Ciszewski, 1963) and $\text{Fe}_{1.77}\text{Ge}$ (Adelson & Austin, 1965), it can be seen that the most probable structure is the one

corresponding to model II. In this model, the moments per metal atom in the respective sites are $\mu_a = 2.72$ and $\mu_d = 0.38$. Noting that the metal atom distribution is $0.83\text{Mn} + 0.12\text{Fe}$ in site (a) and $0.78\text{Fe} + 0.07\text{Mn}$ in site (d), we can take the (a) sublattice as Mn atoms and the (d) sublattice as Fe atoms, as in the magnetic analysis, and take $2.72\mu_B$ as the moment per Mn atom and $0.38\mu_B$ as the moment per Fe atom. The former moment has a c component while the latter lies in the basal plane with a cant angle $\pm 45^\circ$. On the other hand, in terms of the notation in the present paper the Mn_5Ge_3 structure has $\mu_a = 3.00$, $\mu_d = 2.00$, $\mu_{\text{net}} = 2.5$, $\varphi_1 = \varphi_3 = 0^\circ$, $\beta_a = \beta_d = 0^\circ$ (spins parallel to the c axis) and the $\text{Fe}_{1.77}\text{Ge}$ structure has $\mu_a = 1.30$, $\mu_d = 1.10$, $\mu_{\text{net}} = 1.17$, $\varphi_1 = 0^\circ$, $\varphi_3 = 28^\circ$, $\beta_a = \beta_d = 90^\circ$ (spins in the basal plane, including (d) site spins with a cant angle $\pm 28^\circ$ from the common ferromagnetic components). Therefore, the spin structure of $\text{Fe}_{0.9}\text{Mn}_{0.9}\text{Ge}$ would resemble the structures of both of these binary compounds, that is, the suggested structure has the sublattice (a) similar to Mn_5Ge_3 in magnitude of moment, with a component along the c axis, while the sublattice (d) has low moments with canted directions in the basal plane, comparable with the (d) sublattice of $\text{Fe}_{1.77}\text{Ge}$. Although these considerations do not exclude the other solutions, they do indicate greater disparity with the binary compounds.

The authors wish to thank Mr J. W. Moody for synthesis of materials, and Mr N. A. Richard for magnetization measurements.

References

- ADELSON, E. & AUSTIN, A. E. (1965). *J. Phys. Chem. Solids*, **26**, 1795.
 CISZEWSKI, R. (1963). *Phys. Stat. Sol.* **3**, 1999.
 WEISS, R. J. & FREEMAN, A. J. (1959). *J. Phys. Chem. Solids*, **10**, 147.

Acta Cryst. (1968). **A24**, 517

Application de la Théorie Dynamique de S. Takagi au Contraste d'un Défaut Plan en Topographie par Rayons X. I. Faute d'Empilement

PAR A. AUTHIER ET D. SIMON

Laboratoire de Minéralogie-Cristallographie associé au C.N.R.S., Faculté des Sciences de Paris, 1, rue Victor Cousin, Paris 5e, France

(Reçu le 1 mars 1968)

Takagi's dynamical theory of X-ray diffraction by a perfect crystal is described for the two cases of an incident plane-wave and a spherical wave. Emphasis is put on the relation between these two cases. This theory is then applied to a single stacking-fault in a perfect crystal and the same relation is found between the plane-wave case and the spherical wave case. This relation enables us to calculate easily the stacking-fault fringe contrast by the stationary phase method.

1. Introduction

Le contraste de l'image d'un défaut plan a été étudié il y a plusieurs années déjà dans le cas de la microscopie électronique (Whelan & Hirsch, 1957*a, b*; Ha-

shimoto, Howie & Whelan, 1960, 1962; Gevers, Van Landuyt & Amelinckx, 1965, 1966).

Le calcul en est simplifié dans une certaine mesure par le fait que l'onde incidente est plane et que l'on peut utiliser l'approximation dite de la colonne. Il est

plus compliqué pour les rayons X car, dans la majorité des cas d'intérêt pratique, l'onde incidente est sphérique et il n'est évidemment plus question d'approximation de la colonne.

Il est plusieurs façons d'aborder le problème: l'une consiste à partir de l'analyse en ondes planes du faisceau incident (Kato, Usami & Katagawa, 1967; Authier & Sauvage, 1966; Authier, 1968), l'autre à résoudre une forme généralisée des équations fondamentales de la théorie dynamique. C'est ce que nous nous sommes proposés de faire dans cet article et le suivant. Nous avons utilisé pour cela la théorie de Takagi (1962) et la méthode de résolution qu'il en a donnée. Nous montrerons que l'on obtient ainsi les mêmes résultats qu'à l'aide de l'analyse en ondes planes.

Dans ce premier article, nous rappellerons la théorie de Takagi et en donnerons des solutions dans quelques cas particuliers pour un cristal parfait, puis pour un cristal contenant une faute d'empilement. Dans l'article suivant, nous calculerons le contraste des franges de moiré.

2. Théorie dynamique de la diffraction des rayons X par un cristal parfait (cas sans absorption)

(i) Equations générales

Le principe de la théorie dynamique classique est de chercher une solution à l'équation de propagation d'une onde électromagnétique dans un milieu triplement périodique. Laue et Ewald ont montré que lorsque le cristal est parfait et l'onde incidente plane, la solution est constituée par une fonction d'ondes de Bloch:

$$D(\mathbf{r}) = \sum_h D_h \exp(-2\pi i \mathbf{K}_h \cdot \mathbf{r})$$

que l'on interprète comme des champs d'ondes d'amplitudes D_h constantes dans tout le cristal et dont les vecteurs d'onde se déduisent les uns des autres par des relations du type

$$\mathbf{K}_h = \mathbf{K}_0 + \mathbf{h}$$

(\mathbf{h} vecteur du réseau réciproque).

Si l'on porte l'amplitude de cette onde de Bloch dans l'équation de propagation, on peut montrer que celle-ci est équivalente à un système d'équations linéaires dont les inconnues sont les amplitudes D_h .

Les ondes incidentes réelles ne sont jamais des ondes planes. La théorie de Kato (1961) consiste à en faire une analyse en ondes planes. Les ondes se propageant dans le cristal peuvent alors être considérées comme des sommes d'ondes de Bloch dont les points caractéristiques occupent un domaine plus ou moins étendu de la surface de dispersion. La théorie de Takagi consiste, elle, à chercher comme solution de l'équation de propagation, une fonction d'ondes de Bloch modifiée de forme:

$$D(\mathbf{r}) = \sum D_h(\mathbf{r}) \exp(-2\pi i \mathbf{K}_h \cdot \mathbf{r}) \quad (2-2)$$

où $D_h(\mathbf{r})$ est une fonction complexe, lentement variable de la position, que nous appellerons pseudo-amplitude et où $\mathbf{K}_h = \mathbf{K}_0 + \mathbf{h}$, \mathbf{K}_0 étant fixé arbitrairement.

Nous écrivons une onde incidente quelconque sous la forme:

$$D_0^{(a)} = D_0^{(a)}(\mathbf{r}) \exp(-2\pi i \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}) \quad (2-3)$$

Les conditions aux limites sur la face d'entrée sont:

$$D_0(\mathbf{r}_s) = D_0^{(a)}(\mathbf{r}_s)$$

$$D_h(\mathbf{r}_s) = 0$$

où \mathbf{r}_s est le vecteur de position sur la surface d'entrée.

