

calculated for a linear group. For a linear group

$$\beta = \frac{1}{2} \left(\frac{s^T s}{s^T I s} \right) s,$$

where T denotes the transpose operation. If $s^T I s \ll s^T s$, set $\beta = 0$. All else is the same as for non-linear groups.

References

- BUSING, W. R. (1971). *Acta Cryst.* A27, 683–684.
 CAYLEY, A. (1846). *J. reine angew. Math.* 32, 119–123; or *Coll. Math. Papers* (1889). I, No. 52, p. 332. Cambridge Univ. Press.
 CHESICK, J. P. (1973). *Acta Cryst.* B29, 2309–2311.
 DOEDENS, R. J. (1970). *Crystallographic Computing*, pp. 198–200. Edited by F. R. AHMED. Copenhagen: Munksgaard.
 IBERS, J. A. (1971). *Acta Cryst.* B27, 250–251.
 LORENTE, M. (1974). *Cayley Parametrization of Semi-simple Lie Groups*, Boston Univ. Report BU-PNS-6.
 PAWLEY, G. S. (1969). *Acta Cryst.* A25, 531–535.
 PAWLEY, G. S. (1972). *Advances in Structure Research by Diffraction Methods*, Vol. 4. Edited by W. HOPPE and R. MASON. Oxford: Pergamon Press.
 STROUSE, C. E. (1970). *Acta Cryst.* A26, 604–608.
 WATENPAUGH, K. D., SIEKER, L. C., HERRIOTT, J. R. & JENSEN, L. H. (1973). *Acta Cryst.* B29, 943–956.
 WEYL, H. (1946). *The Classical Groups*, p. 56. Princeton Univ. Press.

Acta Cryst. (1975). A31, 591

Simulation des Trajets des Champs d' Ondes dans un Cristal Contenant une Dislocation

PAR Y. EPELBOIN*

Laboratoire de Minéralogie Cristallographie, associé au CNRS, Université P. et M. Curie, 4 place Jussieu, 75230 Paris Cédex 05, France

(Reçu le 4 février 1975, accepté le 25 février 1975)

The X-ray intensity distribution in the incident plane for a crystal containing a straight dislocation has been computed. The trajectories of the wave fields have been drawn in the case of a planar or spherical incident wave, and it has been shown that the interaction of the defect with the X-rays gives rise to new directions of propagation, near the reflected direction. It has also been shown that the importance of this interaction decreases when the defect comes near the reflected direction.

Introduction

Bien que la topographie par la méthode de Lang soit maintenant d'un usage très courant, l'interprétation

* Ce travail constitue une partie d'une thèse de Doctorat en Sciences Physiques de l'Université de Paris, enregistrée au CNRS sous le numéro A09961.

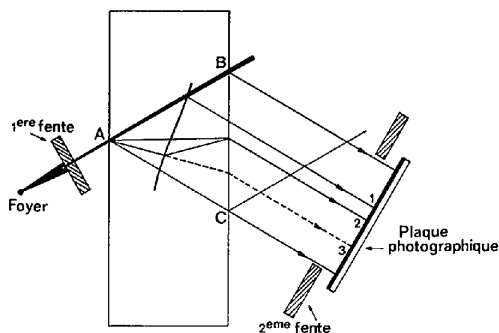


Fig. 1. Formation de l'image d'un défaut en topographie. 1 image directe, 2 image intermédiaire, 3 image dynamique.

du contraste des images obtenues reste difficile. Depuis plusieurs années de nombreux auteurs ont essayé de comprendre l'origine des trois parties que l'on distingue habituellement: l'image directe, l'image intermédiaire et l'image dynamique (Fig. 1).

Kambe (1963) a expliqué la formation de l'image dynamique d'une dislocation par l'optique géométrique en interprétant sa forme, comme étant la caustique des rayons qui ont été courbés au voisinage du défaut. Ceci correspond aux travaux théoriques de Penning & Polder (1961) ou Kato (1963).

Dans ces théories appelées théories géométriques, le point caractéristique d'un champ d'ondes glisse sur la branche de l'hyperbole à laquelle il appartient lorsque le cristal est déformé. Cela provient du fait que le vecteur réciproque local est modifié et qu'en chaque point la surface de dispersion doit être redessinée, ou, ce qui revient au même, le point caractéristique de ce champ déplacé sur l'hyperbole. Dans le cristal, le trajet des rayons X est donc courbé sans qu'un champ d'ondes change de nature: un champ d'ondes 1 reste un champ d'ondes 1.

Mais ceci est insuffisant pour interpréter complètement le contraste de l'image d'un défaut; l'image intermédiaire d'un dislocation, par exemple, présente des

analogies avec les franges que l'on voit dans le cas des fautes d'empilements (Authier, 1968) et ceci ne peut être expliqué que par les interférences de champs d'ondes de type 1 et 2, qui ont suivi des trajets différents (Authier, 1967; Balibar & Authier, 1967). Aussi est-il nécessaire de faire apparaître une nouvelle notion qui n'existe pas dans les théories géométriques: celle des champs d'ondes recréés.

Ceci a été expliqué par Authier & Balibar (1970) et présente des analogies avec la diffraction en lumière visible, aussi l'appelle-t-on théorie de la diffraction: lorsque la déformation devient importante le point caractéristique d'un champ d'ondes se déplace sur la branche de l'hyperbole à laquelle il appartient et de plus excite un point sur l'autre branche: un champ d'ondes 1 va ainsi donner naissance à un champ d'ondes recréé 2.

Les deux théories, celle de l'optique de la diffraction et celle de l'optique géométrique, sont nécessaires pour comprendre complètement le contraste de l'image d'un défaut car les deux phénomènes existent simultanément comme cela a été montré (Balibar, Epelboin & Malgrange, 1975).

En simulant, au moyen d'un ordinateur, le trajet des faisceaux de rayons X, à l'intérieur d'un cristal, nous essaierons de comprendre ces phénomènes. Les calculs ont déjà été effectués dans des cas très particuliers. Taupin (1967) a calculé la répartition d'intensité des rayons X dans un cristal contenant une dislocation coin perpendiculaire au plan d'incidence.

Ces calculs ont été effectués dans le cas d'une onde plane de largeur infinie et dans les conditions exactes de Bragg; cependant, ils ne correspondent pas à l'expérience classique où on utilise très souvent une onde incidente sphérique ou une onde plane de largeur limitée, avec un certain écart à l'incidence de Bragg. D'autres auteurs (Balibar & Authier, 1967) ont dessiné le trajet des champs d'ondes pour certaines géométries.

