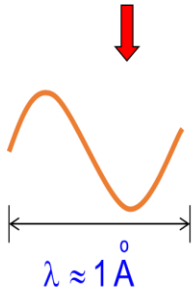
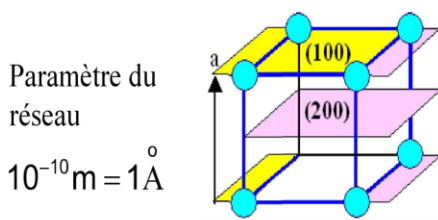


## Chapitre II- Diffraction cristalline et Réseau réciproque

### I. Le faisceau incident:

On étudie la structure cristalline par la diffraction des photons, des neutrons et des électrons.



$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \iff \lambda = \frac{hc}{E}$$

rayon-X:  $\lambda \approx 1\text{\AA} \implies E \approx 12\text{ keV}$

Electrons:  $p = \hbar k = \frac{h}{\lambda} \iff \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$

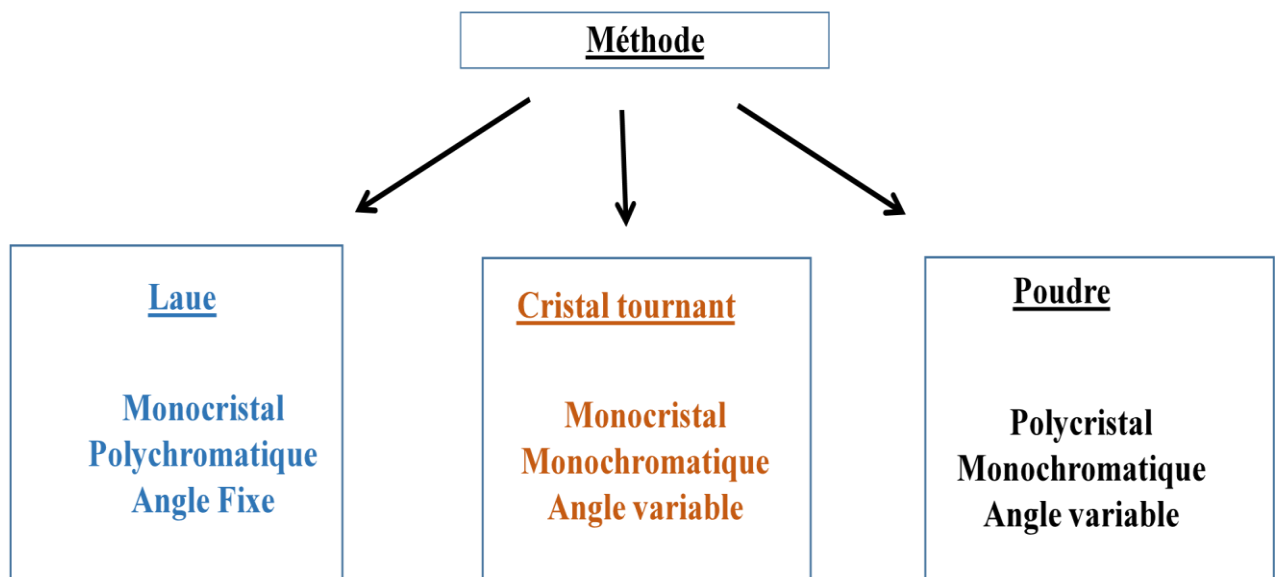
$\lambda \approx 1\text{\AA}$   $m_e = 9.1 \cdot 10^{-31}\text{ kg}$   $\implies E \approx 150\text{ eV}$

Neutrons:  $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$

$\lambda \approx 1\text{\AA}$   $m_n = 1.6749 \cdot 10^{-27}\text{ kg}$   $\implies E \approx 0.08\text{ eV}$

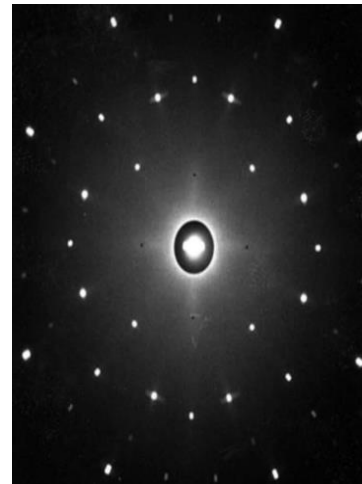
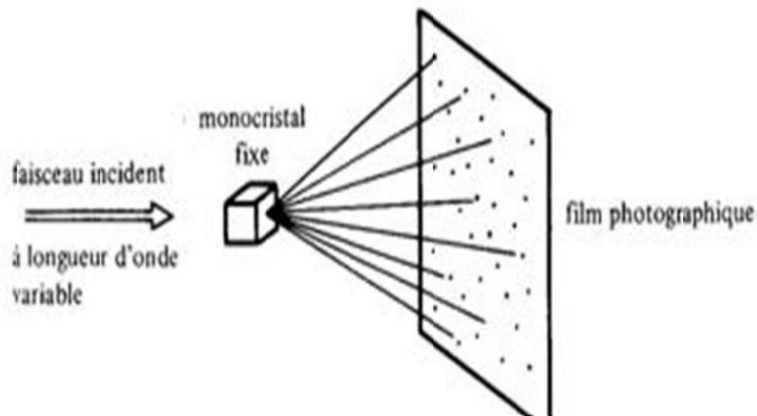
### II. Méthodes expérimentales de diffraction:

