

Creation de Nouveaux Champs d'Ondes Généralisés Dus à la Présence d'un Objet Diffractant à l'Intérieur d'un Cristal Parfait. II. Cas d'un Défaut Isolé*

PAR A. AUTHIER ET F. BALIBAR

*Laboratoire de Minéralogie-Cristallographie, associé au C.N.R.S. Faculté des Sciences,
9, quai St Bernard, Paris 5e, France*

(Reçu le 4 février 1970)

Takagi's equations of X-ray diffraction by an imperfect crystal are solved in the most general case by the method used in a previous paper in the particular case of a perfect crystal. It is shown that, for small strain gradients, the amplitude inside the crystal is the sum of two generalized wave fields obtained by convolution of the Hankel functions H_0^1 and H_0^2 with a 'source distribution' depending on local deformations. This is in agreement with the results given by other authors (Kato, Penning, Malgrange). This corresponds to the approximation of geometrical optics for X-ray propagation in crystals. A quantitative criterion of validity for this approximation is given. When this criterion is not fulfilled in some part of the crystal, the generalized wave-fields are diffracted. It is shown that this implies creation of new generalized wave-fields. This provides a physical interpretation of the occurrence of this phenomenon in the vicinity of a dislocation line and properties of the contrast of images in X-ray topography.

Introduction

Un des problèmes théoriques les plus importants en théorie dynamique des rayons X est celui de l'extension au cas de cristaux déformés de cette théorie, initialement formulée pour des cristaux parfaits. En effet, la technique de topographie par transmission, dite technique de Lang, permet maintenant d'obtenir des clichés représentant avec une très grande précision la distribution d'intensité sur la face de sortie d'un cristal contenant des défauts (en particulier des dislocations isolées); on voit ainsi apparaître une 'image' de ces défauts. L'interprétation de ces clichés rend nécessaire une meilleure compréhension théorique de la propagation des rayons X dans les cristaux contenant des zones fortement déformées et localisées.

Le problème de l'extension de la théorie dynamique aux cristaux contenant des déformations quelconques relève du problème plus général de la propagation d'une onde électromagnétique dans un milieu qui ne se reproduit pas identiquement à lui-même. Ce problème est traité de façon complète en optique des radiations visibles. On est amené à classer les variations des conditions de propagation en deux domaines: l'un correspondant à de faibles variations d'indice de réfraction le long du trajet des rayons lumineux et qui relève de l'optique géométrique et l'autre correspondant à des variations d'indice local plus brutales et qui relève de l'optique physique (ou optique ondulatoire) et de la théorie de la diffraction. La distinction entre ces deux optiques se fait sur la base du critère dit de validité de l'optique géométrique. On sait que tant que

l'optique géométrique reste valable, la propagation de l'énergie lumineuse est modifiée de façon continue par les variations locales d'indice; en particulier, le vecteur d'onde d'une onde plane est modulé en grandeur et en direction par les variations d'indice; néanmoins, la largeur d'un faisceau de rayons lumineux reste constante.

Certains auteurs (notamment Penning & Polder, 1961; Penning, 1966; Kambe 1963; Kato, 1963, 1964a, b) ont traité le problème de la propagation des rayons X dans les cristaux déformés par analogie avec l'optique géométrique. C'est ainsi que Penning étudie l'effet des déformations du cristal sur un paquet gaussien d'ondes planes. Le cristal est décomposé en petites zones à l'intérieur desquelles il est possible de considérer qu'une onde plane reste plane; en tenant compte du fait que l'écart à l'incidence de Bragg de cette onde varie d'une zone à l'autre, il est possible de suivre la propagation d'un faisceau étroit à l'intérieur du cristal déformé. Kambe, après avoir justifié théoriquement l'analogie optique utilisée par Penning, a calculé effectivement le trajet de l'énergie dans ces conditions et a montré que les rayons X 'contournent' les zones déformées. Cependant, il est évident que ce traitement cesse d'être valable dès que les déformations du milieu cristallin sont rapidement variables, la dimension des zones à l'intérieur desquelles le cristal peut être considéré comme parfait devenant infiniment petite. L'analogie avec l'optique géométrique est encore plus visible dans la méthode proposée par Kato: celui-ci écrit, pour la propagation des rayons X, un principe variationnel analogue au principe de Fermat; ce qui lui permet d'obtenir la phase de l'onde se propageant dans le cristal et la direction de propagation de l'énergie par l'intermédiaire de la fonction Eikonale. Ce traitement n'est évidemment justifié que dans les limites d'application

* Ce travail fait partie d'une thèse de doctoret d'Etat soutenue le 28 septembre 1969 par Mme F. Balibar enregistrée au C. N. R. S. sous le numéro A. O. 3538.

du principe de Fermat, c'est-à-dire tant que les variations des conditions de propagation sont faibles sur une longueur de trajet de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde ou encore tant que les phénomènes de diffraction n'interviennent pas. En résumé, les solutions proposées par Kato, Penning et Kambe cessent d'être valables dès que le gradient des déformations devient suffisamment grand et ne permettent de rendre compte de la propagation des rayons X que dans des cristaux faiblement déformés. Notons d'ailleurs que cette notion de *faible* déformation demande à être précisée quantitativement.

Par contre, Takagi (1962, 1969) et Taupin (1964, 1967) ont élaboré des théories suffisamment générales pour englober le cas de déformations quelconques. Les équations régissant l'amplitude de l'onde dans le cristal y sont obtenues à partir des équations de Maxwell. La seule hypothèse faite est la suivante: le cortège électronique entourant chaque atome déplacé n'est pas déformé mais est translaté de la même quantité que le centre de l'atome. Une telle théorie est l'analogue pour la propagation des rayons X dans les cristaux des équations de la théorie ondulatoire de la lumière, valables en dehors des limites de l'optique géométrique. Du fait de leur généralité, les théories de Takagi et Taupin sont moins faciles à manipuler que celles de Penning ou Kato. Cependant, elles permettent de calculer, à l'aide d'ordinateurs, l'amplitude se propageant dans un cristal contenant de fortes déformations (en particulier une dislocation isolée) (Taupin, 1967; Balibar & Authier, 1967). Les résultats obtenus sont en très bon accord avec les résultats expérimentaux donnés par les topographies par transmission.

