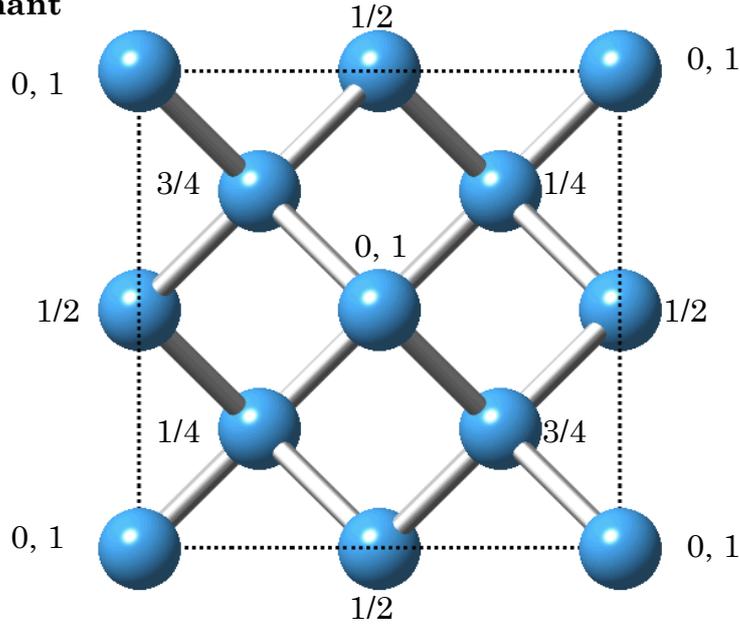


Structure diamant

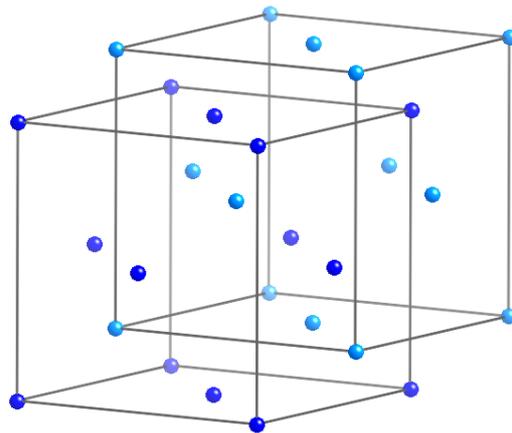


• Recenser tous les atomes de la maille en indiquant leur position

On recense donc 8 atomes dans une maille :

$0, 0, 0$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$
$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}$	$\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$	$\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}$

le fait de les lister dans cet ordre met en évidence que la structure diamant peut-être décrite comme deux réseaux cubiques faces centrées décalés de $\frac{1}{4}(\vec{a} + \vec{b} + \vec{c})$.

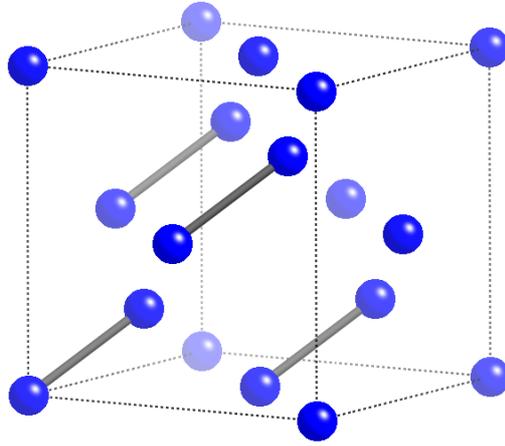


• Identifier le réseau et le motif

Une autre façon de décrire la structure cubique diamant consiste à considérer un réseau cubique F décoré en chaque nœud du motif suivant :

- un atome en $0, 0, 0$
- un atome en $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$

Cette représentation est illustrée sur la figure suivante :



• Etablir le facteur de structure F_{hkl}

Dans ce cas, l'expression du facteur de structure est aisée puisqu'au lieu d'une somme de 8 termes, on a un produit de 2 termes :

$$F_{hkl} = \underbrace{\sum_j^{\text{motif}} f_j \cdot e^{-2i\pi(hx_j + ky_j + lz_j)}}_{\text{motif}} \cdot \underbrace{\left[1 + e^{-i\pi[k+l]} + e^{-i\pi[h+l]} + e^{-i\pi[h+k]}\right]}_{\text{réseau}}$$