Nous montrerons le trajet des rayons X, dans un cristal contenant une dislocation quelconque, pour différentes positions de ce défaut et dans des conditions théoriques variées qui correspondent à celle de l'expérience. Nous verrons, en particulier, qu'il est difficile de distinguer les champs courbés et recréés et que la perturbation apportée par la dislocation à la propagation des rayons X, n'est pas insensible à la position du défaut à l'intérieur du triangle de Borrmann.

I. Théorie

(a) Les équations

Takagi (1962) et Taupin (1964) ont montré que les amplitudes des ondes qui se propagent à l'intérieur d'un cristal sont les solutions d'un système d'équations aux dérivées partielles:

$$\frac{\partial}{\partial s_o} \mathbf{D}'_o(\mathbf{r}) = -i\pi k C \chi_{\bar{h}}(\mathbf{r}) \mathbf{D}'_h(\mathbf{r})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial s_h} \mathbf{D}'_h(\mathbf{r}) &= -i\pi k C \chi_h(\mathbf{r}) \mathbf{D}'_o(\mathbf{r}) \\ &+ 2\pi i \left(k\beta_{\bar{h}} - \frac{\partial}{\partial s_h} \mathbf{h} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}) \right) \mathbf{D}'_h(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (1)$$

où χ_h et $\chi_{\bar{h}}$ sont les coefficients du développement en série de Fourier de la susceptibilité diélectrique du cristal.

- C est la polarisation de l'onde. Nous utiliserons uniquement $C=1$.
- $k=1/\lambda$ est le nombre d'onde, de la radiation utilisée.
- $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ représente la déformation, dans le cristal, au point de coordonnées r .
- \mathbf{h} est le vecteur réciproque de la réflexion.
- D'_o et D'_h sont les amplitudes des ondes réfractée et réfléchie, et leurs dérivées sont calculées le long d'un système d'axes obliques s_o et s_h respectivement parallèles aux directions réfractée et réfléchie.

Les explications de Takagi (1969) montrent que cette théorie réunit à la fois la diffraction et l'optique géométrique. De plus, ces équations présentent le grand avantage d'être valables quel que soit le type de l'onde incidente sur le cristal et quelle que soit la déformation. Malheureusement, leur généralité les rend difficile à intégrer à la main et ceci n'a été effectué que dans des cas particuliers (Balibar, 1969; Chukovskii, 1974; Kato, 1974; Litzmann & Janaček, 1974).

De façon générale et particulièrement pour les dislocations, il est nécessaire d'avoir recours aux méthodes numériques et aux ordinateurs.

(b) Méthode d'intégration

Dans les programmes que nous avons construits, nous avons utilisé l'algorithme mis au point par Authier, Malgrange et Tournarie (1968).

Nous n'en donnerons donc qu'un rapide aperçu. Soient p et q les pas d'intégration choisis le long des directions s_o et s_h ; si nous écrivons les quantités

$$A = -\frac{1}{2}i\pi k p \chi_{\bar{h}}$$

$$B = -\frac{1}{2}i\pi k q \chi_h$$

$$W(s_o, s_h) = i\pi q \left[k\beta_{\bar{h}} - \frac{\partial}{\partial s_h} \mathbf{h} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}) \right], \quad (2)$$

le système d'équations (1) se résume à:

$$\begin{aligned} p \frac{\partial}{\partial s_o} D'_o(s_o, s_h) &= 2A D'_h(s_o, s_h) \\ q \frac{\partial}{\partial s_h} D'_h(s_o, s_h) &= 2B D'_o(s_o, s_h) \\ &+ 2W(s_o, s_h) D'_h(s_o, s_h). \end{aligned} \quad (3)$$

Pour exprimer les dérivées, on utilise la méthode de la dérivée au demi pas qui permet de n'avoir une im- précision qu'au troisième ordre seulement: soit une

fonction $f(x)$, on peut écrire son développement en série de Taylor:

$$f(x+p) = f(x+p/2) + p/2 \frac{\partial}{\partial x} f(x+p/2) + p^2/8 \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x+p/2) + p^3/48 \frac{\partial^3}{\partial x^3} f(x+p/2) + \dots$$

$$f(x) = f(x+p/2) - p/2 \frac{\partial}{\partial x} f(x+p/2) + p^2/8 \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x+p/2) - p^3/48 \frac{\partial^3}{\partial x^3} f(x+p/2) + \dots$$

Par soustraction, on obtient:

$$f(x+p) = f(x) + p \frac{\partial}{\partial x} f(x+p/2) + p^3/24 \frac{\partial^3}{\partial x^3} f(x+p/2) + \dots$$

ce qui permet une approximation correcte.

Ainsi le système d'équations (3) se transforme en:

$$\begin{aligned} D'_o(s_o, s_h) &= D'_o(s_o - p, s_h) + 2AD'_h(s_o - p/2, s_h) \\ D'_h(s_o, s_h) &= D'_h(s_o, s_h - q) + 2BD'_o(s_o, s_h - q/2) \\ &\quad + 2W(s_o, s_h - q/2)D'_h(s_o, s_h - q/2). \end{aligned} \quad (4)$$

En choisissant un pas d'intégration suffisamment faible, et comme les amplitudes des champs d'ondes varient lentement, on peut remplacer les expressions au demi pas par l'approximation suivante:

$$f(x+p/2) \simeq \frac{1}{2}[f(x) + f(x+p)].$$

Ceci permet d'écrire le système (4) sous la forme du produit matriciel:

$$\begin{bmatrix} D'_o(s_o, s_h) \\ D'_h(s_o, s_h) \end{bmatrix} = 1/d \begin{bmatrix} AC_2 & C_2 & AC_1 & AB \\ AB & B & C_1 & B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D'_o(s_o - p, s_h) \\ D'_o(s_o - p, s_h) \\ D'_h(s_o, s_h - q) \\ D'_o(s_o, s_h - q) \end{bmatrix}$$

avec

$$C_1 = 1 + W(s_o, s_h - q/2)$$

$$C_2 = 1 - W(s_o, s_h - q/2)$$

$$d = C_2 - AB.$$

(5)

On voit donc que les valeurs des amplitudes des champs d'ondes en un point A de coordonnées s_o, s_h ne dépendent que des valeurs des amplitudes aux points B et C (Fig. 2) qui sont les noeuds immédiatement voisins sur le réseau dessiné avec les pas p et q parallèlement à s_o et s_h .

En intégrant le système (5) pas à pas, on pourra donc obtenir l'amplitude des champs d'ondes dans le cristal et sur la surface de sortie.