Cependant il serait intéressant d'obtenir un moyen de résoudre analytiquement ces équations. Ceci permettrait d'abord d'éviter l'emploi d'ordinateurs. De plus, on peut espérer mettre ainsi en évidence le caractère physique des phénomènes mis en jeu par la propagation des rayons X dans les zones à fort gradient de déformation. C'est ce que nous nous sommes proposés de faire ici à propos des équations de Takagi.

Ces équations, issues directement des équations de Maxwell, doivent être considérées comme analogues à celles de l'optique ondulatoire. Il est donc logique de les résoudre par la méthode de Kirchhoff ou, ce qui revient au même, par application du principe de Huyghens.

Cela veut dire que l'amplitude de l'onde arrivant en un point doit être calculée en tant que somme de toutes les ondes arrivant en ce point et émises par les diverses sources d'une même surface d'onde, l'amplitude et la localisation de ces sources secondaires étant fonction des déformations du milieu.

Or, nous avons montré par ailleurs (Balibar, 1969) qu'il est possible, dans le cadre de la théorie dynamique de Takagi, de calculer l'amplitude de l'onde envoyée en un point du cristal par un point source unité situé dans le cristal et que cette amplitude est la solution

élémentaire de l'équation aux dérivées partielles proposée par Takagi.

Nous avons, en outre, montré que l'amplitude de l'onde, excitée par une onde incidente quelconque, en un point d'un cristal parfait, pouvait se calculer à l'aide de cette solution élémentaire. Cette amplitude est la somme des contributions en ce point des diverses sources d'une distribution répartie sur la face d'entrée du cristal et dépendant de la forme de l'onde incidente. Ceci nous a conduit à définir le concept de champ d'ondes généralisé, extension du concept classique de champ d'ondes, au cas où l'onde incidente sur le cristal n'est pas plane.

Nous nous proposons, dans cet article, d'appliquer cette méthode au calcul de l'onde en un point d'un cristal contenant des déformations quelconques. Nous montrerons d'abord qu'il est possible, pour ce calcul, de remplacer les déformations locales du cristal par une distribution de sources supplémentaires répartie dans tout le cristal. La contribution en un point de toutes les sources secondaires présentes dans le cristal et à sa surface nous donnera l'expression des champs d'ondes généralisés se propageant dans un cristal déformé. Nous montrerons que pour de très faibles gradients de déformations ces résultats sont identiques à ceux de Penning, Kambe ou Kato. Nous établirons un critère permettant de déterminer *quantitativement* pour quelles valeurs du gradient des déformations les traitements de Penning, Kambe et Kato cessent d'être valables. Ce critère est l'analogue, pour la propagation des rayons X dans les cristaux, du critère de validité de l'optique géométrique. Nous montrerons ensuite que lorsque ce critère n'est pas vérifié, il y a recréation de champ d'ondes généralisés au niveau de la zone fortement perturbée. Nous aurons ainsi mis en évidence la nature physique du phénomène de recréation de champ d'ondes invoqué (Authier, 1967) pour expliquer le contraste des images de dislocations: ce phénomène est un effet de la diffraction des champs d'ondes généralisés au niveau des zones à fort gradient de déformation.

Enfin, dans une dernière partie, nous appliquerons ces résultats généraux au calcul de l'amplitude en un point de la face de sortie d'un cristal contenant une dislocation isolée.

1. Expression générale de l'amplitude de l'onde en un point d'un cristal contenant des déformations quelconques

1.1. Equations de Takagi dans le cas d'un cristal déformé

Utilisant les notations de Takagi (1969), nous représentons l'induction électromagnétique en un point \mathbf{r} du cristal, pour chacune des deux directions possibles de polarisation de l'onde incidente, par un champ scalaire qui, dans le cas à deux faisceaux (cas où seulement deux noeuds 0 et H du réseau réciproque se trouvent sur la sphère d'Ewald) s'écrit:

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) \exp(-2\pi i \mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{r}) + \psi_h(\mathbf{r}) \exp(-2\pi i \mathbf{K}_h \cdot \mathbf{r}). \quad (1.1)$$

$\psi_0(\mathbf{r})$ et $\psi_h(\mathbf{r})$ sont des fonctions complexes, lentement variables du vecteur de position \mathbf{r} . \mathbf{K}_0 et \mathbf{K}_h sont deux vecteurs fixes, se déduisant l'un de l'autre par translation du vecteur $\overrightarrow{OH}=\mathbf{h}$ du réseau réciproque. $\mathbf{K}_h=\mathbf{K}_0-\mathbf{h}$ (Fig. 1). \mathbf{K}_0 est voisin du vecteur d'onde de l'onde plane se propageant dans le cristal et a pour module:

$$|\mathbf{K}_0|=k(1+\chi_0/2)$$

où $k=1/\lambda$ et χ_0 est le premier coefficient du développement de Fourier de la susceptibilité électrique χ du cristal parfait

$$\chi = \sum_h \chi_h \exp(2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{r}) \quad (1.2)$$

L'onde incidente sur le cristal peut toujours être écrite sous la forme

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

où $|\mathbf{k}_0|=k$.

Les vecteurs \mathbf{k}_0 et \mathbf{K}_0 doivent avoir même composante tangentielle pour que les conditions de continuité à la surface du cristal soient réalisées. La position du point M_0 extrémité de \mathbf{k}_0 est complètement déterminée par la donnée du paramètre

$$\beta_h = (|\mathbf{K}_h| - |\mathbf{K}_0|)/k.$$

On voit que le choix de β_h est lié à la manière d'écrire l'onde incidente et il revient au même de faire varier β_h ou l'extrémité du vecteur \mathbf{k}_0 sur la droite T_0 .