Le vecteur \mathbf{K}_0 pouvant être choisi arbitrairement, nous lui imposerons, avec Takagi, les deux conditions suivantes:

– avoir même composante tangentielle que \mathbf{k}_0 sur la face d'entrée; ceci se traduit par la relation $\mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{r}_s = \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_s$.

– avoir pour module $|\mathbf{K}_0| = kn$ où n est l'indice de réfraction pour les rayons X et $k = 1/\lambda$ le nombre d'ondes dans le vide. L'extrémité P de \mathbf{K}_0 se trouve donc sur l'asymptote T_0 au cercle de rayon nk et de centre O , origine du réseau réciproque (Fig. 1). Développons la susceptibilité électrique χ en série de Fourier sous la forme:

$$\chi = \sum_h \chi_h \exp(-2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{r})$$

et remplaçons $D(\mathbf{r})$ et $\chi(\mathbf{r})$ par leurs développements respectifs dans l'équation de propagation. Takagi (1962) a montré que, dans le cas à deux faisceaux, les équations fondamentales de la théorie dynamique classique sont remplacées par le système d'équations aux dérivées partielles:

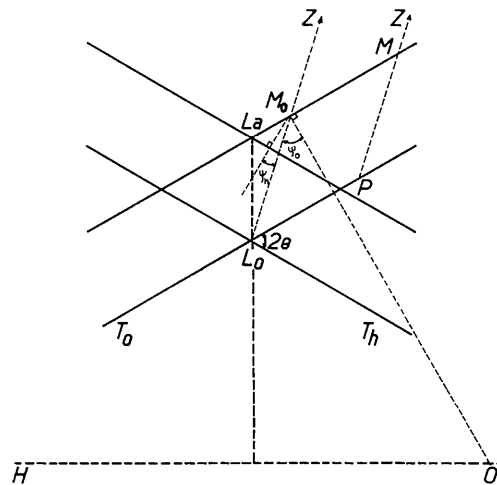


Fig. 1. Vecteurs d'ondes utilisés dans la théorie de Takagi

$$\mathbf{K}_0^{(a)} = \overrightarrow{OM} \text{ (onde incidente), } \mathbf{k}_0 = \overrightarrow{OM}_0, \overrightarrow{M}_0\overrightarrow{M} = k(\Delta\theta - \Delta\theta_0), \\ \mathbf{K}_0 = \overrightarrow{OP}, \mathbf{K}^h = \overrightarrow{HP}.$$

$$\begin{cases} \frac{\partial D_0(\mathbf{r})}{\partial s_0} = -i\pi k \chi_{\bar{h}} D_h(\mathbf{r}) C \\ \frac{\partial D_h(\mathbf{r})}{\partial s_h} = -i\pi k [\chi_h C D_0(\mathbf{r}) - 2\beta_h D_h(\mathbf{r})] \end{cases} \quad (2-4)$$

$C=1$ ou $\cos 2\theta$ suivant que la direction de polarisation du vecteur induction électrique est perpendiculaire ou parallèle au plan d'incidence (θ est l'angle de Bragg); s_0 et s_h sont des coordonnées dans les directions incidente et réfléchi respectivement. Le paramètre

$\beta_h = \frac{|\mathbf{K}_h| - |\mathbf{K}_0|}{k}$ dépend du choix du couple de vecteurs $\mathbf{k}_0, \mathbf{K}_0$.

(ii) *Résolution du système de Takagi*

Nous allons indiquer une méthode générale de résolution du système d'équations de Takagi pour une onde incidente quelconque, nous l'appliquerons aux cas particuliers d'ondes planes ou sphériques.

(a) *Cas d'une onde incidente quelconque*

On transforme le système (2-4) d'équations simultanées aux dérivées partielles du premier ordre en un système d'équations du second ordre indépendantes qui s'écrit:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 D_0}{\partial s_0 \partial s_h} - 2i\pi k \beta_h \frac{\partial D_0}{\partial s_0} + \pi^2 k^2 C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}} D_0 = 0 \\ \frac{\partial^2 D_h}{\partial s_0 \partial s_h} - 2i\pi k \beta_h \frac{\partial D_h}{\partial s_0} + \pi^2 k^2 C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}} D_h = 0 \end{cases}$$

Ces deux équations ont une forme hyperbolique et on peut les résoudre par la méthode de Riemann [voir par exemple Sommerfeld (1949)]. Soient P le point à l'intérieur du cristal où l'on veut calculer les amplitudes D_0 et D_h , s_0 et s_h les vecteurs unitaires dans les directions incidente et réfléchi respectivement, A et B deux

points de la face d'entrée tels que \vec{AP} et \vec{BP} soient respectivement parallèles à s_0 et s_h (Fig.2). Takagi* a

* Travail non publié.

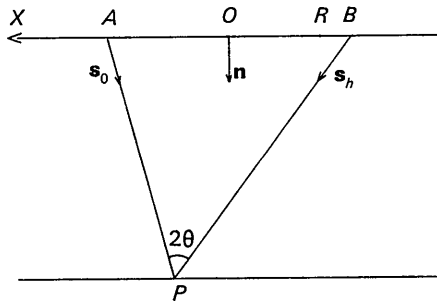


Fig.2. s_0 vecteur unitaire dans la direction incidente; s_h vecteur unitaire dans la direction réfléchi; \mathbf{n} vecteur unitaire normal à la face d'entrée du cristal; $x = \overline{OR}$; $OA = OB = l$.

montré que l'amplitude de l'onde réfléchi ne dépend que des valeurs de l'amplitude de l'onde incidente et de ses dérivées le long du segment \overline{BA} :

$$D_h(P) = \frac{-i\pi k C \chi_h \gamma_0}{\sin 2\theta} \int_{\overline{BA}} D_0^{(a)}(x) v(x) dx \quad (2-5)$$

où

$$\begin{aligned} \gamma_0 &= \cos \psi_0 & \psi_0 &= (\mathbf{s}_0, \mathbf{n}) \\ \gamma_h &= \cos \psi_h & \psi_h &= (\mathbf{s}_h, \mathbf{n}) \end{aligned}$$

Puisque \mathbf{K}_0 et \mathbf{K}_h sont fixés arbitrairement, on peut choisir pour leur extrémité le point de Lorentz, c'est-à-dire le point d'intersection des asymptotes de la surface de dispersion. On aura donc:

$$\beta_h = 0.$$

La fonction $v(M)$ ou fonction de Riemann est définie en tout point M du cristal par les conditions:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 v}{\partial s_0 \partial s_h} + 2i\pi k \frac{\partial(\beta_h v)}{\partial s_0} + \pi^2 k^2 C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}} v = 0 \\ \frac{\partial v}{\partial s_h} = -2i\pi k \beta_h v \quad \text{le long de } BP \\ \frac{\partial v}{\partial s_0} = 0 \quad \text{le long de } AP \\ v(P) = 1 \end{cases}$$

Cette fonction peut être calculée analytiquement lorsque β_h est nul et est alors égale à:

$$v = J_0(\xi) \quad \text{avec}$$

$$\xi = 2\pi k \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}} \sqrt{[s_0 - s_0(P)] [s_h - s_h(P)]}. \quad (2-6)$$

J_0 est la fonction de Bessel d'ordre 0.

Le long de la face d'entrée, elle s'écrit:

$$v(x) = J_0(B\sqrt{l^2 - x^2}) \quad \text{avec} \quad B = \frac{2\pi k |C| \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}} \sqrt{\gamma_0 \gamma_h}}{\sin 2\theta}$$

où x est une coordonnée le long de \overline{BA} par rapport au milieu O de BA .

