

ANNALES DE L'I. H. P.

P.P. EWALD

**Optique cristalline (lumière et rayons X) Interaction
des atomes par rayonnement**

Annales de l'I. H. P., tome 8, n° 2 (1938), p. 79-110

[<http://www.numdam.org/item?id=AIHP_1938__8_2_79_0>](http://www.numdam.org/item?id=AIHP_1938__8_2_79_0)

© Gauthier-Villars, 1938, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la revue « Annales de l'I. H. P. » implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/conditions>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques
<http://www.numdam.org/>

Optique cristalline (lumière et rayons X) Interaction des atomes par rayonnement

par

P. P. EWALD.

1. **Introduction.** — On appelle théorie de la dispersion l'ensemble des calculs d'optique théorique qui servent à expliquer le passage de la lumière à travers la matière. La lumière étant retardée ou accélérée dans ce passage, on parlera de théorie de l'indice de réfraction ou plus simplement de théorie de la réfraction. L'absorption est un phénomène étroitement lié à la réfraction et sa théorie peut être reliée sans difficulté à celle de la réfraction; nous ne chercherons cependant pas à l'analyser ici. La diffusion de la lumière par les irrégularités des corps, est, au contraire, un phénomène très différent de la réfraction et qui disparaît même lorsqu'on a affaire à un corps parfaitement régulier; c'est ce modèle que nous allons prendre comme base de discussion.

La réfraction, au sens strict, de même que la réflexion, ne se produit guère qu'à la surface d'un corps. Nous ne nous occuperons pas ici de la réfraction superficielle et des autres phénomènes de transition à la surface, dont la théorie serait nécessaire pour rattacher le champ optique à l'intérieur du corps au champ extérieur. Qu'il suffise de remarquer que ces questions de surface se laissent facilement étudier lorsqu'on a résolu les problèmes de propagation à l'intérieur et qu'ils conduisent aux relations de Fresnel entre les amplitudes des ondes incidente, réfractée et réfléchie.

Pour définir exactement la théorie de la dispersion ou de la réfraction, qui formera l'objet de cette étude, nous nous proposons d'étudier la *propagation d'un système d'ondes planes dans un cristal idéalisé*. Une onde plane ne saurait exister en toute rigueur à l'intérieur d'un

corps, dont les charges atomiques déforment tout champ électrique d'une façon très compliquée. Nous devons donc définir le champ optique comme consistant, à un certain degré d'approximation, en une seule onde plane (lumière visible) ou en un nombre fini d'ondes planes (rayons X).

L'idéalisation du cristal consiste à réduire celui-ci au modèle le plus simple doué des deux propriétés caractéristiques de la matière cristallisée, à savoir la périodicité et l'anisotropie : nous considérons donc un réseau simple (réseau de Bravais) constitué de dipôles d'une certaine fréquence propre donnée.

Le remplacement des atomes du cristal réel par des dipôles appelle certaines remarques. Bien que l'interaction entre le champ optique et l'atome soit un problème de dynamique atomique, donc de mécanique ondulatoire, nous y substituerons le modèle classique correspondant à l'époque des premières études de H. A. Lorentz. La théorie atomique est aussi appelée théorie de la dispersion par certains théoriciens; pour nous, elle est plutôt une théorie de la polarisabilité; elle conduit au résultat suivant : l'interaction se laisse décrire au moyen de la théorie classique et l'atome ondulatoire équivaut à un dipôle, dont le moment se laisse calculer pour chaque fréquence. L'onde émise par l'atome plongé dans le champ optique ne diffère pas de l'onde sphérique d'un dipôle convenable tant que la longueur d'onde reste grande par rapport aux dimensions de l'atome; et si cette condition n'est plus valable dans le cas des rayons X, la réaction de l'atome est très proche de celle d'un système de dipôles répartis dans le domaine atomique. Ainsi, nous pouvons nous borner au modèle dipolaire de l'atome pour l'étude que nous nous proposons d'entreprendre ici et qui peut être caractérisée comme l'étude de *l'interaction mutuelle des atomes par le moyen de leurs radiations induites*.

Ce même problème peut être énoncé sous d'autres formes équivalentes; en voici deux :

a. Considérons la réaction d'un atome isolé sur une onde lumineuse, réaction déterminée par la fréquence propre du dipôle équivalent. Introduisons ensuite l'atome à l'intérieur du réseau cristallin; outre le champ optique provenant des atomes lointains du même corps, l'atome sera influencé par les champs émanant de ses voisins, lesquels, partageant le même sort, auront acquis un moment dipolaire. Cette influence mutuelle

a pour résultat, comme l'a d'abord montré W.-L. Bragg ⁽¹⁾, d'augmenter la polarisabilité de l'atome entouré d'autres atomes. Ceci peut être énoncé sous la forme d'un changement apparent de fréquence propre du dipôle équivalent à l'atome, par suite de l'interaction des atomes du réseau. Ce changement dépend de l'orientation du moment électrique des atomes par rapport aux axes de translation du cristal, et cette influence, qui change avec la direction des dipôles, donne lieu à la double réfraction et aux autres phénomènes d'optique cristalline. Le calcul de la double réfraction dépend donc essentiellement (quoique pas uniquement, comme nous le remarquerons au dernier paragraphe) de l'interaction des dipôles formés par le passage du champ optique.

- b. Prenons le cas des rayons X. Une seule onde de longueur d'onde et de direction fixées ne pourra pas, dans les cas les plus intéressants, se propager sans être accompagnée par d'autres ondes planes de même fréquence, ayant cependant d'autres directions et éventuellement d'autres longueurs d'onde. Ce seront les ondes diffractées de la première onde par réflexion interne sur les plans réticulaires, suivant la loi de Bragg. L'onde que nous venons de désigner comme la première ne se distingue en rien des autres; le système des plans réticulaires permet de passer
- par réflexion d'une onde quelconque à une autre. C'est l'ensemble de ces ondes, qui forme une unité inséparable, que nous devons appeler, dans le cas des rayons X, champ optique et dont nous devons étudier la propagation dans le cristal.

Dans ce cas, il semble préférable de parler de l'interaction des ondes du champ optique plutôt que de celle des atomes. Car supposons qu'une seule de ces ondes soit trop forte par rapport aux autres; elle perdra de l'intensité par réflexion et la transmettra aux autres ondes qui en gagneront jusqu'à ce qu'un régime d'équilibre s'établisse. La propagation permanente demande un équilibre d'interaction des ondes constituantes.

Cependant, puisque ces ondes proviennent des dipôles et constituent en même temps leurs moyens d'interaction, on peut aussi envisager cet équilibre comme exprimant l'interaction des atomes, comme dans le cas des ondes visibles.

⁽¹⁾ W.-L. BRAGG, *Proc. Roy. Soc. London A*, 105, 1924, p. 370; cf. aussi P. P. EWALD, *Dissertation ou Annalen der Physik.*, 49, 1916, p. 1, fig. 1.

C'est donc en tout cas le détail de cette interaction entre atomes au moyen du rayonnement émis qui nous intéresse ici. Et pour ne pas dépasser les limites de ce sujet nous laisserons de côté toutes les complications qui apparaissent lorsqu'on veut comparer les résultats des calculs aux propriétés optiques des cristaux réels.

2. Notions géométriques; réseau du cristal et de Fourier. — Nous supposons le cristal illimité et ses dipôles arrangés selon un réseau de translations $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$. La cellule élémentaire a le volume v_a . L'indice l — représentant un triplet de nombres entiers, l_1, l_2, l_3 — désigne le dipôle au point

$$(2.1) \quad \mathbf{x}_l = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3.$$

Parallèlement au réseau du cristal nous considérons le *réseau de Fourier* déduit du premier par une transformation de Fourier. (Ce réseau est aussi connu sous le nom de *réseau réciproque*. Mais puisque la réciprocité est une qualité relative à deux choses, nous préférons donner un nouveau nom au complément du réseau cristallin. L'étude d'un cristal à base étendue — atome de grandeur finie ou plusieurs sortes d'atomes — montre qu'on passe du réseau cristallin à l'autre par une transformation de Fourier.)

Le réseau de Fourier est, dans le cas d'un réseau simple, un autre réseau simple formé avec les vecteurs ($\mathbf{b}$) réciproques des translations ($\mathbf{a}$)

$$(2.2) \quad (\mathbf{a}_i \mathbf{b}_k) = \delta_{ik} = \begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases}, \quad \mathbf{b}_1 = \frac{[\mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3]}{v_a}, \quad \mathbf{a}_1 = \frac{[\mathbf{b}_2 \mathbf{b}_3]}{v_b} \quad (v_a v_b = 1).$$

Avec les nombres entiers h_i un point de ce réseau sera donné par le vecteur

$$(2.3) \quad \mathbf{b}_h = h_1 \mathbf{b}_1 + h_2 \mathbf{b}_2 + h_3 \mathbf{b}_3.$$

Chaque fonction qui est périodique dans le réseau du cristal, donc $f(\mathbf{x} + \mathbf{x}_l) = f(\mathbf{x})$, sera représentée dans le réseau de Fourier par une somme d'ondes planes, dont les vecteurs d'onde parcourent tous les points nodaux du réseau :

$$(2.4) \quad f(\mathbf{x}) = \sum_h \Lambda_h e^{2\pi i \mathbf{b}_h \mathbf{x}}, \quad \Lambda_h = \frac{1}{v_a} \int_{\square} f(\mathbf{x}) e^{-2\pi i \mathbf{b}_h \mathbf{x}} d\mathbf{x}.$$

Cette forme pour la série de Fourier se déduit de l'observation que le produit

$$(\mathbf{b}_h \mathbf{x}_l) = \Sigma h_i l_i = \text{nombre entier}$$

garantit la périodicité suivant la maille du cristal. Les coefficients de Fourier s'obtiennent par intégration de la fonction donnée dans la maille v_a . En attribuant comme poids à chaque point b_h du réseau de Fourier le coefficient A_h , ce réseau chargé de poids devient la transformée de Fourier de la fonction périodique dans l'espace du cristal. Une fonction non périodique dans cet espace peut être développée en intégrale de Fourier

$$(2.4') \quad f(\mathbf{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} A(\eta) e^{2\pi i(\mathbf{b}_\eta \mathbf{x})} d\eta, \quad A(\eta) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{x}) e^{-2\pi i(\mathbf{b}_\eta \mathbf{x})} d\mathbf{x}$$

et la transformée de Fourier $A(\eta)$ s'étendra de façon continue à travers l'espace de Fourier.

