

### Conclusions

When the intensity distribution of a diffraction pattern from a crystalline material can be measured as separate distributions around the reciprocal lattice points  $\mathbf{s}_n$ , the average lattice function  $\mathcal{P}(\mathbf{x})$  (a repartition function) satisfies certain conditions. In this case  $\mathcal{P}(\mathbf{x})$  is the sum of a monotonic function of  $\mathbf{x}$  and a quasi-periodic function. The quasiperiodic part of the average lattice function describes the intensity distribution of the diffraction pattern. Therefore the form function,  $C(\mathbf{x}_m)$ , of the coherently scattering region equals the volume integral of the peak of the average lattice function around the  $m$ th node of the average lattice, and the coherently scattering region may be defined as a region of matter corresponding to the form function  $C(\mathbf{x})$ . This function  $C(\mathbf{x}_m)$  represents the fraction of unit cells in the structure around the  $m$ th average lattice point  $\mathbf{x}_m$  that contribute to coherent scattering. In addition, a peak of the average lattice function can be described by  $C(\mathbf{x}_m)\varphi(\mathbf{x}_m, \Delta\mathbf{x})$ , where  $\varphi(\mathbf{x}_m, \Delta\mathbf{x}) = 0$  for  $|\mathbf{e}_i \cdot \Delta\mathbf{x}| \geq \frac{1}{2}|\mathbf{e}_i|^2$ .

We can determine from a powder diffraction pattern the projections on to the perpendicular to the reflecting planes  $C(t)$  and  $\varphi(t, L)$  of  $C(\mathbf{x})$  and  $\varphi(\mathbf{x}, \Delta\mathbf{x})$ , if the diffraction lines can be measured separately; in this case

$\varphi(t, L)$  can be set at zero for  $|L| \geq \frac{1}{2}d$ . Thus equations derived in a previous paper by La Fleur & Koopmans (1968) can be used for the determination of  $C(t)$  when the convergence of the series in the given expression for  $C(t)$  is sufficiently rapid, that is, when the distortions are sufficiently great. The Warren & Averbach method implies a certain inexactness in this case, even when the distribution functions are gaussian. However, if the series in the given expression for  $C(t)$  does not converge sufficiently rapidly, *i.e.* the distortions are sufficiently small, it is justifiable to apply the Warren & Averbach method.

The author is greatly indebted to Dr K. Koopmans for some valuable discussions on the subject of this paper.

### References

- BERTAUT, F. (1950). *Acta Cryst.* **3**, 14.  
 HOSEMANN, R. & BAGCHI, S. N. (1962). *Direct Analysis of Matter by Diffraction*. Amsterdam: North-Holland Publishing Co.  
 LA FLEUR, P. L. G. M. & KOOPMANS, K. (1968). *Acta Cryst.* **A24**, 311.  
 WARREN, B. E. & AVERBACH, B. L. (1952). *J. Appl. Phys.* **23**, 497.

*Acta Cryst.* (1969). **A25**, 650

## Généralisation de la Notion de Champs d'Ondes en Théorie Dynamique

PAR F. BALIBAR

*Laboratoire de Minéralogie-Cristallographie, associé au CNRS, Faculté des Sciences, 9, quai Saint Bernard, Paris Vème, France*

(Reçu le 21 mars 1969)

Using Takagi's theory of X-ray diffraction by a perfect crystal and the general theory of differential equations, a solution of Takagi's equations is given in the form of a linear combination of two unit vectors of the vectorial space formed by the solutions of these equations. The amplitude distribution inside the crystal is then the sum of two terms, each term being the convolution of a function depending on the amplitude distribution on the incident surface and one of the two principal solutions of Takagi's equation which are Hankel functions of the first and second kind,  $H_0^1$  and  $H_0^2$ . This gives an extension of the notion of wave fields since this calculation can be done for any kind of incident wave on the entrance surface. It is shown that these two 'generalized wave fields' present anomalous absorption. In the case of an incident plane wave or an incident spherical wave, these 'generalized wave fields' become identical with the usual wave fields of the dynamical theory.

### 1. Introduction

Les développements de la théorie dynamique des rayons X pour les cristaux parfaits ont conduit à introduire la notion de champ d'ondes. Darwin, Ewald (1917), puis Laue (1931, 1960) ont montré qu'une onde incidente plane de polarisation donnée et de vecteur  
 $\vec{OM} = \mathbf{K}_0^{(\omega)}$  donnait naissance à l'intérieur du cristal à quatre ondes groupées en deux champs

d'ondes; chaque champ d'ondes est constitué par la superposition de deux ondes planes  $\psi_h$  et  $\psi_0$  inséparables, dont les vecteurs d'onde se déduisent l'un de l'autre par translation du réseau réciproque. Les vecteurs d'onde  $\mathbf{K}_h$  et  $\mathbf{K}_0$  menés des noeuds  $H$  et  $O$  du réseau réciproque qui se trouvent sur la sphère d'Ewald, ont donc même extrémité  $P$ ; lorsque l'écart à l'incidence de Bragg de l'onde plane incidente varie,  $P$  décrit la surface de dispersion, surface à deux nappes.

Pour une incidence donnée, les points  $P_1$  et  $P_2$  caractéristiques des deux champs d'ondes sont à l'intersection de chacune des deux nappes de la surface de dispersion et de la normale  $Mz$  à la face d'entrée passant par  $M$  et les directions de propagation des deux champs d'ondes sont les normales à la surface de dispersion en  $P_1$  et  $P_2$ .

Par ailleurs, Kato (1961) a montré que lorsque l'onde incidente est une onde sphérique (ce qui correspond mieux que l'onde plane à l'onde émise par le foyer d'une anticathode), l'amplitude de l'onde en un point  $p$  à l'intérieur du cristal est encore la somme de deux champs d'ondes; mais les points caractéristiques  $P_1$  et  $P_2$  de ces deux champs d'ondes sont alors conjugués sur la surface de dispersion et tels que les normales  $\mathbf{v}_1$  et  $\mathbf{v}_2$  en  $P_1$  et  $P_2$  soient parallèles à  $Ap$ ,  $A$  étant le point de la face d'entrée pour lequel les conditions de Bragg sont rigoureusement satisfaites. Dans ces deux cas particuliers (onde incidente plane et onde incidente sphérique), il est donc possible de décrire l'amplitude se propageant dans le cristal comme la superposition de deux champs d'ondes. L'existence physique de ces deux champs d'ondes est d'ailleurs attestée par un certain nombre d'expériences. Authier (1961) a réussi à séparer effectivement les deux champs d'ondes excités par une même onde plane incidente. De plus, il est possible de faire interférer ces deux champs d'ondes; on obtient alors des franges dites de Pendellösung, suivant la terminologie d'Ewald qui en a fait la théorie (Ewald, 1916). Ces franges ont été mises en évidence expérimentalement par Malgrange & Authier (1965) dans le cas d'une onde plane et par Kato & Lang (1959) dans le cas d'une onde incidente sphérique. En outre, Borrmann a montré que les deux champs d'ondes étaient inégalement absorbés par le cristal (Borrmann, 1954).