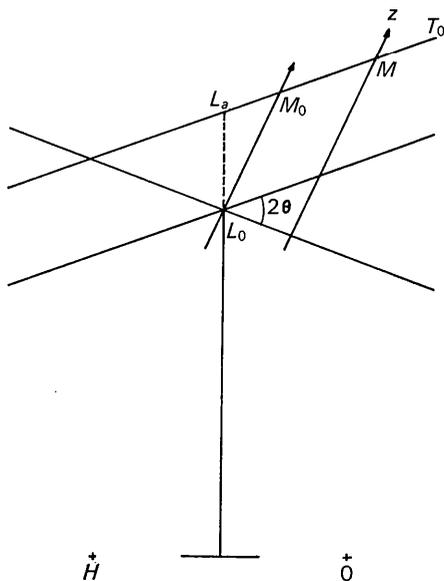


Fig. 1. Surface de dispersion et notations de Takagi. Lorsque le cristal est parfait, on peut prendre $\beta_h=0$. Alors, $\mathbf{K}_0=\overrightarrow{OL}_0$, $\mathbf{K}_h=\overrightarrow{HL}_0$, $\mathbf{k}_0=\overrightarrow{OM}_0$. Une onde incidente plane dans le vide est caractérisée par son vecteur d'onde $\mathbf{K}_0^{(a)}=\overrightarrow{OM}$ dans le vide. Son écart à l'incidence de Bragg est $\Delta\theta-\Delta\theta_0=\overrightarrow{M_0M}/k$.

Pour un cristal parfait β_h est une constante et Takagi a montré qu'on pouvait pour plus de commodité choisir $\beta_h=0$. $\psi_0(\mathbf{r})$ et $\psi_h(\mathbf{r})$ sont alors solutions d'équations aux dérivées partielles de type hyperbolique que nous avons étudiées ailleurs (Balibar, 1969).

Si le cristal est déformé, on peut toujours développer χ de la façon suivante:

$$\chi(\mathbf{r}) = \sum_h \chi'_h(\mathbf{r}) \exp 2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{r} \quad (1.3)$$

où $\chi(\mathbf{r})$ est une fonction de \mathbf{r} et où \mathbf{h} est un vecteur du réseau réciproque du cristal non déformé. En particulier, Takagi a montré que si $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ représente le déplacement d'un atome repéré par \mathbf{r} dans le cristal parfait

$$\chi'_h(\mathbf{r}) = \chi_h \exp[+2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r})]$$

où χ_h est le coefficient intervenant dans le développement (1.2) de χ pour le cristal parfait.

Introduisant alors les fonctions $\psi'_0(\mathbf{r})$ et $\psi'_h(\mathbf{r})$ définies par les relations

$$\begin{aligned} \psi'_0(\mathbf{r}) &= \psi_0(\mathbf{r}), \\ \psi'_h(\mathbf{r}) &= \psi'_h(\mathbf{r}) \exp\{-2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r})\}. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Takagi montre que $\psi'_0(\mathbf{r})$ et $\psi'_h(\mathbf{r})$ sont solutions des équations aux dérivées partielles du second ordre

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi'_0(\mathbf{r})}{\partial s_0 \partial s_h} - 2\pi i k \beta'_h(\mathbf{r}) \frac{\partial \psi'_0(\mathbf{r})}{\partial s_0} \\ + \pi^2 k^2 C^2 \chi_h \chi_h^- \psi'_0(\mathbf{r}) = 0, \end{aligned} \quad (1.5)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi'_h(\mathbf{r})}{\partial s_0 \partial s_h} - 2\pi i k \beta'_h(\mathbf{r}) \frac{\partial \psi'_h(\mathbf{r})}{\partial s_0} \\ + \left[+\pi^2 k^2 C^2 \chi_h \chi_h^- - 2\pi i k \frac{\partial \beta'_h(\mathbf{r})}{\partial \Delta_0} \right] \psi'_h(\mathbf{r}) = 0, \end{aligned} \quad (1.6)$$

où s_0 et s_h sont les coordonnées d'un point du cristal comptées le long des axes $0s_0$ et $0s_h$ parallèles aux directions incidente et réfléchie (Fig. 2).

$C=1$ ou $\cos 2\theta$ suivant l'état de polarisation de l'onde considérée et

$$\beta'_h(\mathbf{r}) = \beta_h - (1/k) \frac{\partial}{\partial s_h} [\mathbf{h} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r})]. \quad (1.7)$$

Nous ne nous intéresserons ici qu'à $\psi_h(\mathbf{r})$, car Takagi a montré que $\psi_0(\mathbf{r})$ pouvait être calculé aisément à partir de l'expression de $\psi_h(\mathbf{r})$. Les variations de $\psi_h(\mathbf{r})$ sont régies par les équations (1.6) et (1.4) assorties des conditions aux limites suivantes (Takagi, 1969):

(1) En tout point de la face d'entrée repéré par \mathbf{r}^s

$$\psi_h(\mathbf{r}^s) = 0, \quad \frac{\partial \psi_h}{\partial s_h}(\mathbf{r}^s) = -i\pi k C \chi_h \psi_0^{(a)}(\mathbf{r}^s), \quad (1.8)$$

$$\frac{\partial \psi_h}{\partial s_0}(\mathbf{r}^s) = (\gamma_0/\gamma_h) \frac{\partial \psi_h}{\partial s_h}(\mathbf{r}^s). \quad (1.9)$$

(2) A l'infini

$$\psi_h = 0 \text{ et } |\nabla \psi_h| = 0. \quad (1.10)$$

1.2. Distribution de sources secondaires équivalente aux déformations du cristal

Pour pouvoir utiliser les résultats de la théorie des distributions, nous transformons l'équation aux dérivées partielles de type hyperbolique (1.6) en une équation aux dérivées partielles de type elliptique, par le changement de variables que nous avons déjà utilisé dans le cas du cristal parfait (Balibar, 1969):

$$\begin{aligned}\gamma_h(X+iY) &= s_0 \\ \gamma_0(X-iY) &= s_h.\end{aligned}$$

Rappelons que $X=0$ est l'équation de la face d'entrée du cristal dans le système de coordonnées X, Y .

