

to two inverted pyramids then contains the positions of 8 octahedral holes (Fig. 11).

At $T < T_c$ at least part of these holes should be occupied by excess oxygen atoms displaced from the centres of the holes by a vector Δr which lies in the corresponding $\{112\}$ plane. At $T > T_c$ these oxygen atoms should be displaced by small amounts out of these planes creating crystal volumes containing disordered oxygen whose dimensions are roughly given by the pyramid $ABCD$ in Fig. 11. The point D is the position of a uranium ion lying at $d = a_0/\sqrt{3}$ above the plane ABC , i.e. above the (111) plane. The mean distance of these disordered volumes in the [111] direction is given by relation (2).

4.5. Conclusion

Any model for the distribution of oxygen in U_4O_9 of space group $I\bar{4}3d$ should be in agreement with the three conditions (1) to (3), the directions and magnitudes of the oxygen displacements as deduced by Willis (1964) and the complete reciprocal lattice as given in Table 2.

These conditions might finally lead to an approach to the correct model of the structure from the point of view of lattice geometry. But it is not yet known if these conditions are sufficient to find this model without ambiguity.

References

- AMELINCKX, S. (1964). *Direct Observation of Dislocations*. New York, London: Academic Press.
- ANDRESEN, A. F. (1959). Enlarged symposium on reactor materials, Stockholm.
- ARONSON, S. & BELLE, J. (1958). *J. Chem. Phys.* **29**, 151.
- BELBEOCH, B., BOIVINEAU, J. C. & PERIO, P. (1967). *J. Phys. Chem. Solids*, **28**, 1267.
- BELBEOCH, B., LAREDO, E. & PERIO, P. (1964). *J. Nucl. Mat.* **13**, 100.
- BELBEOCH, B., PIEKARSKI, C. & PERIO, P. (1961). *Acta Cryst.* **14**, 837.
- DEBETS, P. C. (1966). *Acta Cryst.* **21**, 589.
- FERGUSON, I. F. & STREET, R. S. (1963). *Atomic Energy Research Establishment*, M 1192.
- GOTOO, K., NOMURA, S. & NAITO, K. (1965). *J. Phys. Chem. Solids*, **26**, 1679.
- GRØNVOLD, F. (1955). *J. Inorg. Nucl. Chem.* **1**, 357.
- GUINIER, A. (1964). *Théorie et Technique de la Radiocristallographie*. Paris.
- HIRSCH, P., HOWIE, A., NICHOLSON, R. B., PASHLEY, D. W. & WHELAN, M. J. (1965). *Electron Microscopy of Thin Crystals*. Equation (8-23), p. 202. London: Butterworths.
- KINGERY, W. D. (1965). CEA - S 5.
- LEASK, M. J. M., ROBERTS, L. E. J., WALTER, A. J. & WOLF, W. P. (1963). *J. Chem. Soc.* p. 4788.
- LOOPSTRA, B. O. (1963). RCN-INT-63-036.
- MARKIN, T. L. & BONES, R. J. (1962). Atomic Energy Research Establishment, R 4042.
- MARKIN, T. L. & ROBERTS, L. E. J. (1962). *Thermodynamics of nuclear materials*, p. 693. Vienna: IAEA.
- NAITO, K., ISHII, T., HAMAGUCHI, Y. & OSHIMA, K. (1967). *Solid State Com.* **5**, 349.
- NASU, S. (1966). *Jap. J. Appl. Phys.* **5**, 1001.
- STEEB, S. (1961). *J. Nucl. Mat.* **3**, 235.
- STEEB, S. & MITSCH, P. (1965). *J. Nucl. Mat.* **15**, 81.
- WELLS, A. F. (1962). *Structural Inorganic Chemistry*, p. 406. Oxford Univ. Press.
- WILLIS, B. T. M. (1963). *Nature, Lond.* **197**, 755.
- WILLIS, B. T. M. (1964). *J. physique* **25**, 431.
- WILLIS, B. T. M. (1965). Personal communication to KINGERY, W. D. (1965).

Acta Cryst. (1968). **A24**, 666

Création de Nouveaux Champs d'Ondes Dus à la Présence d'un Objet Diffractant à l'Intérieur d'un Cristal Parfait. I. Cas d'une Fente

PAR F. BALIBAR

Laboratoire de Minéralogie-Cristallographie, Sorbonne, Paris 5^e, France

(Reçu le 20 mars 1968)

Green's functions are used to calculate the amplitude distribution on the exit surface of a perfect crystal in which a wave field, travelling according to the dynamical theory (Laue case), is diffracted by a slit lying inside the crystal. It is shown that this diffraction process induces interbranch scattering and that two wave fields are excited, belonging to both branches of the surface of dispersion. The fine structure of both beams is found to be identical with that obtained by Takagi's theory when the slit lies on the entrance surface of the crystal.

Introduction

La méthode des topographies aux rayons X par transmission permet d'obtenir des images de dislocations

dans des cristaux presque parfaits. L'étude du contraste de ces images a fait l'objet de plusieurs travaux et il est maintenant possible de donner une interprétation des différentes parties qui constituent ces images.

(Authier, 1967; Balibar & Authier, 1967; Taupin, 1967.) En particulier, on explique l'existence de l'image dynamique et surtout des images que nous avons convenu d'appeler intermédiaires, en disant qu'un champ d'ondes entrant dans la zone fortement perturbée entourant la dislocation, se décompose en ses deux composantes le long des directions incidente et réfléchie, de la même façon qu'à la surface de séparation entre le cristal et le vide. En rentrant dans une zone de 'bon cristal', ces ondes excitent de nouveaux champs d'ondes dont les points caractéristiques se trouvent sur les deux branches de la surface de dispersion. Ces nouveaux champs d'ondes se propagent dans de nouvelles directions, donnant ainsi naissance aux images intermédiaires. De ce fait, une certaine portion de l'énergie qui se propageait le long de la direction correspondant au champ d'ondes initial est déviée hors de cette direction, ce qui contribue à la formation de l'image dynamique, qui apparaît ainsi comme 'l'ombre portée' de la dislocation.

Cette explication est insuffisante car, au cours du raisonnement précédent, on est obligé de supposer que tout se passe comme s'il existait entre les régions de 'bon cristal' et les régions de 'mauvais cristal', une frontière nette que l'on pourrait matérialiser par une mince couche de vide entourant la zone perturbée; c'est à la traversée de cette région que les composantes du champ d'ondes initial reprendraient leur individualité. Le raisonnement précédent ne permet donc pas de se faire une idée du mécanisme physique de la création des nouveaux champs d'ondes.

Or, nous avons, par ailleurs (Balibar & Authier, 1967) calculé, la répartition d'intensité sur la face de sortie d'un cristal contenant une seule dislocation, en tenant compte dans la théorie de Takagi (1962) des déformations élastiques entourant le coeur de la dislocation et sans faire aucune autre hypothèse sur la zone perturbée et ses frontières. Nous avons montré que cette répartition est analogue à celle obtenue expérimentalement sur une topographie en pose fixe. Des calculs semblables ont été effectués par Taupin (1967) dans le cadre de sa propre théorie (Taupin, 1964). Ceci prouve que la théorie de Takagi, ou celle de Taupin, *purement électromagnétiques*, puisqu'elles reposent entièrement sur les équations de Maxwell, tiennent compte implicitement de la création des nouveaux champs d'ondes au cours de la traversée de régions fortement perturbées. Il doit donc être possible d'expliquer ce phénomène de récréation des champs d'ondes dans le cadre de la théorie générale des ondes électromagnétiques.

L'objet de cet article est de montrer que ce phénomène peut être expliqué de façon tout à fait générale par la *théorie de la diffraction*. Par diffraction, nous entendons ici non pas la diffraction des rayons X par les atomes du cristal, mais l'effet des modifications subies par une onde électromagnétique rencontrant un obstacle de dimensions grandes vis à vis de la longueur d'onde, mais faibles vis à vis des distances d'observation; une dislocation, par exemple, constitue un ob-

stacle à la propagation des rayons X; les dimensions de la zone perturbée efficace sont de l'ordre de quelques microns; la longueur d'onde est de l'ordre de l'Ångström et la distance qui sépare la dislocation de la face de sortie est en général de l'ordre de 100 microns.

Plus précisément, nous nous proposons de montrer qu'un objet diffractant situé à l'intérieur d'un cristal, parfait par ailleurs, a pour effet de démultiplier un champ d'ondes se propageant dans le cristal en deux champs d'ondes dont les points caractéristiques se trouvent chacun sur une branche différente de la surface de dispersion.