Nous avons déterminé par la même méthode la pseudo-amplitude réfractée:

$$\begin{aligned} D_0(P) &= D_0^{(a)}(A) - \frac{B}{2} \int_{\overline{BA}} D_0^{(a)}(x) \sqrt{\frac{l+x}{l-x}} \\ &\quad \times J_1(B\sqrt{l^2 - x^2}) dx. \end{aligned} \quad (2-7)$$

J_1 est la fonction de Bessel du premier ordre.

(b) *Cas d'une onde incidente plane*

Une onde incidente plane s'écrit sous la forme:

$$D_0^{(a)} = D_0^{(a)} \exp(-2\pi i \mathbf{K}_0^{(a)} \cdot \mathbf{r}),$$

$D_0^{(\omega)}$ étant une constante représentant l'amplitude de cette onde plane et $\mathbf{K}_0^{(\omega)}$ son vecteur d'onde. On peut l'écrire sous une forme identique à (2-3):

$$D_{0p}^{(\omega)} = D_0^{(\omega)} \exp[-2\pi i(\mathbf{K}_0^{(\omega)} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{r}] \exp(-2\pi i \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r})$$

avec

$$D_0^{(\omega)}(\mathbf{r}) = D_0^{(\omega)} \exp[-2\pi i(\mathbf{K}_0^{(\omega)} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{r}].$$

Les expressions des pseudo-amplitudes réfléchie et réfractée deviennent:

$$\left\{ \begin{array}{l} D_h(P) = \frac{-i\pi k C \chi_h \gamma_0}{\sin 2\theta} D_0^{(\omega)} \\ \quad \times \int_{-l}^{+l} \exp(-2\pi i \Delta T x) J_0(B\sqrt{l^2 - x^2}) dx \quad (2-8) \\ \\ D_0(P) = D_0^{(\omega)} \left[\exp(-2\pi i \Delta T l) - \frac{B}{2} \right. \\ \quad \times \int_{-l}^{+l} \exp(-2\pi i \Delta T x) \\ \quad \times \left. \sqrt{\frac{l+x}{l-x}} J_1(B\sqrt{l^2 - x^2}) dx \right] \quad (2-9) \end{array} \right.$$

où ΔT est la composante de $M_0 \bar{M}$ parallèlement à la surface du cristal (Fig. 1). Introduisons un paramètre η défini par:

$$\Delta T = k\gamma_0(\Delta\theta - \Delta\theta_0) = \frac{k\sqrt{\gamma_0\gamma_h}|C|\sqrt{\chi_h\chi_{\bar{h}}}}{\sin 2\theta} \eta. \quad (2-10)$$

L'intégration de (2-8) et (2-9) permet de retrouver les expressions obtenues par la théorie de Laue:

$$\left\{ \begin{array}{l} D_h(P) = -iD_0^{(\omega)} \frac{C}{|C|} \sqrt{\frac{\gamma_0}{\gamma_h}} \frac{\chi_h}{\sqrt{\chi_h\chi_{\bar{h}}}} \\ \quad \times \frac{\sin(Bl\sqrt{1+\eta^2})}{\sqrt{1+\eta^2}} \quad (2-11) \\ \\ D_0(P) = D_0^{(\omega)} \left[\cos(Bl\sqrt{1+\eta^2}) - i \frac{\eta}{\sqrt{1+\eta^2}} \right. \\ \quad \times \left. \sin(Bl\sqrt{1+\eta^2}) \right]. \quad (2-12) \end{array} \right.$$

Remarque: $Bl = \pi d/\lambda$ où d est la profondeur du point P et λ la période de la solution pendulaire ($\lambda = \lambda\sqrt{\gamma_0\gamma_h}/|C|\sqrt{\chi_h\chi_{\bar{h}}}$).

(c) Cas d'une onde incidente sphérique

(α) Distribution d'intensité sur la face de sortie du cristal

Pour une onde incidente sphérique, la fonction d'ondes s'écrit:

$$D_{0s}^{(\omega)} = D_0^{(\omega)} \frac{\exp(-2\pi ikr)}{4\pi r}$$

Soient S la source de rayons X , SQ le rayon qui se trouve exactement sous l'incidence de Bragg et SR un rayon ayant un écart à l'incidence de Bragg $\Delta\theta$ (voir Fig. 3). Le vecteur \mathbf{k}_0 est porté par la droite SQ . Nous pouvons écrire $D_{0s}^{(\omega)}$ de la manière suivante:

$$D_{0s}^{(\omega)} = \frac{D_0^{(\omega)}}{4\pi r} \exp[-2\pi i(kr - \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r})] \exp(-2\pi i \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}).$$

Elle prend alors la forme (2-3) en posant

$$D_0^{(\omega)}(\mathbf{r}) = \frac{D_0^{(\omega)}}{4\pi r} \exp[-2\pi i(kr - \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r})];$$

or $\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} \simeq kr_0(1 - \Delta\theta^2/2)$ car $\Delta\theta$ est petit devant 1 ($\Delta\theta \leq 10^{-4}$) et $r \simeq r_0$.

Donc, on en déduit:

$$D_0^{(\omega)}(r) = \frac{D_0^{(\omega)}}{4\pi r_0} \exp\left(-2\pi ikr_0 \frac{\Delta\theta^2}{2}\right).$$

De plus, on voit sur la Fig. 3 que:

$$x - x_0 = r_0 \frac{\Delta\theta}{\gamma_0}$$

d'où

$$D_0^{(\omega)}(x) = \frac{D_0^{(\omega)}}{4\pi r_0} \exp\left[-\pi i \frac{k\gamma_0^2}{r_0} (x - x_0)^2\right]. \quad (2-13)$$

Nous reportons cette valeur dans les expressions (2-5) et (2-7) puis nous intégrons par la méthode de la phase stationnaire au voisinage de $x = x_0$. Dans les conditions expérimentales habituelles, on a: $r_0 \simeq 4 \cdot 10^5 \mu$, $\lambda \simeq 10^{-4} \mu$ et $r_0/k \simeq 40 \mu^2$. Si $x - x_0 > \sqrt{r_0/k} \simeq 6 \mu$, le facteur de phase oscille très rapidement et sa contribution à l'intégrale est négligeable, ce qui justifie l'utilisation de la méthode de la phase stationnaire.

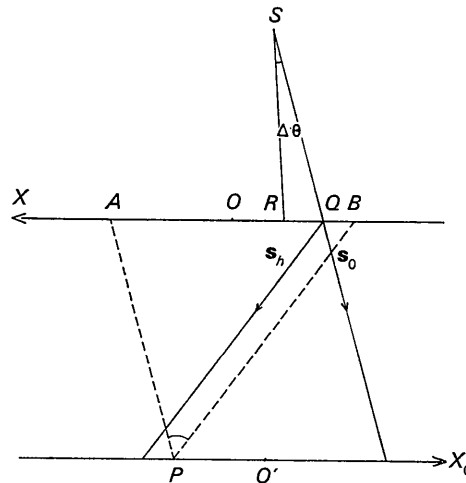


Fig. 3. Cas d'une onde incidente sphérique: $\vec{SQ} = \mathbf{r}_0$, $\vec{SR} = \mathbf{r}$, $\vec{OQ} = x_0$, $OR = x$.