Considérons quelques cas particuliers de cette transformation.

a. Réseau cristallin avec base. — Si la cellule du cristal est remplie d'une façon continue de matière, il y aura une densité $\rho(\mathbf{x})$ de matière, fonction supposée connue, et (2.4) donne comme poids

$$(2.5) \quad A_h = \frac{1}{v_a} \int \rho(\mathbf{x}) e^{-2\pi i(\mathbf{b}_h \mathbf{x})} d\mathbf{x}.$$

Si au contraire on regarde les masses $m^{(k)}$ des atomes concentrées aux points $\mathbf{x}^{(k)}$ (vecteurs de la base), cette intégrale se réduit à

$$(2.5') \quad A_h = \frac{1}{v_a} \sum_{(k)} m^{(k)} e^{-2\pi i(\mathbf{b}_h \mathbf{x}^{(k)})},$$

expression connue sous le nom de *facteur de structure* dans la théorie de la diffraction des rayons X.

b. Réseau formé d'atomes dont la densité est répartie suivant la loi de Gauss. — Pour passer d'une distribution continue à une distribution discontinue de masses atomiques, il convient d'étudier une distribution de Gauss de densité autour des points $\mathbf{x}_l$

$$(2.6) \quad \rho_l(\mathbf{x}) = \frac{m}{(\pi\alpha^2)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{(\mathbf{x}-\mathbf{x}_l)^2}{\alpha^2}}$$

(α = « largeur de l'atome », m = masse intégrale de l'atome). Le coefficient de Fourier peut être facilement obtenu en remplaçant l'intégration limitée de la somme par l'intégration d'un seul membre sur l'espace tout entier

$$\begin{aligned} A_h &= \frac{m}{(\pi\alpha^2)^{\frac{3}{2}}} \frac{1}{v_a} \int_{\square} \sum_l e^{-\frac{(\mathbf{x}-\mathbf{x}_l)^2}{\alpha^2} - 2\pi i(\mathbf{b}_h\mathbf{x})} dv_x \\ &= \dots \int_{\infty} e^{-\frac{(\mathbf{x}-\mathbf{x}_l)^2}{\alpha^2} - 2\pi i(\mathbf{b}_h\mathbf{x})} dv_x \\ &= \frac{m}{v_a} e^{-\pi^2 \alpha^2 \mathbf{b}_h^2}. \end{aligned}$$

On aura donc l'identité

$$(2.7) \quad \varphi(\mathbf{x}) = \sum_l \frac{m}{(\pi\alpha^2)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{(\mathbf{x}-\mathbf{x}_l)^2}{\alpha^2}} = \sum_n \frac{m}{v_a} e^{-\pi^2 \alpha^2 \mathbf{b}_h^2 + 2\pi i(\mathbf{b}_h\mathbf{x})}.$$

Pour les atomes régis par la loi de Gauss (dont nous parlerons comme atomes de Gauss) le réseau de Fourier comporte des poids qui décroissent comme des fonctions de Gauss avec leur distance $|\mathbf{b}_h|$ de l'origine. Du fait que l'on constate dans les expériences une telle décroissance des intensités de diffraction $\mathbf{X}$ par suite du mouvement d'agitation thermique, on peut conclure que les centres de diffraction, déplacés de leur position stable par cette agitation, agissent comme s'ils étaient répartis suivant une fonction de Gauss autour de chaque point du réseau idéal.

3. Calculs de potentiels électriques et optiques. — a. Potentiel électrostatique. — Une charge ponctuelle e au point $\mathbf{x}_l$ donne lieu au potentiel

$$(3.1) \quad u_l(\mathbf{x}) = \frac{e}{4\pi |\mathbf{x} - \mathbf{x}_l|},$$

qui obéit à l'équation de Poisson

$$(3.1') \quad \Delta u_l = \begin{cases} 0 & \mathbf{x} \neq \mathbf{x}_l, \\ \infty & \mathbf{x} = \mathbf{x}_l \end{cases} \quad \text{avec} \quad \int_{\odot} \Delta u dv_x = -e.$$

La somme réticulaire de tels potentiels du même signe sera divergente à cause de la valeur moyenne infinie. Mais comme le terme infini sera compensé dans tout cristal neutre, il ne constitue pas une difficulté réelle. Pour opérer sur des séries convergentes nous remplaçons Δu_l par

une distribution de Gauss autour du point $\mathbf{x}_l$

$$(3.2) \quad \Delta v_l = - \frac{e}{(\pi \alpha^2)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{(\mathbf{x}-\mathbf{x}_l)^2}{\alpha^2}}$$

et nous faisons la somme réticulaire en la transformant selon le dernier paragraphe :

$$(3.3) \quad \Delta v \equiv \sum_l \Delta v_l = - \frac{e}{v_a} \sum_h e^{-\pi^2 \alpha^2 b_h^2 + 2\pi i (\mathbf{b}_h \mathbf{x})}.$$

Puisque $v = \sum v_l$ est une fonction périodique, donc de la forme (2.4), nous pouvons tirer v de la dernière équation et nous obtenons le potentiel électrostatique dû à des atomes de Gauss

$$(3.4) \quad v = \sum_l v_l = + \frac{e}{v_a} \sum_h \frac{e^{-\pi^2 \alpha^2 b_h^2}}{4\pi^2 b_h^2} e^{2\pi i (\mathbf{b}_h \mathbf{x})}.$$

En passant à la limite $\alpha \rightarrow 0$ on retombe sur les potentiels dus aux sources ponctuelles, ce qui donne la transformation

$$(3.5) \quad u \equiv \sum_l \frac{e}{4\pi |\mathbf{x} - \mathbf{x}_l|} = \frac{e}{v_a} \sum_h \frac{1}{4\pi^2 b_h^2} e^{2\pi i (\mathbf{b}_h \mathbf{x})}.$$

Pour v aussi bien que pour u le terme $b_h = 0$ donne le terme infini. Tandis que la somme v possède une convergence absolue et uniforme pour toute valeur de $\mathbf{x}$, u à cause du facteur exponentiel oscillant est rendu convergent que pour $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}_l$. On se rend compte facilement de la signification de v_l : c'est le potentiel dû à une distribution de Gauss de la charge, donc

$$(3.4') \quad v_l = \frac{e}{(\pi \alpha^2)^{\frac{3}{2}}} \int \frac{e^{-\frac{(\boldsymbol{\xi}-\mathbf{x}_l)^2}{\alpha^2}}}{4\pi |\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}|} dv_{\boldsymbol{\xi}}.$$

b. Potentiel retardé de dipôles de même phase. — Pour un dipôle de moment $\mathbf{p}$, on obtient le champ de l'onde sphérique au moyen du potentiel retardé de Hertz

$$(3.6) \quad \mathbf{u}_l = \mathbf{p} \frac{e^{2\pi i k \frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_l}{c}}}{4\pi |\mathbf{x} - \mathbf{x}_l|} \quad \left(k = \frac{\nu}{q} = \frac{1}{\lambda} \text{ « nombre d'ondes »} \right).$$

Dans un milieu homogène diélectrique le double rotationnel de ce potentiel donne l'induction électrique $\mathbf{D}$.

Ce potentiel obéit à l'équation d'ondes

$$(3.6') \quad \Delta \mathbf{u}_l + 4\pi^2 k^2 \mathbf{u}_l = \begin{cases} 0 & \mathbf{x} \neq \mathbf{x}_l \\ \infty & \mathbf{x} = \mathbf{x}_l \end{cases} \quad \text{avec} \quad \int_{\odot} \Delta \mathbf{u}_l d\nu_x = -\mathbf{p}_l.$$

Proposons-nous d'obtenir la somme réticulaire, fonction périodique, donc de la forme

$$(3.7) \quad \mathbf{U} = \sum_l \mathbf{u}_l = \sum_h \Lambda_h e^{2\pi i(\mathbf{b}_h \mathbf{x})}.$$

En remplaçant $\mathbf{u}_l$ par $\mathbf{v}_l$, soumis à l'équation

$$(3.8) \quad \Delta \mathbf{v}_l + 4\pi^2 k^2 \mathbf{v}_l = \text{fonction de Gauss},$$

nous procédons comme pour les potentiels électrostatiques en appliquant la transformation (2.7) pour la somme de Gauss. On obtient

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \sum_l \mathbf{v}_l = \sum_h \mathbf{B}_h e^{2\pi i(\mathbf{b}_h \mathbf{x})}, \\ \Delta \mathbf{v} + 4\pi^2 k^2 \mathbf{v} &= \sum_h 4\pi^2 (-b_h^2 + k^2) \mathbf{B}_h e^{2\pi i(\mathbf{b}_h \mathbf{x})} = \sum_h -\frac{\mathbf{p}}{v_a} e^{-\pi^2 \alpha^2 b_h^2 + 2\pi i(\mathbf{b}_h \mathbf{x})}, \end{aligned}$$

d'où

$$(3.8') \quad \mathbf{v} = \frac{\mathbf{p}}{v_a} \sum_h \frac{e^{-\pi^2 \alpha^2 b_h^2}}{4\pi^2 (b_h^2 - k^2)} e^{2\pi i(\mathbf{b}_h \mathbf{x})}.$$

Cette expression nous donne la somme des potentiels retardés dus aux dipôles de Gauss, tous de même phase. En passant à la limite $\alpha \rightarrow 0$, on obtient le potentiel provenant de dipôles ponctuels de même phase

$$(3.9) \quad \mathbf{U} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \mathbf{v} = \frac{\mathbf{p}}{v_a} \sum_h \frac{1}{4\pi^2 (b_h^2 - k^2)} e^{2\pi i(\mathbf{b}_h \mathbf{x})}.$$

c. Potentiel optique. — Si la phase des dipôles varie suivant la loi de propagation d'une onde plane à vecteur d'onde $\mathbf{k}_l$, on aura

$$(3.10) \quad \mathbf{p}_l = \mathbf{p} e^{2\pi i(\mathbf{k}_l \mathbf{x}_l)}, \quad \mathbf{3} = \sum_l \mathbf{p} e^{2\pi i(\mathbf{k}_l \mathbf{x}_l)} \frac{e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{x}_l}}{4\pi |\mathbf{x} - \mathbf{x}_l|}.$$

Ce potentiel optique $\mathbf{3}$ diffère du cas précédent par la « modulation » $e^{2\pi i(\mathbf{k}_l \mathbf{x}_l)}$.

Or, l'image de Fourier de la somme réticulaire modulée d'une fonc-

tion $g(\mathbf{x})$ est obtenue par un changement d'origine dans l'espace de Fourier, la nouvelle origine étant située au point $-\mathbf{k}_1$ de cet espace.

En effet, si la répétition sans modulation donne

$$(3.11) \quad \left\{ \begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= \sum_l g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_l) = \sum \Lambda(\mathbf{b}_h) e^{2\pi i \mathbf{b}_h \mathbf{x}}; \\ \Lambda(\mathbf{b}_h) &= \frac{1}{v_a} \int_{\square} \sum_l g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_l) e^{-2\pi i \mathbf{b}_h \mathbf{x}} d\nu_x = \frac{1}{v_a} \int_{\infty} g(\mathbf{x}) e^{-2\pi i \mathbf{b}_h \mathbf{x}} d\nu_x; \end{aligned} \right.$$

on aura pour la somme réticulaire modulée

$$(3.11') \quad \begin{aligned} F(\mathbf{x}) &= \sum_l g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_l) e^{2\pi i \mathbf{k}_1 \mathbf{x}_l} = e^{2\pi i \mathbf{k}_1 \mathbf{x}} \sum_l g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_l) e^{2\pi i (\mathbf{k}_1 \mathbf{x}_l - \mathbf{x})} \\ &= e^{2\pi i \mathbf{k}_1 \mathbf{x}} \sum_h B_h e^{2\pi i (\mathbf{b}_h \mathbf{x})}, \end{aligned}$$

où

$$(3.11'') \quad \begin{aligned} B_h &= \frac{1}{v_a} \int_{\square} \sum_l g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_l) e^{-2\pi i (\mathbf{b}_h + \mathbf{k}_1) \mathbf{x}} d\nu_x e^{2\pi i (\mathbf{k}_1 \mathbf{x}_l)} \\ &= \frac{1}{v_a} \int_{\infty} g(\mathbf{x}) e^{-2\pi i (\mathbf{b}_h + \mathbf{k}_1) \mathbf{x}} d\nu_x = \Lambda(\mathbf{b}_h + \mathbf{k}_1). \end{aligned}$$

Appelant alors

$$(3.12) \quad \mathbf{K}_h = \mathbf{b}_h + \mathbf{k}_1,$$

$F(x)$ devient

$$(3.13) \quad F(\mathbf{x}) = \sum \Lambda(\mathbf{K}_h) e^{2\pi i \mathbf{K}_h \mathbf{x}};$$

c'est-à-dire que pour tenir compte de la modulation, il suffit d'un changement d'origine, qui fait remplacer $\mathbf{b}_h$ par $\mathbf{K}_h$ pour les coefficients et pour les vecteurs d'onde dans le développement de Fourier.