1. Position du problème

Bien qu'un champ électromagnétique doive être défini par les deux vecteurs champ électrique et induction magnétique, nous supposons que nous pouvons le représenter par une fonction scalaire unique ψ pour une direction de polarisation donnée (la théorie classique de la diffraction repose sur une hypothèse semblable). En effet, dans le cas dit à deux faisceaux (cas où seulement deux noeuds O et H du réseau réciproque se trouvent au voisinage de la sphère d'Ewald), nous savons (Authier, 1961) que le champ électromagnétique peut être représenté par un champ d'ondes ψ (scalaire) composé de deux ondes ψ_o et ψ_h , de vecteurs d'onde

$\vec{K}_o = \vec{OP}$ et $\vec{K}_h = \vec{HP}$, P étant le point caractéristique de ψ sur la surface de dispersion

$$\psi = \psi_o + \psi_h \exp(-2\pi i \vec{h} \cdot \vec{r}) \quad (\vec{h} = \vec{OH}).$$

Nous savons en outre que l'équation de propagation du problème

$$\Delta \mathbf{D} + \text{rot rot } \chi \mathbf{D} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2}$$

[\mathbf{D} induction magnétique, χ susceptibilité électrique $\chi = \sum_h \chi_h \exp(-2\pi i \vec{h} \cdot \vec{r})$] se réduit alors à l'équation:

$$\Delta \psi(\mathbf{r}) + k^2(1 + \chi)\psi(\mathbf{r}) = 0$$

où k est le vecteur d'onde dans le vide. C'est une équation du type 'équation de Helmholtz', dans laquelle le coefficient de ψ est fonction de \mathbf{r} .

Cette équation ne suffit pas à déterminer complètement ψ . Il faut en outre connaître les conditions aux limites imposées par les données physiques du problème. Dans l'étude qui nous intéresse, ces conditions aux limites sont imposées par le fait que ψ doit prendre certaines valeurs (que nous précisons ultérieurement) au niveau de l'objet diffractant.

Le problème ainsi posé est un problème classique de théorie du potentiel, à savoir: trouver une fonction solution d'une équation différentielle donnée et vérifiant certaines conditions aux limites. Ce problème peut être résolu par la *méthode des fonctions de Green*.

2. Méthode des fonctions de Green

Rappel général

D'après la théorie des fonctions de Green (Morse & Feshbach, 1963), la valeur $\psi(\mathbf{r})$ que prend la fonction ψ cherchée, au point \mathbf{r} , peut être calculée à l'aide d'une intégrale faisant intervenir les conditions aux limites et une fonction auxiliaire G , appelée fonction de Green du problème. Cette fonction est déterminée de la façon suivante.

(i) Elle est solution de l'équation inhomogène de Helmholtz

$$\Delta G(\mathbf{r}) + k^2 G(\mathbf{r}) = -4\pi\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \quad (\delta \text{ fonction de Dirac}).$$

Autrement dit $G(\mathbf{r})$ représente le champ créé au point \mathbf{r} par une source unité placée en \mathbf{r}_0 ; pour cette raison on la note $G(\mathbf{r}/\mathbf{r}_0)$.

(ii) On finit de la déterminer d'après le type de conditions aux limites qui sont imposées à la fonction ψ cherchée.

(a) Si on impose à ψ de prendre certaines valeurs $\psi_0(\mathbf{r}_0^S)$ non nulles sur une surface donnée S_0 (conditions de Dirichlet), on choisit G de façon que $G(\mathbf{r}/\mathbf{r}_0)$ prenne sur S_0 des valeurs non nulles $G(\mathbf{r}/\mathbf{r}_0^S)$. On montre alors, à l'aide du théorème de Green, que ψ prend en \mathbf{r} la valeur

$$\psi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \iint_{S_0} \psi_0(\mathbf{r}_0^S) [\mathbf{grad} G(\mathbf{r}/\mathbf{r}_0^S)] \cdot d\mathbf{A}_0, \quad (1)$$

où $d\mathbf{A}_0$ est le vecteur unitaire porté par la normale à S_0 au point \mathbf{r}_0^S orientée vers l'extérieur de S_0 (si S_0 n'est pas fermée, on peut toujours la fermer à l'infini).

(b) Si on impose à ψ d'être telle que son gradient prenne certaines valeurs sur S_0 : $\mathbf{grad} \psi = \mathbf{N}_0(\mathbf{r}_0^S)$ (conditions de Neuman), on choisit G de façon que $\mathbf{grad} G(\mathbf{r}/\mathbf{r}_0^S) = 0$. On montre alors, de la même façon, que ψ prend en \mathbf{r} la valeur:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \iint_{S_0} G(\mathbf{r}/\mathbf{r}_0^S) \mathbf{N}_0(\mathbf{r}_0^S) \cdot d\mathbf{A}_0. \quad (2)$$

G est donc déterminée:

par l'équation différentielle que doit vérifier ψ ,

par les conditions aux limites imposées à ψ .

C'est une fonction spécifique du problème posé, mais il est évident que la fonction G intervenant dans (1) et celle intervenant dans (2) ne sont pas identiques. Elles peuvent néanmoins l'une ou l'autre servir à résoudre le problème posé.

Détermination de la fonction de Green du problème de la diffraction des rayons X par un objet diffractant, à l'intérieur du cristal

(a) $G(\mathbf{r}/\mathbf{r}_0^S)$ doit représenter le champ créé au point d'observation $P(\mathbf{r})$ par une source unité ponctuelle placée en $Q(\mathbf{r}_0^S)$ (Fig. 2). Comme $G(\mathbf{r}/\mathbf{r}_0^S) = G(\mathbf{r}_0^S/\mathbf{r})$,*

* Cette relation traduit le principe du retour inverse de la lumière ou plus précisément, le principe de réciprocité (cf. Kato, 1968).

G est aussi le champ créé en Q (donc sur la surface de l'objet diffractant) par une source ponctuelle placée en P (donc sur la face de sortie du cristal). Kato (1961) a calculé le champ produit en un point intérieur au cristal par une source ponctuelle située dans le vide et émettant une onde sphérique. En plaçant cette source à la surface de séparation du vide et du cristal, nous obtiendrons la fonction cherchée. Kato (1961) a montré qu'en un point Q situé à une grande distance de la source P d'ondes sphériques, l'amplitude complexe était la somme des amplitudes complexes de quatre ondes, que nous noterons $\varphi_{o1}, \varphi_{o2}, \varphi_{h1}, \varphi_{h2}$. Ces quatre ondes se propagent le long de la même direction

$\overrightarrow{PQ}(\mathbf{r}_0^S - \mathbf{r})$; leurs points caractéristiques sur la surface de dispersion sont les extrémités d'un même diamètre; les ondes φ_{h1} et φ_{h2} forment champ d'ondes avec les ondes φ_{o1} et φ_{o2} respectivement. Les amplitudes et les phases de ces quatre ondes ont été calculées par Kato.

(b) G dépend en outre des conditions imposées à ψ sur l'objet diffractant.

Nous introduirons ici deux hypothèses simplificatrices permettant de déterminer G plus facilement.

Nous supposons d'abord que l'objet diffractant est un écran plan S_0 , opaque aux rayons X, percé d'une fente. Cette hypothèse ne restreint pas la généralité de notre calcul, puisque nous nous proposons d'étudier l'effet de la diffraction sur un champ d'ondes et non une situation physique particulière.

De plus, comme en théorie classique de la diffraction [théorie de Kirchhoff (Stratton, 1941)], nous supposons que les conditions imposées à $\psi(\mathbf{r}_0^S)$ sont les suivantes:

$\psi(\mathbf{r}_0^S) = 0$ et $\partial\psi/\partial n(\mathbf{r}_0^S) = 0$ sur les parties opaques de l'écran ($\partial\psi/\partial n$ est le gradient de ψ normalement à S_0).

Sur la fente, le champ est identique à celui du champ d'ondes incident ψ^i non perturbé:

$$\psi(\mathbf{r}_0^S) = \psi^i(\mathbf{r}_0^S) \quad \text{et} \quad \frac{\partial\psi}{\partial n}(\mathbf{r}_0^S) = \frac{\partial\psi^i}{\partial n}(\mathbf{r}_0^S).$$

Cette deuxième hypothèse est analytiquement absurde car si ψ et $\partial\psi/\partial n$ sont nuls sur une partie de S_0 ils le sont obligatoirement en tout point de l'espace enfermé par S_0 . En dépit de cette objection, la théorie de Kirchhoff conduit à des solutions satisfaisantes dans le domaine de l'optique; nous conserverons donc cette hypothèse.

Grâce à cette hypothèse, (1) et (2) deviennent:

$$\psi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \iint_{S_0} \psi^i(\mathbf{r}_0^S) \frac{\partial G}{\partial n}(\mathbf{r}/\mathbf{r}_0^S) dA_0 \quad dA_0 = |d\mathbf{A}_0| \quad (3)$$

si G est choisi de façon que $G(\mathbf{r}/\mathbf{r}_0^S) = 0$ sur S_0 et

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \iint_{S_0} \frac{\partial\psi^i}{\partial n}(\mathbf{r}_0^S) G(\mathbf{r}/\mathbf{r}_0^S) dA_0 \quad (4)$$

si G est choisi de façon que $\frac{\partial G}{\partial n}(\mathbf{r}/\mathbf{r}_0^S) = 0$ sur S_0 .