L'onde incidente sur le cristal est simulée de la façon suivante: on normalise son amplitude et on illumine un nombre variable de points sur la première ligne calculée: un point représente une onde sphérique, trente à quarante points permettent d'obtenir une onde plane avec une bonne approximation. Dans le premier cas, cela revient à choisir une fente d'entrée dont la largeur correspond au pas transverse de calcul TRANSV (Fig. 3), dans le second cela correspond à une onde plane limitée par la fente source comme c'est le cas avec un spectromètre.

En réalité, dans le programme, on indique l'épaisseur élémentaire de calcul ELEM ainsi que la largeur de la fente d'entrée; la machine calcule les pas d'intégration p et q et choisit le nombre de points sources automatiquement.

Si on applique la relation d'incertitude $\Delta k \cdot \Delta x = 1$ on s'aperçoit qu'avec le pas de calcul $ELEM = 2\mu m$,

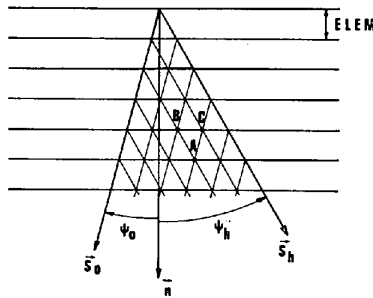


Fig. 2. Principes du calcul effectué: réseau d'intégration n est la normale à la face d'entrée.

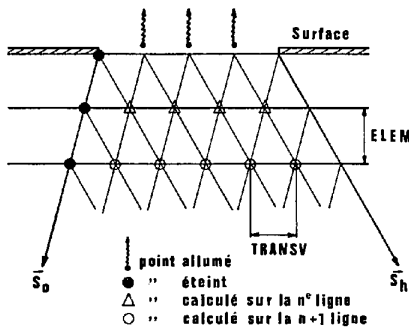


Fig. 3. Principes du calcul effectué: conditions aux limites sur la face d'entrée et calcul pas à pas.

pour la réflexion $220 \text{ Mo } K\alpha$, l'onde sphérique simulée a une divergence de $20''$ et que si la fente d'entrée est large de $40 \mu\text{m}$ la divergence de l'onde plane est de l'ordre de $0,2''$. Ces approximations sont suffisantes, en comparaison avec celles qui sont effectuées dans l'intégration et ceci est démontré par le bon accord qui existe entre les simulations et les topographies expérimentales (Epelboin, 1974a,b).

(c) *Calcul de la déformation due à une dislocation linéaire*

Nous avons tenu compte de l'anisotropie, dans le calcul des dérivées de la déformation $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, en appliquant la théorie développée par Stroh (1958).

Elle est d'ailleurs utilisée dans les simulations de la microscopie électronique (Head, 1967) et des détails pratiques sont données par Hirth & Lothe (1968).

Le calcul des dérivées, le long du système d'axes obliques \mathbf{s}_0 et \mathbf{s}_h , (Fig. 4) donne lieu à des expressions compliquées que nous ne rappellerons pas ici (Epelboin, 1974b).

II. Résultats du calcul dans le cas d'une onde incidente plane

Dans tous les cas, nous avons imaginé un cristal de silicium de $800 \mu\text{m}$ d'épaisseur. La réflexion utilisée est 220 et la radiation $\text{Mo } K\alpha$. La dislocation introduite est oblique et traverse le cristal sous un angle de 60° environ. Son vecteur de Burgers est $\frac{1}{2} [101]$ (Fig. 5) et nous avons supposé que nous l'étudions dans le plan d'incidence où elle est à $400 \mu\text{m}$ de la surface.

(a) $\delta(\Delta\theta) = -0.547 \times 10^{-5} \text{ rad.}$

Ceci correspond à $\eta = -1$.

La Fig. 6 donne le résultat de la simulation lorsque la dislocation est déplacée de gauche à droite dans le cristal.

La direction \mathbf{s}_0 est à gauche, et le champ d'ondes 2 se propage donc aussi de ce côté.

La Fig. 6,1 correspond au cas où la dislocation est sur le trajet du champ 2; il est complètement perturbé et on peut noter que des rayons X apparaissent

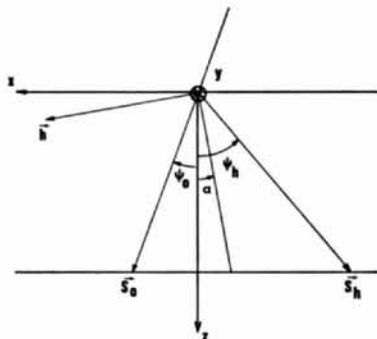


Fig. 4. Systèmes d'axes utilisés: α est l'angle d'asymétrie, \mathbf{h} le vecteur réciproque de la réflexion.

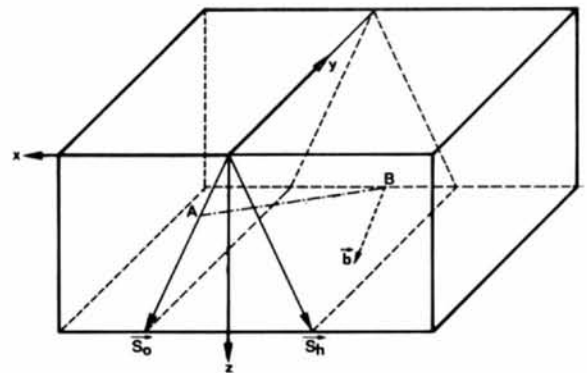


Fig. 5. Orientation de la dislocation étudiée.