L'équation (1.6) régit les variations de la fonction $\psi'_h(X, Y)$ et s'écrit:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \psi'_h}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \psi'_h}{\partial Y^2} - 4\pi i k \gamma_0 \beta'_h \left(\frac{\partial \psi'_h}{\partial X} - i \frac{\partial \psi'_h}{\partial Y} \right) \\ + \left[\sigma^2 - 4\pi i k \gamma_0 \left(\frac{\partial \beta'_h}{\partial X} - i \frac{\partial \beta'_h}{\partial Y} \right) \right] \psi'_h = 0.\end{aligned}$$

Les conditions aux limites (1.8), (1.9) et (1.10) s'écrivent (en supposant qu'il n'y a pas de déformation sur la face d'entrée du cristal):

$$\left. \begin{aligned}\psi'_h(0, Y) &= 0 \\ \frac{\partial \psi'_h}{\partial Y}(0, Y) &= 0 \\ \frac{\partial \psi'_h}{\partial X}(0, Y) &= -2\pi i k C \chi_h \gamma_0 \psi_0^{\omega}(0, Y) \\ \psi'_h &= 0 \text{ et } |\nabla \psi'_h| = 0 \text{ à l'infini.}\end{aligned} \right\} (1.12)$$

L'équation (1.11) est une équation aux dérivées partielles de type elliptique et à coefficients variables. Elle peut être résolue par une méthode de perturbations.

$\psi'_h(X, Y)$ peut toujours être écrite sous la forme:

$$\psi'_h(X, Y) = \psi_h(X, Y) + \eta(X, Y) \quad (1.13)$$

où $\psi_h(X, Y)$ est la solution de l'équation de propagation du cristal parfait, à savoir:

$$\Delta \psi_h(X, Y) + \sigma^2 \psi_h(X, Y) = 0. \quad (1.14)$$

Nous avons montré ailleurs (Balibar, 1969) que ψ_h a pour expression

$$\psi_h(X, Y) = \left[\frac{i}{4} \frac{\partial \psi_h}{\partial X}(0, Y^s) \right] * [H_0^1(\sigma R) + H_0^2(\sigma R)] \quad (1.15)$$

où

$$\frac{\partial \psi_h}{\partial X}(0, Y^s)$$

représente une distribution de sources situées aux points $\mathbf{R}^s(0, Y^s)$ de la droite $X=0$ (face d'entrée du cristal) dont l'intensité est déterminée par la forme de l'onde incidente dans le vide.

$\eta(X, Y)$ apparaît alors comme la perturbation apportée à cette solution par les déformations du cristal.

Compte tenu de la relation (1.13) et de l'équation (1.11), η est régi par:

$$\begin{aligned}\Delta \eta - 4\pi i k \gamma_0 \beta'_h \left(\frac{\partial \psi_h}{\partial X} - i \frac{\partial \psi_h}{\partial Y} + \frac{\partial \eta}{\partial X} - i \frac{\partial \eta}{\partial Y} \right) \\ + \sigma^2 \eta - 4\pi i k \gamma_0 \left(\frac{\partial \beta'_h}{\partial X} - i \frac{\partial \beta'_h}{\partial Y} \right) (\psi_h + \eta) = 0.\end{aligned} \quad (1.16)$$

Le terme de perturbation $\eta(X, Y)$ étant petit, cette équation s'écrit encore

$$\begin{aligned}\Delta \eta + \sigma^2 \eta = 4\pi i k \gamma_0 \beta'_h \left(\frac{\partial \psi_h}{\partial X} - i \frac{\partial \psi_h}{\partial Y} \right) \\ + 4\pi i k \gamma_0 \left(\frac{\partial \beta'_h}{\partial X} - i \frac{\partial \beta'_h}{\partial Y} \right) \psi_h \\ = U(\mathbf{R}) = U(X, Y).\end{aligned} \quad (1.17)$$

Les conditions aux limites imposées à $\eta(X, Y)$ sont

$$\eta(X, Y) = |\nabla \eta(X, Y)| = 0 \text{ à l'infini}$$

et

$$\eta(X, Y) = |\nabla \eta(X, Y)| = 0 \text{ lorsque } U(X, Y) \text{ tend vers } 0.$$

L'équation (1.17) est une équation analogue à l'équation à coefficients constants (1.14) régissant l'amplitude $\psi_h(X, Y)$ dans le cristal parfait, au point X, Y , mais avec un second membre U qui est une fonction des coordonnées d'espace, indépendante de η . Comme la solution élémentaire d'une équation à coefficients constants du type (1.14) est indépendante de la valeur du second membre de cette équation, nous en déduisons que la solution élémentaire de l'équation (1-17) est encore

$$\frac{i}{4} [H_0^1(\sigma R) + H_0^2(\sigma R)].$$

$\eta(X, Y) = \eta(\mathbf{R})$ s'obtient en effectuant le produit de convolution du second membre avec la solution élémentaire

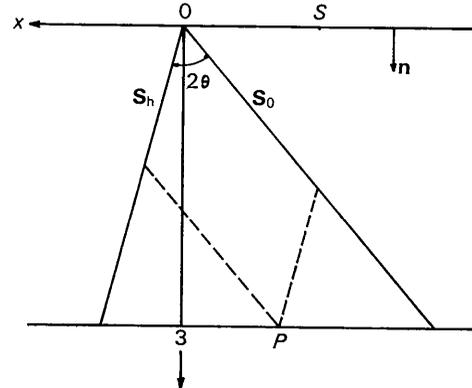


Fig.2. s_0 et s_h sont les vecteurs de base du système d'axes obliques utilisé par Takagi. Ox et Oz sont deux axes orthogonaux liés au cristal. Un point S de la face d'entrée est repéré par $\mathbf{r}^S = OS$. $\gamma_0 = \cos(s_0, \mathbf{n})$, $\alpha_0 = \sin(s_0, \mathbf{n})$; $\gamma_h = \cos(s_h, \mathbf{n})$, $\alpha_h = \sin(s_h, \mathbf{n})$.

$$\begin{aligned} \eta(\mathbf{R}) &= \frac{i}{4} U(\mathbf{R}) * [H_0^1(\sigma R) + H_0^2(\sigma R)] \\ &= \frac{i}{4} \int U(\mathbf{R}') [H_0^1(\sigma |\mathbf{R} - \mathbf{R}'|) \\ &\quad + H_0^2(\sigma |\mathbf{R} - \mathbf{R}'|)] d\mathbf{R}' \end{aligned} \quad (1.18)$$

L'intégrale est à prendre sur tout l'espace où $U(\mathbf{R}')$ est différent de zéro.