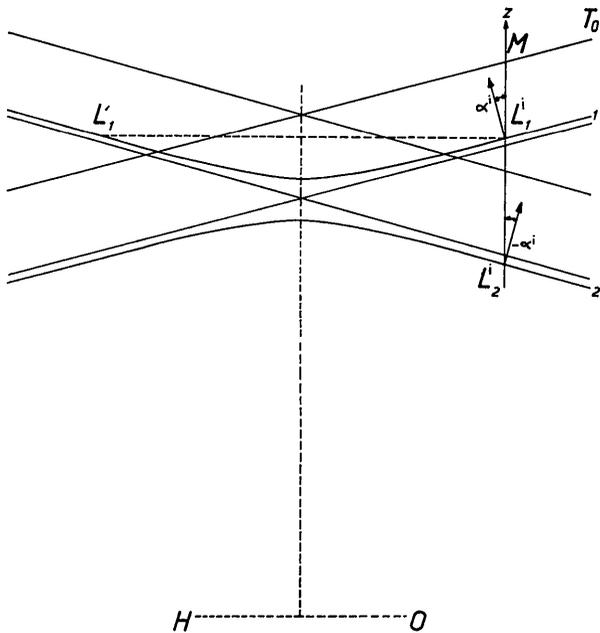


Fig. 1. L_1^i et L_2^i sont les points caractéristiques des deux champs d'ondes tombant sur la fente diffractante et excités par la même onde plane dans le vide, de point caractéristique M .

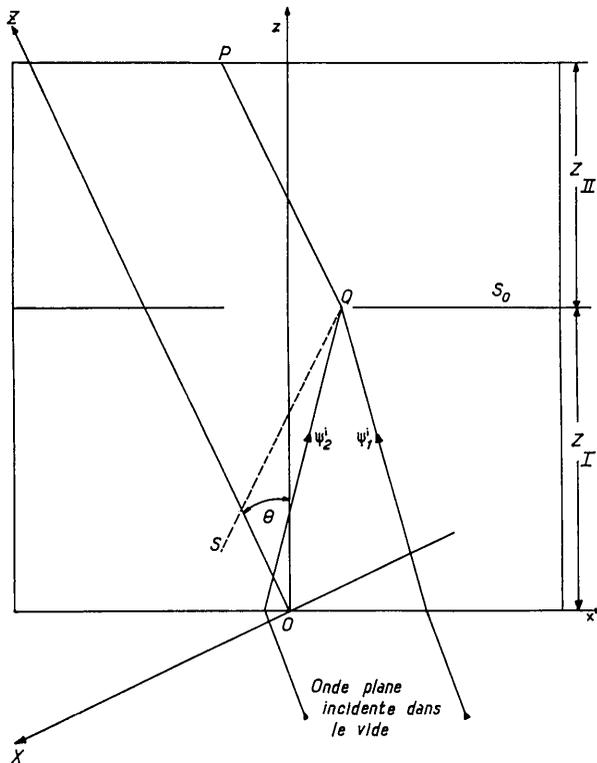


Fig. 2. P est repéré soit par $\vec{r} = \vec{OP}$, soit par ses coordonnées (x, z) dans le système (Oxz) , soit par ses coordonnées (X_p, Z_p) dans le système (OXZ) . Q est repéré soit par $\vec{r}_Q = t_0^S = \vec{OQ}$, soit par ses coordonnées (x_Q, z_Q) dans le système (Oxz) , soit par ses coordonnées (X_Q, Z_Q) dans le système (OXZ) .

La première hypothèse simplificatrice va nous permettre de déterminer aisément G , à l'aide de la *méthode des images*. D'après cette méthode classique (Morse & Feshbach, 1953), G est la somme ou la différence des ondes envoyées par P et par un point S symétrique de P par rapport au plan de l'écran S_0 (S est l'«image» de P dans S_0). Au point $Q(\vec{r}_0^S)$ situé sur S_0 , ces deux ondes ont même valeur et leurs gradients normalement à S_0 sont de signes opposés. Si donc nous voulons avoir $G(\vec{r}/\vec{r}_0^S) = 0$ sur S_0 , nous prendrons leur différence; si au contraire nous voulons avoir $\partial G/\partial n(\vec{r}/\vec{r}_0^S) = 0$ sur S_0 , nous prendrons leur somme.

Parcequ'il est plus facile de calculer $\partial \psi^i/\partial n(\vec{r}_0^S)$ que $\partial G/\partial n(\vec{r}/\vec{r}_0^S)$ nous choisissons de prendre comme représentation intégrale de $\psi(\vec{r})$ la formule (4). $G(\vec{r}/\vec{r}_0^S)$ sera alors la fonction:

$$G(\vec{r}/\vec{r}_0^S) = 2[\varphi_{o1}(\vec{r}/\vec{r}_0^S) + \varphi_{o2}(\vec{r}/\vec{r}_0^S)] + 2[\varphi_{h1}(\vec{r}/\vec{r}_0^S) + \varphi_{h2}(\vec{r}/\vec{r}_0^S)] \exp(-2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{r})$$

que nous noterons:

$$G(\vec{r}/\vec{r}_0^S) = (G_{o1} + G_{o2}) + (G_{h1} + G_{h2}) \exp(-2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{r}).$$

3. Calcul de l'amplitude en un point de la face de sortie du cristal

Nous étudierons le cas où la source de rayons X émet des ondes planes. Soit donc une onde plane tombant sur le cristal et M le point caractéristique de cette onde sur la droite T_0 de l'espace réciproque (Fig. 1). En pénétrant dans le cristal, cette onde donne naissance à deux champs d'ondes ψ_1^i et ψ_2^i (Authier, 1961; Laue, 1960) dont les points caractéristiques L_1^i et L_2^i se trouvent à l'intersection de la normale Mz à la face d'entrée et des branches 1 et 2 de la surface de dispersion, et dont les trajets dans le cristal sont symétriques par rapport à Oz .* Ces deux champs d'ondes sont diffractés par la fente S_0 placée dans un plan parallèle aux faces d'entrée et de sortie du cristal, à la profondeur z_I de la face d'entrée et à la distance z_{II} de la face de sortie (Fig. 2). Nous cherchons à déterminer la vibration $\psi(\vec{r})$ arrivant au point P (de coordonnées $x, z = z_I + z_{II}$) sur la face de sortie.

Chacun des champs d'ondes ψ_1^i et ψ_2^i étant la somme de deux termes $\psi_j^i = \psi_{o1}^i + \psi_{h1}^i \exp(-2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{r})$, $\psi(\vec{r})$ sera la somme de $2 \times 2 \times 4$ soit 16 termes. Si maintenant nous nous intéressons uniquement aux ondes recueillies dans le faisceau réfléchi à la sortie du cristal (car le faisceau transmis est rarement étudié; il serait d'ailleurs aisé de faire un calcul analogue pour le faisceau transmis), ces 16 termes se réduisent à 8:

$$\psi_h(x, z) = \frac{1}{4\pi} \iint_{S_0} \frac{\partial \psi_{o1}^i}{\partial n}(\vec{r}_0^S) G_{h1}(\vec{r}/\vec{r}_0^S) dA_0 + \frac{1}{4\pi} \iint_{S_0} \frac{\partial \psi_{o1}^i}{\partial n}(\vec{r}_0^S) G_{h2}(\vec{r}/\vec{r}_0^S) dA_0$$

* Nous nous limitons à l'étude du cas symétrique.

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{4\pi} \iint_{S_0} \frac{\partial \psi_{o2}^i}{\partial n} (\mathbf{r}_0^S) G_{h1}(\mathbf{r}/\mathbf{r}_0^S) dA_0 \\
& + \frac{1}{4\pi} \iint_{S_0} \frac{\partial \psi_{o2}^i}{\partial n} (\mathbf{r}_0^S) G_{h2}(\mathbf{r}/\mathbf{r}_0^S) dA_0 \\
& + \frac{1}{4\pi} \iint_{S_0} \frac{\partial \psi_{h1}^i}{\partial n} (\mathbf{r}_0^S) G_{o1}(\mathbf{r}/\mathbf{r}_0^S) dA_0 \\
& + \frac{1}{4\pi} \iint_{S_0} \frac{\partial \psi_{h1}^i}{\partial n} (\mathbf{r}_0^S) G_{o2}(\mathbf{r}/\mathbf{r}_0^S) dA_0 \\
& + \frac{1}{4\pi} \iint_{S_0} \frac{\partial \psi_{h2}^i}{\partial n} (\mathbf{r}_0^S) G_{o1}(\mathbf{r}/\mathbf{r}_0^S) dA_0 \\
& + \frac{1}{4\pi} \iint_{S_0} \frac{\partial \psi_{h2}^i}{\partial n} (\mathbf{r}_0^S) G_{o2}(\mathbf{r}/\mathbf{r}_0^S) dA_0.
\end{aligned}$$

Soit en numérotant ces 8 termes de 1 à 8 :

$$\psi_n(x, z) = \sum_{l=1}^{l=8} (l).$$

Expression des termes $\frac{\partial \psi_{kl}^i}{\partial n} (\mathbf{r}_0^S)$ $k=o$ ou h
 $j=1$ ou 2 .