Par contre, lorsqu'on cherche l'amplitude se propageant dans un cristal sur lequel tombe une onde de forme quelconque, on est obligé d'abandonner la représentation sous forme de deux champs d'ondes, et les notions de points caractéristiques et de surface de dispersion. En effet, le cas général d'une onde incidente quelconque ne peut être traité que par la théorie de Takagi (1962). Or Takagi a montré que l'amplitude en un point du cristal est bien la somme de deux ondes inséparables  $\psi_0$  et  $\psi_h$  de vecteurs d'ondes d'origine  $O$  et  $H$ ; mais les équations différentielles de la théorie de Takagi régissent les variations de  $\psi_0$  et  $\psi_h$ , considérés globalement; il devient impossible de faire apparaître une décomposition de chacune des ondes  $\psi_0$  et  $\psi_h$  en deux ondes constituantes.

On perd ainsi le support géométrique de la surface de dispersion et il est alors difficile d'interpréter physiquement par cette théorie les expériences citées plus haut qui mettent en évidence l'existence de la superposition de deux champs d'ondes dans les cas particuliers d'une onde incidente sphérique ou plane.

L'objet de cet article est de montrer qu'il est possible d'étendre la notion de champs d'ondes au cas d'une

onde incidente quelconque. Nous montrerons que la solution des équations différentielles de Takagi régissant  $\psi_0$  (ou  $\psi_h$ ), compte tenu des conditions aux limites imposées par la face d'entrée plane du cristal, est obligatoirement la somme de deux termes.

## 2, Expression de l'onde excitée dans le cristal par une onde incidente quelconque

### 2.1. Rappel des équations de Takagi

Takagi cherche une solution de l'équation de propagation d'une onde électromagnétique dans un milieu triplement périodique. Il montre que dans le cas à deux faisceaux (cas où seulement deux noeuds  $O$  et  $H$  du réseau réciproque se trouvent au voisinage de la sphère d'Ewald, le champ électromagnétique peut être représenté, pour chacune des deux directions possibles de polarisation de l'onde incidente, par un champ scalaire de la forme:

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_h(\mathbf{r}) \exp(-2\pi i \mathbf{K}_h \cdot \mathbf{r}) + \psi_0(\mathbf{r}) \exp(-2\pi i \mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{r}) \quad (1)$$

où  $\psi_h(\mathbf{r})$  et  $\psi_0(\mathbf{r})$  sont des fonctions complexes, lentement variables du vecteur de position  $\mathbf{r}$  et où  $\mathbf{K}_h = \mathbf{K}_0 - \mathbf{h}$ ,  $\mathbf{h}$  étant le vecteur  $\overrightarrow{OH}$  du réseau réciproque;  $\mathbf{K}_0$  est choisi de la façon suivante:

$\mathbf{K}_0$  a même composante tangentielle par rapport à la face d'entrée que le vecteur d'onde  $\mathbf{k}_0$  de l'onde incidente, écrite par Takagi sous la forme:

$$\psi_0^{(a)} = \psi_0^{(a)}(\mathbf{r}) \exp(-2\pi i \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}) \quad (2)$$

$\mathbf{K}_0$  a pour module  $|\mathbf{K}_0| = k_n$  où  $n$  est l'indice de réfraction et  $k = 1/\lambda$ , le nombre d'ondes dans le vide.

Son extrémité est le point de Lorentz  $Lo$ , c'est-à-dire que  $\mathbf{K}_0$  satisfait rigoureusement aux conditions de Bragg (Fig. 1).

Dans le cas à deux faisceaux, Takagi a montré que les fonctions  $\psi_0(\mathbf{r})$  et  $\psi_h(\mathbf{r})$  satisfont au système d'équations aux dérivées partielles:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \psi_0(\mathbf{r})}{\partial s_0} &= -i\pi k C \chi_{\bar{h}} \psi_h(\mathbf{r}) \\ \frac{\partial \psi_h(\mathbf{r})}{\partial s_h} &= -i\pi k C \chi_h \psi_0(\mathbf{r}) \end{aligned} \right\} (3)$$

où  $C=1$  ou  $\cos 2\theta$  suivant l'état de polarisation de l'onde incidente ( $\theta$  angle de Bragg).

$s_0$  et  $s_h$  sont les coordonnées dans les directions incidente et réfléchie respectivement.

$\chi_h$  est le deuxième terme du développement en série de Fourier de la susceptibilité électrique:  $\chi = \chi_0 + \chi_h \exp(-2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{r})$

$$\chi_{\bar{h}} = \bar{\chi}_h$$

Dans le cas d'un cristal parfait, le système (3) peut être transformé en un système d'équations différentielles

elles du deuxième ordre indépendantes :

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi_0}{\partial s_0 \partial s_h} + \pi^2 k^2 C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}} \psi_0 &= 0 \\ \frac{\partial^2 \psi_h}{\partial s_0 \partial s_h} + \pi^2 k^2 C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}} \psi_h &= 0 \end{aligned} \right\} (4)$$

2.2. Résolution des équations de Takagi par la méthode des solutions élémentaires

Nous ne nous occuperons désormais que de l'onde  $\psi_h$ ,  $\psi_0$  étant régi par la même équation différentielle (mais avec des conditions aux limites différentes).

Le problème n'est complètement posé que lorsqu'on a joint à l'équation :

$$\frac{\partial^2 \psi_h}{\partial s_0 \partial s_h} + \pi^2 k^2 C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}} = 0 \quad (5)$$

les conditions aux limites imposées à  $\psi_h$ . Ce sont : sur la face d'entrée du cristal (un point de cette surface étant repéré par un vecteur noté  $\mathbf{r}^s$ ) :

$$\psi_h(\mathbf{r}^s) = 0 \text{ et d'après (2):}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi_h}{\partial s_h}(\mathbf{r}^s) &= -i\pi k C \chi_h \psi_0(\mathbf{r}^s) \\ &= -i\pi k C \chi_h \psi_0^{(0)}(\mathbf{r}^s) \end{aligned} \quad (6)$$

$\frac{\partial \psi_h}{\partial s_0}(\mathbf{r}^s) = \frac{\gamma_0}{\gamma_h} \cdot \frac{\partial \psi_h}{\partial s_h}(\mathbf{r}^s)$  car  $\psi_h$  ne doit pas varier le long de la face d'entrée du cristal.

$$\frac{\partial \psi_h}{\partial x} = 0 \text{ (Fig.2)}$$

$-\psi_h = 0$  et  $\nabla \psi_h = 0$  à l'infini.