La relation (1.18) signifie que l'effet perturbateur des déformations du cristal est le même que celui d'une distribution de sources secondaires de densité $U(X, Y)$ répartie dans tout le cristal. La distribution $U(X, Y)$ est donc la distribution de sources équivalentes aux déformations du cristal et la solution générale du problème s'écrit :

$$\begin{aligned} \psi'_h(X, Y) &= \frac{i}{4} \int \left[\frac{\partial \psi_h}{\partial X}(0, Y^s) + U(\mathbf{R}') \right] [H_0^1(\sigma |\mathbf{R} \\ &\quad - \mathbf{R}'') + H_0^2(\sigma |\mathbf{R} - \mathbf{R}'')] d\mathbf{R}'' \end{aligned} \quad (1.19)$$

où \mathbf{R}'' est un point appartenant au domaine où ni $\frac{\partial \psi_h}{\partial X}(0, Y^s)$ ni $U(\mathbf{R}')$ ne sont nuls, c'est-à-dire $\mathbf{R}'' \equiv \mathbf{R}'$ ou $\mathbf{R}'' \equiv \mathbf{R}^s(0, Y^s)$.

2. Approximation de l'optique géométrique

2.1. Mode de classification des déformations

Les coefficients de l'équation (1.16) et, par suite, le second membre de l'équation (1.17) dépendent de $\beta'_h(X, Y)$ et de son gradient. Or $\beta'_h(X, Y) = \beta'_h(\mathbf{r})$ ne dépend de \mathbf{r} que par l'intermédiaire du terme

$$\frac{1}{k} \frac{\partial}{\partial s_h} (\mathbf{h} \cdot \mathbf{u}) \quad [cf.(1.7)].$$

Lorsque le cristal est parfait, $\beta'_h(\mathbf{r})$ est une quantité constante. Nous excluons ce cas traité en détail ailleurs (Balibar, 1969). Lorsque le cristal est déformé $\beta'_h(\mathbf{r})$ varie à l'intérieur du cristal. Nous classerons les déformations par leur gradient $[(\nabla \beta'_h(\mathbf{r}))]$. Si celui-ci est négligeable, le développement limité de $\beta'_h(\mathbf{r})$ autour de la valeur β_h ne contient que des termes du second ordre et d'ordre plus élevé.

Nous nous intéresserons tout d'abord à des déformations de ce type. On peut alors négliger dans l'équation (1.6) $|2\pi k \partial \beta'_h / \partial s_0|$ devant $\pi^2 k^2 C^2 |\chi_h \chi_{\bar{h}}|$, ce qui s'écrit :

$$|\partial \beta'_h / \partial s_0| \ll \pi \gamma_0 \gamma_h / 2kA^2 \quad (1.11)$$

en introduisant la longueur de solution pendulaire A .

2.2. Signification physique de la condition (2.1)

Pour simplifier, nous supposons que la réflexion est symétrique ($\gamma_0 = \gamma_h$). β'_h est alors en chaque point proportionnel à l'écart à l'incidence de Bragg $\Delta\theta$ de l'onde en ce point.

$$\beta'_h = -\Delta\theta \sin 2\theta$$

et

$$\partial \beta'_h / \partial s_0 = \sin 2\theta \partial(\Delta\theta) / \partial s_0.$$

En introduisant la largeur à mi-hauteur δ du profil de réflexion, le critère (2.1) s'écrit :

$$\delta(\Delta\theta) / \partial s_0 \ll (\pi \gamma_h / 4 |C|) (\delta / A) \quad (2.2)$$

soit encore, pour une direction quelconque :

$$\partial(\Delta\theta) / \partial l \ll \delta / A \quad (2.3)$$

puisque le coefficient $\pi \gamma_h / 4 |C|$ est voisin de 1. La relation (2.3) s'interprète physiquement de la manière suivante: si on suit le trajet de l'énergie, l'écart à l'incidence de Bragg varie d'un point à un autre. La condition (2.3) exprime que la variation de l'écart à l'incidence de Bragg le long d'un trajet de longueur l doit être beaucoup plus petite que la variation d'une désorientation des plans réticulaires égale à δ sur une longueur A . Autrement dit, sur une période de solution pendulaire, les désorientations des plans réticulaires du cristal doivent varier d'une quantité nettement inférieure à la largeur à mi-hauteur du profil de réflexion.

Le critère (2.1) peut être encore formulé de façon différente en faisant apparaître la courbure $1/\rho$ du trajet des rayons X à travers le cristal. Soit α l'angle de la direction de propagation d'un champ d'ondes généralisé donné avec la normale à la face d'entrée du cristal Oz ; α est lié à $\Delta\theta$ par l'intermédiaire du coefficient d'amplification $A = d\alpha / d(\Delta\theta)$. Comme $1/\rho \simeq d\alpha / ds_0$, le critère (2.1) s'écrit encore (dans le cas symétrique):

$$1/A\rho \ll (\pi \gamma_0 / 4 \sin \theta) (\lambda / A^2).$$

Comme $A = (A/\lambda) (2 \sin^2 \theta / \gamma_0)$, la conditions (2.1) sera vérifiée si

$$A/\rho \ll (\pi/2) \sin \theta.$$

Comme $(\pi/2) \sin \theta$ est de l'ordre de grandeur de l'unité, le critère (2.1) est équivalent à

$$A/\rho \ll 1. \quad (2.4)$$

Mis sous cette forme, le critère qui nous sert à définir les déformations à faible gradient apparaît comme l'analogie du critère de validité de l'optique géométrique pour la propagation des Rayons X , à condition de considérer la longueur d'onde de solution pendulaire comme longueur d'onde caractéristique de la propagation des rayons X dans le cristal.