Nous utilisons un double système d'axes de coordonnées de même origine O (Fig. 2) sur la face d'entrée, à l'aplomb du milieu de la fente :

le système $Oxyz$: Oz parallèle aux plans réticulaires, Ox le long de la face d'entrée, dans le plan d'incidence ;

le système $OXYZ$ tel que OZ soit parallèle à la direction de l'onde incidente dans le vide et que Oy coïncide avec l'axe Oy du premier système.

Nous introduisons le paramètre Y^i caractérisant l'écart à l'incidence de Bragg de l'onde plane incidente dans le vide ; si α_j^i est l'angle entre Oz et la normale au point L_j^i de la surface de dispersion, Y^i est défini par (cf. Authier, 1961)

$$Y^i = \frac{\text{tg } \alpha_1^i}{\text{tg } \theta} = - \frac{\text{tg } \alpha_2^i}{\text{tg } \theta} \text{ - nous poserons } \alpha_1^i = \alpha^i.$$

Au point Q de la fente S_0 (de coordonnées x_Q, z_I ou X_Q, Z_Q), l'amplitude des 4 champs d'ondes incidents s'écrit alors :

$$\begin{aligned}
\psi_{oj}^i &= \frac{1}{2}(1 \pm Y^i) \exp [-2\pi i(\mathbf{K}_0^{(a)} \cdot \mathbf{r}_Q + \overline{MP}_j^i z_I)] \\
\psi_{hj}^i &= \pm \frac{1}{2} \sqrt{1 - Y^{i2}} \exp [-2\pi i(\mathbf{K}_0^{(a)} \cdot \mathbf{r}_Q + \overline{MP}_j^i z_I)]
\end{aligned}$$

où: $\mathbf{r}_Q = \overrightarrow{OQ}$,

$\mathbf{K}_0^{(a)}$ est le vecteur d'onde de l'onde incidente plane dans

le vide = \overrightarrow{OM} dans l'espace réciproque,

+ pour $j=1$ et - pour $j=2$.

Soit :

$$\begin{aligned}
\psi_{oi}^i &= \frac{1}{2}(1 + Y^i) \exp \left\{ -2\pi i \left[\frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z_I + K_Z Z_Q \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{1}{2A} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - Y^{i2}}} z_I + \frac{Y^i}{\sqrt{1 - Y^{i2}}} \frac{x_Q}{\text{tg } \theta} \right) \right] \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\psi_{o2}^i &= \frac{1}{2}(1 - Y^i) \exp \left\{ -2\pi i \left[\frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z_I + K_Z Z_Q \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{1}{2A} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - Y^{i2}}} z_I - \frac{Y^i}{\sqrt{1 - Y^{i2}}} \frac{x_Q}{\text{tg } \theta} \right) \right] \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\psi_{h1}^i &= \frac{1}{2} \sqrt{1 - Y^{i2}} \exp \left\{ -2\pi i \left[\frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z_I + K_Z Z_Q \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{1}{2A} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - Y^{i2}}} z_I + \frac{Y^i}{\sqrt{1 - Y^{i2}}} \frac{x_Q}{\text{tg } \theta} \right) \right] \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\psi_{h2}^i &= -\frac{1}{2} \sqrt{1 - Y^{i2}} \exp \left\{ -2\pi i \left[\frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z_I + K_Z Z_Q \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{1}{2A} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - Y^{i2}}} z_I - \frac{Y^i}{\sqrt{1 - Y^{i2}}} \frac{x_Q}{\text{tg } \theta} \right) \right] \right\}
\end{aligned}$$

où :

k est la longueur du vecteur d'onde dans le vide, χ_0 est le premier terme du développement en série de Fourier de χ

$$\chi = \chi_0 + \chi_h \exp(-2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{r}),$$

$$\gamma_0 = \cos \theta,$$

K_Z est la composante le long de OZ de $\mathbf{K}_0^{(a)}$,

$$A = \frac{\gamma_0}{k|c| |\chi_h|} \text{ est la longueur d'onde d'extinction,}$$

$|c|$ est un coefficient qui dépend de la polarisation et vaut 1 ou $\cos 2\theta$.

Comme $\frac{\partial \psi_{kl}^i}{\partial n} (\mathbf{r}_0^S) = \frac{\partial \psi_{kl}^i}{\partial z_I} (\mathbf{r}_Q)$ et compte tenu des relations liant X_Q et Z_Q à x_Q et z_I , nous obtenons

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \psi_{oi}^i}{\partial n} &= \pi i (1 + Y^i) \left[\frac{k\chi_0}{2\gamma_0} + \frac{1}{2A} \frac{1}{\sqrt{1 - Y^{i2}}} + K_Z \gamma_0 \right] \\
& \times \exp \left\{ -2\pi i \left[\frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z_I + K_Z Z_Q + \frac{1}{2A} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - Y^{i2}}} \right. \right. \right. \\
& \left. \left. \left. \times z_I + \frac{Y^i x_Q}{\sqrt{1 - Y^{i2}}} \text{tg } \theta \right) \right] \right\},
\end{aligned}$$

expression dans laquelle nous pouvons négliger $\frac{k\chi_0}{2\gamma_0}$

et $\frac{1}{2A} \frac{1}{\sqrt{1 - Y^{i2}}} = \frac{k|c| |\chi_h|}{2\gamma_0} \frac{1}{\sqrt{1 - Y^{i2}}}$ devant $K_Z \gamma_0$.

En effet, χ_h et χ_0 étant de l'ordre de 10^{-6} , cette approximation est légitime tant que $1 - Y^i$ est supérieur à 10^{-12} , c'est à dire tant qu'on exclut les champs d'ondes se propageant le long des bords immédiats du triangle de Borrmann. Les quatre expressions $\frac{\partial \psi_{kl}^i}{\partial n} (\mathbf{r}_0^S)$ deviennent alors :

$$\frac{\partial \psi_{oi}^i}{\partial n} \simeq 2\pi i (K_Z \gamma_0) \psi_{oi}^i$$

$$\frac{\partial \psi'_{o2}}{\partial n} \simeq 2\pi i (K_Z \gamma_0) \psi'_{o2}$$

$$\frac{\partial \psi'_{h1}}{\partial n} \simeq 2\pi i (K_Z \gamma_0) \psi'_{h1}$$

$$\frac{\partial \psi'_{h2}}{\partial n} \simeq 2\pi i (K_Z \gamma_0) \psi'_{h2}$$

Expression des fonctions $G_{kj}(\mathbf{r}/\mathbf{r}_0^s)$ $k=0$ ou $hij=1$ ou 2

Elles sont données par les équations (37a), (37b), (38a), (38b), de Kato (1961). Dans notre système de coordonnées, nous obtenons:

$$G_{o1} = -iA \frac{1}{\sqrt{K_Z(Z_P - Z_Q)}} \frac{1}{(1 - Y^2)^{1/4}} \sqrt{\frac{1 - Y}{1 + Y}}$$

$$\times \exp \left\{ -2\pi i \left[\frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z_{II} + K_Z(Z_P - Z_Q) + \frac{1}{2A} \sqrt{1 - Y^2} z_{II} \right] \right\}$$

$$G_{o2} = -A \frac{1}{\sqrt{K_Z(Z_P - Z_Q)}} \frac{1}{(1 - Y^2)^{1/4}} \sqrt{\frac{1 - Y}{1 + Y}}$$

$$\times \exp \left\{ -2\pi i \left[\frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z_{II} + K_Z(Z_P - Z_Q) - \frac{1}{2A} \sqrt{1 - Y^2} z_{II} \right] \right\}$$

$$G_{h1} = -iA \frac{1}{\sqrt{K_Z(Z_P - Z_Q)}} \frac{1}{(1 - Y^2)^{1/4}} \exp \left\{ -2\pi i \right.$$

$$\left. \times \left[\frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z_{II} + K_Z(Z_P - Z_Q) + \frac{1}{2A} \sqrt{1 - Y^2} z_{II} \right] \right\}$$

$$G_{h2} = A \frac{1}{\sqrt{K_Z(Z_P - Z_Q)}} \frac{1}{(1 - Y^2)^{1/4}} \exp \left\{ -2\pi i \right.$$

$$\left. \times \left[\frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z_{II} + K_Z(Z_P - Z_Q) - \frac{1}{2A} \sqrt{1 - Y^2} z_{II} \right] \right\}$$

où:

$$A = \left(\frac{1}{2A} \right)^{1/2} \frac{1}{\sin \theta} \frac{1}{\sqrt{z_{II}}} \text{ et } Y = - \frac{x - x_Q}{z_{II} \operatorname{tg} \theta}$$