Nous obtenons donc:

$$D_{hs}(x_0) = -i \frac{D_0^{(a)}}{4r_0} \sqrt{kr_0} \frac{C\chi_h}{\sin 2\theta} \exp(-i\pi/4) \times J_0(B\sqrt{l^2-x_0^2}) \quad (2-14)$$

$$D_{0s}(x_0) = \frac{D_0^{(a)}}{4\pi r_0} \left\{ \exp \left[-\pi i \frac{k\gamma_0^2}{r_0} (l-x_0)^2 \right] - \exp(-i\pi/4) \sqrt{kr_0} \times C \frac{\sqrt{\chi_h\chi_{\bar{h}}}}{\sin 2\theta} \sqrt{\frac{\gamma_h}{\gamma_0}} \sqrt{\frac{l+x_0}{l-x_0}} \times J_1(B\sqrt{l^2-x_0^2}) \right\}. \quad (2-15)$$

x_0 représente l'abscisse sur Ox du point Q tel que SQ satisfasse rigoureusement la condition de Bragg. Il représente aussi l'abscisse sur $O'x_0$ (voir Fig. 3) du point P où l'on cherche la fonction d'ondes.

Remarques: (a) l'expression (2-14) et le second terme de l'expression (2-15) sont identiques, à un facteur numérique près, aux expressions données par Kato (1961). Le premier terme de (2-15) représente le faisceau qui est en dehors des conditions de réflexion de Bragg et qui traverse le cristal sans déviation.

(b) On retrouverait les expressions (2-14) et (2-15) en considérant une onde incidente plane et limitée par une fente infiniment fine et en remplaçant dans (2-5) et (2-7) la pseudo-amplitude $D_0^{(a)}(x)$ par une distribution de Dirac. Mais ceci nous conduit à conserver dans l'expression une mesure de Dirac. Il en résulte des difficultés dans le calcul des intensités diffractées par un cristal contenant un défaut plan.

(β) Conservation de l'énergie. Intensités intégrées

Les pseudo-amplitudes $D_h(x_0)$ et $D_0(x_0)$ que nous venons de calculer ont la dimension d'amplitudes par unité de longueur; donc $|D_h(x_0)|^2$ et $|D_0(x_0)|^2$ représen-

tent les distributions d'intensité sur la face de sortie du cristal. Leurs expressions sont:

$$I_r = |D_h(x_0)|^2 = I_0 \pi^2 k r_0 \frac{C^2 \chi_h^2}{\sin^2 2\theta} J_0^2(B\sqrt{l^2-x_0^2})$$

avec

$$I_0 = \left| \frac{D_0^{(a)}}{4\pi r_0} \right|^2 \quad (2-16)$$

$$I_t = |D_0(x_0)|^2 = I_0 \left\{ 1 + \pi^2 k r_0 \frac{C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}}}{\sin^2 2\theta} \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \times \frac{l+x_0}{l-x_0} J_1^2(B\sqrt{l^2-x_0^2}) - 2 \cos \left[\pi k \frac{\gamma_0^2}{r_0} (l-x_0)^2 - \frac{\pi}{4} \right] \pi \frac{\sqrt{kr_0} C \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}}{\sin 2\theta} \times \sqrt{\frac{\gamma_h}{\gamma_0}} \sqrt{\frac{l+x_0}{l-x_0}} J_1(B\sqrt{l^2-x_0^2}) \right\}. \quad (2-17)$$

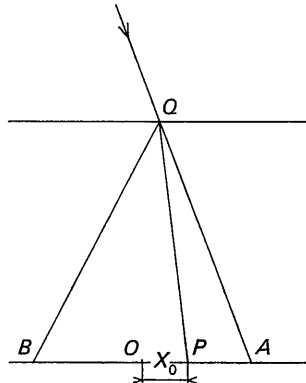
Les Figs. 4(a) et (b) montrent que l'on peut calculer l'intensité intégrée de deux façons. La première consiste à intégrer les intensités I_r et I_t sur la face de sortie du cristal en laissant le faisceau incident et le cristal fixes. La seconde consiste à calculer l'intensité qui arrive en un point de la face de sortie lorsqu'on fait une translation du cristal par rapport au faisceau incident. C'est l'énergie reçue par un point de la plaque photographique dans une topographie par translation. Dans ce dernier cas, on voit facilement que l'intensité incidente est:

$$\int_{-l}^{+l} I_0 dx_0 = 2l I_0.$$

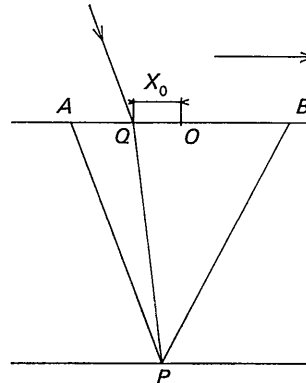
En utilisant les résultats suivants:

$$\int_{-l}^{+l} J_0^2(B\sqrt{l^2-x_0^2}) dx_0 = \frac{1}{B} \int_0^{2Bl} J_0(q) dq$$

$$\int_{-l}^{+l} \frac{l+x_0}{l-x_0} J_1^2(B\sqrt{l^2-x_0^2}) dx_0 = 2l - \frac{1}{B} \int_0^{2Bl} J_0(q) dq$$



(a)



(b)

Fig. 4. (a) Le faisceau incident et le cristal sont fixes. On obtient l'intensité totale diffractée en intégrant l'intensité reçue en P sur le segment AB . (b) On fait une translation du cristal par rapport au faisceau incident. On obtient l'intensité incidente totale en intégrant l'intensité incidente en Q sur le segment AB .

on peut montrer que:

$$2l\gamma_0 I_0 = \gamma_0 \int_{-l}^{+l} I_T dx_0 + \gamma_h \int_{-l}^{+l} I_r dx_0. \quad (2-18)$$

Cette relation exprime la conservation de l'énergie.

(d) *Relation entre les pseudo-amplitudes dans les cas d'une onde incidente plane et sphérique*

Considérons les fonctions:

$$\mathcal{D}_h(x_0) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x_0| > l \\ -\frac{i\pi k C \chi_h \gamma_0}{\sin 2\theta} J_0(B\sqrt{l^2 - x_0^2}) & \text{si } |x_0| \leq l \end{cases}$$

et

$$\mathcal{D}_0(x_0) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x_0| > l \\ \gamma_0 \sqrt{\frac{k}{r_0}} \exp \left[-\pi i \frac{k\gamma_0^2}{r_0} (l-x_0)^2 + i \frac{\pi}{4} \right] \\ -\frac{B}{2} \sqrt{\frac{l+x_0}{l-x_0}} J_1(B\sqrt{l^2 - x_0^2}) & \text{si } |x_0| \leq l. \end{cases}$$

Les expressions (2-14) et (2-15) des pseudo-amplitudes dans le cas d'une onde incidente sphérique s'écrivent:

$$D_h(x_0) = A \mathcal{D}_h(x_0) \quad \text{avec} \quad A = \frac{D_0^{(a)}}{4\pi} \frac{1}{\gamma_0} \frac{\exp(-i\pi/4)}{\sqrt{k r_0}}$$

$$D_0(x_0) = A \mathcal{D}_0(x_0).$$

D'autre part, les formules (2-8) et (2-9) expriment que, pour une onde incidente plane:

$$D_h(P) = D_0^{(a)} \times \text{transformée de Fourier de } \mathcal{D}_h(x_0)$$

$$D_0(P) = D_0^{(a)} \times \text{transformée de Fourier de } \mathcal{D}_0(x_0).$$

La relation qui lie les pseudo-amplitudes dans les deux cas est donc une transformation de Fourier; les variables réciproques dans cette transformation sont: x_0 position du point sur la face de sortie du cristal où l'on calcule l'intensité dans le cas d'une onde incidente sphérique et $\Delta T = k\gamma_0(\Delta\theta - \Delta\theta_0)$ quantité proportionnelle à l'écart de l'incidence de Bragg de l'onde plane incidente. D'après le théorème de Parseval, on a:

$$\int_{-l}^{+l} |D_h(x_0)|^2 dx_0 = \frac{A^2}{|D_0^{(a)}|^2} \int_{-\infty}^{+\infty} |D_h(P)|^2 d(\Delta T).$$

Le premier terme de cette égalité représente l'intensité intégrée sur la base de triangle de Borrmann dans le cas de l'onde sphérique.