Diffraction : fractionnement d'une onde après interaction avec un objet



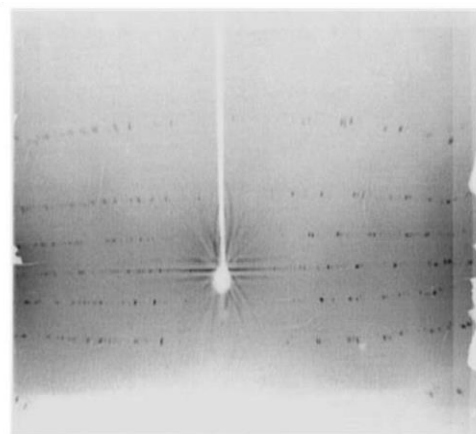
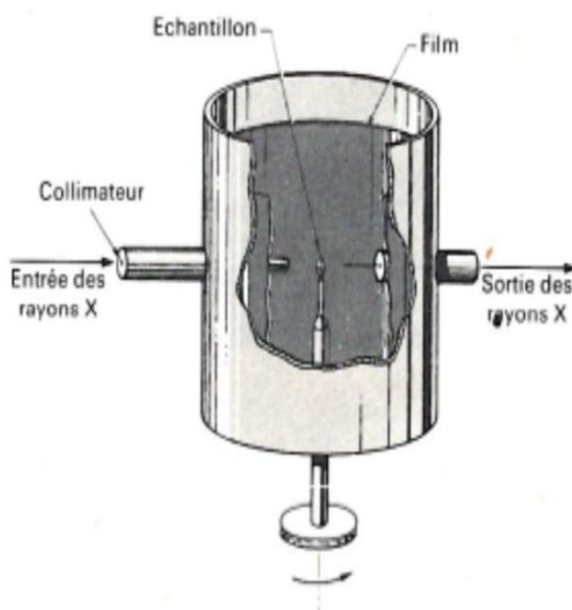
### a. méthode de Laue

La méthode de Laue est un procédé de radiocristallographie qui consiste à recueillir le cliché de diffraction d'un faisceau polychromatique de rayons X ou de neutrons par un monocristal fixe.



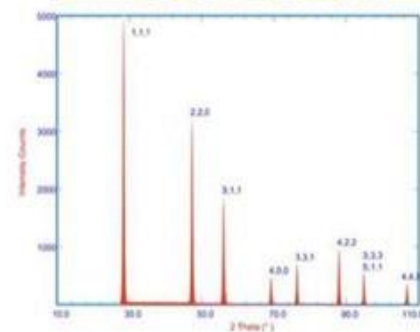
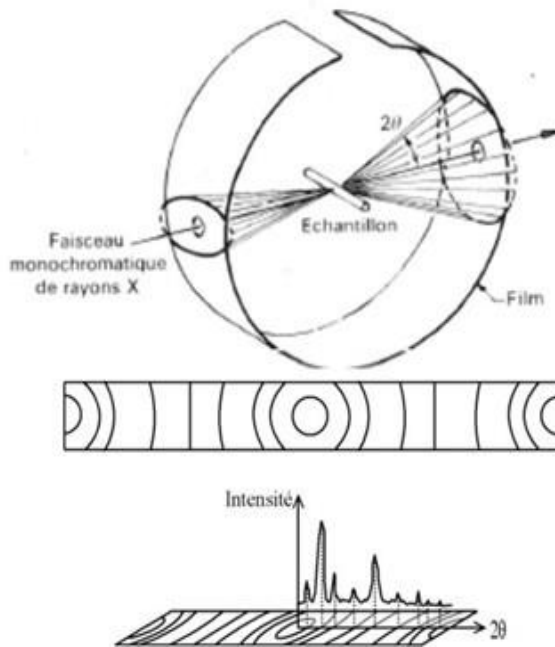
### b. Méthode du cristal tournant

On utilise un rayonnement monochromatique. Le cristal tourne autour d'un axe établi par la méthode de Laue. Le réseau réciproque tourne, alors que la sphère d'Ewald reste fixe. La condition de diffraction est vérifiée à l'instant où un nœud du réseau réciproque touche la sphère.