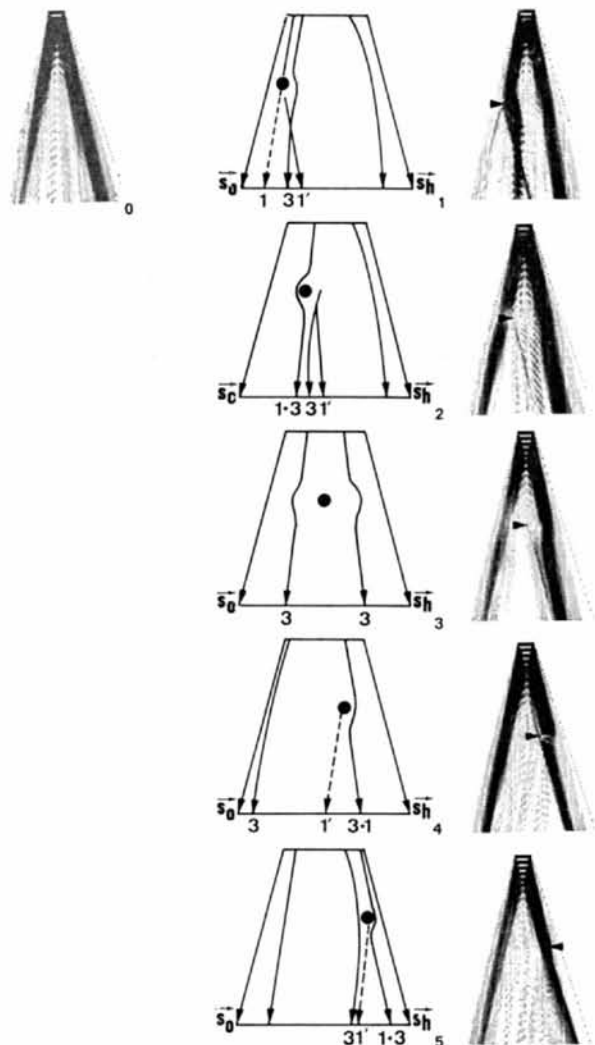


Fig. 6. Simulation dans le cas de l'onde plane $\eta = -1$. Position du coeur de la dislocation: 6,0 cristal parfait; 6,1 $x = +60 \mu\text{m}$, $z = 400 \mu\text{m}$; 6,2 $x = +30 \mu\text{m}$, $z = 400 \mu\text{m}$; 6,3 $x = 0 \mu\text{m}$, $z = 400 \mu\text{m}$; 6,4 $x = -30 \mu\text{m}$, $z = 400 \mu\text{m}$; 6,5 $x = -60 \mu\text{m}$, $z = 400 \mu\text{m}$.

principalement dans deux nouvelles directions marquées 1' et 3.

1' est parallèle à s_h , 3 correspond à un mélange de champs courbés et recréés qui interfèrent. Dans la direction 1 l'intensité est très faible; ceci correspond à l'image dynamique.

Dans le cas de la Fig. 6,2 la dislocation n'est plus exactement sur le trajet du champ d'ondes 2. On peut cependant observer que les effets ne sont pas négligeables. Les deux champs d'ondes 1 et 2 sont courbés en sens opposé et cette figure montre que l'effet de la dislocation se fait sentir, même à de longues distances.

Si on dessine (Fig. 7) la désorientation des plans réflecteurs autour du coeur, on s'aperçoit qu'il ne peut s'agir que d'effets faibles.

On constate, de plus, que la largeur des faisceaux diminue, au niveau du coeur du défaut; ce phénomène est toujours constaté et a été expliqué par Balibar & Malgrange (1975): près du coeur les variations du vecteur d'onde k sont grandes, aussi il lui correspond, dans l'espace du cristal, une diminution de la largeur Δx du faisceau, en accord avec la relation $\Delta k \cdot \Delta x = 1$.

La Fig. 6,3 montre les effets à longue distance de la dislocation car le coeur de la ligne est juste sur la hauteur du triangle de Borrmann.

Dans les cas des Figs. 6,4 et 6,5 la dislocation entre dans le faisceau du champ 1; on constate que les perturbations apportées sont bien plus faibles que dans les cas des Figs. 6,1 et 6,2. Nous aurons l'occasion de constater à nouveau ce phénomène: nous avons toujours remarqué que la perturbation, apportée par la dislocation, à la propagation des rayons X, diminue lorsque le coeur du défaut se rapproche de la direction réfléchie.

(b) $\delta(\Delta\theta) = 0.547 \cdot 10^{-5}$ rad. ($\eta = +1$)

En changeant le signe de l'écart à l'incidence de Bragg, on échange les positions respectives des deux champs d'ondes. Le champ 1 est donc maintenant à gauche.

On peut, dès à présent, prévoir que les effets ne seront pas les mêmes qu'auparavant. Penning & Polder (1961) ont montré que dans un cristal déformé à gradient constant les champs 1 et 2 se courbent en sens inverse. Dans le cas présent, il faut donc s'attendre à ce que pour une position équivalente de défaut, les trajets soient courbés en sens opposé.

Ceci est visible sur les simulations de la Fig. 8. Evidemment, on ne peut prévoir simplement la façon dont les champs d'ondes se courbent parce que, autour d'une dislocation, la déformation varie de façon complexe, mais aussi parce que la recréation de champs d'ondes intervient et que nous ne voyons, sur les simulations, que le résultat global de ces deux phénomènes.

Les Figs. 8,1 et 8,2 montrent la formation de l'image directe de la dislocation. Nous aurons l'occasion de revenir sur ce phénomène lors de l'étude en onde sphérique.

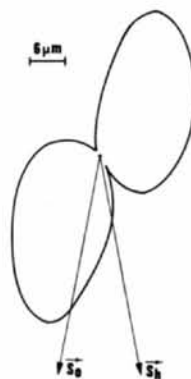


Fig. 7. Forme et dimensions, dessinée dans le plan d'incidence, des plans dont l'écart à l'incidence de Bragg est supérieur à la largeur à mi-hauteur du profil de réflexion.

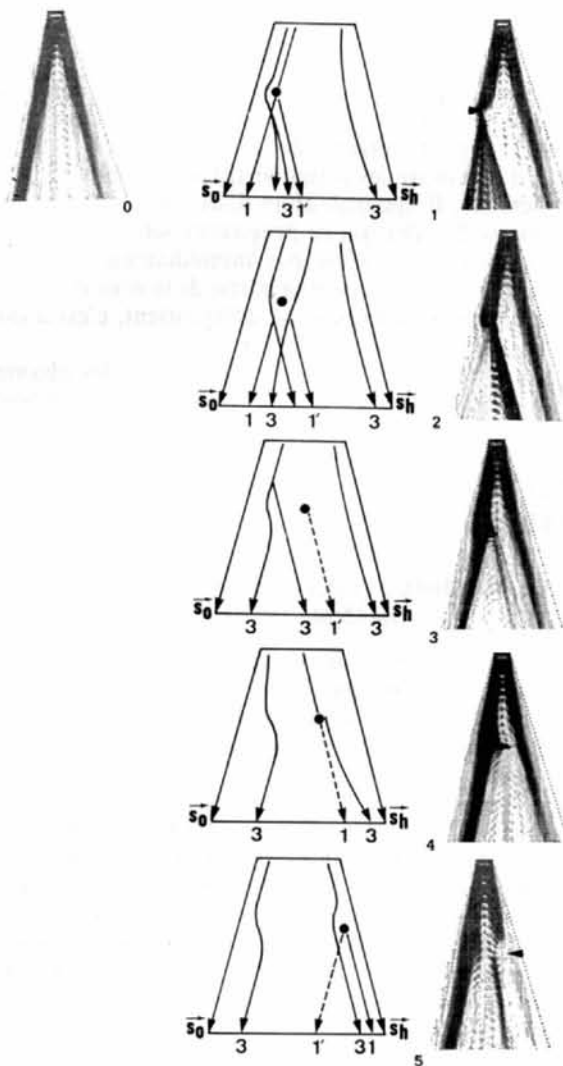


Fig. 8. Simulation dans le cas de l'onde plane $\eta = +1$. Mêmes positions du défaut que dans la Fig. 6.