Appliquant ce théorème pour changer le potentiel retardé isophasé en potentiel optique, on obtient pour celui-ci :

$$(3.14) \quad \mathcal{V} = \sum_l \mathbf{p} e^{2\pi i \mathbf{k}_1 \mathbf{x}_l} \frac{e^{2\pi i k |\mathbf{x} - \mathbf{x}_l|}}{4\pi |\mathbf{x} - \mathbf{x}_l|} = \frac{\mathbf{p}}{v_a} \sum_h \frac{e^{2\pi i \mathbf{K}_h \mathbf{x}}}{4\pi^2 (\mathbf{K}_h^2 - k^2)}.$$

Il est à remarquer qu'il est souvent préférable, du point de vue de la convergence, d'envisager un potentiel optique provenant de dipôles non ponctuels, mais du type de Gauss. Il faudra alors remonter à la

formule (3.8)' pour v , d'où l'on obtient, en changeant $\mathbf{b}_h$ en $\mathbf{K}_h$

$$(3.15) \quad \mathfrak{Z}^{(1)} = \frac{\mathbf{p}}{v_a} \sum_h \frac{e^{-\pi^2 \alpha^2 \mathbf{K}_h^2}}{4\pi^2 (\mathbf{K}_h^2 - k^2)} e^{2\pi i (\mathbf{K}_h \mathbf{x})},$$

série absolument convergente.

4. **Le champ optique et le problème de la dispersion.** — En vue de la convergence de cette dernière série, on ne doit pas craindre d'effectuer sur la seconde série (3.14) l'opération **rot rot**, qui conduit du potentiel au champ, même si la convergence formelle de $\mathfrak{Z}$ cesse ($\mathfrak{Z}^{(1)}$ se laisse différencier autant de fois qu'on voudra). Pour le produit d'un scalaire α avec un vecteur constant $\mathbf{p}$, on a

$$\text{rot } \alpha \mathbf{p} = -[\mathbf{p} \text{ grad } \alpha] \quad (\text{produit vectoriel}),$$

donc,

$$\text{rot } \mathbf{p} e^{2\pi i \mathbf{K}_h \mathbf{x}} = -[\mathbf{p} \cdot 2\pi i \mathbf{K}_h] e^{2\pi i \mathbf{K}_h \mathbf{x}}$$

et

$$(4.1) \quad \text{rot rot } \mathbf{p} e^{2\pi i \mathbf{K}_h \mathbf{x}} = [[\mathbf{p} \cdot 2\pi i \mathbf{K}_h] \cdot 2\pi i \mathbf{K}_h] e^{2\pi i \mathbf{K}_h \mathbf{x}}.$$

Désignons la composante vectorielle de $\mathbf{p}$ normale à $\mathbf{K}_h$ par

$$(4.2) \quad \mathbf{p}_{\perp \mathbf{K}_h} = \mathbf{p} - \frac{1}{\mathbf{K}_h^2} \mathbf{K}_h (\mathbf{p} \mathbf{K}_h) = - \frac{[[\mathbf{p} \mathbf{K}_h] \mathbf{K}_h]}{\mathbf{K}_h^2},$$

cela nous permet d'écrire

$$(4.3) \quad \mathbf{D} \equiv \text{rot rot } \mathfrak{Z} = \frac{1}{v_a} \sum_h \mathbf{p}_{\perp \mathbf{K}_h} \frac{\mathbf{K}_h^2}{\mathbf{K}_h^2 - k^2} e^{2\pi i \mathbf{K}_h \mathbf{x}}.$$

Cette représentation du champ optique en série triplement infinie d'ondes planes est très remarquable. D'abord, c'est une *expression rigoureuse*, valable pour toute longueur d'onde. Elle contient donc les phénomènes d'optique du visible et des rayons X. Au delà du visible, elle se laisse prolonger pour le champ électrostatique d'un ensemble réticulaire de dipôles statiques. Rappelons qu'il suffit d'ajouter un facteur de convergence de la forme $e^{-\pi^2 \alpha^2 \mathbf{K}_h^2}$ pour supprimer toutes les difficultés provenant de l'absence d'étendue des dipôles.

Interprétons géométriquement la somme précédente. La moitié gauche de la figure 1 indique le réseau cristallin de translation $\mathbf{a}_i$ et la direction de propagation de la phase des dipôles. Du côté droit, on voit

le réseau de Fourier de translation $\mathbf{b}_i$ et le point de propagation A, tel que $\vec{AO} = \mathbf{k}_i$. Autour de A, on a tracé la *sphère de propagation* de rayon k . D'après (4.3), la somme $\mathbf{D}$ est à étendre à chaque point du réseau et l'amplitude des ondes composantes devient très grande pour

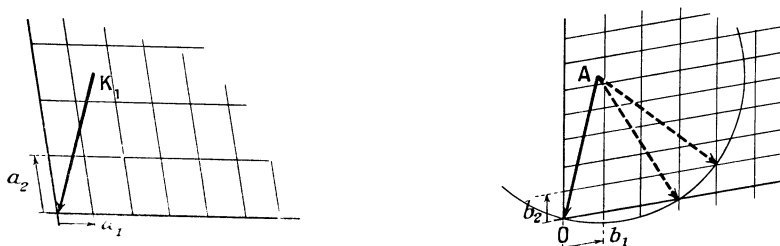


Fig. 1. — Réseau du cristal et réseau Fourier, avec représentation du champ optique X.

les termes qui sont représentés par des points situés près de la surface de la sphère de propagation. Les points à l'intérieur de la sphère donnent lieu à des ondes de vitesse de phase plus grande que dans le vide; au contraire, les termes des grands $\mathbf{K}_h$ sont des ondes de très petite vitesse de phase. La figure correspond à des ordres de grandeur valables pour les rayons X dans les cristaux ordinaires ($\frac{k}{b} \sim \frac{a}{\lambda} \sim 5$). Le cas d'un champ optique du spectre visible sera représenté par la figure 2, qui montre non seulement la cellule du réseau de Fourier beaucoup plus grande par rapport à $\mathbf{k}$ ($\frac{a}{\lambda} \sim 10^{-3}$), mais aussi le rayon k de la sphère de propagation fort différent de la longueur $AO = \mathbf{k}_i$, en tenant compte du fait que $\frac{k_i}{k} = \mu$ (indice de réfraction) diffère de beaucoup de l'unité pour la lumière visible et de très peu pour les rayons X.

Dans le cas des rayons X, il pourra se produire une très grande amplitude pour quelques-unes des ondes composantes du champ entier. Le nombre et le choix de ces ondes fortes dépendra de la situation du point de propagation; il nous suffira d'en supposer connus le nombre n et les directions $\mathbf{s}_1 \dots \mathbf{s}_n$ (vecteurs de longueur unité). C'est avec ce faisceau de n ondes planes que nous pouvons faire une approximation du champ optique total $\mathbf{D}$ dans le cas des rayons X, et la question qui se pose à la théorie est donc de déterminer pour A, point de propagation représentant ce champ, le lieu tel que le champ maintienne les oscil-

lations des dipôles dont il provient. Bien entendu, nous devons partir d'un point A assez proche de sa position finale pour que les n ondes restent toujours les ondes fortes du champ total, bonne approximation de la série infinie. Ceci ne présente pas d'inconvénient pour les rayons X, puisque l'écart est très petit entre les résultats de cette théorie dynamique et de la théorie simple sans indice de réfraction (théorie de Laue-Bragg).

Dans le cas de la lumière visible, l'approximation conduirait à réduire la somme **D** au premier terme, $O = (000)$ étant le seul point près de la sphère de propagation (*fig. 2*). La formule de dispersion qui s'en

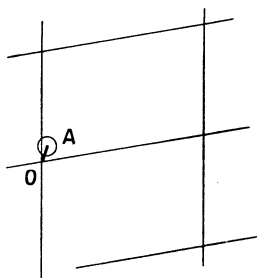


Fig. 2. — Réseau de Fourier, avec représentation d'un champ optique de lumière visible.

déduit est peu satisfaisante. Cela est dû à la grande valeur de l'indice de réfraction. Il ne sera donc pas permis de négliger les « ondes faibles » de la somme totale. En outre, tout résultat dépend de l'évaluation exacte du « champ d'excitation », dont la différence vis-à-vis du champ total provient des membres « faibles » de la somme **D**. C'est ce champ d'excitation qui contient la cause des phénomènes d'optique cristalline — en tant que contenus dans cette théorie d'interaction de rayonnement, — et le plus grand soin doit être apporté à son calcul. Nous en parlerons dans les paragraphes suivants.

§. L'équation de mouvement des dipôles. — Un dipôle isolé placé dans un champ homogène et constant de force électrique **E** acquiert un moment **p** qu'on écrit

$$(\S. 1) \quad \mathbf{p} = \alpha \mathbf{E} \quad (\alpha = \text{polarisabilité}).$$

Si le dipôle possède la fréquence propre ν_0 , il subsiste dans un champ

statique la relation $\alpha = \frac{e^2}{m} : (2\pi\nu_0)^2$ (e , m charge et masse du dipôle). Dans le cas d'oscillations forcées, assez lentes pour qu'on puisse négliger les effets de radiation sur le mouvement du dipôle, on obtiendra la polarisabilité pour la fréquence ν

$$(5.1') \quad \alpha = \frac{e^2/m}{4\pi^2(\nu_0^2 - \nu^2)}.$$

Nous allons garder cette définition de la polarisabilité. Ceci a pour conséquence, que pour les oscillations de fréquence élevée il faut interpréter la relation (1), de telle manière que $\mathbf{E}$ ne représente pas seulement le champ « extérieur » qui existerait à l'endroit du dipôle même si celui-ci était enlevé, mais aussi le champ de rayonnement du dipôle lui-même, qui entraîne une réaction sur celui-ci.

La nécessité d'une telle réaction se pose si l'on envisage un dipôle auquel on a donné un moment initial et qu'on laisse exécuter ses oscillations sans qu'aucune force extérieure n'agisse. L'amortissement de ses oscillations, nécessaire d'un point de vue énergétique à cause de la radiation d'énergie du dipôle à l'infini, doit être produit par l'action d'un champ électrique, puisqu'il n'y a pas d'autre moyen d'attaquer le dipôle que les forces électriques. En absence d'un champ extérieur, c'est bien le champ émis par le dipôle lui-même qui produit l'amortissement.

Pour pouvoir conserver les relations (5.1) et (5.1'), nous devons donc comprendre dans $\mathbf{E}$ (équation 5.1) le champ provenant de sources extérieures au dipôle, plus le champ de réaction du dipôle lui-même. Ce champ est proportionnel à $\mathbf{p}$; on en trouve la grandeur en suivant le flux d'énergie produit par l'action combinée de l'onde sphérique du dipôle et du champ homogène de fréquence ν induisant le dipôle et en posant que le flux total moyen qui passe par une très petite sphère entourant le dipôle soit nul, condition déterminant le dipôle sans absorption d'énergie. On voit que cette détermination de la force réactive de rayonnement est indépendante du sort ultérieur de l'énergie émise, puisqu'elle n'entraîne que des calculs du flux d'énergie dans l'entourage immédiat du dipôle. Par ces calculs, on obtient comme équation de mouvement du dipôle

$$(5.2) \quad \mathbf{p} = \alpha \left\{ \mathbf{E}_0 + \frac{2}{3} \frac{i}{4\pi} (2\pi k)^3 \mathbf{p} \right\}.$$

Ici $\mathbf{E}_0$ est le champ extérieur. Le champ de réaction conduit pour le cas d'un seul dipôle à l'amortissement usuel par rayonnement, le facteur i indiquant que ce champ produit une différence de phase entre le dipôle et le champ extérieur $\mathbf{E}_0$. α est ici donné par (5.1').