### c. Méthode des poudres :

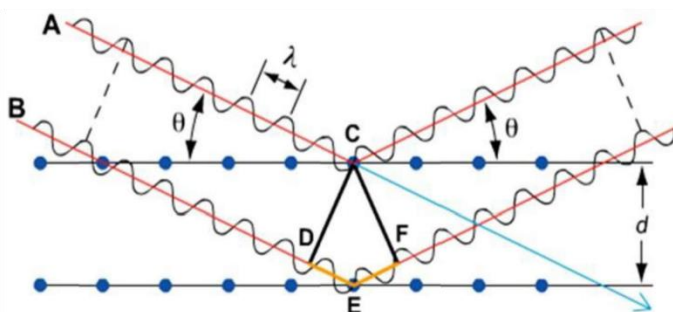
Un rayonnement monochromatique frappe une poudre qui présente une association de petits cristaux orientés au hasard. Des rayons sont diffractés par les cristaux formant avec le pinceau incident un angle qui satisfait à l'équation de Bragg.



### III. Loi de Bragg

Les rayons X se réfléchissent sur les plans réticulaires d'un réseau cristallin comme sur un miroir partiellement transparent.

On obtient un renforcement du faisceau diffracté dans une direction donnée si les rayonnements réfléchis sur les plans réticulaires successifs d'une même famille présentent entre eux une différence de marche qui est multiple entier de la longueur d'onde.



$$DE = d \sin \theta \quad EF = d \sin \theta$$

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

où  $\lambda$  est la longueur d'onde du rayonnement, et  $n$  un nombre entier et  $d$  l'écartement des plans réticulaires

#### IV. Calcul de l'amplitude de l'onde diffusée

La densité électronique  $n(\mathbf{r})$  est une fonction périodique de  $\mathbf{r}$  avec les périodes  $a$ ,  $b$  et  $c$  dans la direction des trois axes du cristal: nous en déduisons

$$n(\mathbf{r}) = n(\mathbf{r} + \mathbf{T})$$

Une telle périodicité est une situation idéale pour l'analyse de Fourier. Nous commençons par étudier une fonction  $n(x)$  à une dimension, de période  $a$ . Nous développons  $n(x)$  en une série de Fourier en cosinus et sinus:

$$n(x) = n_0 + \sum_{p>0} [C_p \cos(2\pi p x / a) + S_p \sin(2\pi p x / a)]$$

Où les  $p$  sont des entiers positifs et  $C_p$  et  $S_p$  des constantes réelles, appelées les coefficients de Fourier du développement.

$$\begin{aligned} n(x+a) &= n_0 + \sum_{p>0} [C_p \cos(2\pi p x / a + 2\pi p) + S_p \sin(2\pi p x / a + 2\pi p)] \\ &= n_0 + \sum_{p>0} [C_p \cos(2\pi p x / a) + S_p \sin(2\pi p x / a)] = n(x). \end{aligned}$$

Nous dirons que  $2\pi p/a$  est un point du réseau réciproque, ou espace de Fourier, du cristal.

L'extension de l'analyse de Fourier à des fonctions périodiques de dimension trois n'est guère compliquée. Nous devons trouver une famille de vecteur  $\mathbf{G}$  tels que:

$$n(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} \quad \text{Avec} \quad n_{-\vec{G}} = n_{\vec{G}}^*$$

Soit invariant par toute translation de réseau  $\mathbf{T}$  qui laisse le cristal invariant,

$$n(\vec{r} + \vec{T}) = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot (\vec{r} + \vec{T})} = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{T}} = n(\vec{r}) \quad \text{quand} \quad e^{i\vec{G} \cdot \vec{T}} = 1$$

L'amplitude de l'onde diffusée par le cristal dans la direction  $\mathbf{k}'$  est :

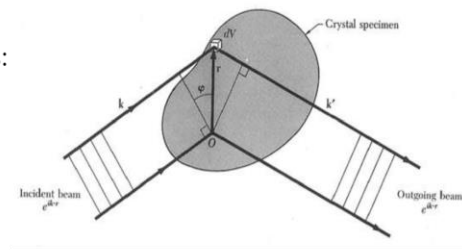
$$A = \int dV n(\vec{r}) e^{-i\vec{\Delta k} \cdot \vec{r}} \quad \text{Où } \vec{\Delta k} \text{ est le vecteur de diffusion } \mathbf{k} - \mathbf{k}'$$

$$A = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} \int dV e^{i(\vec{G} - \vec{\Delta k}) \cdot \vec{r}} = V \cdot n_{\vec{G}} \quad \text{A savoir que } A \text{ devienne négligeable quand} \quad \vec{G} \neq \vec{\Delta k}$$

## - Construction d'Ewald

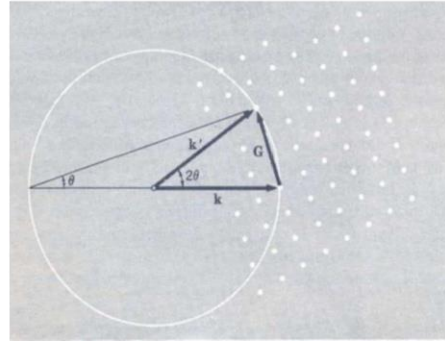
Dans l'espace de Fourier des vecteurs d'onde, les deux règles suivantes:

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{G} = \Delta \vec{k} = \vec{k}' - \vec{k} \\ k = k' \end{array} \right.$$



peuvent se présenter géométriquement. Etant donné un vecteur d'onde incident  $\mathbf{k}$ , on trace une sphère autour du vecteur  $\mathbf{k}$  centrée sur l'origine de  $\mathbf{k}$  comme le montre la figure ci-dessous.