Le problème de la résolution de (5), compte tenu des conditions (6), est celui de la résolution d'une équation aux dérivées partielles hyperbolique homogène avec conditions aux limites homogènes. Takagi effectue cette résolution à l'aide de la fonction auxiliaire de Riemann et obtient  $\psi_h$  sous forme d'une intégrale. Notre but étant de faire apparaître la décomposition de  $\psi_h$  en deux termes indépendants, nous avons cherché à résoudre l'équation (5) en utilisant le résultat général de la théorie des équations aux dérivées partielles d'après lequel les solutions d'une équation différentielle d'ordre  $n$  forment un espace vectoriel à  $n$  dimensions et peuvent donc s'écrire sous forme de combinaison linéaire des  $n$  vecteurs de base de cet espace (voir Schwartz, 1966).

La résolution de l'équation (5) s'effectue alors de la façon suivante :

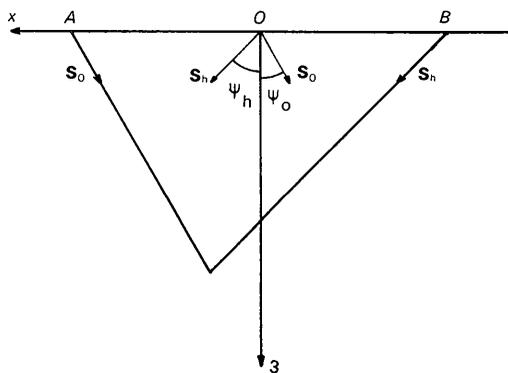


Fig. 2. Dispositions relatives des axes de coordonnées utilisés.  $\gamma_0 = \cos \psi_0$ ,  $\gamma_h = \cos \psi_h$ .

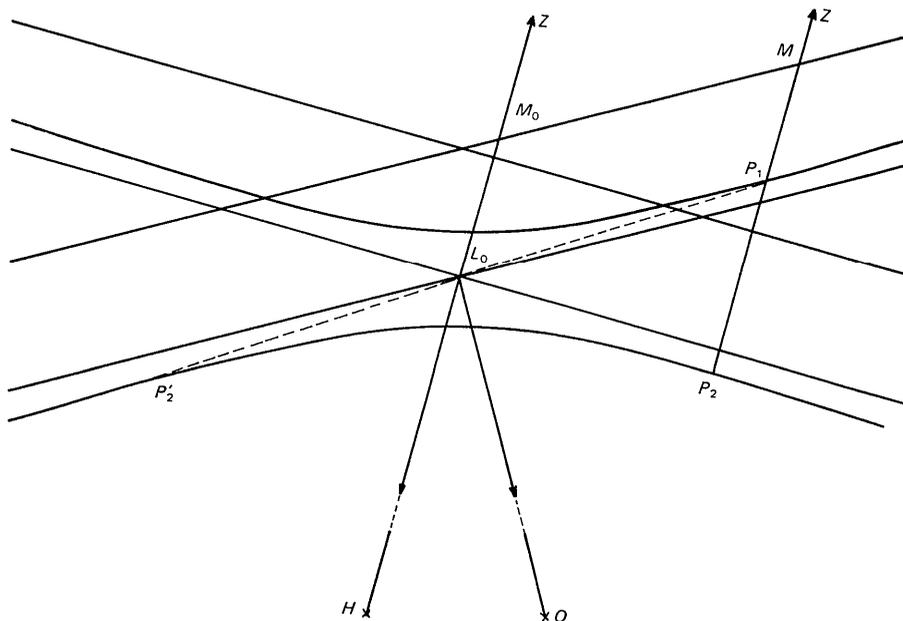


Fig. 1. Les vecteurs d'ondes utilisés par Takagi sont :  $\vec{K}_0 = \vec{OL}_0$  et  $\vec{K}_h = \vec{HL}_0$ . Le vecteur  $\mathbf{k}_0$  de l'équation (2) est  $\vec{k}_0 = \vec{OM}_0$  ayant même composante tangentielle que  $\vec{K}_0$ .

1. Conformément à la méthode indiquée par Hadamard (1964), nous transformons d'abord l'équation hyperbolique (5) en une équation elliptique (l'intérêt de cette transformation apparaîtra dans la deuxième étape).

Par le changement de variables

$$\left. \begin{aligned} \gamma_h(X+iY) &= s_0 \\ \gamma_o(X-iY) &= s_h \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

où  $\gamma_0 = \cos \psi_0$ ,  $\gamma_h = \cos \psi_h$  (Fig. 2), l'équation (5) devient :

$$\frac{\partial^2 \psi_h}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \psi_h}{\partial Y^2} + \sigma^2 \psi_h = 0 \quad (8)$$

avec

$$\sigma = 2\pi k C \sqrt{\chi_h \chi_h} \sqrt{\gamma_0 \gamma_h}.$$

Les conditions aux limites portent alors sur la courbe  $\Gamma$  constituée :

(a) de la droite  $X=0$ , transformée par (7) de la face d'entrée du cristal ( $z=0$ ); [sur cette droite, les conditions imposées sont :

$$\begin{aligned} \psi_h(O, Y) &= 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial \psi_h}{\partial Y}(0, Y) = 0 \\ \frac{\partial \psi_h}{\partial X}(0, Y) &= -2\pi i k C \chi_h \gamma_0 \psi_0(0, Y) \end{aligned} \quad (9)$$

ce qui s'exprime encore en disant que le gradient de  $\psi_h$  normalement à  $\Gamma$  est  $-2\pi i k C \chi_h \gamma_0 \psi_0(0, Y)$ .

(b) d'autre part, du demi cercle de rayon infini situé du côté des  $X > 0$  où  $\psi_h = 0$  et  $\nabla \psi_h = 0$ .

Dans le plan  $X, Y$ , nous devons maintenant chercher la solution d'une *équation elliptique homogène* du second ordre avec des conditions aux limites *inhomogènes*. On sait, d'après la théorie générale des équations aux dérivées partielles (voir par exemple, Morse & Feshbach, p. 795), que cette solution est équivalente à celle de la même *équation elliptique inhomogène* avec conditions aux limites *homogènes*. Plus précisément, la solution cherchée est la solution de l'équation :

$$\frac{\partial^2 \psi_h}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \psi_h}{\partial Y^2} + \sigma^2 \psi_h = 4\pi \varrho(X_0, Y_0) \quad (8')$$

où

$$4\pi \varrho(X_0, Y_0) = (\nabla \psi_h \cdot \mathbf{n})_{X=0}$$

avec conditions homogènes sur  $\Gamma$ .