6. Calcul du champ d'excitation pour un dipôle du réseau cristallin.

— Pour éviter la confusion avec le champ extérieur tombant sur un cristal limité, nous allons appeler *champ d'excitation* le champ provenant des autres dipôles et qui agit sur un dipôle à l'intérieur d'un cristal illimité. Pour obtenir ce champ, il faudra déduire de la somme $\mathbf{D}$ (4.3), produite par l'action de tous les dipôles, la contribution due au dipôle particulier envisagé et ensuite obtenir à l'endroit du dipôle même la valeur du champ restant. Cette soustraction n'est pas facile à effectuer, puisque les deux champs deviennent infinis à l'endroit du dipôle et cela d'une manière très différente; pour $\mathbf{D}$ la convergence cesse par le fait que les facteurs exponentiels cessent de changer de phase pour $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_l$, tandis que le champ du dipôle isolé devient infini comme $|\mathbf{x} - \mathbf{x}_l|^{-3}$, multiplié avec une fonction d'angle. Aussi n'est-il pas pratique de développer le potentiel du dipôle particulier en série de Fourier à l'intérieur de la maille et de le soustraire du potentiel total 3 terme à terme. Cela donnerait des coefficients trop compliqués pour en tirer des résultats utilisables. Cette difficulté subsiste, même si l'on donne une grandeur finie aux dipôles en employant la somme convergente $\mathbf{3}^{(1)}$.

La méthode la plus efficace pour surmonter cette difficulté est l'emploi pour le potentiel et le champ d'une forme mixte entre la représentation en sources dans l'espace du cristal et la représentation en ondes dans l'espace de Fourier. Voici comment on y arrive :

a. Décomposition du potentiel d'un seul dipôle. — On part de l'identité facile à démontrer

$$(6.1) \quad \frac{e^{2\pi i k r}}{4\pi r} = \frac{1}{2\pi^{\frac{3}{2}}} \int_{(0)}^{\infty} e^{-r^2 \varepsilon^2 + \frac{\pi^2 k^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon.$$

Le chemin d'intégration doit partir de $\varepsilon = 0$ de telle façon que $\frac{k^2}{\varepsilon^2}$ possède une partie réelle négative pour $\varepsilon \rightarrow 0$. Pour chaque valeur finie de r , l'intégrale converge. Nous pouvons introduire un nombre réel E

intermédiaire entre 0 et ∞ et partager l'intégration en deux parties : (0) . . . E et E . . . ∞ , qui peuvent être évaluées séparément. En désignant par Φ l'intégrale d'erreur

$$(6.2) \quad \Phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt, \quad \int_x^\infty e^{-t^2} dt = \frac{\sqrt{\pi}}{2} [1 - \Phi(x)],$$

et en introduisant la nouvelle variable

$$r\varepsilon - \frac{\pi ik}{\varepsilon} = \eta, \quad d\varepsilon = \frac{1}{2r} (d\eta + d\sqrt{\eta^2 - 4\pi ikr}),$$

on trouve aisément comme deuxième partie de l'intégrale

$$(6.3) \quad \left(\frac{e^{2\pi ikr}}{4\pi r} \right)_{\text{II}} \equiv \frac{1}{2\pi^{\frac{3}{2}}} \int_E^\infty e^{-r^2\varepsilon^2 + \frac{\pi^2 k^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon \\ = \frac{1}{4\pi r} \left\{ \frac{1}{2} \left[e^{-2\pi ikr} \left[1 - \Phi \left(rE + \frac{i\pi k}{E} \right) \right] \right. \right. \\ \left. \left. + e^{-2\pi ikr} \left[1 - \Phi \left(rE - \frac{i\pi k}{E} \right) \right] \right] \right\}.$$

La première partie du chemin donne le reste de l'intégrale totale

$$(6.4) \quad \left(\frac{e^{2\pi ikr}}{4\pi r} \right)_I \equiv \frac{1}{2\pi^{\frac{3}{2}}} \int_{(0)}^E e^{-r^2\varepsilon^2 + \frac{\pi^2 k^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon \\ = \frac{1}{4\pi r} \left\{ i \sin 2\pi kr + \frac{1}{2} \left[e^{-2\pi ikr} \Phi \left(rE + \frac{i\pi k}{E} \right) \right. \right. \\ \left. \left. + e^{-2\pi ikr} \Phi \left(rE - \frac{i\pi k}{E} \right) \right] \right\}.$$

b. Décomposition du potentiel optique total. — Or, le potentiel optique total peut être décomposé en deux parties analogues. En partant de la représentation (6.1) nous pouvons écrire le potentiel total

$$(6.5) \quad \mathfrak{Z} \equiv \sum_l \mathbf{p} e^{2\pi i(\mathbf{k}_l \cdot \mathbf{x}_l)} \frac{e^{2\pi i(k|\mathbf{x} - \mathbf{x}_l|)}}{4\pi |\mathbf{x} - \mathbf{x}_l|} \\ = \frac{1}{2\pi^{\frac{3}{2}}} \int_{(0)}^\infty \sum_l \mathbf{p} e^{-(\mathbf{x}_l - \mathbf{x})^2 \varepsilon^2 + \pi^2 \frac{k^2}{\varepsilon^2} + 2\pi i(\mathbf{k}_l \cdot \mathbf{x}_l)} d\varepsilon.$$

La somme dans l'expression à intégrer représente une fonction Θ (à trois dimensions), qui se laisse transformer par une transformation de Fourier, ne différant que dans des détails de la transformation contenue dans la

formule (2.7)

$$(6.6) \quad \frac{1}{2\pi^2} \sum_l \underbrace{\mathbf{p} e^{-\frac{(\mathbf{x}_l - \mathbf{x})^2}{\varepsilon^2} + \frac{\pi^2 k^2}{\varepsilon^2} + 2\pi i(\mathbf{k}_1, \mathbf{x}_l)}}_{\text{II}} = \frac{1}{2v_a} \sum_h \underbrace{\mathbf{p} e^{-\frac{\pi^2}{\varepsilon^2}(\mathbf{K}_h^2 - k^2) + 2\pi i(\mathbf{K}_h, \mathbf{x})}}_{\text{I}} \frac{1}{\varepsilon^3}$$

avec

$$\mathbf{K}_h = \mathbf{b}_h + \mathbf{k}_1.$$

En tenant compte du fait que cette égalité subsiste pour chaque élément du chemin d'intégration, nous pouvons introduire la valeur E pour passer d'une représentation à l'autre en écrivant

$$(6.7) \quad \mathcal{Z} = \mathcal{Z}_I + \mathcal{Z}_{II} = \int_{(0)}^E \text{I} d\varepsilon + \int_E^\infty \text{II} d\varepsilon.$$

L'intégration de I est élémentaire et celle de II se fait comme pour le potentiel d'un seul dipôle. On arrive à

$$(6.8) \quad \mathcal{Z}_I = \frac{1}{v_a} \sum_h \frac{e^{-\frac{\pi^2}{E^2}(\mathbf{K}_h^2 - k^2)}}{4\pi^2(\mathbf{K}_h^2 - k^2)} e^{2\pi i(\mathbf{K}_h, \mathbf{x})};$$

$$(6.9) \quad \mathcal{Z}_{II} = \sum_l \frac{\mathbf{p}}{4\pi r_{ql}} \left\{ \cos 2\pi k r_{ql} - \frac{1}{2} \left[e^{2\pi i k r_{ql}} \Phi\left(r_{ql}E + \frac{i\pi k}{E}\right) + e^{-2\pi i k r_{ql}} \Phi\left(r_{ql}E - \frac{i\pi k}{E}\right) \right] \right\},$$

où

$r_{ql} = |\mathbf{x} - \mathbf{x}_l|$ = distance du point d'observation $\mathbf{x}$ au point réticulaire $\mathbf{x}_l$.

La partie $\mathcal{Z}_I$ de $\mathcal{Z}$ est une représentation dans l'espace de Fourier et nous pouvons la comparer au potentiel $\mathcal{Z}^{(1)}$, (3.15), obtenu pour le champ optique de dipôles de Gauss de largeur $E = \frac{1}{\varepsilon}$. On remarquera que c'est le même potentiel à un facteur $e^{+\frac{\pi^2 k^2}{E^2}}$ près. Le moment électrique intégral des dipôles de Gauss donnant $\mathcal{Z}_I$ est donc d'autant plus élevé que E est plus petit, c'est-à-dire que le dipôle est plus étendu. Quelle est l'explication de cette augmentation du moment intégral? La raison devient apparente si l'on calcule pour un dipôle de Gauss ce qu'on appelle le *facteur atomique* dans la théorie de la diffraction des rayons X, facteur qui tient compte du retard des potentiels électriques, de sorte que les éléments de volume d'un dipôle étendu ne coopèrent pas tous avec la même phase au point d'observation.

Pour un dipôle ayant son centre à l'origine et pour une distribution du moment au point $\mathbf{s}$

$$\frac{\mathbf{p}}{(\pi\alpha^2)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{s^2}{\alpha^2}}$$

l'action au point d'observation $\mathbf{x}$ devient

$$(6.10) \quad \mathcal{J} = \mathbf{p} \int \frac{1}{(\pi\alpha^2)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{s^2}{\alpha^2}} \frac{e^{2\pi i k \cdot \mathbf{x} - \mathbf{s}}}{4\pi |\mathbf{x} - \mathbf{s}|} dv_s.$$

On trouve par intégration directe que cela est égal à

$$(6.10') \quad \mathcal{J} = \mathbf{p} e^{-\pi^2 k^2 \alpha^2} \frac{e^{2\pi i k \cdot \mathbf{x}}}{4\pi |\mathbf{x}|}.$$

Le dipôle étendu rayonne comme un dipôle ponctuel de moment plus petit. Puisque $E = 1/\alpha$, la formule donnant $\mathfrak{Z}_I$ est donc telle que cette partie du potentiel peut être considérée comme le potentiel d'un système de dipôles de Gauss d'activité équivalente aux dipôles ponctuels, quelle que soit la valeur choisie pour la grandeur des dipôles de Gauss.

L'interprétation de la seconde partie, $\mathfrak{Z}_{II}$, est alors claire : c'est le potentiel dû aux dipôles ponctuels, chacun d'eux entouré d'un dipôle de

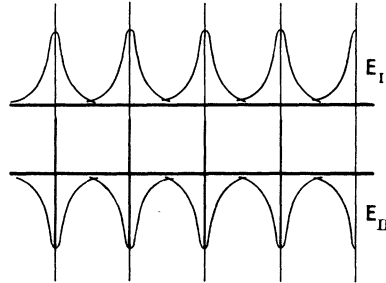


Fig. 3. — Distribution réticulaire de la densité de dipôle donnant lieu aux deux parties du champ optique.

Gauss de phase négative, compensateur du dipôle donnant lieu à $\mathfrak{Z}_I$ (voir fig. 3).