Expression des huit termes composant $\psi_n(x, z)$

$$(1) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{Y_1}^{Y_2} B(-i)(1 + Y^i) \frac{1}{\sqrt{K_Z(Z_P - Z_Q)}} \frac{1}{(1 - Y^2)^{1/4}} \exp(-2\pi i K_Z Z_P) \exp(i\Phi_1) dy dY$$

$$(2) = - \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{Y_1}^{Y_2} B(1 + Y^i) \frac{1}{\sqrt{K_Z(Z_P - Z_Q)}} \frac{1}{(1 - Y^2)^{1/4}} \exp(-2\pi i K_Z Z_P) \exp(i\Phi_2) dy dY$$

$$(3) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{Y_1}^{Y_2} B(-i)(1 - Y^i) \frac{1}{\sqrt{K_Z(Z_P - Z_Q)}} \frac{1}{(1 - Y^2)^{1/4}} \exp(-2\pi i K_Z Z_P) \exp(i\Phi_3) dy dY$$

$$(4) = - \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{Y_1}^{Y_2} B(1 - Y^i) \frac{1}{\sqrt{K_Z(Z_P - Z_Q)}} \frac{1}{(1 - Y^2)^{1/4}} \exp(-2\pi i K_Z Z_P) \exp(i\Phi_4) dy dY$$

$$(5) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{Y_1}^{Y_2} B(-i) \sqrt{1 - Y^{i2}} \frac{1}{\sqrt{K_Z(Z_P - Z_Q)}} \frac{1}{(1 - Y^2)^{1/4}} \sqrt{\frac{1 - Y}{1 + Y}} \exp(-2\pi i K_Z Z_P) \exp(i\Phi_5) dy dY$$

$$(6) = - \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{Y_1}^{Y_2} -B \sqrt{1 - Y^{i2}} \frac{1}{\sqrt{K_Z(Z_P - Z_Q)}} \frac{1}{(1 - Y^2)^{1/4}} \sqrt{\frac{1 - Y}{1 + Y}} \exp(-2\pi i K_Z Z_P) \exp(i\Phi_6) dy dY$$

$$(7) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{Y_1}^{Y_2} B(i) \sqrt{1 - Y^{i2}} \frac{1}{\sqrt{K_Z(Z_P - Z_Q)}} \frac{1}{(1 - Y^2)^{1/4}} \sqrt{\frac{1 - Y}{1 + Y}} \exp(-2\pi i K_Z Z_P) \exp(i\Phi_7) dy dY$$

$$(8) = - \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{Y_1}^{Y_2} B \sqrt{1 - Y^{i2}} \frac{1}{\sqrt{K_Z(Z_P - Z_Q)}} \frac{1}{(1 - Y^2)^{1/4}} \sqrt{\frac{1 - Y}{1 + Y}} \exp(-2\pi i K_Z Z_P) \exp(i\Phi_8) dy dY$$

où

$$B = - \frac{1}{4\pi} z_{II} \operatorname{tg} \theta A K_Z \gamma_0 i \pi = \frac{i}{4} \sqrt{z_{II}} K_Z \frac{1}{\sqrt{2A}}$$

$$Y_1 = - \frac{x - x_1}{z_{II} \operatorname{tg} \theta}, \quad Y_2 = - \frac{x - x_2}{z_{II} \operatorname{tg} \theta}$$

(x_1 et x_2 étant les abscisses des extrémités de la fente) et:

$$\Phi_1(Y) = -2\pi \left\{ \frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z + \frac{1}{2A} \left[(z_I + z_{II}) \frac{1}{\sqrt{1 - Y^{i2}}} + \frac{Y^i}{\sqrt{1 - Y^{i2}}} \frac{x}{\operatorname{tg} \theta} + z_{II} \left(\sqrt{1 - Y^{i2}} + \frac{Y Y^i - 1}{\sqrt{1 - Y^{i2}}} \right) \right] \right\}$$

$$\Phi_2(Y) = -2\pi \left\{ \frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z + \frac{1}{2A} \left[(z_I - z_{II}) \frac{1}{\sqrt{1 - Y^{i2}}} + \frac{Y^i}{\sqrt{1 - Y^{i2}}} \frac{x}{\operatorname{tg} \theta} + z_{II} \left(-\sqrt{1 - Y^{i2}} + \frac{Y Y^i + 1}{\sqrt{1 - Y^{i2}}} \right) \right] \right\}$$

$$\Phi_3(Y) = -2\pi \left\{ \frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z + \frac{1}{2A} \left[(z_{II} - z_I) \frac{1}{\sqrt{1 - Y^{i2}}} + \frac{Y^i}{\sqrt{1 - Y^{i2}}} \frac{x}{\operatorname{tg} \theta} + z_{II} \left(\sqrt{1 - Y^{i2}} + \frac{Y Y^i - 1}{\sqrt{1 - Y^{i2}}} \right) \right] \right\}$$

$$\Phi_4(Y) = -2\pi \left\{ \frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z + \frac{1}{2A} \left[-(z_{\text{I}} + z_{\text{II}}) \frac{1}{\sqrt{1-Y^{i2}}} \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{Y^i}{\sqrt{1-Y^{i2}}} \frac{x}{\text{tg } \theta} + z_{\text{II}} \left(-\sqrt{1-Y^2} + \frac{YY^i-1}{\sqrt{1-Y^{i2}}} \right) \right] \right\}$$

$$\Phi_5(Y) = \Phi_1(Y) \quad \Phi_6(Y) = \Phi_2(Y)$$

$$\Phi_7(Y) = \Phi_3(Y) \quad \Phi_8(Y) = \Phi_4(Y).$$

Chaque intégrale double se sépare en deux intégrales simples:

L'intégrale en y est la même pour les 8 termes composant, $\psi_h(x, z)$, à savoir:

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{K_Z(Z_P, Z_Q)}} \exp(-2\pi i K_Z Z_P) dy.$$

En appliquant la méthode de la phase stationnaire (Born & Wolf, 1959), on trouve que la contribution principale à I provient des points $y=0$ (plan d'incidence) et que I vaut:

$$e^{-i\pi/4} \frac{1}{K_Z} \exp(-2\pi i K_Z Z_P).$$

L'intégrale en Y dépend, pour chacun des 8 termes, des limites d'intégration Y_1 et Y_2 , c'est à dire de la largeur de la fente et de sa position par rapport à P . Nous envisagerons d'abord le cas d'une fente de largeur infinie (calcul qui a le caractère d'un test) et ensuite celui d'une fente de largeur finie $e = x_2 - x_1$.

4. Cas d'une fente de largeur infinie

Nous nous attendons à retrouver ainsi la propagation des deux champs d'ondes ψ_1^i et ψ_2^i non perturbés.

L'intégration en Y peut se faire dans ce cas par la méthode de la phase stationnaire. Ainsi pour (1), la phase est stationnaire lorsque

$$\frac{\partial \Phi_1}{\partial Y} = 0 \text{ soit: } -\frac{2\pi}{A} z_{\text{II}} \left(-\frac{Y}{\sqrt{1-Y^2}} \right. \\ \left. + \frac{Y^i}{\sqrt{1-Y^{i2}}} \right) = 0$$

c'est à dire lorsque $Y = Y^i$.

Comme

$$\frac{\partial^2 \Phi_1}{\partial Y^2} (Y^i) = \frac{\pi}{A} z_{\text{II}} \frac{1}{(1-Y^{i2})^{3/2}} > 0.$$

$$(1) = \frac{1}{4} (1+Y^i) \sqrt{1-Y^{i2}} \exp \left\{ -2\pi i \left[\frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z + K_Z Z_P \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{2A} \left(z \frac{1}{\sqrt{1-Y^{i2}}} + \frac{Y^i}{\sqrt{1-Y^{i2}}} \frac{x}{\text{tg } \theta} \right) \right] \right\}.$$

Un calcul analogue montre que Φ_2 est stationnaire pour $Y = -Y^i$. De façon générale, on montre que

$$\frac{\partial \Phi_{2l+1}}{\partial Y} (Y^i) = 0 \text{ et } \frac{\partial \Phi_{2l}}{\partial Y} (-Y^i) = 0.$$

