

Série 4: Détermination des structures cristallines par diffraction des rayons X

Exercice 6 : Facteur de structure d'une pérovskite

1

$$F(hkl) = f_A + f_B \exp[-i\pi(h + k + l)] + f_X(\exp[-i\pi h] + \exp[-i\pi k] + \exp[-i\pi l])$$

$$F(hkl) = f_A + f_B \times (-1)^{h+k+l} + f_X \left((-1)^h + (-1)^k + (-1)^l \right)$$

L'intensité diffusée étant proportionnelle au module de $F(hkl)$, sa valeur dépendra de la parité des indices (hkl) .

2

1^{er} cas: (h+ k+ l) pair:

- 1 indice pair et deux impairs:

$$F(hkl) = f_A + f_B - f_X$$

- Les trois indices pairs:

$$F(hkl) = f_A + f_B + 3f_X$$

2^{ème} cas: (h+ k +l) impair:

- 2 indices pairs et un indice impair:

$$F(hkl) = f_A - f_B + f_X$$

- Les trois indices impairs:

$$F(hkl) = f_A - f_B - 3f_X$$