Autrement dit, la condition aux limites inhomogène  $(\nabla \psi_h \cdot \mathbf{n}) \neq 0$  en certains points de  $\Gamma$  peut être remplacée par une distribution de charges de densité

$$\frac{1}{4\pi} (\nabla \psi_h \cdot \mathbf{n})_{X=0} \text{ placée sur la droite } X=0$$

2. Une telle équation se résoud par la méthode des *solutions élémentaires* (Hadamard, 1964; Schwartz, 1966).

On appelle solution élémentaire  $e(\mathbf{R}-\mathbf{R}_0)$  d'un opérateur différentiel  $D$  relativement au point  $\mathbf{R}_0$  toute solu-

tion de l'équation homogène

$$De(\mathbf{R}-\mathbf{R}_0) = 4\pi \delta(\mathbf{R}_0)$$

$\delta$  distribution de Dirac et on démontre (Schwartz, 1966 p. 137 et 143) que lorsque  $D$  est un opérateur *elliptique* (d'où l'intérêt du changement de variables ci-dessus), la solution générale de l'équation inhomogène  $D\psi(\mathbf{R}) = 4\pi \varrho(\mathbf{R}_0)$  est obtenue par convolution de la fonction de point  $\varrho(\mathbf{R}_0)$  et d'une solution élémentaire (ou d'une combinaison linéaire de solutions élémentaires). Autrement dit, les solutions élémentaires d'une équation elliptique forment une base pour l'espace vectoriel des solutions de cette équation.

La recherche des solutions élémentaires de (8') est donc le préalable nécessaire à sa résolution.

Une solution élémentaire de (8') est telle que

$$\frac{\partial^2 e}{\partial X^2}(\mathbf{R}-\mathbf{R}_0) + \frac{\partial^2 e}{\partial Y^2}(\mathbf{R}-\mathbf{R}_0) + \sigma^2 e(\mathbf{R}-\mathbf{R}_0) = 4\pi \delta(\mathbf{R}_0)$$

$$\text{où } |\mathbf{R}| = \sqrt{X^2 + Y^2}, \quad |\mathbf{R}_0| = \sqrt{X_0^2 + Y_0^2}.$$

La fonction  $e$  doit donc représenter le champ créé en  $\mathbf{R}$  par une source unité placée en  $\mathbf{R}_0$ . On sait (voir Sommerfeld, 1964 p. 47) que toute fonction du type :

$$U(X, Y) \log [\sigma \sqrt{(X-X_0)^2 + (Y-Y_0)^2}] + V(X, Y)$$

où  $U(X, Y)$  et  $V(X, Y)$  sont des fonctions régulières telles que  $U(X, Y) \rightarrow \pm 2$  lorsque  $X \rightarrow X_0$  et  $Y \rightarrow Y_0$ , convient.

Les solutions élémentaires de (8') doivent, en outre, s'annuler à l'infini, ce qui impose de choisir pour  $e$  les fonctions

$$i\pi H_0^1[\sigma|\mathbf{R}-\mathbf{R}_0|] \quad \text{et} \quad i\pi H_0^2[\sigma|\mathbf{R}-\mathbf{R}_0|]$$

(Morse & Feshbach, 1953);  $H_0^1$  et  $H_0^2$  étant les fonctions de Hankel d'indice zéro et d'ordres 1 et 2. La fonction  $i\pi H_0^1[\sigma|\mathbf{R}-\mathbf{R}_0|]$  représente une onde cylindrique convergente en  $\mathbf{R}_0$ . Ces fonctions sont linéairement indépendantes et forment une base pour l'espace vectoriel des solutions de l'équation (8).

2.3. *Expression de la solution générale de l'équation (8) ou (8')*

La solution générale de l'équation (8) est donnée par le produit de convolution

$$\begin{aligned} \psi_h(\mathbf{R}) &= \psi_h(X, Y) \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{\partial \psi_h}{\partial X}(\mathbf{R}) * \{A i\pi H_0^1(\sigma \mathbf{R}) + B i\pi H_0^2(\sigma \mathbf{R})\} \end{aligned} \quad (10)$$

où  $\frac{\partial \psi_h}{\partial X}(\mathbf{R})$  est une distribution qui n'a de valeurs non

nulles qu'aux points  $R^S(0, Y^S)$  de la droite  $X=0$  (transformée de la face d'entrée).

Cette relation de convolution entre fonctions s'écrit sous forme intégrale:

$$\begin{aligned} \psi_h(X, Y) = & \frac{1}{4\pi} \int_{X=0} \frac{\partial \psi_h}{\partial X}(0, Y^S) \\ & \times \{A i\pi H_0^1[\sigma \sqrt{X^2 + (Y - Y^S)^2}] \\ & + B i\pi H_0^2[\sigma \sqrt{X^2 + (Y - Y^S)^2}]\} dY^S. \end{aligned}$$

Les constantes  $A$  et  $B$  sont déterminées par le fait que  $\psi_h(X, Y)$  doit être régulière par  $X=0$ . Compte tenu des formes asymptotiques des fonctions  $H_0^1$  et  $H_0^2$  lorsque leur argument tend vers 0, il faut que  $A=B=1$ .

$$\begin{aligned} \psi_h(X, Y) = & \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \psi_h}{\partial X}(0, Y^S) i\pi \\ & \times H_0^1[\sigma \sqrt{X^2 + (Y - Y^S)^2}] dY^S \\ & + \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \psi_h}{\partial X}(0, Y^S) i\pi \\ & \times H_0^2[\sigma \sqrt{X^2 + (Y - Y^S)^2}] dY^S. \end{aligned} \quad (11)$$

Pour obtenir l'expression de  $\psi_h$  en fonction des variables physiques  $s_0$  et  $s_h$ , il suffit alors de remplacer  $X$  et  $Y$  par leurs expressions en  $s_0$  et  $s_h$  données par (7). En particulier  $|\mathbf{R} - \mathbf{R}^S| = \sqrt{s_0 s_h / \gamma_0 \gamma_h}$ . Voir Appendice.

*Remarque 1.* Ce résultat est analogue à celui qu'on obtiendrait en appliquant le théorème de Green à la résolution de (8) à condition d'admettre pour fonction de Green du problème la fonction:  $i\pi H_0^1(\sigma|\mathbf{R} - \mathbf{R}^S|) + i\pi H_0^2(\sigma|\mathbf{R} - \mathbf{R}^S|)$ . Or, dans le cas d'une surface limite plane, on sait que la fonction de Green s'obtient par la méthode des images (Morse & Feshbach, p. 812). On peut donc considérer  $i\pi H_0^1(\sigma|\mathbf{R} - \mathbf{R}^S|)$  comme l'onde envoyée du point  $P(\mathbf{R})$  au point  $\mathbf{R}^S$ . L'image de  $P$  dans la droite  $X=0$  est un point  $P'(-X, Y)$  dont le vecteur de position est  $\mathbf{R}'$  et  $i\pi H_0^2(\sigma|\mathbf{R}' - \mathbf{R}^S|) = i\pi H_0^2(\sigma|\mathbf{R} - \mathbf{R}^S|)$  doit alors être considérée comme l'onde envoyée par  $P'$  en  $\mathbf{R}^S$ .

*Remarque 2.* L'expression (11) de la solution générale de l'équation (5) est identique à l'expression obtenue par Takagi à l'aide de la fonction de Riemann. Fondamentalement, cela tient au fait que la fonction de Riemann de l'équation (5) est directement liée aux solutions élémentaires de (8). (Voir Appendice).