Des pics de diffraction correspondants à des vecteurs de réseau réciproques  $\mathbf{G}$  seront observés si et seulement si  $\mathbf{G}$  donne un point du réseau réciproque situé à la surface de la sphère. Un tel vecteur est indiqué sur la figure, ainsi que le vecteur d'onde  $\mathbf{k}'$  du rayon de Bragg réfléchi.



## V. Vecteur du réseau réciproque

### a. Définition

réseau de Bravais  $\vec{T}_{pqr} = p\vec{a} + q\vec{b} + r\vec{c}$   $p, q \text{ et } r \in \mathbb{Z}$

réseau réciproque  $\vec{G}_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$   $h, k \text{ et } l \in \mathbb{Z}$

Les relations de définitions du réseau réciproque sont les suivantes

$$\left. \begin{array}{lll} \vec{a} \cdot \vec{a}^* = 2\pi & \vec{a} \cdot \vec{b}^* = 0 & \vec{a} \cdot \vec{c}^* = 0 \\ \vec{b} \cdot \vec{a}^* = 0 & \vec{b} \cdot \vec{b}^* = 2\pi & \vec{b} \cdot \vec{c}^* = 0 \\ \vec{c} \cdot \vec{a}^* = 0 & \vec{c} \cdot \vec{b}^* = 0 & \vec{c} \cdot \vec{c}^* = 2\pi \end{array} \right\} \begin{array}{l} \vec{a}^* = 2\pi \frac{\vec{b} \wedge \vec{c}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \wedge \vec{c})} \\ \vec{b}^* = 2\pi \frac{\vec{c} \wedge \vec{a}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \wedge \vec{c})} \\ \vec{c}^* = 2\pi \frac{\vec{a} \wedge \vec{b}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \wedge \vec{c})} \end{array}$$

Le volume de la maille directe est :  $v = \vec{a} \cdot (\vec{b} \wedge \vec{c})$

Celui de la maille réciproque est :  $v^* = \vec{a}^* \cdot (\vec{b}^* \wedge \vec{c}^*)$

$$\longrightarrow v^* = \frac{(2\pi)^3}{v^3} (\vec{b} \wedge \vec{c}) \cdot [(\vec{c} \wedge \vec{a}) \wedge (\vec{a} \wedge \vec{b})]$$

En utilisant les identités de Lagrange:  $\vec{C} \wedge (\vec{A} \wedge \vec{B}) = (\vec{C} \cdot \vec{B}) \cdot \vec{A} - (\vec{C} \cdot \vec{A}) \cdot \vec{B}$

$$(\vec{C} \wedge \vec{A}) \wedge \vec{B} = (\vec{C} \cdot \vec{B}) \cdot \vec{A} - (\vec{C} \cdot \vec{B}) \cdot \vec{A}$$

$$v^* = \frac{(2\pi)^3}{v^3} \left[ ((\vec{b} \wedge \vec{c}) \cdot \vec{a}) \vec{c} - ((\vec{b} \wedge \vec{c}) \cdot \vec{c}) \vec{a} \right] \cdot (\vec{a} \wedge \vec{b})$$

$$\longrightarrow v^* = \frac{(2\pi)^3}{v^3} [vc] \cdot (\vec{a} \wedge \vec{b}) = \frac{(2\pi)^3}{v}$$

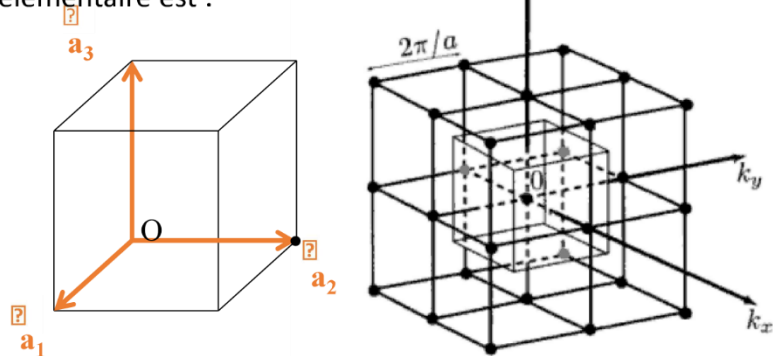
$$\longrightarrow v^* = \frac{(2\pi)^3}{v}$$