2.3. Champs d'ondes généralisés lorsque l'approximation géométrique est justifiée

L'amplitude ψ'_h en un point P s'obtient alors à partir des relations (1.13), (1.15) et (1.18) où $U(\mathbf{R})$ a pour expression :

$$U(\mathbf{R}) = 4\pi i k \gamma_0 \beta'_h(\mathbf{R}) \left[\frac{\partial \psi_h}{\partial X}(\mathbf{R}) - i \frac{\partial \psi_h}{\partial Y}(\mathbf{R}) \right]. \quad (2.5)$$

La valeur de ψ'_h au point P (repéré par \mathbf{R} , $R = \sqrt{X^2 + Y^2}$) est égale à la valeur en ce point du produit de convolution de la solution élémentaire et de la distribution spatiale:

$$\frac{\partial \psi_h}{\partial X}(0, Y^S) + 4\pi i k \gamma_0 \beta'_h(\mathbf{R}') \times \left[\frac{\partial \psi_h}{\partial X}(\mathbf{R}') - i \frac{\partial \psi_h}{\partial Y}(\mathbf{R}') \right]. \quad (2.6)$$

\mathbf{R}' représente ici un point de la zone où U est $\neq 0$. On remarque que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi_h}{\partial X}(0, Y^S) &\equiv \frac{\partial \psi_h}{\partial X}(0, Y^S) - i \frac{\partial \psi_h}{\partial Y}(0, Y^S) \\ &\equiv \frac{\partial \psi_h}{\partial X}(\mathbf{R}^S) - i \frac{\partial \psi_h}{\partial Y}(\mathbf{R}^S) \end{aligned}$$

puisque $\frac{\partial \psi_h}{\partial Y}(\mathbf{R}^S)$ est nul par hypothèse. La distribution (2.6) s'écrit donc

$$\left[\frac{\partial \psi_h}{\partial X}(\mathbf{R}^S) - i \frac{\partial \psi_h}{\partial Y}(\mathbf{R}^S) \right] [1 + 4\pi i k \gamma_0 \beta'_h(\mathbf{R}') \mathbf{A}(\mathbf{R}' - \mathbf{R}^S)] \quad (2.7)$$

où \mathbf{A} est un vecteur de l'espace X, Y dépendant des dérivées secondes de ψ_h . L'expression (2.7) s'écrit encore

$$\frac{\partial \psi_h}{\partial X}(0, Y^S) \exp \{4\pi i k \gamma_0 \beta'_h(\mathbf{R}') \mathbf{A}(\mathbf{R}' - \mathbf{R}^S)\}$$

en supposant les déformations suffisamment faibles pour pouvoir assimiler $(1+u)$ à $\exp u$.

On voit donc que l'effet des perturbations du cristal peut être représenté simplement par un déphasage variable dans la distribution de sources qui doit être convoluée avec la solution élémentaire. $\psi'_h(\mathbf{R})$ est donc encore la somme de deux termes indépendants ψ'_{h1} et ψ'_{h2} comme dans le cas du cristal parfait, obtenus par convolution de la distribution de sources équivalentes par H_0^1 et H_0^2 . Par extension, nous conviendrons d'appeler ces deux termes champs d'ondes généralisés 1 et 2 (ou ondes de types 1 et 2).

Ces deux champs d'ondes généralisés présentent par rapport au cas du cristal parfait les modifications suivantes:

(1) $\psi'_{h1}(X, Y)$ et $\psi'_{h2}(X, Y)$ ne dépendent plus uniquement des valeurs prises par $\frac{\partial \psi_h}{\partial X}$ sur la face d'entrée du cristal.

(2) Ils se propagent en subissant une déformation puisque la distribution qui doit être convoluée avec la solution élémentaire subit un léger déphasage. La fonction Eikonale du champ d'ondes généralisé considéré est donc modifiée; comme la direction de propagation de l'énergie transportée par un champ d'ondes généralisé est celle du gradient de sa fonction Eikonale, les trajets de l'énergie dans le cristal sont donc modifiés par rapport au cas du cristal parfait.

(3) L'intégrale représentant ψ'_h n'étant pas la même que celle qui représente ψ_h , les amplitudes des champs d'ondes généralisés sont également modifiés. Mais le point important ici est que ces modifications se font de façon continue; il est possible de suivre par continuité l'évolution d'un champ d'ondes généralisé donné à travers tout le cristal.

Nous allons préciser le point (2) en étudiant les modifications subies par les trajets des champs d'ondes généralisés induits dans le cristal par une onde plane incidente, en vue de comparer les résultats de la présente théorie avec ceux de Penning (1966) ou Kato & Ando (1966) et avec les résultats expérimentaux de Malgrange (1969).

Pour cela nous remarquerons d'abord que lorsque β_h n'est pas choisi égal à zéro (dans le cas du cristal parfait) mais a une valeur constante $\neq 0$, la solution de l'équation (1.11) est obtenue en multipliant celle correspondant à $\beta_h = 0$ par la quantité

$$\exp \{-2\pi i k \beta_h (X - iY)\}.$$

Elle subit un déphasage de $-2\pi k \beta_h (X - iY)$.

Ainsi, soit un champ d'ondes généralisé donné [(1) par exemple] excité par l'onde plane incidente dont l'écart à l'incidence de Bragg est caractérisé par le coefficient τ

$$\tau = i2\pi k \gamma_0 (\Delta\theta - \Delta\theta_0) \sin 2\theta.$$

Lorsque $\beta_h = 0$, son expression est

$$A \exp i\tau Y \exp \{i\sqrt{\sigma^2 - \tau^2} X\};$$

lorsque β_h est $\neq 0$, il devient:

$$A [\exp \{i(\tau + 2\pi i k \beta_h) Y\} \exp \{i(\sqrt{\sigma^2 - \tau^2} - 2\pi k \beta_h) X\}].$$

Revenant au cas du cristal déformé, nous effectuons le calcul de la variation β'_h en découplant le cristal en tranches d'épaisseur ΔX dans lesquelles nous considérons β'_h comme constant. Lorsqu'on passe d'une tranche à l'autre β'_h varie. A cette variation de β'_h correspond une variation de phase de la solution de l'équation (1.11) égale à

$$-2\pi k \left(\frac{\partial \beta'_h}{\partial X} - i \frac{\partial \beta'_h}{\partial Y} \right) (\Delta X - i\Delta Y) (X - iY).$$

On peut considérer les ondes arrivant sur chacune des tranches comme des ondes de type $A \exp i\tau Y$ où A et τ sont des fonctions de X . La variation de τ lorsqu'on passe de la tranche X à la tranche $X + \Delta X$ en laissant Y fixe, est:

$$\Delta\tau = 2\pi k \left(\frac{\partial \beta'_h}{\partial X} - i \frac{\partial \beta'_h}{\partial Y} \right) \Delta X$$

ce qui établit la relation liant τ à X . On vérifie que cette relation est équivalente à la relation (24)* de Penning & Polder (1961), compte tenu des relations