L'amélioration de la convergence de la série pour le potentiel total se produit par un mécanisme très curieux : en $\mathfrak{Z}_I$ par l'absence de singularités dans la distribution du moment électrique, en $\mathfrak{Z}_{II}$ par la compensation des actions des charges lointaines grâce à l'équivalence des

dipôles ponctuels et de ceux de Gauss. Les deux séries convergent sous forme de fonctions exponentielles du carré des vecteurs de sommation $\mathbf{K}_h$ et $\mathbf{r}_{ql} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_l$. Pour $\mathfrak{Z}_I$ c'est évident, pour $\mathfrak{Z}_{II}$ on le voit facilement en posant pour les grands arguments

$$(6.11) \quad 1 - \Phi(x) = \frac{e^{-x^2}}{\sqrt{\pi}x} \left(1 - \frac{1}{2x^2} + \frac{1.3}{(2x^2)^2} - \dots \right).$$

c. Champ d'excitation. — Le potentiel du champ d'excitation pour un dipôle situé à $\mathbf{x}_l = 0$ est formé en retranchant (6.3) et (6.4) de $\mathfrak{Z}$ (6.7-6.9). A cause des différenciations nécessaires il faut calculer le potentiel pour $\mathbf{x} \neq 0$. On voit que le terme $l = (000)$ de $\mathfrak{Z}_{II}$ est supprimé de la somme $\mathfrak{Z}_{II}$, ce que nous indiquons par un accent sur Σ . On obtient, pour le potentiel d'excitation sans qu'une nouvelle approximation ait été nécessaire,

$$(6.12) \quad \mathfrak{Z}^{(0)} = \mathfrak{Z}_I^{(0)} + \mathfrak{Z}_{II}^{(0)};$$

$$(6.13) \quad \mathfrak{Z}_I^{(0)} = \frac{1}{v_a} \sum_h \mathbf{p} \frac{e^{-\frac{\pi^2}{E^2}(\mathbf{K}_h^2 - k^2)}}{4\pi^2(\mathbf{K}_h^2 - k^2)} e^{2\pi i \mathbf{K}_h \mathbf{x}} \\ - \frac{\mathbf{p}}{4\pi r} \left\{ i \sin 2\pi k r + \frac{1}{2} \left[e^{2\pi i k r} \Phi\left(rE + \frac{i\pi k}{E}\right) + e^{-2\pi i k r} \Phi\left(rE - \frac{i\pi k}{E}\right) \right] \right\};$$

$$(6.14) \quad \mathfrak{Z}_{II}^{(0)} = \sum_l' \frac{\mathbf{p}}{4\pi r_{ql}} \frac{1}{2} \left\{ e^{2\pi i k r_{ql}} \left[1 - \Phi\left(r_{ql}E + \frac{i\pi k}{E}\right) \right] + e^{-2\pi i k r_{ql}} \left[1 - \Phi\left(r_{ql}E - \frac{i\pi k}{E}\right) \right] \right\} \\ (r_{ql} = |\mathbf{x} - \mathbf{x}_l|; r = r_{q0} = |\mathbf{x}|).$$

Formons maintenant le champ d'excitation

$$(6.15) \quad \mathbf{E}^{(0)} = \text{rot rot } \mathfrak{Z}^{(0)}.$$

Pour la somme dans l'expression de $\mathfrak{Z}_I^{(0)}$, voir la formule (4.3) Les autres termes dans $\mathfrak{Z}_I^{(0)}$ sont de la forme

$$\mathbf{u} = \mathbf{p} f(r),$$

où r désigne maintenant la distance, mesurée du point d'observation.

On obtient, avec l'abréviation $\mathbf{r}_1 = \frac{\mathbf{r}}{r}$,

$$(6.16) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{grad } f(\mathbf{r}) = \mathbf{r}_1 f', \quad \text{rot } \mathbf{p} f(\mathbf{r}) = -[\mathbf{p} \mathbf{r}_1] f', \\ \text{rot rot } \mathbf{p} f(r) = [[\mathbf{p} \mathbf{r}_1] \mathbf{r}_1] \left(f''(r) - \frac{f'}{r} \right) - 2\mathbf{p} \frac{f'}{r}. \end{array} \right.$$

Si nous voulons connaître la valeur du champ au point $\mathbf{x} = 0$ seulement, une simplification est évidente pour les termes de $\mathbf{Z}_I^{(0)}$. Car, puisque le champ à l'origine ne peut dépendre de la direction suivant laquelle on s'approche de l'origine, la composante $\mathbf{p}_{1x} = -[\mathbf{p}\mathbf{r}_I]\mathbf{r}_I$ doit être sans effet, c'est-à-dire que pour $\mathbf{r} \rightarrow 0$, $\lim \left(f'' - \frac{f'}{r} \right) = 0$, relation qu'on retrouve en faisant le calcul. Il ne reste que le membre $-2\mathbf{p}\frac{f}{r}$, lequel est obtenu facilement en développant $f(r)$ suivant les puissances de r jusqu'à la seconde.

Appelant les composantes normales à $\mathbf{K}_h$ et à $\mathbf{x}_l$

$$(6.17) \quad \mathbf{p}_{1\mathbf{K}_h} = \frac{1}{K_h^2} [\mathbf{K}_h [\mathbf{p}\mathbf{K}_h]], \quad \mathbf{p}_{1x_l} = \frac{1}{x_l^2} [\mathbf{x}_l [\mathbf{p}\mathbf{x}_l]]$$

et se souvenant qu'à la limite $\mathbf{x} \rightarrow 0$, on aura $\mathbf{r}_{lI} \rightarrow \mathbf{x}_l$, on obtient la valeur stricte de la force électrique d'excitation

$$(6.18) \quad \mathbf{E}^{(0)} = \mathbf{E}_I^{(0)} + \mathbf{E}_{II}^{(0)};$$

$$(6.19) \quad \mathbf{E}_I^{(0)} = \frac{1}{\varphi_a} \sum_h \mathbf{p}_{1\mathbf{K}_h} \frac{K_h^2}{K_h^2 - k^2} e^{-\frac{\pi^2}{E^2}(K_h^2 - k^2)} - \left[\frac{2}{3} \left(\frac{E}{\sqrt{\pi}} \right)^3 \gamma(E) + \frac{4\pi^2}{3} ik^3 \right] \mathbf{p};$$

$$(6.20) \quad \mathbf{E}_{II}^{(0)} = \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{1}{2} \left[\sum_l' \frac{e^{2\pi i \mathbf{K}_l \mathbf{x}_l}}{x_l^2} \left\{ \mathbf{p}_{1x_l} \left[[1 - \Phi_+] \{ -3 + 6\pi ikx_l + 4\pi^2 k^2 x_l^2 \} \right. \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{2E}{\sqrt{\pi}} e^{-(+)^2} x_l \{ 3 - 2\pi ikx_l + 2E^2 x_l^2 \} \right] \right. \\ \left. \left. - 2\mathbf{p} \left[[1 - \Phi_+] \{ -1 + 2\pi ikx_l \} - \frac{2E}{\sqrt{\pi}} e^{-(+)^2} x_l \right] \right\} \right. \\ \left. + \text{somme conjuguée complexe} \right].$$

où

$$(6.21) \quad \begin{cases} [1 - \Phi_+] = 1 - \Phi \left(x_l E + \frac{\pi ik}{E} \right), & e^{-(+)^2} = e^{-\left(x_l E + \frac{\pi ik}{E} \right)^2}, \quad x_l = |\mathbf{x}_l|, \\ \gamma(E) = e^{\frac{\pi^2 k^2}{E^2}} \left(1 + 2\pi^2 \frac{k^2}{E^2} \right) - 2\sqrt{\pi} \left(i \frac{\pi k}{E} \right)^3 \Phi \left(i \frac{\pi k}{E} \right). \end{cases}$$

Cette formule pour le champ d'excitation permet le calcul avec des valeurs E quelconques. La somme $\mathbf{E}_{II}^{(0)}$ qui doit être effectuée dans le réseau du cristal vaut mieux que l'expression initiale du champ par somme d'ondes sphériques, puisque ses termes s'amortissent comme $\exp(-E^2 x_l^2)$, donc d'autant mieux que E est grand. D'autre part, la somme dans $\mathbf{E}_I^{(0)}$ demande qu'on choisisse E aussi petit que possible. La

somme étendue au réseau du cristal étant plus pénible à exécuter, nous essayerons de la supprimer tout à fait par le choix assez grand de E . Proposons-nous de calculer le champ avec l'exactitude relative ε et déterminons E tel que la contribution de $\mathbf{E}_\Pi^{(0)}$ reste au-dessous de $\varepsilon \mathbf{E}^{(0)}$.

Comme le calcul ne présente pas de difficultés dans le cas des rayons X, nous pouvons nous borner à l'expliquer pour le cas des ondes longues. Pour la lumière visible avec l'indice de réfraction $\mu = \frac{k_1}{k}$ on a

$$(6.22) \quad \left\{ \begin{array}{l} \mu^2 - 1 = \frac{k_1^2}{k^2} - 1 \sim \text{d'ordre de grandeur } 1, \\ ak \sim ak_1 \sim 10^{-3} - 10^{-4}. \end{array} \right.$$

Dans (6.19) la contribution principale à $\mathbf{p}$ provient du terme 000 de la somme et du premier facteur de $\mathbf{p}$, donnant comme ordre de grandeur

$$(6.23) \quad \mathbf{E}_I^{(0)} \sim \mathbf{p} \left[\frac{1}{a^3} e^{-\pi^2 \frac{k_1^2 - k^2}{E^2}} - \frac{2}{3} \left(\frac{E}{\sqrt{\pi}} \right)^3 e^{-\pi^2 \frac{k^2}{E^2}} \right].$$

Cette approximation suppose encore que $\frac{k}{E} = \frac{\alpha}{\lambda} \ll 1$, ce qui est raisonnable puisque la largeur α des dipôles de Gauss devra rester petite envers leurs distances a .

L'approximation des sommes consiste alors à tenir compte seulement des contributions des dipôles de Gauss; l'erreur introduite par le gonflement des dipôles ponctuels se trouve corrigé par le dernier terme de (6.19). Nous supposons donc $\frac{k}{E} \sim ak \sim 10^{-3}$. Les exponentielles sont alors sans importance et en introduisant dans la formule $\frac{1}{E} = \alpha$ comme grandeur des dipôles, on obtient

$$(6.23') \quad \mathbf{E}_I^{(0)} \sim \mathbf{p} \left[\frac{1}{a^3} - \frac{2}{3} \left(\frac{1}{\alpha \sqrt{\pi}} \right)^3 \right] \sim \frac{\mathbf{p}}{a^3}.$$

Cette partie du champ d'excitation est donc de l'ordre de grandeur du moment moyen de la maille, $\frac{\mathbf{p}}{v_a}$.

Dans $\mathbf{E}_\Pi^{(0)}$, d'autre part, le plus grand terme sera celui provenant du dipôle le plus voisin de l'origine, donc éloigné d'une distance d'ordre a . L'argument de Φ pour ce premier dipôle permettra déjà l'approximation

$$(6.24) \quad [1 - \Phi_\perp] = \frac{e^{-x_\perp^2 E^2}}{\sqrt{\pi} x_\perp E} \sim \frac{e^{-\left(\frac{a}{\alpha}\right)^2}}{\sqrt{\pi} \left(\frac{a}{\alpha}\right)}.$$

L'ordre de grandeur du plus grand terme de $\mathbf{E}_{\Pi}^{(0)}$ deviendra

$$(6.25) \quad \mathbf{E}_{\Pi}^{(0)} \sim \frac{\mathbf{p}}{4\pi} \frac{1}{a^3} e^{-a^2 E^2} \left[\frac{-3}{aE} - \frac{2}{\sqrt{\pi}} (3aE + 2a^2 E^2) + 2 + \frac{2}{\sqrt{\pi}} (2aE) \right] \\ = \frac{\mathbf{p}}{a^3} e^{-a^2 E^2} \frac{1}{4\pi} \left[-\frac{3}{aE} + 2 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} (aE + 2a^2 E^2) \right].$$

Le facteur exponentiel seul est capable de supprimer les termes de $\mathbf{E}_{\Pi}^{(0)}$. Pour obtenir une approximation du champ à $\varepsilon = 10^{-3}$ près on se souviendra que $e^{-3^2} \sim 10^{-4}$; il suffit donc de poser $aE = 3$, $\alpha = \frac{1}{3}a$ pour être certain que le plus grand terme de $\mathbf{E}_{\Pi}^{(0)}$ soit plus petit que $3 \cdot 10^{-4} \mathbf{E}^{(0)}$. Puisqu'il y a plusieurs de ces termes, au maximum 12 dans un réseau simple hexagonal avec $\frac{c}{a} = 1,633$, et en tenant compte des contributions des seconds voisins, nous pourrions poser

$$(6.26) \quad aE \geq 3.5,$$

pour être autorisés à supprimer $\mathbf{E}_{\Pi}^{(0)}$, en conservant la limite de 0.001 d'erreur relative dans le champ d'excitation des ondes visibles.