D'où les résultats:

$$(2) = -\frac{1}{4} (1+Y^i) \sqrt{1-Y^{i2}} \exp \left\{ -2\pi i \left[\frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z + K_Z Z_P \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{2A} (z_{\text{I}} - z_{\text{II}}) \frac{1}{\sqrt{1-Y^{i2}}} + \frac{Y^i}{2A \sqrt{1-Y^{i2}}} \frac{x}{\text{tg } \theta} \right] \right\}$$

$$(3) = \frac{1}{4} (1-Y^i) \sqrt{1-Y^{i2}} \exp \left\{ -2\pi i \left[\frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z + K_Z Z_P \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{2A} (z_{\text{II}} - z_{\text{I}}) \frac{1}{\sqrt{1-Y^{i2}}} + \frac{Y^i}{2A \sqrt{1-Y^{i2}}} \frac{x}{\text{tg } \theta} \right] \right\}$$

$$(4) = -\frac{1}{4} (1-Y^i) \sqrt{1-Y^{i2}} \exp \left\{ -2\pi i \left[\frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z + K_Z Z_P \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{1}{2A} (z_{\text{I}} + z_{\text{II}}) \frac{1}{\sqrt{1-Y^{i2}}} + \frac{Y^i}{2A \sqrt{1-Y^{i2}}} \frac{x}{\text{tg } \theta} \right] \right\}$$

$$(5) = \frac{1}{4} (1-Y^i) \sqrt{1-Y^{i2}} \exp i \Phi_1$$

$$(6) = -(2) \quad (7) = -(3)$$

$$(8) = -\frac{1}{4} (1+Y^i) \sqrt{1-Y^{i2}} \exp i \Phi_4.$$

Et par conséquent:

$$\psi_h(x, z) = \frac{1}{2} \sqrt{1-Y^{i2}} \exp \left\{ -2\pi i \left[\frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z + K_Z Z_P \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{2A} \frac{1}{\sqrt{1-Y^{i2}}} z + \frac{1}{2A} \frac{Y^i}{\sqrt{1-Y^{i2}}} \frac{x}{\text{tg } \theta} \right] \right\} \\ - \frac{1}{2} \sqrt{1-Y^{i2}} \exp \left\{ -2\pi i \left[\frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z + K_Z Z_P \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{1}{2A} \frac{1}{\sqrt{1-Y^{i2}}} z + \frac{1}{2A} \frac{Y^i}{\sqrt{1-Y^{i2}}} \frac{x}{\text{tg } \theta} \right] \right\}$$

$$\psi_h(x, z) = \psi_{h1}^i(x, z) + \psi_{h2}^i(x, z).$$

La vibration en P est donc la vibration qu'y produiraient les deux champs d'ondes initiaux non perturbés, c'est à dire non diaphragmés.

5. Cas d'une fente de largeur finie $e = x_2 - x_1$

(1) Considérons d'abord un *seul champ d'ondes* initial, le champ ψ_1^i par exemple, et étudions l'effet de la diffraction sur ce champ d'ondes. Ce n'est plus tout ψ_2^i qui contribue à l'amplitude en P , mais seulement sa partie non diaphragmée, c'est à dire celle pour laquelle x_Q est compris entre x_2 et x_1 . L'amplitude en P due au seul champ ψ_1^i , que nous noterons $\psi(P) = \psi(x, z)$, sera la somme des intégrales (1), (2), (5) et (6), avec:

$$Y_1 = Y_1(P) = -\frac{x-x_1}{z_{\text{II}} \text{tg } \theta} \text{ et } Y_2 = Y_2(P) = -\frac{x-x_2}{z_{\text{II}} \text{tg } \theta}.$$

Pour un Y^i donné, cherchons quelle est la répartition de l'amplitude $\psi(P)$ aux divers points P de la face de sortie du cristal. Compte tenu de ce qui a été dit au

paragraphe précédent, (1) ne sera $\neq 0$ qu'aux points P tels que Y^i soit compris entre les deux limites d'intégration $Y_1(P)$ et $Y_2(P)$; c'est à dire aux points du segment MN (Fig.3). De même, pour (5). Par contre, comme Φ_2 et Φ_6 sont stationnaires pour $Y = -Y^i$, (2) et (6) ne seront $\neq 0$ qu'aux points P' du segment $M'N'$, tels que $-Y^i$ soit compris entre $Y_1(P')$ et $Y_2(P')$.

On voit donc qu'un faisceau parallèle d'inclinaison α^i , donne naissance dans la seconde partie du cristal à deux faisceaux d'inclinaison α^i et $-\alpha^i$, dont les traces sur la face de sortie sont MN et $M'N'$ respectivement. Ces deux faisceaux se séparent à la distance $z_0 = e/2 \operatorname{tg} \alpha^i$ du plan de la fente diffractante.

Comparons la structure fine de ces deux faisceaux après leur séparation

Pour cela, considérons deux points $P(x, z)$ et $P'(x' = -x, z' = z)$, symétriques par rapport à oz ; et appartenant aux segments MN et $M'N'$ respectivement.

(a) *Calcul de l'amplitude $\psi(P)$*

$\psi(P)$ est la somme des termes (1) et (5), calculés au point P . Posons $Y_1 = Y_1(P)$ et $Y_2 = Y_2(P)$. Comme e est supposé petit devant z_{II} , Y varie peu lorsque x_Q varie de x_1 à x_2 . On peut donc faire un développement limité des phases Φ_1 et Φ_5 , autour de la valeur Y^i pour laquelle ces fonctions sont stationnaires.

$$\Phi_1(Y) = \Phi_1(Y^i) + \frac{(Y - Y^i)^2}{2} \frac{\partial^2 \Phi_1}{\partial Y^2}(Y^i) = \Phi_1(Y^i) + \frac{(Y - Y^i)^2}{2} \frac{\pi}{A} z_{II} \frac{1}{(1 - Y^{i2})^{3/2}}$$

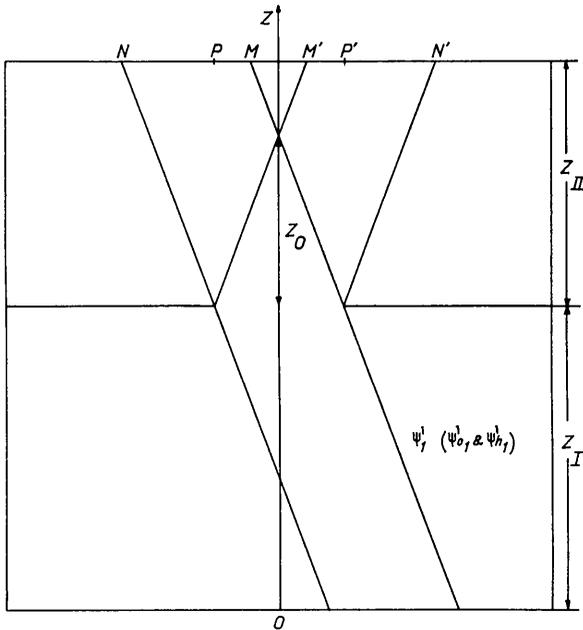


Fig. 3. Un champ d'ondes ψ^i_2 , se propageant dans la première partie du cristal, donne naissance, dans la seconde partie du cristal, à deux champs d'ondes dont les trajets sont symétriques par rapport à Oz .

$$\Phi_5(Y) = \Phi_5(Y^i) + \frac{(Y - Y^i)^2}{2} \frac{\pi}{A} \times z_{II} \frac{1}{(1 - Y^{i2})^{3/2}} = \Phi_1(Y).$$

(1) s'écrit alors, l'intégration sur y étant la même que pour une fente de largeur infinie:

$$(1) = B(-i)e^{-i\pi/4} \frac{1}{K_Z} (1 + Y^i) \exp [i\Phi_1(Y^i)] \times \int_{Y_1}^{Y_2} \frac{1}{(1 - Y^2)^{1/4}} \exp \left[i \frac{(Y - Y^i)^2}{2} \frac{\pi}{A} z_{II} \times \frac{1}{(1 - Y^{i2})^{3/2}} \right] dY.$$

On suppose que la variation du terme d'amplitude $(1 - Y^2)^{-1/4}$ au voisinage de Y^i , est petite devant celle du terme de phase, et on le remplace par $(1 - Y^{i2})^{-1/4}$.

En posant:

$$\tau = \left(\frac{z_{II}}{A} \right)^{1/2} (1 - Y^{i2})^{-3/4} (Y - Y^i) = \tau(Y)$$

on trouve qu'en $P(x, z)$, (1) vaut:

$$(1) = \frac{1}{4} e^{-i\pi/4} \frac{1}{\sqrt{2}} (1 + Y^i) \sqrt{1 - Y^{i2}} \exp(i\Phi_1) Y^i [F(v_2) - F(v_1)] = (1)_\infty \left(\frac{1 - i}{2} \right) [F(v_2) - F(v_1)]$$

où: $(1)_\infty$ est la valeur en P du terme (1) lorsque le champ d'ondes n'est pas diaphragmé, c'est à dire celle obtenue au paragraphe 4.