(c) Répartition de l'intensité

La méthode de représentation que nous avons utilisée jusqu'à présent visualise bien les trajets des champs d'ondes; cependant, elle a le défaut de rendre impossible toute évaluation de leur intensité. C'est pourquoi nous présentons dans la Fig. 9 les Figs. 6,1 et 8,1 d'une façon différente: à huit profondeurs différentes nous avons dessiné l'intensité calculée des rayons X.

Ainsi on s'aperçoit que les champs recréés et courbés ont une intensité beaucoup plus élevée dans le cas de la Fig. 9,2 que dans le cas de la Fig. 9,1; ceci résulte du fait que l'interaction du défaut a lieu avec un champ 1 dont l'intensité est déjà grande. On voit aussi que ces effets n'apparaissent qu'en dessous du niveau du coeur de la dislocation.

Ceci est confirmé par la Fig. 10 qui est un grossissement des phénomènes qui se produisent près de la ligne de dislocation.

Ceci a été expliqué par la notion de paquets de champs d'ondes (Balibar & Malgrange, 1975): dans la réalité, le long d'une direction donnée ne se propage pas un champ d'ondes de largeur infinie, mais un ensemble de largeur finie qui correspond à un petit segment sur la surface de dispersion. Ce paquet, lorsqu'il rencontre les zones perturbées du cristal, perd sa cohérence. Il apparaît alors deux nouveaux paquets de champs d'ondes qui se propagent séparément et ce dernier phénomène n'est pas immédiatement visible: il faut avoir déjà traversé une partie de la zone déformée pour que les deux paquets se différencient, c'est à dire être au-delà du coeur du défaut.

Comme le montre la Fig. 10, le type des champs d'ondes excitateurs et la déformation interviennent: lorsqu'on change le sens du vecteur de Burgers la figure n'a plus le même aspect.

Ceci est d'ailleurs confirmé par l'observation de topographies et leur simulation (Epelboin, 1974).

III. Résultats du calcul dans le cas d'une onde incidente sphérique

En allumant un seul point sur la face d'entrée du cristal, nous avons simulé une onde sphérique. La Fig. 11 montre les résultats obtenus lorsque la dislocation prend successivement les positions que nous avons déjà étudiées.

Les franges de Pendellösung sont bien visibles, dans tous les cas, mais leur forme est modifiée, même à longue distance, par la présence de la dislocation.

L'interprétation de ces résultats est encore plus difficile qu'auparavant car tous les phénomènes coexistent: le long d'une même direction se propagent des champs d'ondes 1 ou 2 et il devient encore plus hasardeux de vouloir distinguer les champs courbés des champs recréés.

La Fig. 11,1 montre la formation de l'image directe du défaut. Comme nos calculs obéissent uniquement aux équations de Takagi, c'est à dire aux lois de la théorie dynamique, on voit qu'il n'est nul besoin de

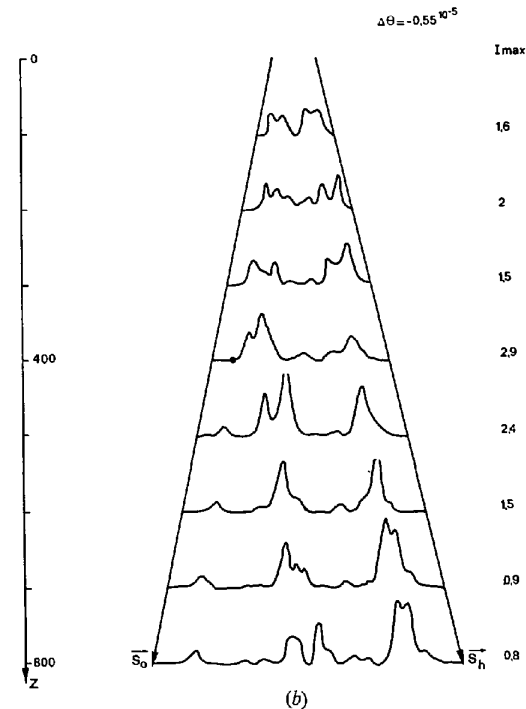
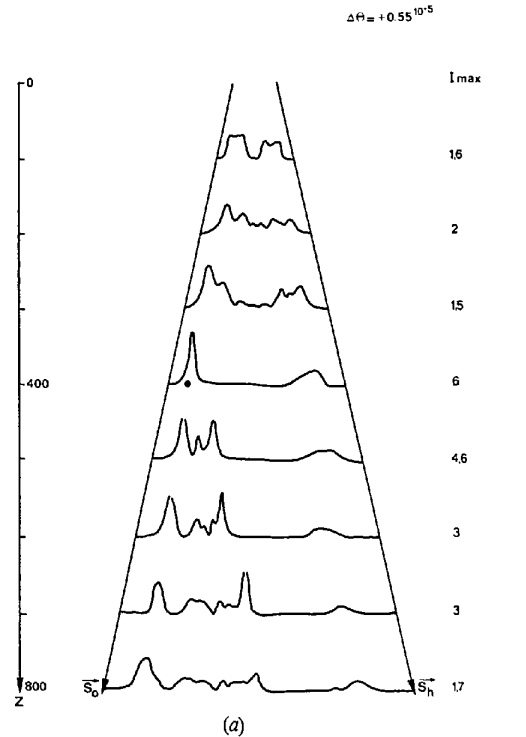


Fig. 9. Répartition de l'intensité dans le cas de (a) la Figs. 6,1 et (b) la Fig. 8,1. I_{max} représente la valeur maximale de l'intensité (en unités arbitraires).

faire appel à la théorie cinématique pour comprendre l'existence de cette image; simplement comme ces deux théories se rejoignent lorsque le cristal est très déformé, il n'est pas étonnant que nous voyons bien ce phénomène.

Il est cependant certain que si l'onde sphérique incidente avait une divergence moins grande, une partie de cette image pourrait disparaître. Ce résultat explique aussi que la théorie cinématique soit insuffisante pour interpréter les images directes de défauts et ne puisse donner qu'une approximation (Authier, 1968; Epelboin & Ribet, 1974; Bowen & Miltat, 1975).