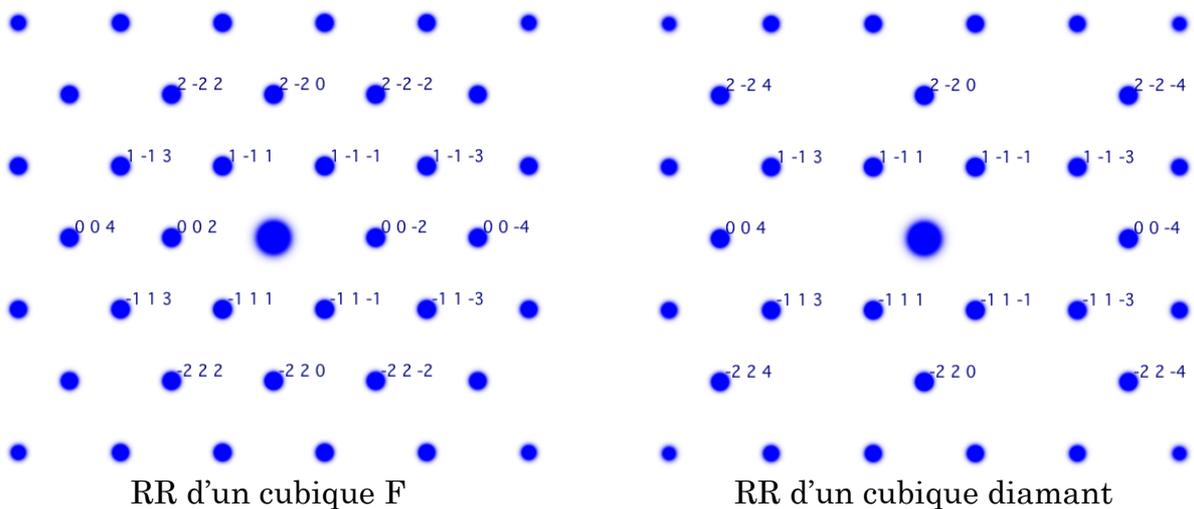
$$F_{hkl} = f_j \cdot \underbrace{\left[1 + e^{-i\pi[h+k+l]/2}\right]}_{\text{motif}} \cdot \underbrace{\left[1 + e^{-i\pi[k+l]} + e^{-i\pi[h+l]} + e^{-i\pi[h+k]}\right]}_{\text{réseau}}$$

• En déduire les conditions d'extinctions (resp. d'existence) des réflexions.

Cette expression de F_{hkl} comprend donc deux termes susceptibles de s'annuler en fonction des valeurs de h , k et l :

- le terme dû au réseau F : $F_{hkl} = 0$ si h, k et l de parités différentes
- le terme dû au motif : $F_{hkl} = 0$ si $h + k + l = 4n + 2$
-

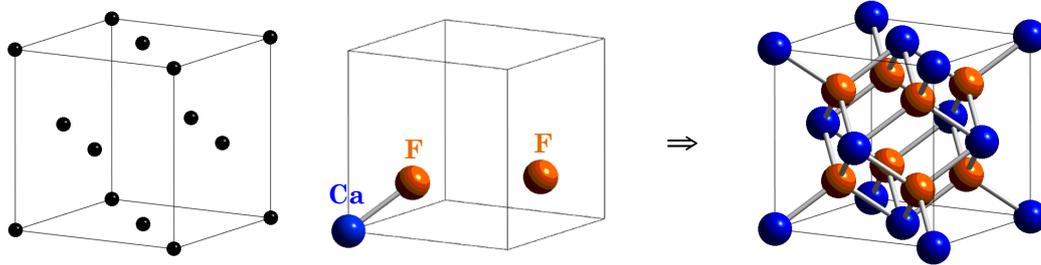
On peut ainsi comparer un plan des réseaux réciproques d'une structure cubique F et cubique diamant :



Structure fluorite – extinctions dues au motif

Pour la structure de type fluorite, les positions atomiques sont :

$$\underbrace{\left(0,0,0 \quad 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)}_{\text{réseau}} + \underbrace{\begin{cases} \text{A : } 0,0,0 \\ \text{X : } \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4} \text{ et } \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4} \end{cases}}_{\text{motif}}$$



Dans ce cas l'expression du facteur de structure est :

$$F_{hkl} = \underbrace{\sum_j^{\text{motif}} f_j \cdot e^{-2i\pi(hx_j + ky_j + lz_j)}}_{\text{motif}} \cdot \underbrace{\left[1 + e^{-i\pi[k+l]} + e^{-i\pi[h+l]} + e^{-i\pi[h+k]}\right]}_{\text{réseau}}$$

$$F_{hkl} = \left[f_{\text{Ca}} + f_{\text{F}} e^{-i\pi[h+k+l]/2} + f_j e^{-i\pi[h+k+3l]/2} \right] \times \left[1 + e^{-i\pi[k+l]} + e^{-i\pi[h+l]} + e^{-i\pi[h+k]} \right]$$

En fonction des valeurs de h , k et l , le facteur de structure prend différentes valeurs :