Le second terme représente l'intensité intégrée lorsqu'on considère une infinité d'ondes planes incidentes sans relation de phase. On constate que ces deux intensités intégrées sont égales. Ce résultat a déjà été montré par Kato (1961). Remarquons qu'il permet de retrouver sans calcul la conservation de l'énergie dans le cas d'une onde sphérique, la conservation de l'énergie ayant été démontrée depuis longtemps dans le cas d'une onde plane.

3. Théorie dynamique dans le cas absorbant

(i) *Expression de la pseudo-amplitude réfléchie dans le cas d'une onde plane incidente*

La formule (2-5) donne l'expression de la pseudo-amplitude réfléchie par un cristal parfait en un point de la face de sortie dans le cas où l'on néglige l'absorption. Nous avons vu que la fonction de Riemann intervenant dans cette expression est une fonction de Bessel [expression (2-6)].

Nous avons vu, d'autre part, que $D_h(P)$ ne dépend que des valeurs de cette fonction sur la face d'entrée du cristal.

Pour pouvoir calculer cette fonction de Riemann, nous avons choisi:

$$\beta_h = \frac{|K_h| - |K_0|}{k} = 0 \quad \text{dans le cristal.}$$

Et nous avons écrit l'amplitude incidente sous la forme $D_0^{(a)}(x) = D_0^{(a)} \exp(-2\pi i \Delta T x)$, ΔT étant proportionnel à l'écart à l'incidence de Bragg de l'onde plane incidente.

On obtient la même valeur de l'amplitude $D_h(P)$ à l'intérieur du cristal en supposant $\beta_h \neq 0$ dans le cristal et $\Delta T = 0$ sur la face d'entrée. Dans ce cas, $D_0^{(a)}(x) = D_0^{(a)}$ et

$$v = J_0(\xi) \exp\{-2\pi i k \beta_h [s_h - s_h(P)]\}$$

d'où:

$$\begin{aligned} D_h(P) &= \frac{-i\pi k C \chi_h \gamma_0}{\sin 2\theta} \exp\left(i\pi k \beta_h \frac{d}{\gamma_h}\right) \\ &\times \int_{BA} D_0^{(a)} \exp\left(-2\pi i \frac{k\beta_h \gamma_0}{\sin 2\theta} x\right) \\ &\times J_0\left(\frac{\pi d}{A} \sqrt{1 - \frac{x^2}{l^2}}\right) dx. \end{aligned} \quad (3-1)$$

En comparant les expressions (2-8) et (3-1), on déduit la relation:

$$\Delta T = \frac{k\beta_h \gamma_0}{\sin 2\theta}; \quad \beta_h \text{ étant réel.}$$

Dans le cas du cristal absorbant, nous supposons que les vecteurs d'onde dans le cristal \mathbf{K}_0 et \mathbf{K}_h sont complexes:

$$\mathbf{K}_h = \mathbf{K}_{hr} + i\mathbf{K}_{hi}$$

$$\mathbf{K}_0 = \mathbf{K}_{0r} + i\mathbf{K}_{0i}.$$

De même χ_h et β_h sont complexes:

$$\chi_h = \chi_{hr} + i\chi_{hi}$$

$$\beta_h = \beta_{hr} + i\beta_{hi}.$$

On peut aussi calculer $\sqrt{\chi_h \chi_h^*} = |\chi_{hr}| + i|\chi_{hi}| \cos \varphi$; φ est la différence de phase entre χ_{hr} et χ_{hi} .

On montre facilement que:

$$\frac{k\beta_{hr}\gamma_0}{\sin 2\theta} = \Delta T$$

et:

$$\beta_{ht} = \frac{|\chi_{i0}|}{2} \left(\frac{\gamma_h}{\gamma_0} - 1 \right).$$

D'où, pour une onde incidente plane, on obtient:

$$D_h(P) = - \frac{i\pi k C \chi_{rh} \gamma_0}{\sin 2\theta} D_0^{(\omega)} \exp \left[- \frac{\mu d}{4} \left(\frac{1}{\gamma_h} - \frac{1}{\gamma_0} \right) \right] \\ \times \int_{-l}^{+l} \exp \left[- \frac{\mu(\gamma_h - \gamma_0)}{\sin 2\theta} x \right] \\ \times J_0 \left(\frac{\pi d}{A} \sqrt{1 - \frac{x^2}{l^2}} \right) \exp(-2\pi i \Delta T x) dx, \quad (3-2)$$

sachant que $\mu = -2\pi k |\chi_{i0}|$, μ étant le coefficient d'absorption linéaire,

$$\frac{1}{A} = \frac{1}{t} + i \frac{1}{\tau}, \quad \frac{1}{t} = \frac{k|C|\chi_{rh}}{\sqrt{\gamma_0\gamma_h}} \quad \text{et} \quad \frac{1}{\tau} = \frac{k|C|\chi_{ih} \cos \varphi}{\sqrt{\gamma_0\gamma_h}}.$$

Remarque: dans les expressions (2-8) et (3-2), nous avons omis les facteurs exponentiels ayant un argument imaginaire car ils n'interviennent pas dans le calcul des intensités.

(ii) *Expression de la pseudo-amplitude réfléchie dans le cas d'une onde incidente sphérique*

Pour une onde incidente sphérique, on remplace

$$D_0^{(\omega)} \exp(-2\pi i \Delta T x) \quad \text{par} \\ \frac{D_0^{(\omega)}}{4\pi r_0} \exp \left[-\pi i \frac{k\gamma_0^2}{r_0} (x - x_0)^2 \right].$$

Ces deux expressions représentant dans chacun des cas l'écart à l'incidence de Bragg de l'onde incidente. Il suffit alors d'intégrer par la méthode de la phase stationnaire et l'on obtient:

$$D_h(x_0) = -i \frac{D_0^{(\omega)}}{4} \sqrt{\frac{k}{r_0}} \frac{C \chi_{rh}}{\sin 2\theta} \exp(-i\pi/4) \\ \times \exp \left[- \frac{\mu d}{4} \left(\frac{1}{\gamma_h} - \frac{1}{\gamma_0} \right) \right] \\ \times \exp \left[- \frac{\mu(\gamma_h - \gamma_0)}{2 \sin 2\theta} x_0 \right] J_0 \left(\frac{\pi d}{A} \sqrt{1 - \frac{x_0^2}{l^2}} \right). \quad (3-3)$$

Nous avons négligé χ_{ih} devant χ_{rh} dans le coefficient constant de $D_h(x_0)$. Remarquons que cette expression est presque identique à l'expression (2-14) obtenue dans le cas non absorbant à un facteur exponentiel près qui n'est différent de 1 que pour une réflexion asymétrique. De plus $1/A$ étant complexe, la fonction

$$J_0 \left(\frac{\pi d}{A} \sqrt{1 - \frac{x_0^2}{l^2}} \right)$$

est aussi complexe. Si l'on compare les expressions (3-2) et (3-3) ci-dessus, on constate que nous avons encore une relation de transformation de Fourier entre les pseudo-amplitudes dans les cas d'une onde plane et d'une onde sphérique incidente.

