

## ATELIER 2

***Facteur de structure, mode de réseau et extinctions***

—

**Exercice 1 : Loi de Friedel**

Montrer que les figures de diffraction sont centrosymétriques. *Pour ce faire, on montrera que  $I_{hkl} = I_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}$ .*

Cette propriété (appelée loi de Friedel) est-elle toujours vérifiée ?

**Exercice 2 : Facteur de structure et mode de réseau**

1. Quelles sont les translations de réseau compatibles avec le réseau cristallin ? Donner les modes de réseau correspondants.
2. Etablir les conditions d'extinction dues au mode de réseau (*ou conditions d'existence des nœuds du réseau réciproque*) dans le cas d'un réseau I et d'un réseau F. *On pourra partir de l'expression du facteur de structure dans laquelle on tiendra compte des translations de réseau propres aux modes I et F.*

**Exercice 3 : Le cas de InP et GaAs**

Le phosphore d'indium (InP) et l'arséniure de gallium (GaAs) sont des composés isostructuraux. Pourtant leurs diagrammes de diffraction de poudres respectifs ne présentent pas la même succession de raies diffractées par les plans  $(hkl)$  :

InP	111	200	220	311	222	400
GaAs	111	220	311	400		

1. Quel est le mode de réseau de InP et GaAs ?
2. Expliquer pourquoi certaines raies qui existent pour InP ne sont pas visibles pour GaAs. *Pour ce faire, on calculera le facteur de structure.*

On donne les coordonnées réduites des atomes dans la maille

In/Ga	0	0	0
P/As	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$

ainsi que les numéros atomiques des quatre éléments :  $Z_{\text{Ga}} = 31$ ,  $Z_{\text{As}} = 33$ ,  $Z_{\text{In}} = 49$  et  $Z_{\text{P}} = 15$ .

## **Exercice 4 : Extinctions systématiques dues aux éléments de symétrie de position**

La présence de miroirs avec glissement ou d'axes hélicoïdaux dans le groupe d'espace d'un cristal se traduit en diffraction des rayons X par l'extinction de certaines raies. Ces extinctions sont dites systématiques. Dans cet exercice, nous voulons établir les conditions sur les indices  $h$ ,  $k$  et  $\ell$  qui définissent les extinctions systématiques dues aux éléments de symétrie.

1. Déterminer les extinctions systématiques dans le cas d'un miroir de type  $c$  perpendiculaire à  $\vec{a}$ .
2. Déterminer les extinctions systématiques dans le cas d'un axe hélicoïdal de type  $2_1$  parallèle à  $\vec{c}$ .

## **Exercice 5 : Le cas du rutile ( $\text{TiO}_2$ )**

Le rutile ( $\text{TiO}_2$ ) est un minéral qui cristallise dans le système quadratique. Son groupe ponctuel est  $\frac{4}{m}mm$ . Les paramètres de maille sont  $a = 4.594 \text{ \AA}$  et  $c = 2.958 \text{ \AA}$ . Les positions des atomes dans la maille sont :

$$\text{Ti} \quad 0, 0, 0 \quad \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$$

$$\text{O} \quad u, u, 0 \quad u + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - u, \frac{1}{2} \quad \bar{u}, \bar{u}, 0 \quad \frac{1}{2} - u, u + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$$

1. Déterminer le mode de réseau du rutile.
2. Déterminer l'expression du facteur de structure.
3. En déduire les extinctions systématiques et les éléments de symétrie qui en sont responsables.