

Acta Cryst. (1952). 5, 393

Diffusion thermique des rayons X par des monocristaux de fer- α et dynamique du réseau cubique centré. Par H. CURIEN, *Laboratoire de Minéralogie à la Sorbonne, Paris 5, France*

(Reçu le 24 janvier 1952)

La mesure, en *valeur absolue*, des pouvoirs diffusants de monocristaux permet (Laval, 1941; Olmer, 1948) la détermination des courbes de dispersion des ondes d'agitation thermique dans un cristal (variation de la vitesse de propagation et de la fréquence de ces ondes avec leur longueur d'onde). Utilisant un spectromètre à chambre d'ionisation nous avons ainsi déterminé les vitesses et les fréquences de toutes les ondes longitudinales et transversales qui se propagent dans un monocristal de fer- α suivant les trois directions des axes quaternaire, ternaire et binaire (Curien, 1951). Pour les ondes très longues, nous trouvons des vitesses de propagation en très bon accord avec les valeurs calculées à partir des constantes élastiques. Ces courbes de dispersion permettent le calcul du spectre des fréquences (nombre de vibrations propres dont la fréquence est comprise entre ν et $\nu+d\nu$, pour toute valeur de ν). La Fig. 1 donne en tirets les courbes obtenues à partir des courbes de

dispersion pour les ondes qui se propagent respectivement dans la direction de l'axe quaternaire, binaire et ternaire. La courbe en trait plein donne le spectre total expérimental. Il est obtenu à partir des spectres correspondant aux trois axes par la méthode indiquée par Houston (1948). La chaleur spécifique atomique réticulaire calculée à partir de ce spectre est $c_r = 5,53$. La chaleur spécifique atomique totale à volume constant à 18° C. est $c_v = 6,05$ (Lapp, 1936). La chaleur spécifique électronique et magnétique est donc $c_e = 0,52$, valeur très grande comme pour tous les métaux ferromagnétiques.

D'autre part, on peut calculer, par la méthode de Born (1942-3), la matrice dynamique et l'équation séculaire relative au réseau cubique centré. Nous avons fait ce calcul *sans faire l'hypothèse des forces centrales*, en considérant les interactions d'un atome du réseau avec ses premiers voisins (8 atomes), ses deuxième voisins (6 atomes) et ses troisième voisins (12 atomes). Le calcul fait alors intervenir sept 'coefficients atomiques' dérivées secondes de l'énergie réticulaire du réseau légèrement perturbé par rapport aux divers déplacements des atomes à partir de leurs positions d'équilibre. On a calculé les courbes de dispersion des fréquences des ondes en fonction de ces coefficients atomiques. En comparant ces courbes calculées aux courbes expérimentales obtenues à partir de la mesure de la diffusion des rayons X par les monocristaux de fer, on trouve immédiatement la valeur numérique des coefficients atomiques pour ce cristal. Ces valeurs montrent que les forces de rappel agissant sur les atomes engagés dans le réseau ne sont pas exactement centrales. (Par exemple, le déplacement d'un deuxième voisin perpendiculairement à la droite qui le joint à l'atome central fait intervenir une force de rappel non nulle.) Les forces de rappel radiales résultant de déplacements radiaux dr des différents atomes sont:

pour un premier voisin: $F = 3,5 \times 10^4 dr$ dynes

pour un deuxième voisin: $F = 1,2 \times 10^4 dr$ dynes

pour un troisième voisin: $F = 0,5 \times 10^4 dr$ dynes

si dr est en centimètres.

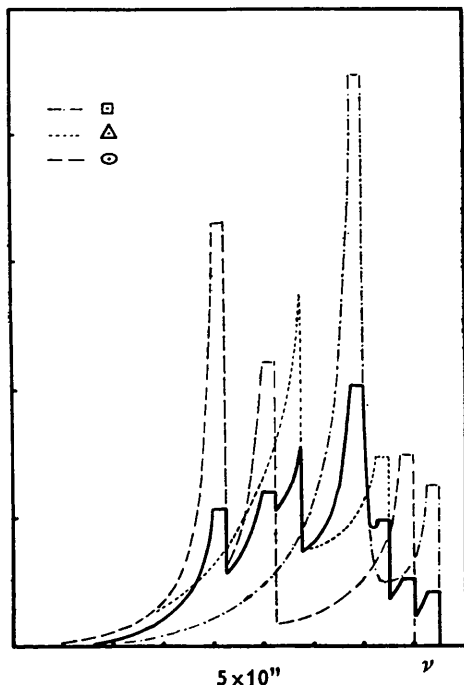


Fig. 1. Spectre des fréquences. En trait plein le spectre global. Les pics ont été coupés à une hauteur telle que leur largeur soit $2,5 \times 10^{11}$ qui est l'intervalle qui a servi au tracé de la courbe point par point.

Bibliographie

- BORN, M. (1942-3). *Rep. Phys. Soc. Prog. Phys.* 9, 294.
 CURIEN, H. (1951). Thèse, Paris.
 HOUSTON, W. (1948). *Rev. Mod. Phys.* 20, 161.
 LAPP, E. (1936). *Ann. Phys., Paris*, (2), 6, 326.
 LAVAL, J. (1941). *Bull. Soc. franç. Minér.* 64, 1.
 OLMER, P. (1948). *Bull. Soc. franç. Minér.* 71, 144.