(iii) *Calcul de l'intensité réfléchie*

(a) *Cas d'une onde sphérique incidente*

Comme \mathbf{K}_h est complexe, il faut maintenant écrire:

$$I_h = |D_h \exp(-2\pi i \mathbf{K}_h \cdot \mathbf{r})|^2 \\ I_h = D_h D_h^* \exp \{ -2\pi i [\mathbf{K}_h \cdot \mathbf{r} - (\mathbf{K}_h \cdot \mathbf{r})^*] \}.$$

Or

$$\mathbf{K}_h \cdot \mathbf{r} - (\mathbf{K}_h \cdot \mathbf{r})^* = 2 \mathcal{J}(\mathbf{K}_h \cdot \mathbf{r}) = 2 \mathcal{J}(\mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{r}).$$

Car pour respecter la condition de la continuité de la composante tangentielle des vecteurs d'onde à la face d'entrée, il faut choisir \mathbf{K}_{ht} et \mathbf{K}_{0t} perpendiculaires à cette face.

On trouve:

$$\mathcal{J}(\mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{r}) = - \frac{k|\chi_{i0}|}{2\gamma_0} d.$$

Donc:

$$I_h = |D_h|^2 \exp(-\mu d/\gamma_0).$$

Et finalement:

$$I_h = \frac{|D_0^{(\omega)}|^2}{16} \frac{k}{r_0} \frac{C^2 |\chi_{rh}|^2}{\sin^2 2\theta} \exp \left[- \frac{\mu d}{2} \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_h} \right) \right] \\ \times \exp \left[- \frac{\mu(\gamma_h - \gamma_0)}{\sin 2\theta} x_0 \right] \left| J_0 \left(\frac{\pi d}{A} \sqrt{1 - \frac{x_0^2}{l^2}} \right) \right|^2. \quad (3-4)$$

Si nous supposons que d est très supérieur à t et que $Y = x_0/l$ n'est pas trop voisin de ± 1 , nous pouvons écrire:

$$J_0 \left(\frac{\pi d}{A} \sqrt{1 - Y^2} \right) \simeq \frac{1}{\pi} \frac{2t}{d} \frac{1}{(1 - Y^2)^{1/4}} \\ \times \cos \left[\frac{\pi d}{A} \sqrt{1 - Y^2} - \frac{\pi}{4} \right].$$

Donc:

$$I_h \simeq \frac{|D_0^{(\omega)}|^2}{16} \frac{k}{r_0} \frac{C^2 |\chi_{rh}|^2}{\sin^2 2\theta} \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{2t}{d} \right)^2 \frac{1}{(1 - Y^2)^{1/2}} \\ \times \exp \left[- \frac{\mu d}{2} \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_h} \right) \right] \exp \left[- \frac{\mu(\gamma_h - \gamma_0)}{\sin 2\theta} x_0 \right] \\ \times \left\{ sh^2 \left[\frac{\pi d}{\tau} \sqrt{1 - Y^2} \right] + \cos^2 \left[\frac{\pi d}{t} \sqrt{1 - Y^2} - \frac{\pi}{4} \right] \right\}. \quad (3-5)$$

Remarque: La période des franges de solution pendulaire est identique dans les cas avec et sans absorption tant que Y n'est pas trop voisin de ± 1 . Mais on constate que si $Y \simeq \pm 1$ elle diffère pour les deux cas.

(β) Cas d'une onde plane incidente

L'intégrale intervenant dans l'expression (3-2) se calcule de la même façon que dans l'expression (2-8).

On trouve alors:

$$D_h(P) = \frac{-i\pi k C \chi_h \gamma_0}{\sin 2\theta} D_0^{(a)} \exp \left[-\frac{\mu d}{4} \left(\frac{1}{\gamma_h} - \frac{1}{\gamma_0} \right) \right] \\ \times \frac{2 \sin [\sqrt{(2\pi X)^2 + B^2}]}{\sqrt{(2\pi X)^2 + B^2}}$$

Avec

$$2\pi X = 2\pi \Delta T - \frac{i\mu(\gamma_h - \gamma_0)}{2 \sin 2\theta}$$

On peut calculer $\sqrt{(2\pi X)^2 + B^2}$ qui est complexe, en fonction de η . Et, en négligeant les termes du second ordre en χ_{i0} on trouve:

$$\sqrt{(2\pi X)^2 + B^2} = \frac{2\pi\gamma_0\gamma_h}{\sin 2\theta} \sigma \text{ avec } \sigma = \sigma_r + i\sigma_i \\ \sigma_r = \frac{1}{t} \sqrt{1 + \eta^2}, \quad \sigma_i = \frac{k|\chi_{0i}|}{\sqrt{1 + \eta^2}} \\ \times \left[\frac{1}{k\tau|\chi_{0i}|} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\gamma_0} - \frac{1}{\gamma_h} \right) \eta \right]$$

A l'aide de ces expressions, on retrouve l'intensité réfléchie dans le cas de l'onde plane donnée par von Laue (1960). Nous avons fait le calcul pour l'intensité réfractée et avons montré que le résultat était aussi identique à celui fait par le calcul classique.

4. Application de cette théorie à l'étude des défauts plans

(i) Introduction

Nous nous limiterons à l'étude des défauts plans séparant deux régions de cristal parfait. De plus, dans cet article, nous n'étudierons que le cas où le vecteur de diffraction \mathbf{h} est le même dans les deux parties du cristal: ce qui se produit par exemple pour une faute d'empilement. Dans un prochain article, nous étudierons le cas où le vecteur de diffraction est différent dans les deux parties du cristal, ce qui entraîne la formation de franges de moiré.

Le premier cristal donne une onde réfractée D_0^I et une onde réfléchie D_h^I (Fig. 5). Ces deux ondes sont incidentes sur le second cristal. Chacune, à son tour, engendre deux ondes: $D_0^{II}(O^I)$, $D_h^{II}(O^I)$ pour l'onde D_0^I et $D_0^{II}(h^I)$, $D_h^{II}(h^I)$ pour l'onde D_h^I .

A la sortie du second cristal, nous avons donc quatre ondes, deux dans la direction réfléchie $D_h^{II}(O^I)$, $D_0^{II}(h^I)$ et deux dans la direction incidente $D_0^{II}(O^I)$, $D_h^{II}(h^I)$. Les ondes $D_h^{II}(O^I)$ et $D_0^{II}(h^I)$ interfèrent, donnant lieu à des franges que nous observons dans la direction réfléchie (franges de moiré ou franges de faute d'empilement).

(ii) Forme générale de la pseudo-amplitude à la sortie du second cristal dans la direction réfléchie

Prenons successivement comme onde incidente sur le second cristal les ondes dont les pseudo-amplitudes sont D_0^I et D_h^I . Leurs vecteurs d'onde sont \mathbf{K}_0^I et \mathbf{K}_h^I tels que $\mathbf{K}_h^I = \mathbf{K}_0^I + \mathbf{h}^I$. Puisque nous n'étudions que le cas d'une faute d'empilement, c'est-à-dire le cas où les deux cristaux ne sont pas désorientés l'un par rapport à l'autre, l'espace réciproque est identique pour ces deux cristaux. Il en est de même pour leurs surfaces de dispersion. Comme nous l'avons vu précédemment, les vecteurs d'onde sont choisis arbitrairement et, dans le second cristal, nous les prendrons identiques à \mathbf{K}_0^I et \mathbf{K}_h^I . Tout l'intérêt de la théorie de Takagi est d'utiliser des vecteurs d'onde fixes et d'introduire dans le terme que nous avons appelé pseudo-amplitude la partie variable du terme de phase.