$F(v)$ est l'intégrale $\int_0^v \exp i\pi \frac{\tau^2}{2} d\tau$ (cf. Sommerfeld, 1964)

$$v_1 = \tau(Y_1), \quad v_2 = \tau(Y_2).$$

On trouve de même:

$$(5) = (5)_\infty \frac{(1 - i)}{2} [F(v_2) - F(v_1)].$$

L'amplitude $\psi(P)$ en P , due au champ d'ondes initial ψ^i_1 diaphragmé par la fente de largeur e est donc:

$$\psi(P) = \sqrt{1 - Y^{i2}} \exp \left\{ -2\pi i \left[\frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z + K_Z Z_P \right] \right\} + \frac{1}{2A} \left(\frac{z_I + z_{II}}{\sqrt{1 - Y^{i2}}} + \frac{Y^i x}{\sqrt{1 - Y^{i2}}} \operatorname{tg} \theta \right) \times \left(\frac{1 - i}{2} \right) [F(v_2) - F(v_1)].$$

(b) *Calcul de l'amplitude $\psi(P')$*

$\psi(P')$ est la somme des termes (2) et (6) calculés cette fois au point P' ($x' = -x, z' = z$). Le calcul est analogue au précédent. A chaque élément $dydx$ de la fente dif-

fractante centré en $Q(x)$, on fait correspondre son symétrique centré en $Q'(x' = -x)$. L'onde élémentaire envoyée par Q' en P' s'obtient à partir de celle envoyée par Q en P en changeant Y en $-Y$, ce qui a pour effet de modifier les amplitudes des fonctions G_{o2} et G_{h2} sans en changer la phase. On obtient ainsi :

$$(2) = -Be^{-i\pi/4} \frac{1}{K_Z} (1+Y^i) \int_{Y_2}^{Y_1} \frac{1}{(1-Y^2)^{1/4}} \times \exp [i\Phi_2(Y)] dY$$

$$(6) = Be^{-i\pi/4} \frac{1}{K_Z} \sqrt{1-Y^i} \int_{Y_2}^{Y_1} \frac{1}{(1-Y^2)^{1/4}} \times \sqrt{\frac{1+Y}{1-Y}} \exp [i\Phi_6(Y)] dY.$$

De la même manière que précédemment, on développe $\Phi_2 = \Phi_6$ en série limitée au deuxième ordre autour de la valeur $-Y^i$ qui est la valeur de Y pour laquelle la fonction Φ_2 est stationnaire :

$$\Phi_2 = \Phi_2(-Y^i) - \left(\frac{Y+Y^i}{2}\right)^2 \frac{\pi}{A} z_{II} \frac{1}{(1-Y^i2)^{3/2}}$$

et on pose :

$$\tau = \left(\frac{z_{II}}{A}\right)^{1/2} (1-Y^i2)^{-3/4} (Y+Y^i).$$

On trouve ainsi :

$$(2) = -\frac{1}{4}(1+Y^i) \sqrt{1-Y^i2} \exp [i\Phi_2(-Y^i)] [F(v_2) - F(v_1)]$$

$$(6) = \frac{1}{4}(1-Y^i) \sqrt{1-Y^i2} \exp [i\Phi_2(-Y^i)] [F(v_2) - F(v_1)]$$

D'où

$$\begin{aligned} \psi(P') = & -\frac{1}{2} Y^i \sqrt{1-Y^i2} \exp \left\{ -2\pi i \left[\frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z + K_Z Z_{P'} \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{2A} \left(\frac{z_I - z_{II}}{\sqrt{1-Y^i2}} + \frac{Y^i}{\sqrt{1-Y^i2}} \frac{x'}{\text{tg } \theta} \right) \right] \right\} \\ & \times [F(v_2) - F(v_1)] \frac{(1-i)}{2}. \end{aligned}$$

Nous pouvons donc énoncer un premier résultat : étant donné un champ d'ondes ψ_1^i dont le point caractéristique sur la surface de dispersion est L_1^i (Fig. 1), et qui se propage dans la direction α^i , il donne naissance dans la seconde partie du cristal, après avoir subi la diffraction, à deux champs d'ondes se propageant dans les directions α^i et $-\alpha^i$, symétriques par rapport à la normale à la fente diffractante ; nous venons d'en calculer les amplitudes. La question est maintenant de savoir quels sont les points caractéristiques de ces deux champs d'ondes. Dans les phases des amplitudes complexes $\psi(P)$ et $\psi(P')$ que nous venons de calculer, nous voyons que les termes

$$\frac{1}{2A} \frac{Y^i}{\sqrt{1-Y^i2}} \frac{x}{\text{tg } \theta} \quad \text{et} \quad \frac{1}{2A} \frac{Y^i}{\sqrt{1-Y^i2}} \frac{x'}{\text{tg } \theta}$$

sont tous les deux affectés du signe + ; nous en déduisons :

que le point caractéristique du champ d'ondes arrivant en P est L_1^i ,

que le point caractéristique du champ d'ondes arrivant en P' est L_2^i , et non pas L_1^i (auquel correspond aussi la direction de propagation $-\alpha^i$).

Nous pouvons donc dire que du fait de la diffraction, un champ d'ondes est démultiplié en deux champs d'ondes dont les points caractéristiques se trouvent sur deux branches différentes de la surface de dispersion. Nous retrouvons ainsi un résultat obtenu par Penning (1966) de façon différente.

(2) Si maintenant, nous considérons les deux champs d'ondes ψ_1^i et ψ_2^i excités par l'onde plane incidente, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \psi_h(P) = & \left[\frac{1}{2} \sqrt{1-Y^i2} \exp \left\{ -2\pi i \left[\frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z + K_Z Z_P \right. \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{2A} \left(\frac{z}{\sqrt{1-Y^i2}} + \frac{Y^i x}{\sqrt{1-Y^i2} \text{tg } \theta} \right) \right] \right\} \right] \\ & - \frac{1}{2} \sqrt{1-Y^i2} \exp \left\{ -2\pi i \left[\frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z + K_Z Z_P \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{1}{2A} \left(\frac{2}{\sqrt{1-Y^i2}} - \frac{Y^i x}{\sqrt{1-Y^i2}} \frac{1}{\text{tg } \theta} \right) \right] \right\} \right] \\ & \times \left(\frac{1-i}{2} \right) [F(v_2) - F(v_1)] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \psi_h(P') = & \left[-\frac{1}{2} Y^i \sqrt{1-Y^i2} \exp \left\{ -2\pi i \left[\frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z + K_Z Z_{P'} \right. \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{2A} \left(\frac{z_I - z_{II}}{\sqrt{1-Y^i2}} + \frac{Y^i x'}{\sqrt{1-Y^i2}} \frac{1}{\text{tg } \theta} \right) \right] \right\} \right] \\ & - \frac{1}{2} Y^i \sqrt{1-Y^i2} \exp \left\{ -2\pi i \left[\frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z + K_Z Z_{P'} \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{1}{2A} \left(\frac{z_I - z_{II}}{\sqrt{1-Y^i2}} - \frac{Y^i x'}{\sqrt{1-Y^i2}} \frac{1}{\text{tg } \theta} \right) \right] \right\} \right] \\ & \times \frac{(1-i)}{2} [F(v_2) - F(v_1)]. \end{aligned}$$

C'est le facteur $\frac{1-i}{2} [F(v_2) - F(v_1)]$ qui détermine la figure de diffraction.

Ce coefficient $F(v_2) - F(v_1)$, différence entre deux intégrales de Fresnel, est analogue à celui que l'on obtient en optique classique lors du calcul de la diffraction de la lumière visible par une fente (Sommerfeld, 1964; Bruhat, 1959). En effet, si on considère une onde plane incidente de lumière ordinaire, tombant sur une fente de largeur e , l'amplitude s de l'onde dif-

fractée en un point S situé dans l'air à une distance l de la fente, comptée perpendiculairement au plan de la fente, est:

$$s = s_0 \left(\frac{1-i}{2} \right) [F(v_2) - F(v_1)]$$

où $v_2 = \sqrt{\frac{2}{l\lambda}} x_2$ et $v_1 = \sqrt{\frac{2}{l\lambda}} x_1$,

x_2 et x_1 étant les abscisses des extrémités de la fente diffractante, comptées à partir de l'intersection du rayon parallèle à la direction incidente et de la fente. s_0 est l'amplitude en S de l'onde non diaphragmée. On montre en optique classique, que l'allure de la figure de diffraction dépend (par l'intermédiaire de la longueur de la corde joignant les deux points de la spirale de Cornu correspondant aux valeurs v_2 et v_1),

du paramètre $w = v_2 - v_1 = e \sqrt{\frac{2}{l\lambda}}$.

Si w est inférieur à 0,5, on est dans les conditions de diffraction de Fraunhofer; la figure de diffraction présente alors une tache centrale intense, plus grande que la zone d'éclaircissement géométrique et entourée de franges d'intensité moins intense. Si w est supérieur à 2,5, on est dans les conditions de diffraction de Fresnel; la largeur de la tache de diffraction est comparable à celle de la zone d'éclaircissement géométrique et son aspect dépend des valeurs de w (voir Bruhat (1959) à ce sujet).

Si nous revenons maintenant au calcul de la diffraction des rayons X par une fente située à l'intérieur d'un cristal, nous voyons que $\psi_h(P)$ et $\psi_h(P')$ s'expriment de la même façon que s . La figure de diffraction autour de P ou de P' dans le cristal est donc la même que celle obtenue, pour la même valeur de w , dans le cas d'une onde lumineuse se propageant dans l'air.