Les Figs. 11,2 et 11,3 montrent la formation des images intermédiaire et dynamique. De plus on s'aperçoit que les champs d'ondes perturbés se propagent de façon privilégiée, soit dans la direction s_n , soit dans des directions proches de celle-ci. Enfin les Figs. 11,4 et 11,5 confirment un phénomène déjà vu: l'interaction de la dislocation et des champs d'ondes est plus faible au fur et à mesure que le défaut se rapproche du bord droit du triangle de Borrmann.

Si on examine, maintenant, un agrandissement de la répartition d'intensité autour du coeur les conclusions sont les mêmes que dans le cas de l'onde plane: la perturbation apparaît en dessous du coeur et la répartition d'intensité est modifiée en changeant le signe du vecteur de Burgers (Fig. 12).

IV. Etude d'une dislocation coin perpendiculaire au plan d'incidence

On peut se demander si les résultats précédents, bien que la dislocation soit quelconque, sont généraux. Nous avons donc simulé une dislocation coin perpendiculaire au plan d'incidence parce que c'est le seul cas où on puisse simplement imaginer la déformation des plans réflecteurs.

La Fig. 13 présente les résultats obtenus pour toutes les propagations que nous avons étudiées précédemment. Nous y avons ajouté [Fig. 13(d)] le cas particulier où l'onde incidente est plane et exactement à l'angle de Bragg.

Les conclusions que nous pouvons tirer de cette étude sont les mêmes que précédemment: sans être identique, la propagation des rayons obéit aux mêmes lois que celles que nous avons constatées précédemment. La Fig. 13(d) confirme de plus que la courbure des champs d'ondes et leur recreation s'effectue de façon privilégiée dans des directions proches de la direction s_n .

Conclusion

Ces simulations montrent que l'interprétation de la propagation des rayons X dans un cristal très déformé

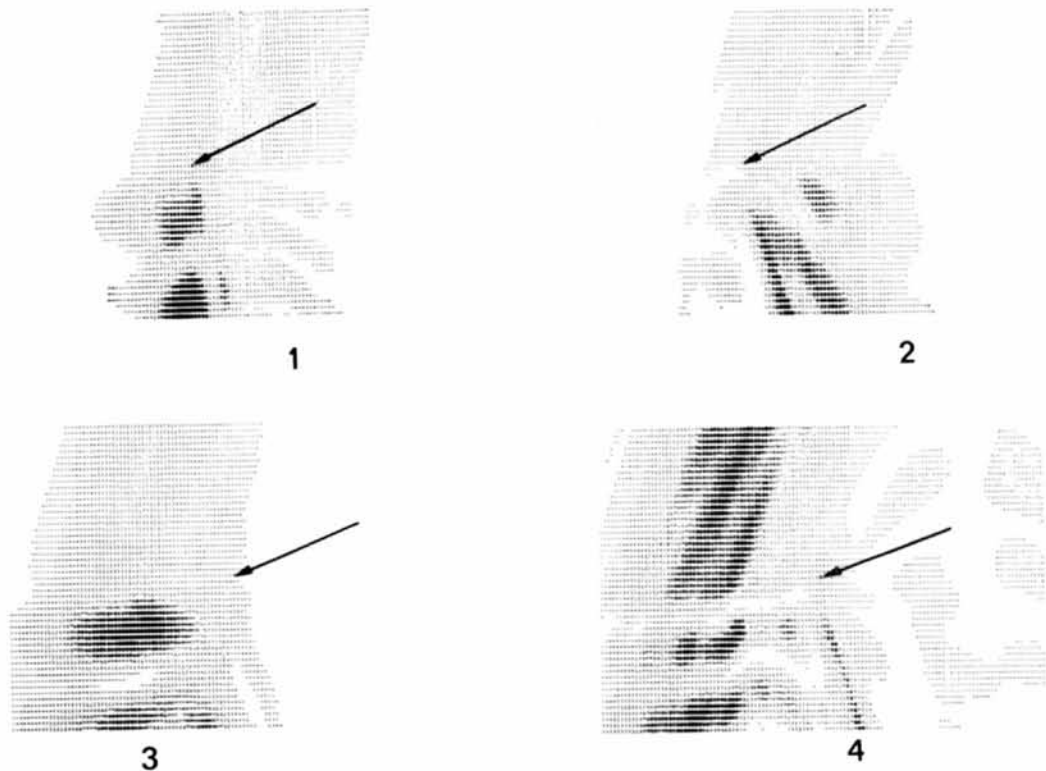


Fig. 10. Répartition de l'intensité près du coeur. 10,1 correspond à la Fig. 6,1, 10,2 à la Fig. 6,2, 10,3 à la Fig. 8,1, 10,4 à la Fig. 8,2.

ne peut être expliquée que par la présence simultanée de champs d'ondes courbés et recréés. L'influence de la dislocation s'étend sur de larges distances, ce qui peut rendre hasardeux un calcul qui découperait le cristal en zones bonnes ou mauvaises. Les champs d'ondes perturbés se propagent de façon privilégiée dans des directions proches de la direction réfléchie et l'effet de la perturbation apportée au cristal par la dislocation diminue lorsque le défaut se rapproche de la direction réfléchie.

Pour améliorer la compréhension de ces phénomènes, il serait nécessaire d'étudier séparément l'optique de la diffraction et l'optique géométrique; cependant une étude globale, comme celle que nous avons entreprise, permet de visualiser la propagation réelle des rayons X dans un cristal déformé.

Références

- AUTHIER, A. (1967). *Advanc. X-ray Anal.* **10**, 9-31.
 AUTHIER, A. (1968). *Phys. Stat. Sol.* **27**, 77-93.
 AUTHIER, A. & BALIBAR, F. (1970). *Acta Cryst.* **A26**, 647-654.
 AUTHIER, A., MALGRANGE, C. & TOURNARIE, M. (1968). *Acta Cryst.* **A24**, 126-136.
 BALIBAR, F. (1969). *Acta Cryst.* **A25**, 650-658.
 BALIBAR, F. & AUTHIER, A. (1967). *Phys. Stat. Sol.* **21**, 413-422.
 BALIBAR, F., EPELBOIN, Y. & MALGRANGE, C. (1975). *Acta Cryst.* Sous presse.
 BALIBAR, F. & MALGRANGE, C. (1975). *Acta Cryst.* **A31**, 425-434.
 BOWEN, K. & MILTAT, J. (1975). A paraître.
 CHUKOVSKII, F. N. (1974). 2nd European Crystallographic Meeting, Kesthely, Hongrie.
 EPELBOIN, Y. (1974a). *J. Appl. Cryst.* **7**, 372-377.
 EPELBOIN, Y. (1974b). *Etude de la recréation des champs d'ondes dans un cristal déformé. Simulation de topographies aux rayons X par la méthode de Lang.* Thèse d'Etat. Univ. de Paris.
 EPELBOIN, Y. & RIBET, M. (1974). *Phys. Stat. Sol. (a)*, **25**, 507-513.
 HEAD, A. K. (1967). *Austr. J. Phys.* **20**, 557-566.