La pseudo-amplitude réfléchie sera donc:

$$D_h = D_h^{II}(O^I) + D_0^{II}(h^I) \quad (4-1)$$

Si l'onde incidente est sphérique, $D_h^I(x^I)$ et $D_0^I(x^I)$ sont données par les formules (2-14) et (2-15) où on remplace x^0 par x^I et χ_h par χ_h^I . D'autre part, d'après (2-5) et (2-7), on écrit $D_h^{II}(O^I)$ et $D_0^{II}(h^I)$ sous la forme:

$$D_h^{II}(O^I) = -\frac{i\pi k C \chi_h^I \gamma_0}{\sin 2\theta} \int_{A_2 B_2} D_0^I(x^I) \\ \times J_0(B' \sqrt{I^{II2} - X^{II2}}) dX^{II}$$

$$D_0^{II}(h^I) = D_h^I(x^I = X + I^{II}) - \frac{B'}{2} \int_{A_2 B_2} D_h^I(x^I) \\ \times \sqrt{\frac{I^{II} + x^{II}}{I^{II} - x^{II}}} J_1(B' \sqrt{I^{II2} - x^{II2}}) dx^{II}$$

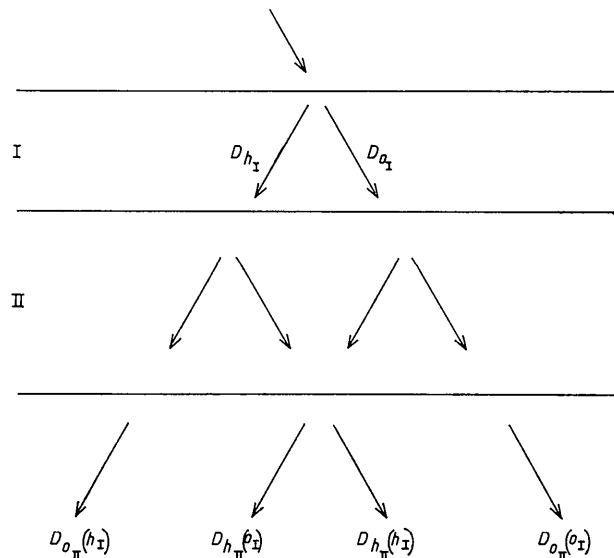


Fig. 5. Défaut plan parallèle aux faces du cristal.

(voir la signification des lettres à la légende de la Fig. 6) avec

$$B' = \frac{2\pi k |C| \sqrt{\chi_h^{II} \chi_h^{II}} \sqrt{\gamma_0 \gamma_h}}{\sin 2\theta}$$

On montre que pour une faute d'empilement $\chi_h^{II} = \chi_h^I \exp(i\delta)$ avec $\delta = 2\pi \mathbf{h} \cdot \mathbf{u}$, \mathbf{u} étant le vecteur faute. Ceci entraîne: $B' = B$ et, finalement $D_h^{II}(O^I)$ et $D_0^{II}(h^I)$ s'écrivent sous la forme de produits de composition:

$$D_h^{II}(O^I) = D_0^I(X) * \mathcal{D}_h^{II}(X) \exp(i\delta)$$

$$D_0^{II}(h^I) = D_h^I(X) * \mathcal{D}_0^{II}(-X)$$

en posant:

$$D_0^I(X) = \begin{cases} 0 & \text{si } |X| > l^I \\ D_0^I(X) & \text{si } |X| \leq l^I \end{cases}$$

$$D_h^I(X) = \begin{cases} 0 & \text{si } |X| > l^I \\ D_h^I(X) & \text{si } |X| \leq l^I. \end{cases}$$

\mathcal{D}_h^{II} et \mathcal{D}_0^{II} ont la signification donnée au paragraphe 2(ii) (d).

Il vient donc:

$$D_h(X) = \mathcal{D}_0^{II}(-X) * D_h^I(X) + D_0^I(X) * \mathcal{D}_h^{II}(X) \exp(i\delta). \quad (4-2)$$

Pour une onde plane incidente, l'expression de l'onde diffractée est:

$$D_h^I(\eta) = D_0^{IIp}(-\eta) D_h^{Ip}(\eta) + D_0^{Ip}(\eta) D_h^{IIp}(\eta) \exp(i\delta). \quad (4-3)$$

Comme pour un cristal sans faute, on passe de l'expression de l'amplitude diffractée pour une onde incidente plane à celle pour une onde incidente sphérique par une *transformation de Fourier*. Il nous suffira par

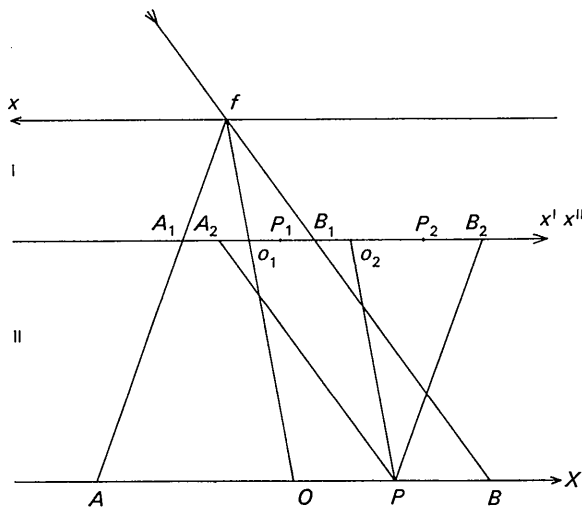


Fig. 6. Etude en un point P de la face de sortie. $l^I = O_1A_1 = O_1B_1$; $l^{II} = O_2B_2$; $l = l^I + l^{II} = OA = OB$; $\bar{O}_1P_1 = x^I$; $\bar{O}_2P_2 = x^{II}$; $\bar{OP} = x$.

suite de faire un calcul analogue à celui fait par Gevers, van Landuyt & Amelinckx (1965, 1966) dans le cas de la microscopie électronique et de prendre la transformée de Fourier du résultat.

On trouve par exemple, à l'aide de (2-11) et (2-12):

$$\mathcal{F} D_h(X) = D_h^I(\eta) = 2D \left\{ \left[\cos l^{II}u + i \frac{B\eta}{u} \sin l^{II}u \right] \times \frac{\sin l^Iu}{u} + \frac{\sin l^{II}u}{u} \left[\cos l^Iu - i \frac{B\eta}{u} \times \sin l^Iu \right] \exp(i\delta) \right\} \quad (4-4)$$

avec

$$u = B\sqrt{1 + \eta^2}$$

et

$$D = - \frac{iC\chi_h}{4 \sin 2\theta} \sqrt{\frac{k}{r_0}} \exp(-i\pi/4) D_0^{(a)}$$

Si $\delta = 2k\pi$, on obtient:

$$\mathcal{F} D_h(X) = 2D \frac{\sin(l^I + l^{II})u}{u}$$

d'où on tire: $D_h(X) = DJ_0(B\sqrt{l^2 - X^2})$ où $l = l^I + l^{II}$ et

l'on vérifie que l'on obtient bien l'intensité diffractée par un cristal parfait [voir (2-14)] ayant comme épaisseur la somme des épaisseurs des deux cristaux séparés par la faute.