### b. Réseau réciproque du réseau cubique simple

Le volume de la maille élémentaire est :

$$v = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)$$

$$v_{CS} = a^3$$

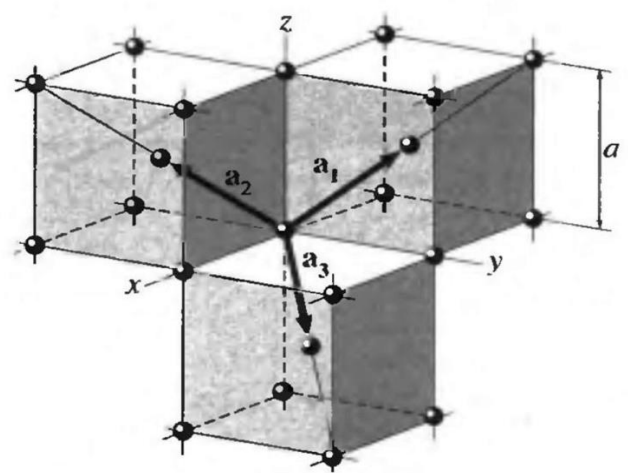


$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{a}_1 = a\vec{i} \\ \vec{a}_2 = a\vec{j} \\ \vec{a}_3 = a\vec{k} \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \vec{b}_1 = \vec{a}_1^* = \frac{2\pi}{v} \vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3 = \frac{2\pi a^2}{a^3} \vec{j} \wedge \vec{k} = \frac{2\pi}{a} \vec{i} \\ \vec{b}_2 = \vec{a}_2^* = \frac{2\pi}{v} \vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1 = \frac{2\pi a^2}{a^3} \vec{k} \wedge \vec{i} = \frac{2\pi}{a} \vec{j} \\ \vec{b}_3 = \vec{a}_3^* = \frac{2\pi}{v} \vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2 = \frac{2\pi a^2}{a^3} \vec{i} \wedge \vec{j} = \frac{2\pi}{a} \vec{k} \end{array} \right.$$

*c. Réseau réciproque du réseau cubique centré*

**Les vecteurs fondamentaux du réseau CC**

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{a}_1 = \frac{1}{2} a(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{a}_2 = \frac{1}{2} a(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{a}_3 = \frac{1}{2} a(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}) \end{array} \right.$$



Le volume de la maille élémentaire est :

$$v = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)$$

$$v_{CC} = \frac{1}{2} a(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) \cdot \left[ \frac{1}{2} a(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}) \wedge \frac{1}{2} a(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}) \right]$$

$$v_{CC} = \frac{a^3}{8} (-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) \cdot [(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}) \wedge (\vec{i} + \vec{j} - \vec{k})]$$

$$v_{CC} = \frac{a^3}{4} (-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) \cdot (\vec{j} + \vec{k})$$

$$v_{CC} = \frac{a^3}{2}$$

**Les vecteurs fondamentaux du réseau réciproque**

$$\vec{b}_1 = \vec{a}_1^* = \frac{2\pi}{v} \vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3 = \frac{2\pi}{a^3/2} \left[ \frac{1}{2} a(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}) \wedge \frac{1}{2} a(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}) \right]$$

$$\vec{b}_1 = \vec{a}_1^* = \frac{2\pi a^2/4}{a^3/2} (\vec{j} + \vec{k}) = \frac{2\pi}{a} (\vec{j} + \vec{k})$$

$$\vec{b}_1 = \vec{a}_1^* = \frac{2\pi a^2/4}{a^3/2} (\vec{j} + \vec{k}) = \frac{4\pi}{a} \left( \frac{1}{2} (\vec{j} + \vec{k}) \right)$$

De même on trouve

$$\vec{b}_2 = \vec{a}_2^* = \frac{2\pi}{v} \vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1 = \frac{2\pi}{a} (\vec{i} + \vec{k}) = \frac{4\pi}{a} \left( \frac{1}{2} (\vec{i} + \vec{k}) \right)$$

$$\vec{b}_3 = \vec{a}_3^* = \frac{2\pi}{v} \vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2 = \frac{2\pi}{a} (\vec{i} + \vec{j}) = \frac{4\pi}{a} \left( \frac{1}{2} (\vec{i} + \vec{j}) \right)$$



#### d. Réseau réciproque du réseau cubique à faces centrées

Les vecteurs fondamentaux du réseau CFC

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{a}_1 = \frac{1}{2} a(\vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{a}_2 = \frac{1}{2} a(\vec{i} + \vec{k}) \\ \vec{a}_3 = \frac{1}{2} a(\vec{i} + \vec{j}) \end{array} \right.$$