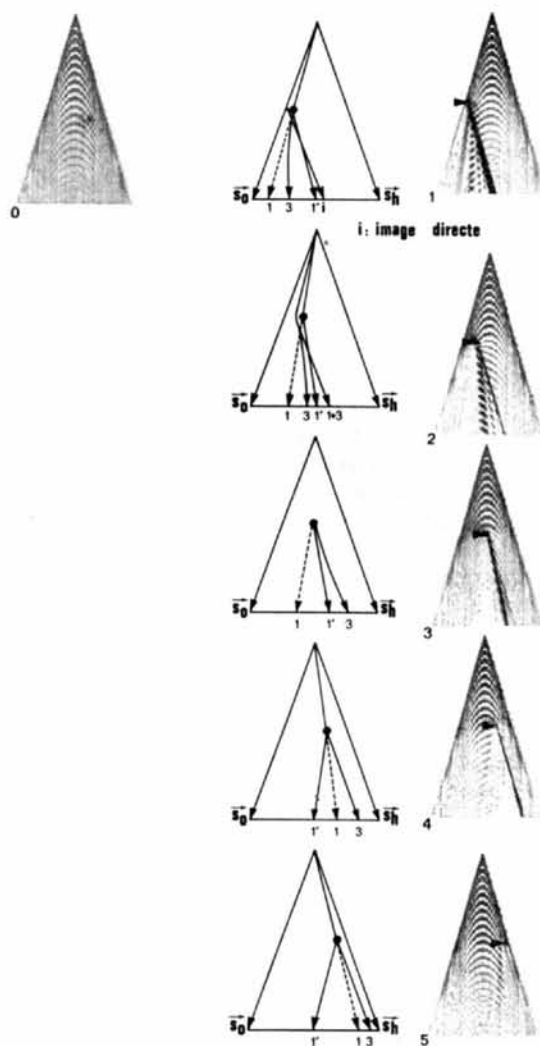


Fig. 11. Simulation dans le cas de l'onde sphérique. Même géométrie que pour la Fig. 6.

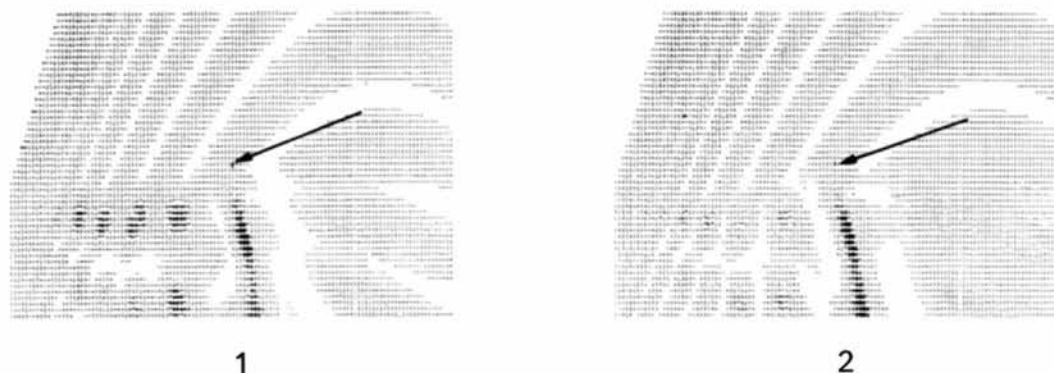


Fig. 12. Répartition de l'intensité près du coeur. 12,1 correspond à 11,2. 12,2 correspond à 11,2 mais b est changé en $-b$.