Le cas des rayons X est encore plus favorable à la suppression de $\mathbf{E}_{\Pi}^{(0)}$, puisque

$$(6.27) \quad \delta = 1 - \mu \sim 10^{-5} - 10^{-6}, \quad \frac{k_h^2}{k_h^2 - k^2} = \frac{\mu^2}{\mu^2 - 1} \sim 10^4 - 10^6.$$

L'ordre de grandeur de $\mathbf{E}_I^{(0)}$ est déterminé par les ondes fortes à

$$(6.28) \quad \mathbf{E}_I^{(0)} \sim \frac{\mathbf{p}}{a^3} \sum \frac{1}{\delta_h} \sim \frac{\mathbf{p}}{a^3} \cdot 10^5.$$

L'accroissement des amplitudes des ondes fortes se produit par la sommation des ondes sphériques à travers de grandes distances et il n'y a pas moyen qu'une telle valeur s'accumule dans $\mathbf{E}_{\Pi}^{(0)}$, dont les contributions lointaines décroissent rapidement. Une valeur de E bien inférieure à celle du cas de la lumière visible serait suffisante pour éliminer la seconde somme. Nous pourrions donc adopter la détermination (6.26) pour les deux cas. $\gamma(E)$ [voir 6.21)] sera très près de 1.

Notons que la transition depuis les ondes très longues jusqu'aux champs purement électrostatiques (cas du calcul du tenseur diélectrique) exigerait une discussion plus détaillée et ne permettrait pas le calcul numérique en employant exclusivement les sommes du type I.

Dans ce qui suit il sera entendu que remplissant la condition (6.26) nous sommes autorisés à nous borner à $\mathbf{E}_1^{(0)}$. Il faut alors que pour tout E surpassant la limite de cette condition, $\mathbf{E}_1^{(0)}$ soit indépendant de E.

Pour voir comment cela arrive, substituons dans $\mathbf{E}_1^{(0)}$ une intégration à la sommation. Pour les membres élevés on peut poser $\frac{(\mathbf{K}_h^2 - k^2)}{\mathbf{K}_h^2} = 1$ et la somme de (6.19) devient

$$(6.29) \quad \frac{\mathbf{p}}{\nu_a} e^{\frac{\pi^2 k^2}{\mathbf{E}^2}} \int \sin^2 \theta e^{-\frac{\pi^2}{\mathbf{E}^2} x^2} \cdot 2\pi \sin \theta d\theta x^2 dx = \frac{\mathbf{p}}{\nu_a} \cdot \frac{2}{3} \left(\frac{\mathbf{E}}{\sqrt{\pi}} \right)^3 e^{\frac{\pi^2 k^2}{\mathbf{E}^2}}.$$

Ceci est précisément la valeur qui sera retranchée de la somme en (6.19) par le premier terme de $\gamma(\mathbf{E})$; ce qui reste comme valeur de $\mathbf{E}_1^{(0)}$ est : 1° la différence entre la somme et son approximation par l'intégrale et 2° les termes de $\gamma(\mathbf{E})$ proportionnels à $\left(\frac{k}{\mathbf{E}}\right)^2, \left(\frac{k}{\mathbf{E}}\right)^4, \dots$ donc très petits puisque $\left(\frac{k}{\mathbf{E}}\right)$ est très petit. En outre il reste en $\mathbf{E}^{(0)}$ le membre indépendant de E, $\frac{4\pi^2}{3} i k^3 \mathbf{p}$.

De cette approximation on tire la conclusion, qu'en effet on peut choisir une valeur quelconque pour E pourvu qu'elle soit assez grande. La formule (6.19) avec (6.21) représentent alors le champ d'excitation.

7. La dynamique du dipôle et la formule de dispersion. — En introduisant (6.19) avec (6.21) dans l'équation de mouvement du dipôle ooo [éq. (5.2)], on remarque tout d'abord que la seule partie de $\mathbf{E}^{(0)}$ qui soit indépendante de E s'élimine : la réaction du champ du dipôle sur lui-même, qui d'ordinaire conduit à l'amortissement par rayonnement, est exactement équilibrée et détruite. Ce résultat général pour un milieu strictement périodique est connu depuis le travail classique de H. A. Lorentz, mais il ressort ici automatiquement du calcul exact du champ d'excitation.

L'équation de mouvement peut alors s'écrire

$$(7.1) \quad \mathbf{p} = \frac{\alpha}{1 + \frac{2}{3} \left(\frac{\mathbf{E}}{\sqrt{\pi}} \right)^3 \gamma(\mathbf{E}) \cdot \alpha} \frac{1}{\nu_a} \sum_h \mathbf{p}_h \frac{\mathbf{K}_h^2}{\mathbf{K}_h^2 - k^2} e^{-\frac{\pi^2}{\mathbf{E}^2} (\mathbf{K}_h^2 - k^2)}.$$

C'est une équation vectorielle linéaire homogène pour le moment $\mathbf{p}$. En posant

$$(7.2) \quad \mathbf{p}_h \mathbf{K}_h = \mathbf{p} - \frac{1}{\mathbf{K}_h^2} \mathbf{K}_h (\mathbf{K}_h \mathbf{p})$$

et en mettant

$$(7.3) \quad \sigma_1 = \sum_h \frac{\mathbf{K}_h^2}{\mathbf{K}_h^2 - k^2} e^{-\frac{\pi^2}{E^2}(\mathbf{K}_h^2 - k^2)},$$

on obtient d'abord

$$\mathbf{p} \left[1 - \frac{\frac{\alpha}{\nu_a} \sigma_1}{1 + \alpha \frac{2}{3} \left(\frac{E}{\sqrt{\pi}} \right)^3 \gamma(E)} \right] = - \frac{\left(\frac{\alpha}{\nu_a} \right)}{1 + \alpha \frac{2}{3} \left(\frac{E}{\sqrt{\pi}} \right)^3 \gamma(E)} \sum_h \frac{\mathbf{K}_h (\mathbf{K}_h \mathbf{p})}{\mathbf{K}_h^2 - k^2} e^{-\frac{\pi^2}{E^2}(\mathbf{K}_h^2 - k^2)}.$$

On peut introduire les abréviations

$$(7.4) \quad \mathbf{L}_h = \frac{\mathbf{K}_h}{\sqrt{\mathbf{K}_h^2 - k^2}} e^{-\frac{1}{2} \frac{\pi^2}{E^2}(\mathbf{K}_h^2 - k^2)}$$

et

$$(7.5) \quad \beta = \frac{\nu}{\alpha} + \frac{2}{3} \nu \left(\frac{E}{\sqrt{\pi}} \right)^3 \gamma(E) - \sigma_1,$$

et puis mettre l'équation sous la forme : tenseur $\mathfrak{C}$ de p égal zéro

$$(7.6) \quad \left\{ \beta + \sum_h \mathbf{L}_h (\mathbf{L}_h \cdot) \right\} \mathbf{p} \equiv \mathfrak{C} \mathbf{p} = 0.$$

Cette équation est rigoureuse, pourvu que E soit choisi selon les indications données au paragraphe 6. Nous pouvons de plus formuler la condition de résolution de cette équation sous une forme valable pour toutes les longueurs d'onde. D'après les règles du calcul tensoriel cette condition s'écrit

$$(7.8) \quad \mathbf{S}_3 \mathfrak{C} = 0,$$

où $\mathbf{S}_3$ désigne le troisième scalaire du tenseur (son déterminant). Sa valeur donne ⁽¹⁾

$$(7.9) \quad \mathbf{D} = \frac{1}{3!} \sum_{hik} [\mathbf{L}_h [\mathbf{L}_i \mathbf{L}_k]]^2 + \beta \frac{1}{2} \sum_{hi} [\mathbf{L}_h \mathbf{L}_i]^2 + \beta^2 \sum_h \mathbf{L}_h^2 + \beta^3 = 0,$$

équation générale de dispersion, qui, avec des sommes infinies, est valable pour le cas des rayons X aussi bien que pour la lumière visible. Cette équation sert à déterminer, en fonction de sa direction,

⁽¹⁾ Nous renvoyons le lecteur au livre de F. Spielrein, Vektorrechnung — 2. Aufl., 1926, Verlag K. Wittwer à Stuttgart, p. 349 et table de formules, formules 567-569.

la longueur du vecteur $\mathbf{K}_1$, qui est contenu dans les L_i (7.4) par moyen des $\mathbf{K}_h$ (3.12). L'équation détermine de cette façon la « surface de dispersion », qui n'est autre chose que la surface normale de Fresnel, comme nous l'allons voir tout de suite pour la lumière visible (1).

8. Optique cristalline de la lumière visible. — Au lieu de discuter l'équation de dispersion (7.9), il vaut mieux retourner à l'équation de mouvement (7.6) en l'adaptant aux conditions déterminées par la petitesse de $\mathbf{k}_1$ et k par rapport à $\mathbf{b}_h$. On pourra omettre les $\mathbf{k}$ dans tous les membres excepté pour $\mathbf{b} = 0$ et l'on introduira de nouvelles abréviations pour les sommes qui ne dépendent pas de la direction $\mathbf{s}$ de propagation :

$$(8.1) \quad \mathbf{s} = \frac{\mathbf{k}_1}{|\mathbf{k}_1|}, \quad \mu = \frac{k_1}{k}, \quad N = \frac{\mu^2}{\mu^2 - 1} = \frac{k_1^2}{k_1^2 - k^2};$$

$$(8.2) \quad \sigma_0 = \sum' e^{-\frac{\pi^2}{E^2} b_h^2}, \quad \mathbf{T}_0 = \sum' \frac{\mathbf{b}_h(\mathbf{b}_h \cdot)}{b_h^2} e^{-\frac{\pi^2}{E^2} b_h^2}.$$

$$(8.3) \quad \beta = \beta_0 - \sigma_0 - N = \frac{\nu}{z} + \frac{2}{3} \nu \left(\frac{E}{\sqrt{\pi}} \right)^3 \gamma - \sigma_0 - N.$$

Enfin, on peut introduire les axes principaux du tenseur symétrique $\mathbf{T}_0$ en l'écrivant avec les vecteurs d'unité orthogonaux $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$

$$(8.4) \quad \mathbf{T}_0 = \tau_x \mathbf{x}(\mathbf{x} \cdot) + \tau_y \mathbf{y}(\mathbf{y} \cdot) + \tau_z \mathbf{z}(\mathbf{z} \cdot).$$

L'équation de mouvement devient alors

$$(8.4') \quad \{ \beta_0 - \sigma_0 - N[1 - \mathbf{s}(\mathbf{s} \cdot)] + \mathbf{T}_0 \} \mathbf{p} = 0$$

ou, puisque

$$(8.5) \quad \mathbf{p} - \mathbf{s}(\mathbf{s} \mathbf{p}) = \mathbf{p}_{\perp \mathbf{s}}, \quad \{ \beta_0 - \sigma_0 + \tau_x \mathbf{x} \mathbf{x} + \tau_y \mathbf{y} \mathbf{y} + \tau_z \mathbf{z} \mathbf{z} \} \mathbf{p} = N \mathbf{p}_{\perp \mathbf{s}}.$$

(1) Remarque à propos d'un travail récent (*Zeits. f. Kristallographie*, 97, 1937, p. 1).