- si h , k et l de parité différentes : $F_{hkl} = 0$
- si h , k et l de même parité (par d_{hkl} décroissant) :

$$\mathbf{111} : F_{111} = \left[f_{\text{Ca}} + f_{\text{F}} \left[e^{-3i\pi/2} + e^{-5i\pi/2} \right] \right] \times 4 = 4 f_{\text{Ca}}$$

et en prenant $f_{\text{Ca}} = 20$ et $f_{\text{F}} = 9$ et en considérant $I(\vec{Q}) = F_{hkl} \cdot F_{hkl}^*$:

$$I_{111} = 16 f_{\text{Ca}}^2 = 6\,400$$

$$\mathbf{200} : F_{200} = \left[f_{\text{Ca}} + f_{\text{F}} \left[e^{-i\pi} + e^{-i\pi} \right] \right] \times 4 = 4 \times [f_{\text{Ca}} - 2f_{\text{F}}]$$

$$I_{200} = 16 [f_{\text{Ca}} - 2f_{\text{F}}]^2 = 32$$

$$\mathbf{220} : F_{220} = \left[f_{\text{Ca}} + f_{\text{F}} \left[e^{-2i\pi} + e^{-2i\pi} \right] \right] \times 4 = 4 \times [f_{\text{Ca}} + 2f_{\text{F}}]$$

$$I_{220} = 16 [f_{\text{Ca}} + 2f_{\text{F}}]^2 = 23\,104$$

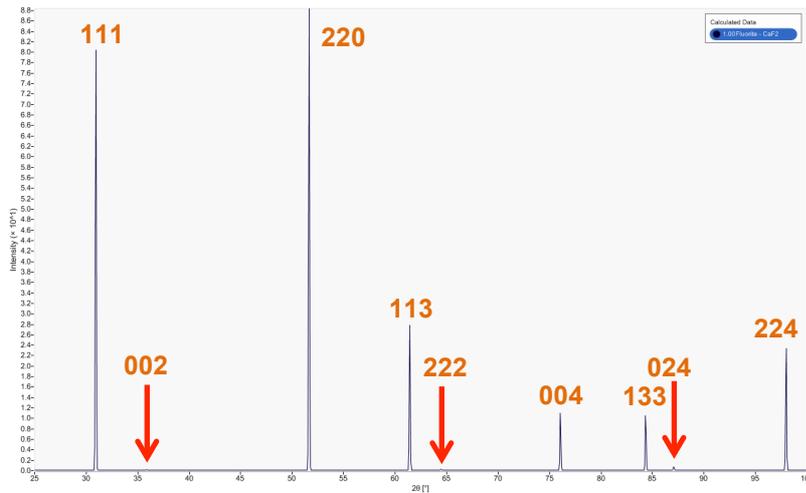
$$\mathbf{311} : F_{311} = \left[f_{\text{Ca}} + f_{\text{F}} \left[e^{-3i\pi/2} + e^{-7i\pi/2} \right] \right] \times 4 = 4 f_{\text{Ca}}$$

$$I_{311} = 16 f_{\text{Ca}}^2 = 6\,400$$

Il apparaît donc que certaines réflexions (telles que $h + k + l = 4n + 2$) ont une intensité très faible à cause des interférences entre les ondes diffusées par les atomes de Calcium et de Fluor.

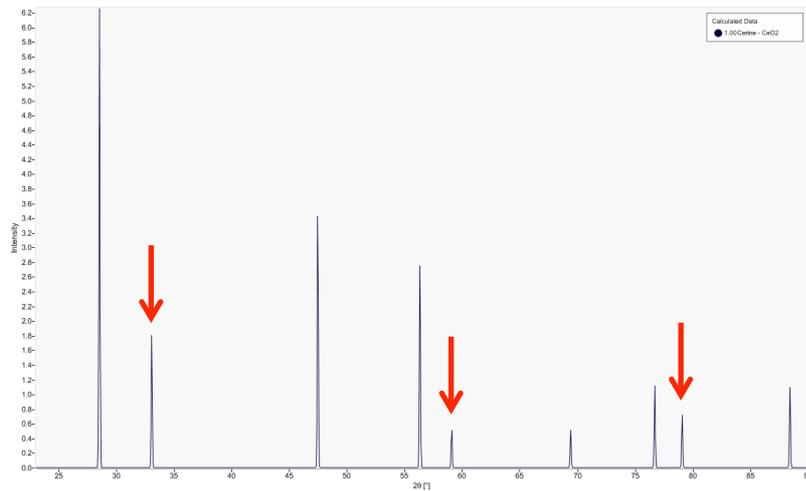
Les figures suivantes représentent des diagrammes de diffraction obtenus sur des composés de type AX_2 , CaF_2 et CeO_2 :

CaF_2



Les réflexions indiquées par une flèche ont une intensité très faible.

CeO_2



Pour CeO_2 , les mêmes réflexions ont une intensité sensiblement plus importante (proportionnellement aux autres)