Le volume de la maille élémentaire est :

$$v = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)$$

$$v_{CFC} = \frac{a^3}{8} (\vec{j} + \vec{k}) \cdot [(\vec{i} + \vec{k}) \wedge (\vec{i} + \vec{j})] = \frac{a^3}{8} (\vec{j} + \vec{k}) \cdot [(\vec{i} + \vec{k}) \wedge (\vec{i} + \vec{j})]$$

$$v_{CFC} = \frac{a^3}{8} (\vec{j} + \vec{k}) \cdot (\vec{k} + \vec{j} - \vec{i}) = \frac{a^3}{4}$$

Les vecteurs fondamentaux du réseau réciproque

$$\vec{b}_1 = \vec{a}_1^* = \frac{2\pi}{v} \vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3 = \frac{2\pi}{a^3/4} \left[ \frac{1}{2} a(\vec{i} + \vec{k}) \wedge \frac{1}{2} a(\vec{i} + \vec{j}) \right]$$

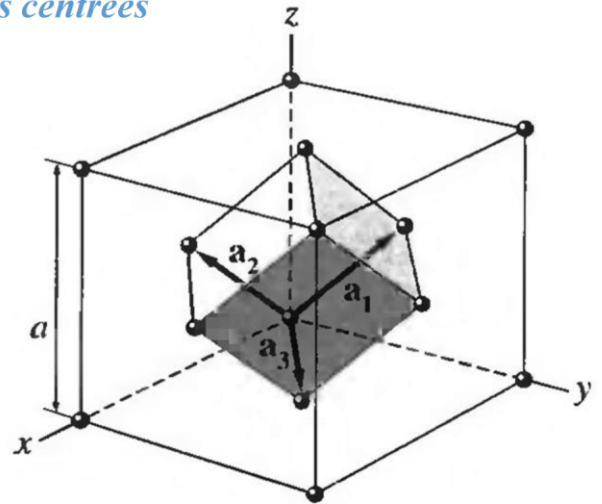
$$\vec{b}_1 = \vec{a}_1^* = \frac{2\pi a^2/4}{a^3/4} (-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) = \frac{2\pi}{a} (-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k})$$

$$\vec{b}_1 = \vec{a}_1^* = \frac{2\pi}{a} (-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) = \frac{4\pi}{a} \left( \frac{1}{2} (-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) \right)$$

De même on trouve

$$\vec{b}_2 = \vec{a}_2^* = \frac{2\pi}{v} \vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1 = \frac{2\pi}{a} (\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}) = \frac{4\pi}{a} \left( \frac{1}{2} (\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}) \right)$$

$$\vec{b}_3 = \vec{a}_3^* = \frac{2\pi}{v} \vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2 = \frac{2\pi}{a} (\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}) = \frac{4\pi}{a} \left( \frac{1}{2} (\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}) \right)$$





### e. Première zone de Brillouin

La maille primitive de Wigner-Seitz du réseau réciproque est appelée *première zone de Brillouin*. Comme le suggère le nom, on définit des zones de Brillouin d'ordre plus élevé, constituant des mailles primitives d'un type différent et qui apparaissent dans la théorie des niveaux électroniques dans un potentiel périodique.

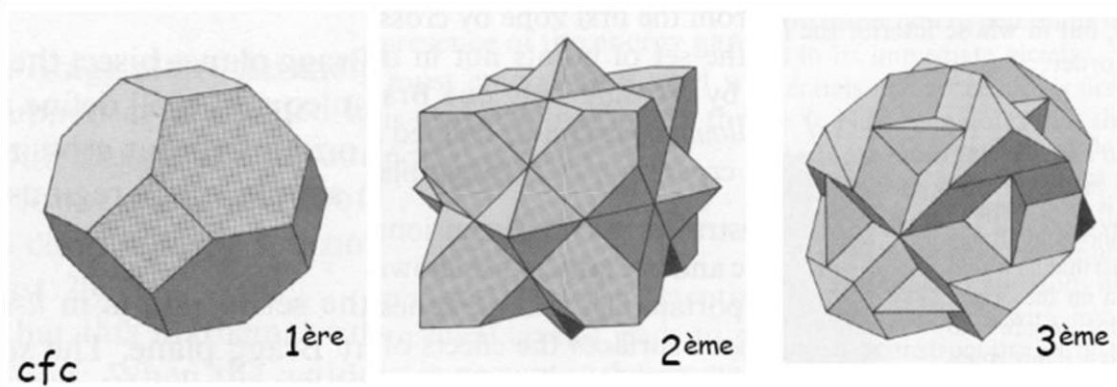
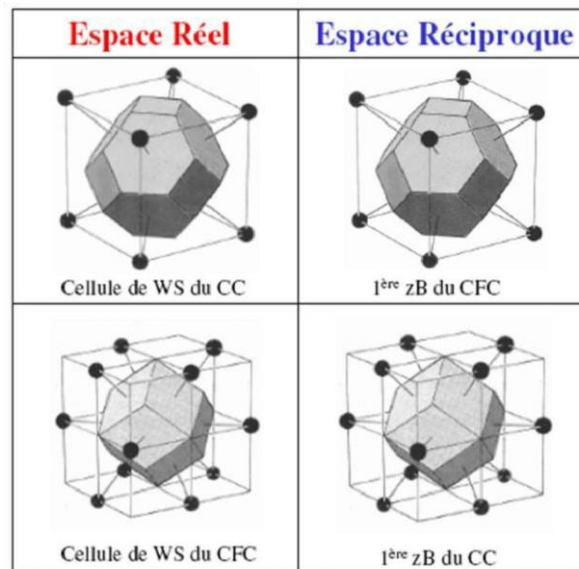