* Cette relation est elle-même équivalente à l'équation (2.20) de Kato (1964).

et

$$\tau = i2\pi k |\chi_h| \gamma_0 \eta$$

$$X = -z/2\gamma_0^2.$$

Suivant alors la même démarche que Penning (et Kato), on peut de là déduire l'équation de la trajectoire du champ d'ondes généralisé considéré. En particulier, on en déduit comme Kato que les trajets sont des hyperboles lorsque

$$\frac{\partial \beta'_h}{\partial X} - i \frac{\partial \beta'_h}{\partial Y}$$

est constant. On vérifie également l'accord avec les résultats de Penning (1966) et Malgrange (1969) dans le cas d'un gradient thermique parallèle à la face d'entrée du cristal. $\beta'_h(X, Y)$ s'écrit alors

$$\beta'_h(X, Y) = \beta_h - a(\gamma_0^2 X + i\alpha_0^2 Y)$$

où β_h est une constante et a est proportionnel au module $|\nabla_r T|$ du gradient thermique

$$a = 4\alpha_0 \gamma_0 |\nabla_r T|.$$

La condition de validité de l'optique géométrique (2.1) donne alors

$$|\nabla_r T| \ll 4k A^2 \alpha_0;$$

soit dans les conditions expérimentales de Malgrange

$$|\nabla_r T| \ll 180^\circ \cdot \text{cm}^{-1}.$$

Cet ordre de grandeur est en accord avec l'ordre de grandeur des gradients utilisés par cet auteur.

En conclusion, nous dirons donc que tant que l'approximation de l'optique géométrique reste valable, un champ d'ondes généralisé ne se décompose pas. Dans le cadre de la théorie dynamique classique, ce résultat peut s'interpréter ainsi: le point caractéristique P_j d'un champ d'ondes donné se déplace de façon continue sur la surface de dispersion tant que la condition (2.1) est réalisée, c'est-à-dire en introduisant la vitesse $d(L_a M)/ds_0$ du point M sur la droite T_0 (Fig. 1), tant que:

$$d(L_a M)/ds_0 \ll (\pi \gamma_0 / 4 \sin \theta) (\lambda / A^2).$$

En particulier, le point P_j ne change pas de branche de la surface de dispersion dans ces conditions.

3. Déformations a fort gradient-diffraction des champs d'ondes généralisés

Nous supposons maintenant que la condition (2.1) n'est plus réalisée. $\psi'_h(X, Y)$ s'obtient encore à l'aide des relations (1.13), (1.15) et (1.18) mais le terme $U(\mathbf{R})$ ne peut plus être réduit à un terme petit et présentant un déphasage de $\pi/2$ par rapport au terme

$$\frac{\partial \psi_h}{\partial X}(0, Y^S) \text{ comme au } \S (2.3). U(\mathbf{R}) \text{ est ici la somme}$$

de deux termes $U_1(\mathbf{R})$ et $U_2(\mathbf{R})$ contributions des champs d'ondes 1 et 2

$$U_j(\mathbf{R}) = 4\pi i k \gamma_0 \left[\beta'_h(\mathbf{R}) \left(\frac{\partial \psi_{hj}}{\partial X}(\mathbf{R}) - i \frac{\partial \psi_{hj}}{\partial Y}(\mathbf{R}) \right) + \psi_{hj}(\mathbf{R}) \left(\frac{\partial \beta'_h}{\partial X}(\mathbf{R}) - i \frac{\partial \beta'_h}{\partial Y}(\mathbf{R}) \right) \right]. \quad (3.1)$$

Comme $U_1(\mathbf{R})$ et $U_2(\mathbf{R})$ présentent par rapport à $\frac{\partial \psi_h}{\partial X}(0, Y^S)$ des phases différentes et ont des modules différents, la somme

$$\frac{\partial \psi_h}{\partial X}(0, Y^S) + U(\mathbf{R})$$

intervenant dans l'expression (1.19) de $\psi'_h(X, Y)$ ne peut plus se calculer aisément comme au § (2.3).

Nous étudierons ici la propagation d'un champ d'ondes généralisé (champ 1 par exemple) dans un cristal contenant une petite région où la condition (2.1) n'est pas réalisée (zone de 'très mauvais cristal'), et baignant dans du 'bon cristal' (zone pour laquelle la condition (2.1) est réalisée). De telles conditions expérimentales correspondent au cas de bons cristaux contenant des défauts localisés et isolés (dislocations, par exemple). Nous ne traitons donc pas le cas de cristaux mosaïques. Nous nous proposons, dans ces conditions, d'analyser la distribution d'amplitude $\psi'_h(X, Y)$ dans la région de bon cristal située au delà du défaut considéré. D'après les équations (1.13) et (1.18) $\psi'_h(X, Y)$ s'écrit alors:

$$\psi'_h(X, Y) = \underbrace{\psi_{h1}}_{\text{solution non perturbée}} + \frac{i}{4} \int \underbrace{U_1(\mathbf{R}) [H_1^2(\sigma|\mathbf{R}-\mathbf{R}|) + H_2^2(\sigma|\mathbf{R}-\mathbf{R}|)] d\mathbf{R}'}_{\text{terme de perturbation}}.$$

On voit que le terme de perturbation est la somme de deux termes (une onde de type 1 et une onde de type 2). L'onde de type 1 ajoutée à ψ_{h1} constitue le champ d'ondes généralisé 1 dans la partie du cristal située au-delà du défaut. L'onde de type 2 représente dans cette partie du cristal un nouveau champ d'ondes généralisé qui n'existerait pas en l'absence de défaut; c'est ce que nous appellerons le champ d'ondes recréé; sa direction de propagation est différente de celle du champ d'ondes de type 1.