Par une faute d'interprétation j'ai cru obtenir la surface des raies, plutôt que la surface normale, à partir d'une équation analogue à (7.9) dans le travail cité. Pour aboutir à l'équation de la surface normale, il suffit alors de diviser chaque terme de la série (4.3) de D , par la « constante diélectrique de ce terme », $\frac{\mathbf{K}_h^2}{k^2}$. Le champ électrique obtenu de cette manière ne représente pas le champ d'excitation correct. En transposant la somme de l'espace Fourier dans l'espace du cristal, on voit que le champ obtenu à partir de (4.3) par cette division est la différence du champ optique total émis par les dipôles et d'un champ provenant d'une action instantanée (donc pas retardée) des mêmes dipôles. La simple division n'est donc pas légitime pour arriver au champ d'excitation. Pour le domaine des rayons X, qui intéressait surtout dans le travail cité, la faute n'est pas grande, mais elle le devient dans le domaine de la lumière visible.

Nous pouvons introduire les indices principaux de réfraction. Posons pour cela $\mathbf{p}$ parallèle à un des axes principaux de $\mathbf{T}_0$, par exemple à $\mathbf{x}$. Le membre gauche représente alors un vecteur parallèle à $\mathbf{x}$ et puisque ce vecteur doit être égal à un vecteur normal à $\mathbf{S}$, il faut avoir :

- a. Ou $\mathbf{s}$ normal à $\mathbf{x}$, c'est-à-dire $\mathbf{s}$ dans le plan (y, z) ;
- b. Ou $\mathbf{p}_1 = 0$, c'est-à-dire $\mathbf{S}$ parallèle à $\mathbf{x}$.
- c. Ou $|\mathbf{p}| = 0$, solution triviale.

Dans le cas b, qui conduirait à des ondes de polarisation longitudinale, il faut que

$$(8.6) \quad \beta_0 - \sigma_0 + \tau_x = 0,$$

ce qui n'est pas en général le cas, car cette relation ne sera vraie que pour l'une des valeurs τ_x, τ_y, τ_z au plus. Il ne reste alors que la solution $\mathbf{p} = 0$, ce qui montre qu'il n'y aura pas d'ondes longitudinales, excepté peut-être dans quelques directions singulières où la parenthèse dans (8.5) s'annule.

Dans le cas général (a), l'équation pourra s'écrire pour $\mathbf{p} \parallel \mathbf{x}$

$$(8.7) \quad \beta_0 - \sigma_0 + \tau_x = N_x,$$

d'où l'on tire la valeur $\tau_x = N_x + \sigma_0 - \beta_0$ comme valeur principale du tenseur $\mathbf{T}_0$.

Admettant maintenant une direction quelconque pour $\mathbf{p}$, l'équation de mouvement (8.4') s'écrit

$$(8.8) \quad \left\{ \frac{N_x - N}{N} \mathbf{x}\mathbf{x} + \frac{N_y - N}{N} \mathbf{y}\mathbf{y} + \frac{N_z - N}{N} \mathbf{z}\mathbf{z} + \mathbf{s}\mathbf{s} \right\} \mathbf{p} = 0.$$

Pour pouvoir la satisfaire, il faut que le troisième scalaire (le déterminant) du tenseur que nous écrivons sous la forme

$$(8.9) \quad \Phi = \{ \quad \} = m_x \mathbf{x}\mathbf{x} + m_y \mathbf{y}\mathbf{y} + m_z \mathbf{z}\mathbf{z} + \mathbf{s}\mathbf{s}$$

s'annule. Observant que $[\mathbf{x}\mathbf{y}] = \mathbf{z}$, $(\mathbf{x}[\mathbf{y}\mathbf{z}]) = 1$, cela donne ⁽¹⁾

$$(8.10) \quad \begin{aligned} S_3 \Phi &= m_x m_y m_z + m_y m_z (\mathbf{s}\mathbf{x})^2 + m_z m_x (\mathbf{s}\mathbf{y})^2 + m_x m_y (\mathbf{s}\mathbf{z})^2 \\ &= m_x m_y m_z \left[1 + \frac{(\mathbf{s}\mathbf{x})^2}{m_x} + \frac{(\mathbf{s}\mathbf{y})^2}{m_y} + \frac{(\mathbf{s}\mathbf{z})^2}{m_z} \right] = 0. \end{aligned}$$

(1) Pour un tenseur

$$\Phi = \sum_{i=1}^n \mathbf{a}_i (\mathbf{b}_i \cdot),$$

on a

$$S_3 \Phi = \frac{1}{3!} \sum_{i,k,l} (\mathbf{a}_i [\mathbf{a}_k \mathbf{a}_l]) (\mathbf{b}_i [\mathbf{b}_k \mathbf{b}_l]).$$

Pour une direction générale de $\mathbf{s}$, les m ne s'annulent pas et la condition de dispersion deviendra, avec

$$(8.11) \quad \frac{1}{m_x} = \frac{N}{N_x - N} = -1 + \frac{N_x}{N_x - N} = (\mu^2 - 1) \frac{\mu_x^2}{\mu^2 - \mu_x^2} - 1,$$

$$(8.12) \quad (\mu^2 - 1) \left\{ \frac{\mu_x^2 (\mathbf{s}\mathbf{x})^2}{\mu^2 - \mu_x^2} + \frac{\mu_y^2 (\mathbf{s}\mathbf{y})^2}{\mu^2 - \mu_y^2} + \frac{\mu_z^2 (\mathbf{s}\mathbf{z})^2}{\mu^2 + \mu_z^2} \right\} = 0.$$

μ n'étant pas $= 1$ pour un cristal différent du vide et anisotrope, il faut que la parenthèse s'annule. C'est l'équation de la *surface normale de Fresnel*, qui relie la direction $\mathbf{s}$ de la normale de la surface de phase avec l'indice de réfraction μ et l'exprime au moyen des indices principaux.

Pour le calcul numérique de la double réfraction il faudra obtenir les orientations (par rapport au cristal) et les valeurs des axes principaux du tenseur $\mathbf{T}_0$. Cela n'est possible que par un calcul numérique avec des données précises sur les axes du cristal. Seul le cas d'un réseau simple cubique permet un calcul simple des sommes.

On aura dans ce cas pour les trois directions d'axes $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$

$$(8.13) \quad T_0(\mathbf{x}) = \sum' \frac{\mathbf{b}_h(\mathbf{b}_h \mathbf{x})}{b_h^2} e^{-\frac{\pi^2}{E^2} b_h^2} = \mathbf{x} \sum' \frac{(\mathbf{b}_h \mathbf{x})^2}{b_h^2} e^{-\frac{\pi^2}{E^2} b_h^2} = \frac{1}{3} \mathbf{x} \sigma_0,$$

à cause de l'équivalence des axes. Donc $\tau_x = \frac{1}{3} \sigma_0$ et

$$(8.14) \quad N_x = N = \frac{\mu^2}{\mu^2 - 1} = \beta - \frac{2}{3} \sigma_0, \quad \mu^2 - 1 = \frac{1}{\beta_0 - \frac{1}{3} - \frac{2}{3}(\sigma_0 + 1)}.$$

Or, d'après (8.2) la somme $\sigma_0 + 1$ est la somme totale (sans omission du membre $\mathbf{b}_h = 0$), qui peut être transformée selon (2.7) dans le réseau du cristal, donnant, avec la valeur supposée suffisamment grande de E :

$$(8.15) \quad \sigma_0 + 1 = \sum_h e^{-\frac{\pi^2}{E^2} b_h^2} = \nu \left(\frac{E}{\sqrt{\pi}} \right)^3 \sum_l e^{-E^2 x_l^2} \approx \nu \left(\frac{E}{\sqrt{\pi}} \right)^3.$$

Remplaçant β_0 par sa valeur $\frac{\nu}{\alpha} + \frac{2}{3} \nu \left(\frac{E}{\sqrt{\pi}} \right)^3$ [voir (8.3), $\gamma \sim 1$], on obtient comme formule de dispersion du cristal cubique

$$(8.16) \quad \mu^2 - 1 = \frac{\frac{\alpha}{\nu}}{1 - \frac{1}{3} \frac{\alpha}{\nu}},$$

formule de H. A. Lorentz bien connue.

9. **Optique cristalline des rayons X.** — L'équation (7.9) nous donne la condition générale de propagation. On voit par la définition des $\mathbf{L}_h$ (7.4) que, tant que la fonction exponentielle n'intervient pas, ils sont tous de l'ordre de grandeur 1, excepté dans le cas où la sphère de propagation passe très près d'un point du réseau de Fourier (*fig. 1*), ce qui rend le dénominateur très petit. Sachant que l'indice de réfraction sera très voisin de 1, on admettra toujours que l'origine $\mathbf{b}_h = 0$ compte parmi ces points. On aura à distinguer deux cas : 1° seul $\mathbf{b}_h = 0$ donne un grand $\mathbf{L}_{000} = \mathbf{L}_1$; ou 2° en plus de $\mathbf{L}_{000}$ il y aura d'autres $\mathbf{L}_{hik} = \mathbf{L}_j$ d'ordre supérieur au reste des $\mathbf{L}_h$.

a. Le seul $\mathbf{L}_{000} = \mathbf{L}_1$ est d'ordre supérieur à 1. — Dans ce cas, l'onde 000 seule est sensible vis-à-vis d'un petit déplacement du point de propagation A (*fig. 1*), tandis que les autres amplitudes ne changent pas beaucoup. On pourra donc poser, dans l'équation de mouvement (7.6),

$$(9.1) \quad \sum \mathbf{L}_h \mathbf{L}_h = \mathbf{N} \mathbf{s} \mathbf{s} + \mathbf{T}'_0, \quad \mathbf{T}'_0 = \sum' \frac{\mathbf{K}_h \mathbf{K}_h}{K_h^2 - k^2} e^{-\frac{\pi^2}{E^2} (K_h^2 - k^2)},$$

$$(9.1') \quad \sigma_1 = \mathbf{N} + \sigma'_0, \quad \sigma'_0 = \sum' \frac{K_h^2}{K_h^2 - k^2} e^{-\frac{\pi^2}{E^2} (K_h^2 - k^2)},$$

$$(9.1'') \quad \beta = -\mathbf{N} + \frac{\nu}{\alpha} + c, \quad c = \frac{2}{3} \nu \left(\frac{E}{\sqrt{\pi}} \right)^3 \gamma(E) - \sigma'_0,$$

où $\mathbf{T}'_0$, σ'_0 et c ne dépendent que des variations importantes de $\mathbf{k}_1$ et peuvent être considérés comme constants pour les faibles variations nécessaires à l'ajustement exact de $\mathbf{k}_1$ ou $\mathbf{N}$. Cependant, on ne pourra plus considérer $\mathbf{T}'_0$ et σ'_0 comme donnés uniquement par la structure du cristal (c'est-à-dire ne dépendant que des $\mathbf{b}_h$), comme dans le cas des ondes longues : la connaissance d'une valeur approximative de $\mathbf{k}_1$ est essentielle pour déterminer ces grandeurs.

Nous procédons comme au dernier paragraphe en introduisant les axes principaux du tenseur $\mathbf{T}'_0$:

$$(9.2) \quad \mathbf{T}'_0 = \tau'_x \mathbf{x}' \mathbf{x}' + \tau'_y \mathbf{y}' \mathbf{y}' + \tau'_z \mathbf{z}' \mathbf{z}'.$$

Les accents sont ajoutés pour rappeler la dépendance de $\mathbf{k}_1$ qui distingue ces axes de ceux du paragraphe précédent. Du reste (7.6) peut être écrit

$$(9.3) \quad \left\{ \frac{\nu}{\alpha} + c + \tau'_x \mathbf{x}' \mathbf{x}' + \tau'_y \mathbf{y}' \mathbf{y}' + \tau'_z \mathbf{z}' \mathbf{z}' \right\} \mathbf{p} = \mathbf{N} \mathbf{p}_1.$$

d'où l'on tire, comme plus haut :

$$(9.4) \quad \tau'_x = N'_x - \frac{v}{\alpha} - c$$

et toutes les autres conséquences du cas des ondes longues. On obtiendra donc comme surface de dispersion un tronçon de surface normale ordinaire limité par la condition que la variation de direction $\mathbf{s}$ reste si petite qu'on puisse considérer $\mathbf{T}'_0$ et σ'_0 comme constants.

