

TD 5 : Facteur de structure : mode et motif

1 Facteur de structure avec un motif simple d'un atome en (0,0,0).

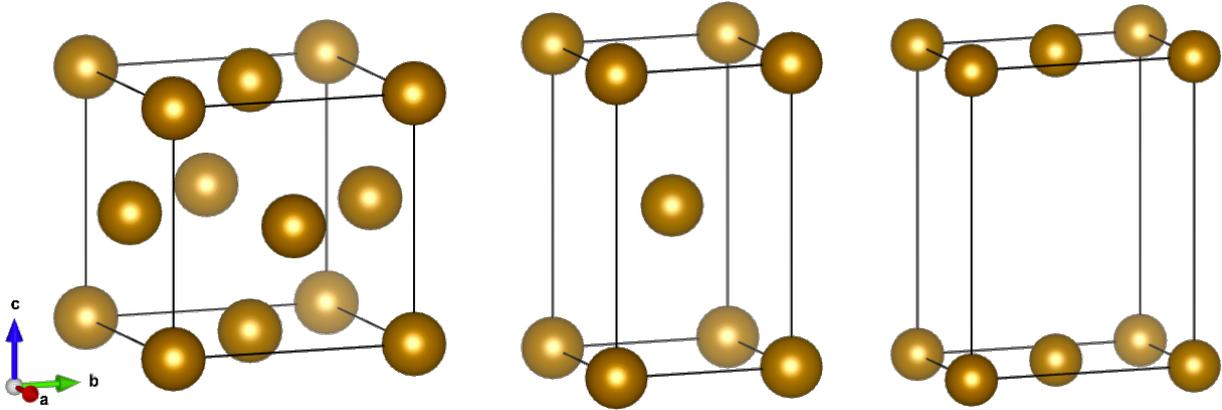


FIGURE 1 – Différents modes pour un motif simple d'un atome en (0,0,0).

1.1 Mode F

On considère un cristal cubique face centré F, avec un motif constitué d'un atome de fer (Fe, $Z=26$) en (0,0,0) (Fig. 1 à gauche).

1. Calculer le facteur de structure F_{hkl} pour un cubique F.
2. En déduire les règles d'extinction pour le mode F.

1.2 Mode I

On considère un cristal tetragonal centré I, avec un motif constitué d'un atome de plomb (Pb, $Z=82$) en (0,0,0) (Fig. 1 au milieu).

1. Calculer le facteur de structure F_{hkl} pour un tetragonal centré I.
2. En déduire les règles d'existence pour le mode I.

1.3 Mode C

On considère un cristal orthorhombique centré C, avec un motif constitué d'un atome de zinc (Zn, $Z=30$) en (0,0,0) (Fig. 1 à droite).

1. Calculer le facteur de structure F_{hkl} pour un orthorhombique centré C.
2. En déduire les règles d'existence pour le mode I.

2 Facteurs de structure avec motif.

2.1 Les composés de type RX

On considère un cristal de formule générale RX composé de deux éléments dont R est en position (0,0,0) et X en position (1/2, 1/2, 1/2) (Fig. 2 à gauche). Dans cette formule R est un atome de césium ($Z=55$) dans sa forme ionique Cs^+ , et X est soit un atome de chlore : Cl ($Z=17$) soit un atome d'iode I ($Z=53$) dans leur forme réduite (Cl^- ou I^-). Pour les facteurs de diffusion atomique, on considérera pour les applications numériques que $f(q)$ est égal au nombre d'électrons de l'espèce chimique.

1. Quelles est le mode de réseau ?

- Calculer le facteur de structure F_{hkl} pour le cas où $X=\text{Cl}^-$ et $X=\text{I}^-$.
- Quelle extinction supplémentaire observe-t-on pour $X=\text{I}^-$? Commenter.

2.2 La structure diamant

Le diamant est un cristal cubique face centrée dont le motif est constitué de deux atomes de carbone (C, $Z=8$) situés en $(-1/8, -1/8, -1/8)$ et $(1/8, 1/8, 1/8)$ (Fig. 2 au milieu).

- Quelles sont les conditions sur les indices hkl pour que l'intensité soit non nulle ?
- Calculer le facteur de structure F_{hkl} du diamant.
- Quelle condition supplémentaire doivent satisfaire hkl pour que l'intensité soit non nulle à cause du motif ?

2.3 YbCu_2Si_2

YbCu_2Si_2 cristallise dans le groupe d'espace $I4/mmm$. On donne la position de 3 atomes : Yb $(0,0,0)$, Cu $(1/2,0,1/4)$ et Si $(0,0,0.38)$ (Fig. 2 à droite).

- Combien y a-t-il de noeud par maille ?
- Combien d'atomes constituent le motif.
- Donner la position de chaque atome du motif.
- Donner l'expression du facteur de structure F_{hkl} de YbCu_2Si_2 .

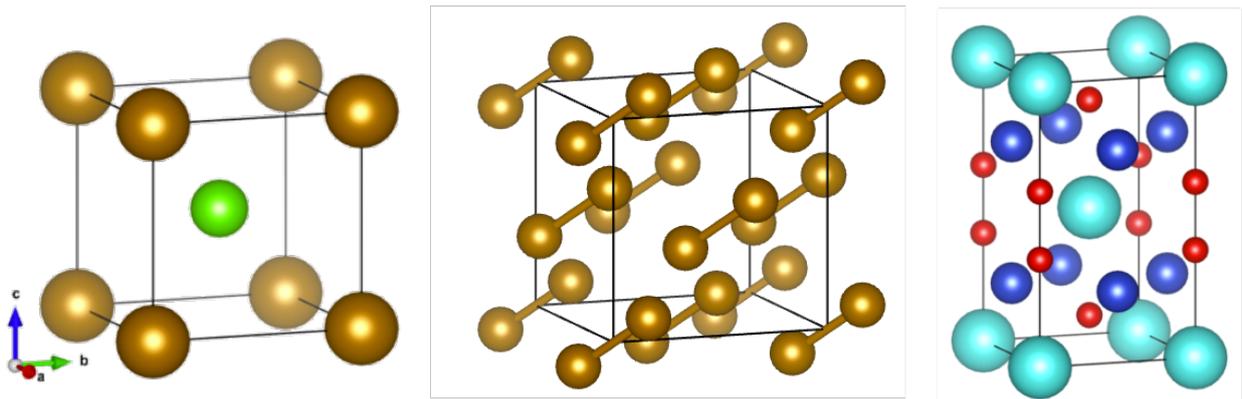


FIGURE 2 – Gauche : structure cubique de type de type RX. Milieu : structure diamant. Droite : structure de YbCu_2Si_2 avec Yb en bleu clair, Cu en bleu foncé et Si en rouge