Dans le cas général ($\delta \neq 2k\pi$), l'expression (4-4) peut s'écrire sous la forme:

$$\mathcal{F} D_h(X) = 2D \exp(i\delta/2) \left\{ \cos \frac{\delta}{2} \frac{\sin lu}{u} - i \sin \frac{\delta}{2} \times \frac{\sin(l^I - l^{II})u}{u} + \frac{B\eta}{u^2} \sin \frac{\delta}{2} \times \left[\cos(l^I - l^{II})u - \cos lu \right] \right\}. \quad (4-5)$$

(iii) *Comparaison entre la méthode de Takagi et la méthode du développement en ondes planes de Kato*

Le traitement de Kato (1961) consiste à écrire l'amplitude de l'onde sphérique sous forme d'une intégrale de Fourier et à interpréter celle-ci comme une somme d'ondes planes:

$$D_h(X) = \frac{i}{4\pi} \iint_{-\infty}^{+\infty} \frac{D_h^I \exp(-2\pi i \mathbf{K} \cdot \mathbf{r})}{K_z} dK_x dK_y$$

Ceci conduit à remplacer D_h^I par une expression identique à (4-5) (Authier, 1968). Les deux méthodes conduisent bien au même résultat.

L'intensité $I = |D_h(X)|^2$ est obtenue en intégrant (4-5) par la méthode de la phase stationnaire. Rappelons qu'elle peut être mise sous la forme d'une somme de trois termes I_1, I_2, I_3 qui, dans le cas sans absorption,

sont égaux à :

$$I_1 = \frac{2D^2A}{\pi^2 d} \frac{1 - (1 - Y^2) \sin^2(\delta/2)}{(1 - Y^2)^{1/2}} \cos^2 \left(\varphi - \frac{\pi}{4} \right)$$

$$I_2 = \frac{2D^2A}{\pi^2 |d^I - d^{II}|} \frac{(1 - Z)^2 \sin^2(\delta/2)}{(1 - Z^2)^{1/2}} \cos^2 \left(|\psi| - \frac{\pi}{4} \right)$$

$$= \frac{\pm 2D^2A}{\pi^2 \sqrt{|d^I - d^{II}|}} \frac{2(1 - Z)Y \sin^2(\delta/2)}{(1 - Y^2)^{1/4} (1 - Z^2)^{1/4}}$$

$$\times \left[\cos \left(\varphi - \frac{\pi}{4} \right) \cos \left(|\psi| - \frac{\pi}{4} \right) \right]$$

avec

$$Y = \frac{X}{l^I + l^{II}}, \quad Z = \frac{X}{l^{II} - l^I}$$

$$\varphi = \frac{\pi d}{A} \sqrt{1 - Y^2}; \quad \psi = \frac{\pi(d^I - d^{II})}{A} \sqrt{1 - Z^2}.$$

d^I et d^{II} sont les distances du plan de faute aux faces d'entrée et de sortie. Le signe supérieur correspond à $d^I < d^{II}$, le signe inférieur à $d^{II} < d^I$.

Intensité intégrée

Il est possible d'évaluer l'intensité intégrée lorsque la faute d'empilement est très proche de la face d'entrée ou de sortie. Il suffit de faire un développement limité au premier ordre en fonction de l'épaisseur de l'un des deux cristaux. On intègre ensuite directement sans passer par la méthode de la phase stationnaire. Le résultat, calculé pour un cristal non absorbant, est indépendant de la face près de laquelle est la faute :

$$\int_{-l}^{+l} |D_n(X)|^2 dX = |D_0^{(\omega)}|^2 \frac{k}{r_0} \frac{C^2 \chi_h^2}{16 \sin^2 2\theta} \frac{1}{B}$$

$$\times \left\{ \int_0^{2\pi d/A} J_0(q) dq + 4Bl^j \sin^2 \frac{\delta}{2} \right.$$

$$\left. \times \left[\int_0^{2\pi d/A} J_1(q) dq - 1 \right] \right\} \cdot j = I, II.$$

Ceci montre que les deux franges extrêmes de l'image sur une topographie par translation d'une faute d'empilement dans un cristal peu ou pas absorbant auront le même contraste. Celui-ci ne dépend pas du signe de la faute d'empilement mais simplement du rapport $2\pi d/A$.

(iv) Étude du cas où le cristal est absorbant

Le calcul est identique à celui fait précédemment. Nous partons de l'expression de la pseudo-amplitude dans le cas d'une onde incidente plane. Puis nous en prenons la transformée de Fourier dont nous obtenons une expression approchée par la méthode de la phase stationnaire. Le résultat est le même que celui donné par Authier (1968).

5. Conclusion

Les méthodes des équations généralisées de Takagi ou du développement en ondes planes de Kato conduisent essentiellement au même résultat, mais par des voies différentes. Les expressions des amplitudes de l'onde diffractée par un cristal pour des ondes incidentes plane ou sphérique se déduisent l'une de l'autre par une transformation de Fourier; l'une exprime les variations de l'amplitude en fonction de l'écart à l'incidence de Bragg de l'onde incidente, l'autre la distribution d'amplitude sur la face de sortie.

Les deux méthodes peuvent s'appliquer au cas d'un cristal contenant des défauts plans. Celle de Kato permet de donner une interprétation physique du résultat: I_1 correspond à des interférences entre ondes dont le point caractéristique n'a pas changé de branche sur la surface de dispersion, I_2 à des interférences entre ondes dont le point caractéristique a changé de branche, I_3 à des interférences entre des ondes de ces deux types. Il est ainsi très commode d'interpréter la distribution d'intensité diffractée par un cristal contenant une lamelle hors réflexion (par exemple séparé en deux parties par un trait de scie; Authier, Milne & Sauvage, 1968).

En revanche, la méthode des équations généralisées est plus souple, elle permet plus facilement le calcul des franges de moiré (article suivant) et se prête très bien au formalisme matriciel. Nous avons l'intention de l'appliquer au calcul du contraste dû à une succession de fautes d'empilement.

L'un de nous (A. Authier) tient à remercier le professeur S. Takagi pour les nombreuses discussions qu'il a eues avec lui, et en particulier de lui avoir indiqué, dès 1961, la solution générale du système (2-4).

Références

- AUTHIER, A. (1961). *Bull. Soc. franc. Minér. Cryst.* **84**, 51.
 AUTHIER, A. & SAUVAGE, M. (1966). *J. Physique*, **27**, C 3.
 AUTHIER, A. (1968). *Phys. Stat. Sol.* **27**, N° 1, 77.
 AUTHIER, A., MILNE, A. D. & SAUVAGE, M. (1968). *Phys. Stat. Sol.* **26**, N° 2, 469.
 GEVERS, R., VAN LANDUYT, J. & AMELINCKX, S. (1965). *Phys. Stat. Sol.* **11**, 689.
 GEVERS, R., VAN LANDUYT, J. & AMELINCKX, S. (1966). *Phys. Stat. Sol.* **18**, 325.
 HASHIMOTO, H., HOWIE, A. & WHELAN, M. J. (1960). *Phil. Mag.* **5**, 967.
 HASHIMOTO, H., HOWIE, A. & WHELAN, M. J. (1962). *Proc. Roy. Soc. A* **269**, 80.
 KATO, N. (1961). *Acta Cryst.* **14**, 627.
 KATO, N., USAMI, K. & KATAGAWA, T. (1967). *Advanc. X-ray Analysis*, **10**, 46.
 LAUE, M. VON (1960). *Röntgenstrahlinterferenzen*, 3. Ausgabe. Frankfurt: Akademische Verlagsges.
 SOMMERFELD, A. (1949). *Partial Differential Equations in Physics*, p. 36. New York: Academic Press.
 TAKAGI, S. (1962). *Acta Cryst.* **15**, 1311.
 WHELAN, M. J. & HIRSCH, P. B. (1957a). *Phil. Mag.* **2**, 1121.
 WHELAN, M. J. & HIRSCH, P. B. (1957b). *Phil. Mag.* **2**, 1303.