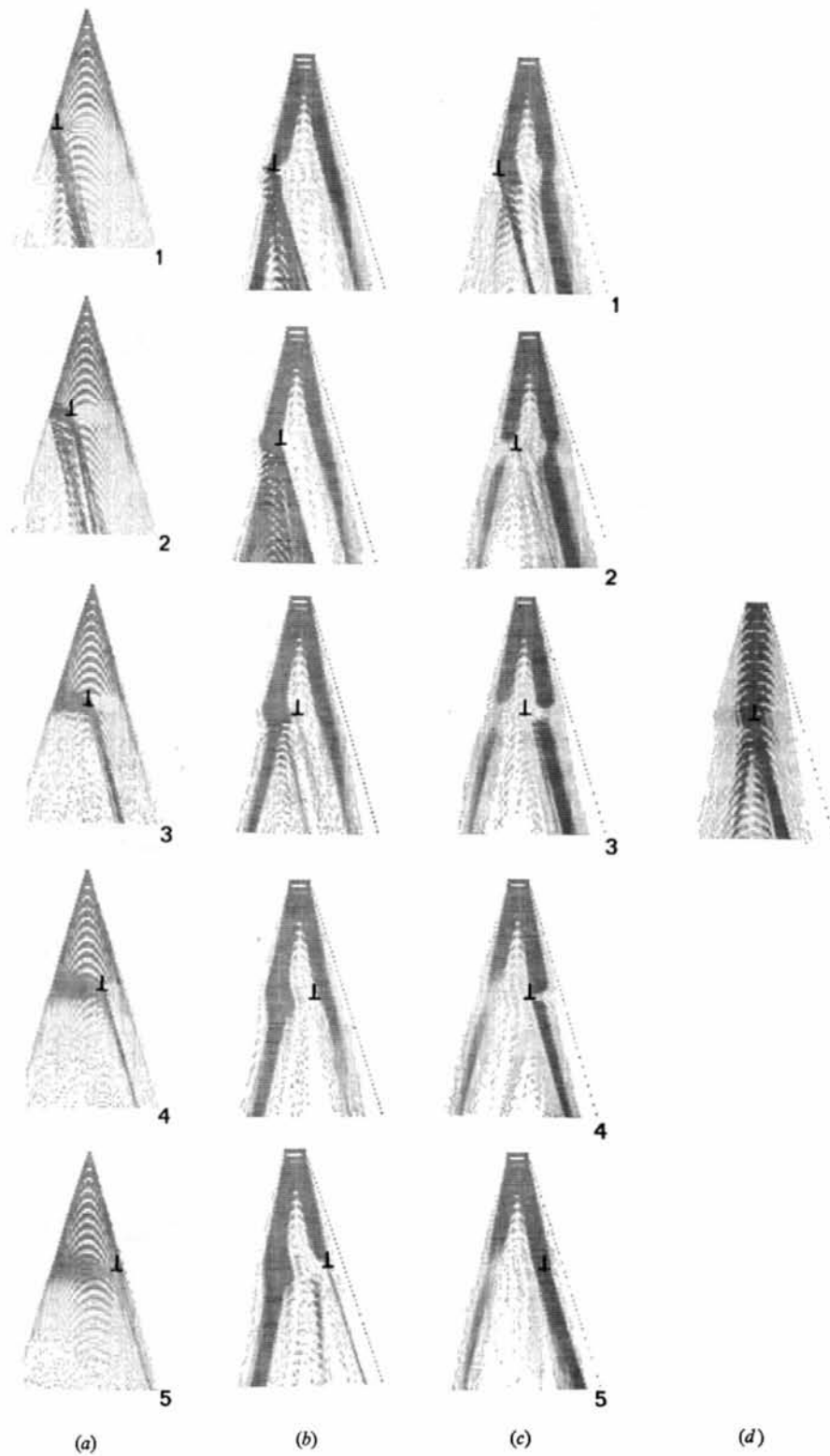


Fig. 13. Simulation d'une dislocation coin $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[110]$. Toutes les autres conditions sont identiques aux simulations précédentes. (a) Cas de l'onde sphérique. (b) $\eta = 1$. (c) $\eta = -1$. (d) $\eta = 0$.

- HIRTH, J. P. & LOTHE, J. (1968). *Theory of Dislocations*, pp. 398–440. New York: McGraw-Hill.
- KAMBE, K. (1963). *Z. Naturforsch.* **18a**, 1010–1011.
- KATO, N. (1963). *J. Phys. Soc. Japan*, **18**, 1785–1791.
- KATO, N. (1974). *X-Ray Diffraction*, pp. 350–436. New York: McGraw-Hill.
- LITZMANN, O. & JANAČEK, Z. (1974). *Phys. Stat. Sol. (a)*, **25**, 663–666.
- PENNING, P. & POLDER, D. (1961). *Philips Res. Rep.* **16**, 419–440.
- STROH, A. N. (1958). *Phil. Mag.* **3**, 625–646.
- TAKAGI, S. (1962). *Acta Cryst.* **15**, 1311–1312.
- TAKAGI, S. (1969). *J. Phys. Soc. Japan*, **26**, 1239–1253.
- TAUPIN, D. (1964). *Bull. Soc. Fr. Minér. Crist.* **87**, 469–511.
- TAUPIN, D. (1967). *Acta Cryst.* **23**, 25–35.

Acta Cryst. (1975). A**31**, 600

Analytic Approximations to Incoherently Scattered X-Ray Intensities

BY H. H. M. BALYUZI

Physics Department, Queen Elizabeth College (University of London), Campden Hill Road, London W8, England

(Received 8 August 1974; accepted 25 January 1975)

The theoretically calculated incoherently scattered X-ray intensities of Cromer & Mann [*J. Chem. Phys.* (1967). **47**, 1892–1893] and Cromer [*J. Chem. Phys.* (1969). **50**, 4857–4859] for the elements 2 to 95 and 102 have been fitted to an analytic function. The coefficients of fit are tabulated and the accuracy of the fitting is discussed. The accuracy is very good for $\sin \theta/\lambda \leq 1.5 \text{ \AA}^{-1}$.

In studies of liquids and amorphous solids by X-ray diffraction it is often necessary to remove the incoherently scattered contribution to the measured intensities. This contribution may be calculated using data taken from published tables of theoretically calculated atomic incoherent X-ray intensities [$I_{inc}(s)$, $s = \sin \theta/\lambda$], e.g. *International Tables for X-ray Crystallography* (1962), Cromer & Mann (1967), Cromer (1969), Tavard, Nicolas & Rouault (1967). These published intensities are however only tabulated for certain fixed values of s whereas in practice they may be needed for values of s other than these. It is convenient therefore to fit the tabulated data to an analytic function of s which may then be evaluated as required for any intermediate values of s . This has been done by Hajdu (1972) for the incoherent intensities calculated using Clementi wave functions by Tavard *et al.* (1967) for the elements from 2 to 36 inclusive. An almost complete set of incoherent intensities has been calculated by Cromer & Mann (1967) for spherically symmetric free atoms and by Cromer (1969) for aspherical free atoms using SCF Hartree-Fock wave functions; only the intensities for elements from 95 to 101 inclusive are missing from the set. In this paper the coefficients of an analytic function which has been fitted to this set of incoherent intensities are presented.

In the tables of Cromer & Mann (1967) and Cromer (1969) the incoherent intensities are listed for each element at s values 0.0, 0.005, 0.01, 0.05, 0.10, 0.15, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0, 1.5, 2.0, 3.0, 4.0, 5.0, 8.0 \AA^{-1} . In X-ray diffraction experiments intensity measurements are not usually made at values of s greater than 1.5 \AA^{-1} (the maximum possible value

of s attainable when using Mo $K\alpha$ X-rays in 1.41 \AA^{-1}) so it was decided to choose an analytic function which would fit the tabulated intensities well for s between 0.0 and 1.5 \AA^{-1} . Traditionally X-ray scattering factors have been fitted to a function which is the sum of a number of Gaussians and a constant; Cromer & Waber (1965) used four Gaussians and a constant and hence obtained a nine-coefficient fit. On the other hand electron scattering factors have been fitted to the sum of a number of Gaussians without any constant term, e.g. Smith & Burge (1962). It was therefore decided to try fitting $F(s) = Z - I_{inc}(s)$ (Z is the atomic number), which is a smoothly decreasing function of s of the same general form as X-ray and electron scattering factors, to the sum of either four Gaussians and a constant or of five Gaussians. Preliminary investigation showed that the latter gave a better overall fit and used less computer time in doing so. Hence the analytic function chosen was

$$F_{fit}(s) = \sum_{i=1}^5 a_i \exp(-b_i s^2),$$

where the a_i and b_i are the ten coefficients of fit. A non-linear least-squares fitting procedure (Pennington, 1970), in which the sum of the squares of the absolute differences between the fitted and tabulated values of $F(s)$ was minimized, was used to calculate the coefficients of fit. No weighting of the data was applied prior to the fitting procedure and hence no one region of s was emphasized relative to another.

In Table 1 the coefficients of fit are listed for each of the elements together with two indications of the quality of fit. The column headed MPD gives the mean