Illustration à 3 dimensions



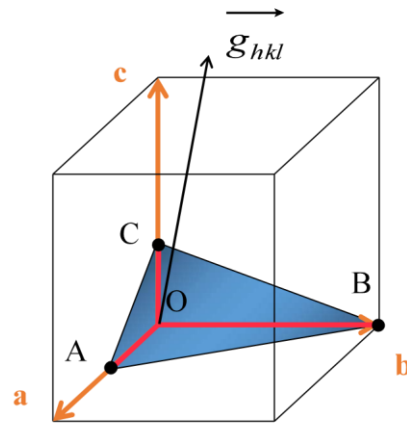
Réseau (paramètre)	Réseau réciproque (paramètre)	Première zone de Brillouin
cubique ( $a$ )	cubique ( $2\pi/a$ )	cube
cubique centré ( $a$ )	cubique faces centrées ( $4\pi/a$ )	octaèdre obtus
cubique faces centrées ( $a$ )	cubique centré ( $4\pi/a$ )	dodécaèdre rhombique

### f. Vecteurs du réseau réciproque

$$\vec{g}_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

$$\vec{OA} = \frac{\vec{a}}{h} \quad \vec{OB} = \frac{\vec{b}}{k} \quad \vec{OC} = \frac{\vec{c}}{l}$$

$$\vec{AB} = \vec{OB} - \vec{OA}$$



$$\vec{g}_{hkl} \cdot \vec{AB} = (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \cdot (\vec{OB} - \vec{OA})$$

$$\vec{g}_{hkl} \cdot \vec{AB} = (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \cdot \left(\frac{\vec{b}}{k} - \frac{\vec{a}}{h}\right) = (-2\pi + 2\pi) = 0$$

$$\text{On aura de même} \quad \vec{g}_{hkl} \cdot \vec{AC} = 0 \quad \vec{g}_{hkl} \cdot \vec{BC} = 0$$

Le plan ACB est donc perpendiculaire au vecteur  $\vec{g}_{hkl}$

### g. Distance interréticulaire $d_{hkl}$

Soit  $d_{hkl}$  la distance entre deux plans voisins de la famille. Cette distance est égale à la projection du vecteur  $\vec{OA}$  sur la normale aux plans  $(hkl)$ .

$$d_{hkl} = \vec{OA} \cdot \frac{\vec{g}_{hkl}}{\|\vec{g}_{hkl}\|} = \frac{\vec{a}}{h} \cdot \frac{h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*}{\|\vec{g}_{hkl}\|} = \frac{\vec{a} \cdot \vec{a}^*}{\|\vec{g}_{hkl}\|} = \frac{2\pi}{\|\vec{g}_{hkl}\|}$$

$$\bullet \quad d_{hkl} \text{ distance entre plan } (hkl) \quad d_{hkl} = \frac{2\pi}{\|\vec{g}_0\|}$$

• Cas général

$g_0$  plus petit vecteur de la rangée

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{\sqrt{h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hka^*b^*\cos\gamma^* + 2klb^*c^*\cos\alpha^* + 2lha^*c^*\cos\beta^*}}$$

➤ **Système cubique :**  $a^* = b^* = c^* = \frac{2\pi}{a}$ ,  $\alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90^\circ$