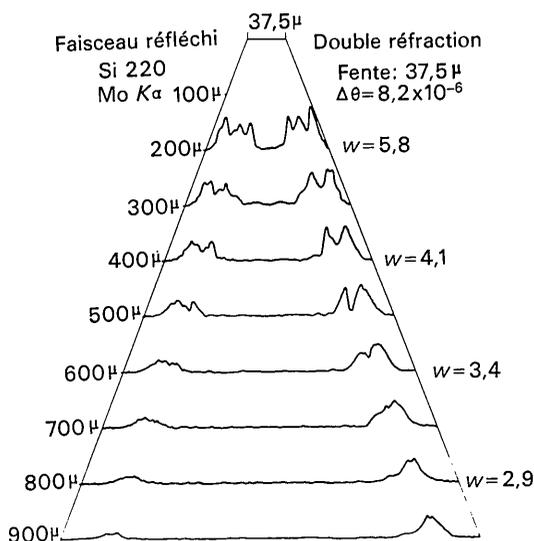


Fig. 4. [Extraite de l'article Authier, Malgrange & Tournarie (1968)]. Profils, à diverses profondeurs, des faisceaux se propageant dans le cristal, après diffraction par une fente placée sur la face d'entrée du cristal (onde plane incidente dans le vide).

Remarquons que w dans le cristal peut encore s'exprimer sous la forme (cf. Malgrange, 1967):

$$w = e \sqrt{\frac{2 \cos \bar{\theta} \cos \alpha^t}{A r \lambda}}$$

où r est la distance fente-point d'observation et où $A = d\alpha^t/d(\Delta\theta)$ est appelé coefficient d'amplification et varie entre 1 et 10^4 .

On voit ainsi que si e et λ gardent la même valeur, on obtient à une distance r dans le cristal la même figure de diffraction que dans l'air à une distance $Ar/\cos \alpha^t \cos \theta$, c'est à dire à une distance 10^4 à 10^5 plus grande.

Nous retrouvons ainsi des résultats déjà obtenus (Authier & Malgrange, 1966; Authier, Malgrange & Tournarie, 1968; Malgrange, 1967). Ces auteurs ont étudié (à l'aide de la théorie de Takagi) l'effet sur une onde plane incidente dans le vide de la limitation imposée par une fente placée sur la face d'entrée du cristal; ce qui correspond au cas $z_I=0$, $z_{II}=z$ de notre calcul. Comme eux, nous trouvons que deux faisceaux se propagent alors dans le cristal et que leur structure fine dépend du même paramètre w .

De plus notre calcul permet d'expliquer la différence qui existe entre les profils des deux faisceaux, différence qu'on peut constater sur la Fig. 4, extraite de l'article (Authier, Malgrange & Tournarie, 1968). En effet, ces profils sont calculés pour un cristal absorbant. Pour tenir compte de l'absorption dans notre calcul, il suffit de supposer que la partie imaginaire de A est $\neq 0$; nous voyons alors que l'absorption intervient dans $\psi(P)$ par le facteur:

$$\exp \left\{ -2\pi i \frac{1}{A} \left(\frac{-z}{\sqrt{1-Y^2}} + \frac{Y^t x}{\sqrt{1-Y^2}} \right) \right\}$$

et dans $\psi(P')$ par le facteur:

$$\exp \left\{ -2\pi i \frac{1}{A} \left(\frac{-z}{\sqrt{1-Y^2}} - \frac{Y^t x}{\sqrt{1-Y^2}} \right) \right\}$$

$$(x' = -x \text{ et } z_I = 0, z_{II} = z).$$

A une même profondeur z dans le cristal, w est le même pour les deux faisceaux; le nombre de pics des deux profils est donc le même; mais, alors que la variation en x de $\psi(P)$ est en

$$\exp \left\{ -2\pi i \frac{x Y^t}{A \sqrt{1-Y^2}} \right\}; \text{ elle est en } \exp \left\{ 2\pi i \frac{x Y^t}{\sqrt{1-Y^2}} \right\}$$

pour $\psi(P')$; comme la fonction exponentielle n'est pas symétrique, la répartition de l'amplitude en fonction de x n'est pas la même dans les deux faisceaux; d'où la différence constatée sur la Fig. 4.

Conclusion

Nous venons donc de montrer qu'un champ d'ondes donne naissance à deux nouveaux champs d'ondes lorsqu'il est diffracté. Cette création de nouveaux champs d'ondes apparait dans notre calcul, comme le

résultat de l'application de la théorie mathématique générale de la diffraction des ondes électromagnétiques aux champs d'ondes de rayons X se propageant dans un cristal parfait. Cette théorie générale nous impose d'introduire, dans le calcul de l'amplitude des champs d'ondes diffractés, la fonction de Green du problème; et c'est la forme même de cette fonction, elle-même imposée par les équations de propagation des rayons X dans les cristaux qui conduit au résultat de la création des nouveaux champs d'ondes. Le fait que nous ayons établi ce résultat pour le cas d'une fente diffractante n'enlève rien à la généralité du calcul, cette hypothèse ayant pour but uniquement de permettre un calcul plus aisé de la fonction de Green. Des calculs plus compliqués, mais semblables du point de vue théorique, doivent permettre de résoudre des problèmes de diffraction à géométrie plus compliquée.

C'est ainsi, que pour expliquer le contraste des images de dislocation, il faudra adapter ce calcul aux conditions physiques imposées par la dislocation. Le modèle de la fente ne convient certainement pas ici, et il faudra le remplacer plutôt par celui d'un fil plongé dans un milieu transparent aux rayons X. Comme le théorème de Babinet ne peut être appliqué ici sans précautions, il faudra donc reprendre le calcul. De plus, pour être dans les conditions physiques des expériences de topographie aux rayons X, il faudra supposer, comme le fait Kato (1968), que la source de rayons X émet non pas une onde plane, mais une onde sphérique.

Acta Cryst. (1968). A **24**, 676

Optical Activity in a Non-enantiomorphous Crystal: AgGaS₂

BY M. V. HOBDEN

Royal Radar Establishment, Malvern, Worcestershire, England

(Received 19 April 1968)

There are no symmetry properties in the theory of optical activity that forbid optical activity in the four non-enantiomorphous crystal classes m , $mm2$, $\bar{4}$ and $\bar{4}2m$, but the existence of such a phenomenon has not, until now, been experimentally verified. This work describes the first positive observation of optical activity in a non-enantiomorphous crystal, silver thiogallate (AgGaS₂). Measurements of the refractive indices of this crystal show that it is accidentally optically isotropic at 4974 Å, although it is of class $\bar{4}2m$. At this wavelength the rotation of the plane of polarization has been measured for propagation along both diad axes. The optical rotatory power is 522 deg.mm⁻¹, the sense of rotation being opposite for the two diad axes. There was no rotation along the c axis. These observations substantiate the theory of optical activity and show that there are no unsuspected conditions forbidding optical activity in these classes; the previous absence of experimental verification of this phenomenon has been due to the lack of crystals with suitable optical properties.

Introduction

Optical activity has been observed for the first time in a non-enantiomorphous crystal, silver thiogallate (AgGaS₂) (Hobden, 1967). The experimental details of this observation are described and considered from

Je remercie Monsieur Authier qui a suscité et dirigé ce travail. Ses suggestions, son aide constante et ses nombreux conseils m'ont permis de la mener à bien.

References

- AUTHIER, A. (1961). *Bull. Soc. franç. Minér. Crist.* **84**, 51.
 AUTHIER, A. (1967). *Advanc. X-ray Analysis*, **10**, 9.
 AUTHIER, A. & MALGRANGE, C. (1966). *C.r. Acad. Sci. Paris*, **262**, 429.
 AUTHIER, A., MALGRANGE, C. & TOURNARIE, M. (1968). *Acta Cryst.* A **24**, 126.
 BALIBAR, F. & AUTHIER, A. (1967). *Phys. stat. sol.* **21**, 413.
 BORN, M. & WOLF, E. (1959). *Principles of Optics*. London: Pergamon Press.
 BRUHAT, G. (1959). *Optique*. Paris: Masson.
 KATO, N. (1961). *Acta Cryst.* **14**, 526, 627.
 KATO, N. (1968). *Acta Cryst.* A **24**, 157.
 LAUE, M. VON (1960). *Röntgenstrahlinterferenzen*. Frankfurt am Main: Akademische Verlagsgesellschaft.
 MALGRANGE, C. (1967). Thèse, Paris.
 MORSE, P. & FESHBACH, H. (1953). *Methods of Theoretical Physics*, ch. 7. New York: McGraw Hill.
 PENNING, P. (1966). Thèse, Delft.
 SOMMERFELD, A. (1964). *Optics*, p. 239. New York: Academic Press.
 STRATTON, J. A. (1941). *Electromagnetic Theory*, ch. 8. New York: McGraw Hill.
 TAKAGI, S. (1962). *Acta Cryst.* **15**, 1311.
 TAUPIN, D. (1964). *Bull. Soc. franç. Minér. Crist.* **87**, 469.
 TAUPIN, D. (1967). *Acta Cryst.* **23**, 25.

a historical and theoretical viewpoint. It is shown that the observation verifies the theory of optical activity based on the gyration tensor.

Optical activity was first observed in quartz as a rotation of the plane of polarization of light propagating along the optic axis. This was explained by