### 3. Champs d'ondes généralisés

#### 3.1. Notion de champs d'ondes généralisés

Les expressions (10) et (11) de  $\psi_h(X, Y)$  montrent que quelle que soit la distribution d'amplitude sur la face d'entrée du cristal,  $\psi_h(X, Y)$  est toujours la somme de deux termes obtenus par convolution avec les deux solutions élémentaires de l'équation elliptique (8)

$i\pi H_0^1$  et  $i\pi H_0^2$  qui, elles, sont indépendantes de la forme de l'onde incidente. Nous conviendrons d'appeler *champs d'ondes généralisés* 1 le produit de convolution

$$\left. \begin{aligned} \psi_{h_1} = & \frac{1}{4\pi} \frac{\partial \psi_h}{\partial X}(\mathbf{R}) * H_0^1(\sigma \mathbf{R}) \\ & \text{(associé au terme } \psi_{01} \text{ correspondant)} \\ & \text{et champ d'ondes généralisé 2 le produit} \\ \psi_{h_2} = & \frac{1}{4\pi} \frac{\partial \psi_h}{\partial X}(\mathbf{R}) * H_0^2(\sigma \mathbf{R}). \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

On voit que l'existence de deux termes composant  $\psi_h(X, Y)$  donc des deux champs d'ondes généralisés, est liée à la nature même de l'équation (8), donc, en dernière analyse, à la nature même de la propagation des ondes électromagnétiques dans un cristal. Mathématiquement ceci peut se formuler ainsi: c'est parce que les solutions d'une équation différentielle aux dérivées partielles du deuxième ordre forment un sous-espace vectoriel à deux dimensions dans l'espace des distributions que  $\psi_h(X, Y)$  est une somme de deux termes du type (10).

Ce résultat peut se généraliser au cas dit à  $n$  faisceaux (cas où  $n$  points du réseau réciproque se trouvent au voisinage de la sphère d'Ewald). Dans ce cas, on obtient par la théorie de Takagi un système de  $n$  équations différentielles du premier ordre analogue à (3) portant sur  $n$  fonctions inconnues; ce système peut être transformé en  $n$  équations d'ordre  $n$  indépendantes. Les solutions de chacune de ces équations forment un espace vectoriel en général d'ordre  $n$  et la solution générale de chacune des équations indépendantes est une combinaison linéaire de  $n$  vecteurs de base de cet espace.

Ainsi dans le cas à trois faisceaux, on obtient trois champs d'ondes généralisés. En fait, comme il faut tenir compte des deux directions possibles de polarisation de l'onde incidente ( $\sigma = 2\pi k C \sqrt{\chi_h \chi_h} \sqrt{\gamma_0 \gamma_h}$  dépend

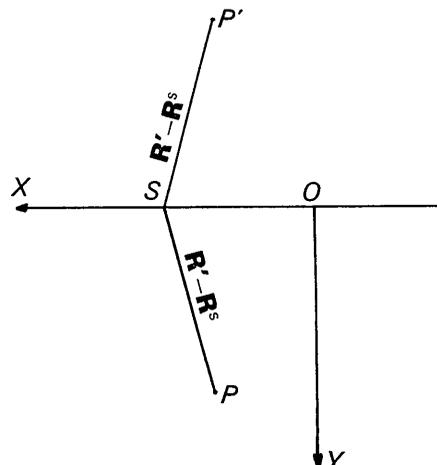


Fig. 3. Système d'axes utilisé.  $\vec{OS} = \mathbf{R}^S$ ;  $R^S = \sqrt{X^2 + Y^2}$ ;  $\vec{OP} = \mathbf{R}$ ;  $\sqrt{X^2 + Y^2} = R$ .

du facteur de polarisation  $C$ ) on obtient six champs d'ondes généralisés.

Revenant au cas à deux faisceaux, la remarque 1 ci-dessus nous permet, en outre, de donner une interprétation physique de ces résultats: compte tenu de l'existence d'une surface de discontinuité plane (la face d'entrée), à toute onde se propageant d'un point de la face d'entrée  $\mathbf{R}^S$  vers  $P(\mathbf{R})$ , le long de la direction  $\mathbf{R}-\mathbf{R}^S$ , il faut associer une onde 'réfléchie' se propageant le long de la direction  $\mathbf{R}'-\mathbf{R}^S$ ; en un point du cristal on doit donc toujours considérer la superposition de deux ondes (Fig. 3).

3.2. Propriétés des champs d'ondes généralisés—Absorption

Si on fait varier la forme de l'onde tombant sur la face d'entrée du cristal, les champs d'ondes généralisés correspondants ont en commun d'être obtenus par convolution d'une même fonction  $H_0^1$  (resp.  $H_0^2$ ) avec une fonction variable. Ceci détermine les propriétés communes à tous les champs d'ondes.

En particulier les champs d'ondes généralisés présentent le phénomène d'absorption anormale mis en évidence par Borrmann pour les champs d'ondes excités par une onde incidente plane.

En effet, lorsque le cristal considéré est absorbant,  $\chi_h$  est complexe et  $\sigma$  peut se mettre sous la forme  $\sigma = \sigma_r + i\sigma_i$ .

Par ailleurs,

$$L = |\mathbf{R} - \mathbf{R}^S| = \sqrt{\frac{[s_0(P) - s_0(S)][s_h(P) - s_h(S)]}{\gamma_0 \gamma_h}}$$

est proportionnel à la profondeur  $z$  du point  $P$ .

Pour des épaisseurs suffisamment grandes

$$H_0^1(\sigma L) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi(\sigma_r + i\sigma_i)L}} \exp(i\sigma_r L) \exp(-i\pi/4) \exp(-\sigma_i L),$$

et

$$H_0^2(\sigma L) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi(\sigma_r + i\sigma_i)L}} \exp(-i\sigma_r L) \exp(i\pi/4) \exp(\sigma_i L).$$

Si on reporte ces expressions dans (12), on voit que l'absorption subie par  $\psi_{h1}$  est supérieure à l'absorption photoélectrique normale, celle subie par  $\psi_{h2}$  lui est inférieure et ceci quelle que soit l'onde incidente considérée. N.B. La numérotation des champs d'ondes est ici imposée par l'ordre des fonctions de Hankel ( $\psi_{h1}$  correspond à  $H_0^1$ ). Elle est l'inverse de celle qui est habituellement utilisée.