Un champ d'ondes généralisé donné se décompose donc, lors de la traversée de la zone de 'mauvais cristal' en deux champs d'ondes généralisés de type 1 et 2. Cette conclusion est analogue à celle à laquelle nous étions arrivés dans un précédent article (Balibar, 1968) lors de l'étude de la diffraction des champs d'ondes par un écran opaque percé d'une fente et placé à l'intérieur d'un cristal par ailleurs parfait. Ceci n'a rien d'étonnant car on sait que lorsque les conditions de l'optique géométrique ne sont pas réalisées, il y a diffraction. Or la zone à fort gradient de déformations joue le rôle d'obstacle diffractant opaque vis-à-vis de

toute onde d'incidence voisine de celle de Bragg pour les plans réticulaires du cristal parfait; en effet, les désorientations effectives des plans réticulaires y sont nettement plus grandes que la largeur de la raie considérée pour le cristal parfait et l'onde ne peut plus s'y propager.

En résumé, les champs d'ondes se propageant dans une région où règne un gradient de déformation suivant un trajet courbé, tant que le gradient reste inférieur à une certaine valeur limite. Lorsqu'il excède cette valeur, il y a diffraction des champs d'ondes généralisés accompagnée de la création de nouveaux champs d'ondes.

4. Application au cas d'un cristal contenant une dislocation isolée

4.1. Origine physique des images intermédiaires

Ces résultats généraux ont été établis principalement en vue de leur application à l'étude des images de dislocations obtenues par topographie en pose fixe. Ces images ont été décrites et interprétées partiellement par Authier (1961, 1967), Chikawa (1964), Lang & Polcarova (1965). Leur contraste a été étudié à l'aide d'ordinateurs par Taupin (1967), Kambe (1963) et Balibar & Authier (1967). Authier (1967) a montré que le contraste de ces images ne peut être interprété qu'en supposant la création de nouveaux champs d'ondes au voisinage immédiat de la ligne de dislocation.

Les raisonnements précédents permettent d'expliquer ce phénomène dû à la diffraction des champs d'ondes généralisés au niveau de la zone fortement déformée entourant immédiatement la ligne de dislocation. Le critère (2.1) de validité de l'optique géométrique nous permet de donner une estimation de la taille de la zone où se produit cet effet. Prenons, par exemple, le cas d'une dislocation coin de vecteur de Burgers \mathbf{b} . En première approximation, la variation de l'écart à l'incidence de Bragg dans un plan d'incidence donné ne dépend que de la distance du point d'observation au point d'intersection de la ligne de dislocation avec le plan d'incidence

$$\delta(\Delta\theta) = b/2\pi r; \quad b = |\mathbf{b}|. \quad (4.1)$$

Compte tenu de la relation

$$\beta'_h = -\Delta\theta \sin 2\theta$$

il vient

$$\beta'_h(\mathbf{r}) = \beta_h - \sin 2\theta(b/2\pi r) \quad (4.2)$$

soit

$$\frac{\partial \beta'_h}{\partial s_0}(\mathbf{r}) = (b/2\pi r^2) \sin 2\theta (\partial r / \partial s_0).$$

Le critère (2.1) s'écrit alors

$$r \gg A \sqrt{b \sin 2\theta / \pi^2 \gamma_0 \gamma_h}$$

soit pour $b = 3,84 \text{ \AA}$, $\lambda = 0,7 \text{ \AA}$ (raie Mo $K\alpha$) et pour la réflexion 220 du silicium

$$r \gg A/4 \quad A = 35 \text{ \mu m}.$$

On a ainsi une estimation de la taille de la zone diffractante dans chaque plan d'incidence; c'est, en première approximation, un cercle centré sur le coeur de la dislocation et de rayon $\simeq 10 \text{ \mu m}$.

Les équations (1.13), (1.18), (3.1) et (4.1) permettent théoriquement de calculer l'amplitude en un point \mathbf{R} . L'intégrale (1.18) est une intégrale double portant sur la zone fortement déformée. Cette intégration peut se faire rapidement sur ordinateur. Dans le cas d'une onde incidente sphérique ou plane, on peut déjà déterminer, grâce à la méthode de la phase stationnaire et sans le secours d'un ordinateur:

- les points de la zone fortement déformée d'où sont issus les champs d'ondes recrées.
- la direction de ces champs d'ondes.
- leur divergence due à la diffraction.

Les résultats de ces calculs et leur comparaison avec les résultats expérimentaux sont décrits dans un article séparé (Authier, Balibar & Epelboin, 1970).

Références

- AUTHIER, A. (1961). *Bull. Soc. franç. Minér. Crist.* **84**, 115.
 AUTHIER, A. (1967). *Advanc. X-ray Anal.* **10**, 9.
 AUTHIER, A., BALIBAR, F. & EPELBOIN, Y. (1970). *Phys. Stat. Sol.* Sous presse.
 BALIBAR, F. & AUTHIER, A. (1967). *Phys. Stat. Sol.* **21**, 413.
 BALIBAR, F. (1968). *Acta Cryst.* **A24**, 666.
 BALIBAR, F. (1969). *Acta Cryst.* **A25**, 650.
 CHIKAWA, J. (1964). *Appl. Phys. Letters*, **4**, 154.
 KAMBE, K. (1963). *Z. Naturforsch.* **18a**, 1010.
 KATO, N. (1963). *J. Phys. Soc. Japan*, **18**, 1785.
 KATO, N. (1964a). *J. Phys. Soc. Japan*, **19**, 67.
 KATO, N. (1964b). *J. Phys. Soc. Japan*, **19**, 971.
 KATO, N. & ANDO, Y. (1966). *J. Phys. Soc. Japan*, **21**, 964.
 LANG, A. R. & POLCAROVA, M. (1965). *Proc. Royal Soc.* **A285**, 297.
 MALGRANGE, C. (1969). *Acta Cryst.* **A25**, 356.
 PENNING, P. & POLDER, D. (1961). *Philips Res. Repts.* **16**, 419.
 PENNING, P. (1966). Thèse, Delft.
 TAKAGI, S. (1962). *Acta Cryst.* **15**, 1311.
 TAKAGI, S. (1969). *J. Phys. Soc. Japan*, **26**, 1239.
 TAUPIN, D. (1964). *Bull. Soc. franç. Minér. Crist.* **87**, 469.
 TAUPIN, D. (1967). *Acta Cryst.* **23**, 25.