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

<p>Orthorhombic</p> $\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$	<p>Tetragonal</p> $\frac{1}{d_{hkl}^2} = \left[ h^2 + k^2 + l^2 \left( \frac{a}{c} \right)^2 \right] \frac{1}{a^2}$	<p>Cubic</p> $\frac{1}{d_{hkl}^2} = (h^2 + k^2 + l^2) \frac{1}{a^2}$
<p>Monoclinic</p> $\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a^2 \sin^2 \gamma} + \frac{k^2}{b^2 \sin^2 \gamma} - \frac{2hk \cos \gamma}{ab \sin^2 \gamma} + \frac{l^2}{c^2}$	<p>Hexagonal</p> $\frac{1}{d_{hkl}^2} = \left[ \frac{4}{3} (h^2 + k^2 + hk) + l^2 \left( \frac{a}{c} \right)^2 \right] \frac{1}{a^2}$	
<p>Triclinic</p> $\frac{1}{d_{hkl}^2} = \left[ \begin{vmatrix} \frac{h}{a} \cos \gamma \cos \beta & 1 & \frac{h}{a} \cos \alpha \\ \frac{h}{a} \frac{k}{b} & 1 & \cos \alpha \\ \frac{l}{c} \cos \alpha & 1 & \cos \beta \end{vmatrix} + \frac{k}{b} \begin{vmatrix} \cos \gamma \frac{k}{b} \cos \alpha & \cos \gamma & 1 \\ \cos \beta \cos \alpha & \cos \beta & \cos \alpha \end{vmatrix} + \frac{l}{c} \begin{vmatrix} \cos \gamma & 1 & \frac{k}{b} \\ \cos \beta & \cos \alpha & \frac{l}{c} \end{vmatrix} \right] \cdot \begin{vmatrix} 1 & \cos \gamma \cos \beta \\ \cos \gamma & 1 \cos \alpha \\ \cos \beta & \cos \alpha & 1 \end{vmatrix}^{-1}$		
<p>Trigonal (rhombohedral)</p> $\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{[(h^2 + k^2 + l^2) \sin^2 \alpha + 2(hk + kl + lh) (\cos^2 \alpha - \cos \alpha)]}{A^2 (1 + 2 \cos^3 \alpha - 3 \cos^2 \alpha)}$		

#### h. Angle entre plans réticulaires

En cristallographie on définit l'angle entre deux plans par l'angle de leurs normales, c'est-à-dire que l'on calcule l'angle entre deux rangées du réseau réciproque.

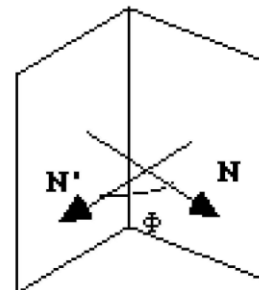
Soient deux plans d'indices de Miller (hkl) et (h'k'l').

Les équations de leurs normales respectives sont :

$$\vec{N} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^* \quad \vec{N}' = h'\vec{a}^* + k'\vec{b}^* + l'\vec{c}^*$$

On calcule alors l'angle de ces rangées

$$\vec{N} \cdot \vec{N}' = \|\vec{N}\| \|\vec{N}'\| \cos \phi$$



Donc,

$$\cos \phi = \frac{(h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \cdot (h'\vec{a}^* + k'\vec{b}^* + l'\vec{c}^*)}{\|\vec{N}\| \|\vec{N}'\|}$$

Dans le système cubique,

$$\cos \phi = \frac{hh' + kk' + ll'}{\sqrt{(h^2 + k^2 + l^2)(h'^2 + k'^2 + l'^2)}}$$

### i. Zones

Une zone est une rangée réticulaire commune à au moins deux plans réticulaires.

Soient les deux vecteurs  $\vec{N} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$   $\vec{N}' = h'\vec{a}^* + k'\vec{b}^* + l'\vec{c}^*$

le vecteur  $\vec{N} \times \vec{N}'$  est parallèle à la rangée recherchée caractérisée par

$$\vec{R}_{pqr} = p\vec{a} + q\vec{b} + r\vec{c}$$

Cela donne :

$$\vec{N} \wedge \vec{N}' = (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \wedge (h'\vec{a}^* + k'\vec{b}^* + l'\vec{c}^*)$$

$$\rightarrow \vec{N} \wedge \vec{N}' = hk'(a^* \wedge b^*) + hl'(a^* \wedge c^*) + kh'(b^* \wedge a^*) + kl'(b^* \wedge c^*) + lh'(c^* \wedge a^*) + lk'(c^* \wedge b^*)$$

$$\rightarrow \vec{N} \wedge \vec{N}' = v^* [(kl' - lk')\vec{a} + (lh' - hl')\vec{b} + (hk' - kh')\vec{c}] = \alpha \vec{R}$$

Par identification on obtient :  $p = kl' - lk'$ ;  $q = lh' - hl'$  et  $r = hk' - kh'$

### j. Facteur de structure

L'amplitude de l'onde diffusée par un cristal comportant  $N$  cellules peut s'écrire :

$$A_G = N \int_{cellule} dV \cdot n(\mathbf{r}) \cdot e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} = NF_G \quad F_G \text{ est appelé facteur de structure}$$

Si la cellule contient  $M$  atomes situées chacune dans une position  $\mathbf{r}_j$  et contribuant avec sa densité électronique  $n_j$ , le facteur de structure peut s'écrire :

$$F_G = \sum_j e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}_j} f_j \quad \text{Avec} \quad f_j = \int dV \cdot n_j(\mathbf{r}) \cdot e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} \quad \text{est le facteur de forme atomique}$$

En introduisant les vecteurs de base des deux réseaux (direct et réciproque) :

$$\vec{r}_j = x_j \vec{a} + y_j \vec{b} + z_j \vec{c} \quad \text{et} \quad \vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

le facteur de structure devient :  $F_G = F(h, k, l) = \sum_j f_j e^{-2\pi i(x_j h + y_j k + z_j l)}$