3.3. Exemples de calcul de champs d'ondes généralisés (1) Cas d'une onde incidente plane

Nous supposons que l'amplitude de l'onde incidente est égale à l'unité

$$\psi_{0p}^{(a)} = \exp(-2\pi i \mathbf{K}_0^{(a)} \cdot \mathbf{r}).$$

$\mathbf{K}_0^{(a)}$  est le vecteur d'onde dans le vide  $\mathbf{K}_0^{(a)} = \overrightarrow{OM}$  (Fig. 1). Cette onde doit être écrite sous une forme identique à (2):

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

$\psi_0^{(a)}(\mathbf{r})$  est alors donné par:

$$\begin{aligned} \psi_0^{(a)}(\mathbf{r}) &= \exp[-2\pi i(\mathbf{K}_0^{(a)} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{r}] \\ &= \exp[-2\pi i \Delta T(x - \frac{\alpha_0}{\gamma_0} z)] \end{aligned}$$

où  $\Delta T$  est un paramètre proportionnel à l'écart de l'incidence de Bragg ( $\Delta\theta - \Delta\theta_0$ ) de l'onde incidente:  $\Delta T = k\gamma_0(\Delta\theta - \Delta\theta_0)$ .

Dans le système  $(X, Y)$ ,  $\psi_0^{(a)}(\mathbf{r})$  s'écrit pour un point  $(0, Y^S)$  de la transformée de la face d'entrée.

$$\psi_0^{(a)}(0, Y^S) = \exp[-2\pi i(-i\Delta T \sin 2\theta Y^S)] = \exp(i\tau Y^S)$$

avec  $\tau = 2\pi i \Delta T \sin 2\theta$

$$\frac{\partial \psi_h}{\partial X}(0, Y^S) = 2\pi i k C \chi_h \gamma_0 \exp(i\tau Y^S).$$

Les champs d'ondes généralisés sont:

$$\begin{aligned} \psi_{h1}(X, Y) &= \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} (-2\pi i k C \chi_h \gamma_0) \\ &\quad \exp(i\tau Y^S) \{i\pi H_0^1[\sigma \sqrt{X^2 + (Y - Y^S)^2}]\} dY^S \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \psi_{h2}(X, Y) &= \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} (-2\pi i k C \chi_h \gamma_0) \\ &\quad \exp(i\tau^S) \{i\pi H_0^2[\sigma \sqrt{X^2 + (Y - Y^S)^2}]\} dY^S. \end{aligned}$$

Les fonctions  $H_0^1$  et  $H_0^2$  peuvent être développées en ondes planes  $\exp[i\mathbf{K}(\mathbf{R} - \mathbf{R}^S)]$  de vecteurs d'ondes  $\mathbf{K}$  ( $|\mathbf{K}| = \sqrt{K_x^2 + K_y^2}$ ) quelconques.

$$\begin{aligned} i\pi H_0^1[\sigma|\mathbf{R} - \mathbf{R}^S|] &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dK_x \int_{-\infty}^{+\infty} dK_y \\ &\quad \times \frac{\exp[i\mathbf{K}(\mathbf{R} - \mathbf{R}^S)]}{K^2 - \sigma^2} \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dK_x \exp(iK_x X) \int_{-\infty}^{+\infty} dK_y \\ &\quad \times \frac{\exp[i\mathbf{K}_y(Y - Y^S)]}{K_x^2 + K_y^2 - \sigma^2} \psi_{h1} \\ &= \frac{-2\pi i k C \chi_h \gamma_0}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dK_x \exp(iK_x X) \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{+\infty} dK_y \frac{\exp(iK_y Y)}{k^2 - 2} \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[i(\tau - K_y) Y^S] dY^S. \end{aligned}$$

Soit, en appliquant aux intégrales en  $Y^S$  et en  $K_y$  le théorème intégral de Fourier:

$$\psi_{h1} = \frac{+2\pi ik C \chi_h \gamma_0}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dK_x \times \frac{\exp(iK_x X) \exp(i\tau Y)}{\sigma^2 - \tau^2 - K_x^2} \cdot (2\pi).$$

Cette intégrale se calcule par la méthode des résidus. Comme  $H_0^1$  doit représenter une onde divergente et étant donné que  $X$  est toujours  $> 0$ , nous pouvons prendre comme chemin d'intégration le contour  $C_1$  de la Fig. 4, fermé dans le demi plan supérieur par un demi cercle de rayon infini.

$$\psi_{h1} = ik C \chi_h \gamma_0 (2\pi i) \exp(i\sqrt{\sigma^2 - \tau^2}) \exp(i\tau Y) \frac{1}{2\sqrt{\sigma^2 - \tau^2}}.$$

Soit en introduisant le paramètre

$$\eta = \frac{\Delta T \sin 2\theta}{k\sqrt{\gamma_0 \gamma_h} C \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}} = \frac{\Delta T \sin 2\theta}{\gamma_0 \gamma_h}$$

utilisé par Authier (1961):

$$\psi_{h1}(x, z) = -\frac{1}{2} \frac{C}{|C|} \frac{\chi_h}{\sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}} \sqrt{\frac{\gamma_0}{\gamma_h}} \exp i\pi \frac{z}{\Delta} \sqrt{1 + \eta^2} \times \frac{\exp[-2\pi i \Delta T(x - \frac{\alpha_0}{\gamma_0} z)]}{1 + \eta^2} \quad (13a)$$

De même

$$\psi_{h2}(x, z) = \frac{1}{2} \frac{C}{|C|} \frac{\chi_h}{\sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}} \sqrt{\frac{\gamma_0}{\gamma_h}} \exp -i\pi \frac{z}{\Delta} \sqrt{1 + \eta^2} \times \frac{\exp[-2\pi i \Delta T(x - \frac{\alpha_0}{\gamma_0} z)]}{\sqrt{1 + \eta^2}} \quad (13b)$$

Les expressions (13a) et (13b) sont celles données par la théorie dynamique classique.

(2) Cas d'une onde incidente sphérique

L'onde incidente (d'amplitude unité) s'écrit (voir Authier & Simon, 1968):

$$\psi_0^{(a)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi r_0} \exp[-i\pi k \frac{\gamma_0^2}{r_0} (x - x_0)^2] \times \exp(-2\pi i \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}).$$

La signification de  $x_0$  et  $r_0$  est indiquée sur la Fig. 5.  $r_0$  est considéré comme constant le long de la face d'entrée.

En coordonnées  $X, Y$ ,  $\psi_0^{(a)}$  s'écrit pour un point de la droite  $X=0$ :

$$\psi_0^{(a)}(0, Y^S) = \frac{1}{4\pi r_0} \exp[i\pi k \frac{\gamma_0^2}{r_0} \sin^2 2\theta (Y^S - Y_0)^2]$$

où

$$Y_0 = \frac{x_0}{i \sin 2\theta}$$

soit encore:

$$\psi_0^{(a)}(0, Y^S) = \frac{1}{4\pi r_0} \exp[i\pi a^2 (Y^S - Y_0)^2]$$

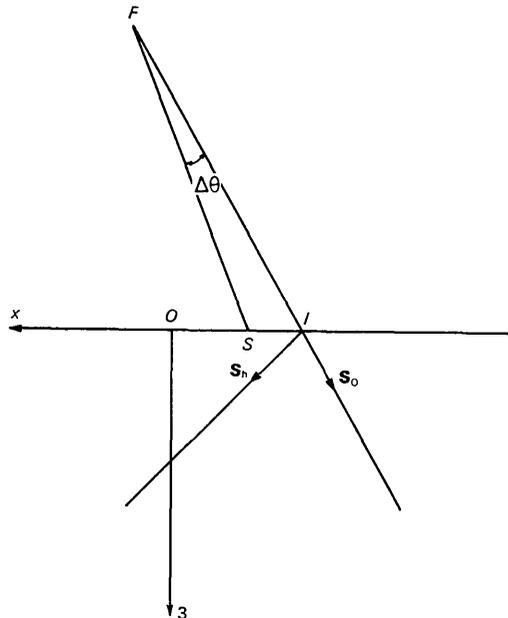


Fig. 5. Cas d'une onde incidente sphérique.  $\vec{OI} = x_0$ ,  $\vec{FI} = r_0$ ,  $\vec{OS} = x$ .