Entre ces limites le cristal se comporte pour l'unique onde forte comme un cristal pour la lumière ordinaire avec des axes principaux $\mathbf{x}' \dots$ et des indices principaux $N'_x \dots$ qui dépendent du vecteur d'onde $\mathbf{k}_1$. C'est en ce sens qu'on peut parler d'une double réfraction des rayons X, due à l'arrangement anisotrope de dipôles isotropes ⁽¹⁾. Les valeurs principales de l'indice de réfraction ne pourront être déterminées d'une façon générale; mais avec des données spéciales la détermination des axes du tenseur $\mathbf{T}_0$ ne présente point de difficultés.

On peut se demander s'il existe une réfraction moyenne, qui soit indépendante de la direction de propagation.

L'invariant du tenseur $\mathbf{T}'_0$, $\tau'_x + \tau'_y + \tau'_z = \sigma'_0$ selon (9.1) et (9.1'). On obtient donc de (9.4)

$$(9.5) \quad N'_x + N'_y + N'_z = \sigma'_0 + 3 \left(\frac{v}{\alpha} + c \right)$$

ou

$$(9.6) \quad \left\{ \begin{aligned} \frac{1}{\overline{\mu}^2 - 1} &= \frac{1}{3} \left\{ \frac{1}{\mu_x^2 - 1} + \frac{1}{\mu_y^2 - 1} + \frac{1}{\mu_z^2 - 1} \right\} = \frac{v}{\alpha} - 1 + \frac{2}{3} \left[v \left(\frac{E}{\sqrt{\pi}} \right)^3 - \sigma'_0 \right], \\ \overline{\mu}^2 - 1 &= \frac{\frac{\alpha}{v}}{1 - \frac{\alpha}{v} \left\{ 1 + \frac{2}{3} \left[\sigma'_0 - v \left(\frac{E}{\sqrt{\pi}} \right)^3 \right] \right\}}. \end{aligned} \right.$$

Cet indice moyen dépend encore de la direction $\mathbf{s}$ qui entre en σ'_0 . Dans le cas des ondes longues nous aurions σ_0 au lieu de σ'_0 et en introduisant pour σ_0 la valeur (8.15) on obtient

$$(9.6') \quad \overline{\mu}^2 - 1 = \frac{\frac{\alpha}{v}}{1 - \frac{1}{3} \frac{\alpha}{v}} \quad \text{ou} \quad 3 \frac{\overline{\mu}^2 - 1}{\overline{\mu}^2 + 2} = \frac{\alpha}{v},$$

⁽¹⁾ Cette question de double réfraction des rayons X a été discutée à plusieurs reprises, mais d'une façon formelle seulement, en supposant que la force restitutive du dipôle varie selon la direction de polarisation (dipôle anisotrope).

c'est-à-dire que cet indice moyen obéit à la formule ordinaire de Lorentz comme un corps isotrope de polarisabilité spécifique $\frac{\alpha}{v}$. Pour les ondes courtes, au contraire, le cristal n'a point d'indice moyen indépendant de la direction de propagation.

b. Plusieurs $\mathbf{L}_j$ sont d'ordre supérieur à 1. — Ce cas embrasse les phénomènes de diffraction des rayons X. Supposons qu'il y ait n points du réseau de Fourier situés très près de la sphère de propagation et désignons par $\mathbf{L}_j$ les n valeurs de $\mathbf{L}_h$ correspondantes. Ces n valeurs seront très sensibles aux changements du point de propagation A (*fig. 1*), tandis que les autres $\mathbf{L}_h$, tout en changeant pour des déplacements importants de $\mathbf{k}_1$, ne sont pas affectées par les adaptations minimales de $\mathbf{k}_1$, nécessaires pour la solution du problème dynamique. Si nous désignons par deux accents les valeurs des sommes obtenues sans les n membres forts, on aura

$$(9.7) \quad \sum \mathbf{L}_h \mathbf{L}_h = \sum_{(n)} \frac{\mathbf{K}_j \mathbf{K}_j}{\mathbf{K}_j^2 - k^2} + \sum_h'' \frac{\mathbf{K}_h \mathbf{K}_h}{\mathbf{K}_h^2 - k^2} e^{-\frac{\pi^2}{\mathbf{K}_h^2} (\mathbf{K}_h^2 - k^2)} = \dots + \mathbf{T}_0'',$$

$$(9.7') \quad \sigma_1 = \sum_{(n)} \frac{\mathbf{K}_j^2}{\mathbf{K}_j^2 - k^2} + \sum_h'' \frac{\mathbf{K}_h^2}{\mathbf{K}_h^2 - k^2} e^{-\dots} = \dots + \sigma_0'',$$

$$(9.7'') \quad \beta = - \sum_{(n)} \frac{\mathbf{K}_j^2}{\mathbf{K}_j^2 - k^2} - \sigma_0'' + \frac{2}{3} v \left(\frac{\mathbf{E}}{\sqrt{\pi}} \right)^3 + \frac{v}{z}.$$

L'équation du mouvement (7.6) devient

$$(9.8) \quad \left\{ \frac{v}{z} + \frac{2}{3} v \left(\frac{\mathbf{E}}{\sqrt{\pi}} \right)^3 - \sigma_0'' + \mathbf{T}_0'' \right\} \mathbf{p} = \sum_{(n)} \mathbf{p}_{1\mathbf{K}_j} \frac{\mathbf{K}_j^2}{\mathbf{K}_j^2 - k^2}.$$

Le membre gauche contient le tenseur $\mathbf{T}_0''$ dont σ_0'' est le premier invariant. La somme des trois derniers termes de la parenthèse est indépendante de E et, selon le nombre n des raies fortes et leurs directions, le vecteur $\mathbf{p}$, obtenu en résolvant l'équation variera, en longueur et direction. Ces trois derniers membres produisent une anisotropie du dipôle entouré du réseau (lequel, isolé, est supposé isotrope), anisotropie du même genre mais différente dans le détail de celle qui a été discutée pour le cas α . On ne saurait la déterminer qu'en connaissant tous les détails du cristal ($\mathbf{b}_h$) et les caractères essentiels du champ (point de propagation A à peu près connu).

Comme approximation nous pouvons laisser de côté les trois derniers membres de la parenthèse et traiter l'équation

$$(9.9) \quad \frac{\nu}{\alpha} \mathbf{p} = \sum_{(n)} \mathbf{p}_{\mathbf{L}_k} \frac{\mathbf{K}_j^2}{\mathbf{K}_j^2 - k^2}.$$

En posant

$$(9.10) \quad \sum_{(n)} \frac{\mathbf{K}_j^2}{\mathbf{K}_j^2 - k^2} = \rho, \quad \frac{\nu}{\alpha} - \rho = \beta$$

cette équation devient

$$(9.9') \quad \left\{ \beta + \sum_{(n)} \frac{\mathbf{K}_j(\mathbf{K}_{j'})}{(\mathbf{K}_j^2 - k^2)} \right\} \mathbf{p} = 0$$

et se réduit à la forme (7.6) avec la condition de résolution (7.9). Vis-à-vis du cas envisagé au paragraphe (7) il y a cependant la différence que les $\mathbf{L}_k$ sont simplifiés par ce que les exponentielles sont toutes égales à 1 et que les sommes n'embrassent que les n membres forts. L'interprétation directe de l'équation simplifiée (9.9) est la suivante : $\mathbf{p}$ égale α fois le champ provenant seulement des n ondes qui sont fortes par résonance; on a laissé de côté les influences secondaires du champ d'excitation.

Il est superflu de discuter la condition de dispersion pour ce cas, puisque cela a été fait ailleurs (¹). De cette condition (7.9) résulte la surface de dispersion à $2n$ nappes qui est le lieu du point de propagation A et de laquelle on déduit les écarts à la loi de Bragg, la largeur du domaine angulaire dans lequel la réflexion des rayons X se produit et enfin l'intensité de cette réflexion par un cristal parfait.

10. Résumé. — En résumé, on a étudié et discuté la théorie de l'interaction du rayonnement et des atomes d'un cristal. Le plus grand soin doit être apporté à la détermination exacte du champ d'excitation qui produit les oscillations des atomes individuels. Le modèle simple du cristal parfaitement périodique permet d'effectuer ce calcul avec précision pour une longueur d'onde quelconque : le résultat est

(¹) P. P. EWALD, *Annalen der Physik*, 54, 1917, p. 519; *Zeitschr. f. Kristallographie*, 97, 1937, p. 1. — Voir aussi *Handb. d. Physik*, II Aufl. (1933), Bd. 23/2, p. 285-300.

donné par les formules (6.18)-(6.21), au moyen d'une quantité arbitraire E , dont l'interprétation est donnée au paragraphe 6 et dans la figure 3. En supposant que les atomes réagissent comme des dipôles de polarisabilité isotrope α (5.1), (5.2), on obtient l'équation de mouvement des dipôles sous les formes (7.1), (7.6) et ensuite comme condition de résolution l'équation de dispersion générale (7.9). On a montré, ensuite, que cette équation se réduit dans le cas de la lumière visible à l'équation de la surface normale de Fresnel et pour le cas des rayons X à l'équation de la surface de dispersion de la théorie dynamique des interférences X.

Les deux branches de l'optique cristalline, lumière visible et rayons X, ont donc été traitées par la même méthode, laquelle pourrait être appliquée également pour le domaine intermédiaire, ouvrant ainsi la voie au calcul de l'optique des rayons infra-X. Par suite des difficultés inhérentes au problème il ne semble pas possible d'arriver à des résultats généraux pour l'optique infra-X, mais on pourra aisément suivre la transition de l'optique visible à l'optique X par un calcul numérique dans des cas spéciaux.

L'interaction des atomes par leur rayonnement permet de parler d'une double réfraction pour les rayons X dans un sens restreint (§ 9).

Le calcul numérique de cette interaction dans le cas de la lumière, effectué en 1912, prouve qu'elle conduit à une double réfraction de l'ordre de grandeur observable. Cette interaction est donc essentielle. D'autre part, elle n'est pas la seule cause de l'anisotropie optique, puisqu'il y en a deux autres : l'anisotropie propre du dipôle représentant la réaction optique de l'atome (orienté dans un cristal) et l'anisotropie du champ de force cristallin dans lequel l'atome est placé quand il forme partie du cristal (interaction statique des atomes du cristal). M. Hylleraas a montré dans ses calculs que les interactions statique et par rayonnement suffisent dans les cas considérés pour tenir compte des propriétés optiques des cristaux tels que Hg^2Cl^2 , TiO^2 , quartz, etc. Dans la théorie simplifiée que nous venons d'énoncer pour un autre objet que le calcul actuel, l'interaction statique se présenterait comme qualité tensorielle de la polarisabilité α , tenseur dépendant de la structure et des forces entre les atomes voisins.

Je tiens à remercier ici l'Université de Cambridge (Angleterre) et la « Society for the Protection of Science and Learning » (Londres) pour

m'avoir procuré les moyens et le loisir de rédiger ces conférences faites en 1932.

M. A. Papapetrou, d'Athènes, m'a rendu de grands services par la discussion critique de quelques difficultés qui ont empêché une publication plus prompte. Je lui dois également tous mes remerciements.

(Conférences données
à l'Institut Henri Poincaré
en février 1932.)