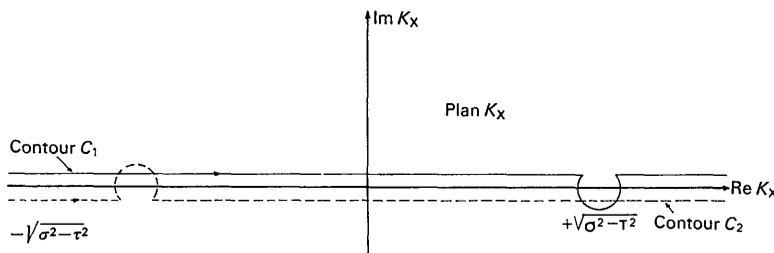


Fig. 4. L'intégration en  $K_x$  se fait dans le plan complexe le long du contour  $C_1$  fermé par un demi-cercle de rayon infini vers le haut pour  $\psi_{h1}$  et le long du contour  $C_2$  fermé par un demi-cercle de rayon infini vers le haut pour  $\psi_{h2}$ .

en posant :

$$a^2 = \frac{k\gamma_0^2}{r_0} \sin^2 2\theta.$$

On en déduit :

$$\frac{\partial \psi_h}{\partial X}(0, Y^S) = -2\pi i k C \chi_h \gamma_0 \frac{1}{4\pi r_0} \exp [i\pi a^2 (Y^S - Y_0)^2].$$

Comme précédemment, nous développerons les fonctions  $H_0^1$  et  $H_0^2$  en ondes planes  $\exp i\mathbf{K}(\mathbf{R} - \mathbf{R}^S)$ . Le champ d'ondes généralisé 1 s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \psi_{h1} &= \left(\frac{1}{4\pi}\right) (-2\pi i k C \chi_h \gamma_0) \left(\frac{1}{4\pi r_0}\right) \left(-\frac{1}{\pi}\right) \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} dK_x \exp(iK_x X) \int_{-\infty}^{+\infty} dK_y \frac{\exp(iK_y Y)}{\sigma^2 - K_x^2 - K_y^2} \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} dY^S \exp(-iK_y Y^S) \exp [i\pi a^2 (Y^S - Y_0)^2]. \end{aligned}$$

On sait que la transformée de Fourier d'un produit de fonctions est égale au produit de convolution de leurs transformées de Fourier, multiplié par  $\sqrt{2\pi}$  ; et que cette transformation est réciproque. Appliquant cette propriété au calcul des intégrales en  $K_y$  et  $K_x$ , on obtient :

$$\begin{aligned} \psi_{h1} &= -\frac{1}{2} \frac{1}{4\pi r_0} \exp i\pi/4\sqrt{kr_0} \frac{\chi_h C}{\sin 2\theta} \\ &\times H_0^1[\sigma\sqrt{(X^2 + (Y - Y_0)^2)}]. \end{aligned}$$

De même

$$\begin{aligned} \psi_{h2} &= -\frac{1}{2} \frac{1}{4\pi r_0} \exp i\pi/4\sqrt{kr_0} \frac{\chi_h C}{\sin 2\theta} \\ &\times H_0^2[\sigma\sqrt{(X^2 + (Y - Y_0)^2)}]. \end{aligned}$$

La somme de ces deux termes est à un facteur numérique près identique à l'expression donnée par Kato (1961).

#### 4. Conclusion

Nous venons de montrer que l'existence de champs d'ondes généralisés à l'intérieur du cristal est une conséquence directe de la nature de la propagation des rayons X dans les milieux triplement périodiques. Le nombre des champs d'ondes généralisés est égal au degré des équations différentielles régissant cette propagation. Dans le cas à deux faisceaux, on obtient donc deux champs d'ondes généralisés et ceci quelle que soit la forme de l'onde incidente dans le vide.

La méthode de résolution employée permet, en outre, de traiter d'autres problèmes de théorie dynamique, en particulier les problèmes de propagation dans des cristaux déformés. En effet, les équations différentielles à résoudre sont encore du type (5), (éventuellement avec un terme supplémentaire du premier ordre - Takagi, 1962) et peuvent donc encore être mises sous forme d'une équation elliptique du type (8) (où  $\sigma$

dépend du gradient de déformation). Les conditions aux limites (6) sont à remplacer par d'autres conditions spécifiques des problèmes à traiter. Mais, de toute façon, la solution générale est encore obtenue par convolution de fonctions dépendant de ces conditions aux limites avec les solutions élémentaires des équations mises sous forme elliptique.

Il est ainsi possible de traiter aussi les problèmes de diffraction par une fente ou un fil, placés à l'intérieur du cristal, c'est-à-dire des problèmes correspondant à des déformations à très fort gradient.

On sait (Balibar, 1968) que dans le cas d'une onde plane incidente dans le vide, il y a alors création de nouveaux champs d'ondes. De la même façon, pour une onde incidente dans le vide quelconque, l'effet de la diffraction par la fente ou le fil placés à l'intérieur du cristal sera de créer de nouveaux champs d'ondes généralisés. De plus, il serait intéressant d'étudier l'évolution des champs d'ondes généralisés lorsque le gradient de déformations devient de plus en plus fort et d'estimer pour quel ordre de grandeur des déformations il y a création de nouveaux champs d'ondes généralisés. Ceci doit permettre d'interpréter les images de dislocations obtenues par topographie.

Enfin, notons que la méthode des champs d'ondes généralisés permet de calculer la distribution d'intensité sur la place de sortie d'un cristal contenant un plan de faute.

Je remercie Monsieur Authier qui a suscité et dirigé ce travail et dont les conseils et l'aide constante m'ont permis de le mener à bien.

Je tiens également à remercier D. Simon pour ses suggestions.

#### APPENDICE

En revenant aux coordonnées  $s_0$  et  $s_h$  (Fig. 2), on retrouve l'expression de  $\psi_h$  donnée par Takagi (communication privée) et utilisée par Authier & Simon (1968).

En effet (11) devient :

$$\begin{aligned} \psi_h(P) &= \frac{\gamma_0 \psi_h}{\sin 2\theta} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial \psi_h}{\partial z}\right)_{z=0} \\ &\left\{ \frac{1}{2} H_0^1 \left[ \sigma \frac{\sqrt{(s_0(P) - s_0^S)(s_h(P) - s_h^S)}}{\sqrt{\gamma_0 \gamma_h}} \right] \right. \\ &\left. + \frac{1}{2} H_0^2 \left[ \sigma \frac{\sqrt{(s_0(P) - s_0^S)(s_h(P) - s_h^S)}}{\sqrt{\gamma_0 \gamma_h}} \right] \right\} dx, \end{aligned}$$

où  $s_0^S$  et  $s_h^S$  sont les coordonnées d'un point de la surface  $z=0$  d'abscisse  $x$ . Compte tenu de (6), et de la relation  $H_0^1(q) + H_0^2(q) = 2J_0(q)$ ,  $\psi_h$  s'écrit :

$$\begin{aligned} \psi_h(P) &= -\frac{i\pi k C \chi_h \gamma_0}{\sin 2\theta} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_h^{(q)}(x) \\ &J_0 \left[ 2\pi k |C| \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}} \frac{\sqrt{\gamma_0 \gamma_h}}{\sin 2\theta} \sqrt{l^2 - x^2} \right] dx \end{aligned}$$

avec  $l = OA = OB$  (Fig. 2).

Dans cette expression la fonction

$$J_0(B\sqrt{l^2 - x^2}) \left( B = 2\pi k C \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}} \frac{\sqrt{\gamma_0 \gamma_{\bar{h}}}}{\sin 2\theta} \right)$$

est la fonction de Riemann associée à l'équation (5). Cette fonction est liée aux solutions élémentaires de l'équation (8): en effet, on montre en théorie générale des équations aux dérivées partielles (Hadamard 1964, p. 182) que la fonction de Riemann n'est autre que le coefficient du logarithme dans la solution élémentaire mise sous forme:

$$U(X, Y) \log(\sigma|\mathbf{R} - \mathbf{R}_0|) + V(X, Y)$$

(voir paragraphe 2.2). Effectivement le développement des fonctions

$$i\pi H_0^1(\sigma|\mathbf{R} - \mathbf{R}_0|) \text{ et } i\pi H_0^2(\sigma|\mathbf{R} - \mathbf{R}_0|)$$

(pour  $\mathbf{R}$  voisin de  $\mathbf{R}_0$ ) donne:

$$i\pi H_0^1(\sigma|\mathbf{R} - \mathbf{R}_0|) = 2J_0(\sigma|\mathbf{R} - \mathbf{R}_0|) \log \frac{\sigma|\mathbf{R} - \mathbf{R}_0|}{2}$$

+ une fonction régulière de  $|\mathbf{R} - \mathbf{R}_0|$  et

$$i\pi H_0^2(\sigma|\mathbf{R} - \mathbf{R}_0|) = 2J_0(\sigma|\mathbf{R} - \mathbf{R}_0|) \log \frac{|\sigma\mathbf{R} - \mathbf{R}_0|}{2}$$

+ une fonction régulière de  $|\mathbf{R} - \mathbf{R}_0|$  (voir Morse & Feshbach, p. 627).

*Acta Cryst.* (1969). A25, 658

## Méthode Nouvelle de Construction des Groupes Magnétiques

By J. SIVARDIÈRE

*Laboratoire de Diffraction Neutronique, Centre d'Etudes Nucléaires, Boîte Postale 269, Grenoble, France*

(Reçu le 16 avril 1969)

The determination of real one-dimensional representations of a group is equivalent to the determination of its invariant subgroups of index two. This idea is used to construct and classify the magnetic space groups.

### Introduction

Soit  $G$  un groupe cristallographique; pour rechercher les groupes magnétiques qui s'en déduisent, deux méthodes peuvent être utilisées:

(1) On recherche tous les sous-groupes invariants  $H_\alpha$  d'indice 2 de  $G$  et on remplace les éléments du deuxième complexe par les antiopérateurs correspondants, d'où des groupes magnétiques  $G_\alpha$  isomorphes de  $G$ .

(2) On recherche toutes les représentations  $\Gamma_\alpha$  réelles et de dimension 1 de  $G$ , et on remplace les éléments ayant pour caractère  $-1$  par les antiopérateurs correspondants.

Les deux méthodes sont équivalentes puisque les représentations  $\Gamma_\alpha$  réelles et de dimension 1 ont pour noyaux les sous-groupes invariants  $H_\alpha$  d'indice 2. Si  $G$

Il faut noter que ce n'est que par hasard que la fonction de Riemann  $J_0$  est proportionnelle à la somme des deux solutions élémentaires du problème; il n'en est en général pas ainsi.

### Références

- AUTHIER, A. (1961). *Bull. Soc. Minér. Franç.* **84**, 51.  
 AUTHIER, A. & SIMON, D. (1968). *Acta Cryst.* A24, 517.  
 BALIBAR, F. (1968). *Acta Cryst.* A24, 667.  
 BORRMANN, G. (1954). *Z. Kristallogr.* **106**, 109.  
 EWALD, P. P. (1917). *Ann. Phys. Lpz.* **54**, 519.  
 EWALD, P. P. (1916). *Ann. Phys. Lpz.* **49**, 1, 117.  
 HADAMARD, J. (1964). *La Théorie des Équations aux Dérivées Partielles*, Pékin.  
 KATO, N. (1961). *Acta Cryst.* **14**, 526, 627.  
 KATO, N. & LANG, A. R. (1959). *Acta Cryst.* **12**, 249.  
 LAUE, M. VON (1931). *Naturwissenschaften*, **10**, 133.  
 LAUE, M. VON (1960). *Röntgenstrahl-Interferenzen*. Frankfurt am Main: Akademische Verlagsgesellschaft.  
 MALGRANGE, C. & AUTHIER, A. (1965). *C. R. Acad. Sci. Paris*, **261**, 3774.  
 MORSE, P. & FESHBACH, H. (1953). *Methods of Theoretical Physics*. New York.  
 SCHWARTZ, L. (1966). *Théorie des Distributions*, Paris.  
 SOMMERFELD, A. (1964). *Partial Differential Equations*. New York.  
 TAKAGI, S. (1962). *Acta Cryst.* **15**, 1311.

est un groupe ponctuel (Sivardière, 1969a), ces deux méthodes sont aussi simples l'une que l'autre; par contre si  $G$  est un groupe d'espace  $G_e$ , la deuxième méthode, développée ici, semble plus systématique que la première.

Dans une première partie, on recherche les représentations irréductibles des groupes d'espace réelles et de dimension 1; dans une deuxième partie, on en déduit une classification des groupes d'espace magnétiques; les résultats sont comparés à ceux de Opechowski et Guccione (1961); on envisage enfin, dans une troisième partie, le cas des groupes d'espace colorés.

### Principales notations utilisées

- $G_e$  Groupe d'espace.  
 $G$  Groupe ponctuel d'éléments  $\alpha$  (identité  $\varepsilon$ ).