aussi des demi-entiers et le réseau réciproque présente une maille plus petite que la réciproque de la maille simple du réseau direct, ce qui entraîne la disparition systématique de certains noeuds caractéristiques dans le réseau réciproque. Celui ci, au lieu de présenter des noeuds aux extrémités de tous les vecteurs. $h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$ ou $hkl$ sont tous des entiers, n'en présentera que pour certaines valeurs des indices $hkl$ => absences systématiques.

A ces absences correspondent des extinctions systématiques dans le spectre de diffraction des R.X

Exemple : 1* Pour un réseau I : $\underbrace{xyz}_{\text{groupe } \alpha}$ et $\underbrace{x+\frac{1}{2}\ y+\frac{1}{2}\ z+\frac{1}{2}}_{\text{groupe } B}$

$$F(hkl) = \sum_{\alpha} f_k \exp i2\pi(hx_k + ky_k + lz_k) + \sum_{B} f_k \exp i2\pi\left[h\left(x+\tfrac{1}{2}\right) + k\left(y+\tfrac{1}{2}\right) + l\left(z_k+\tfrac{1}{2}\right)\right].$$

$$\Rightarrow F(hkl) = \left(1 + \exp i\pi(h+k+l)\right] \sum_{1/2} f_k \exp i2\pi(hx_k + ky_k + lz_k).$$

$1 + \exp i\pi(h+k+l) = +2$ si $h+k+l = 2n$

$= 0$ si $h+k+l = 2n+1$

$\Rightarrow F(hkl) = 0$ si $h+k+l = 2n+1$ => c'est la condition d'extinctions systématique caractéristique de tout réseau I

2 - réseau F :

$xyz$ , $x+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}, z$ , $x+\frac{1}{2}, y, z+\frac{1}{2}$ , $x, y+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}$.

$$\Rightarrow F(hkl) = \left[1 + \exp i\pi(k+l) + \exp i\pi(h+l) + \exp i\pi(h+k)\right] \times \sum_{1/4} f_k \exp i2\pi (hx_k + ky_k + z_k)$$

$F(hkl) = 0$ sauf si $h+k = 2n$

$k+l = 2n$

$h+l = 2n$

=> $hkl$ doivent être de même parité.

## 3) réseau C :

$x\,y\,z\,,\; x+\frac{1}{2}\; y+\frac{1}{2}\; z$

$\Rightarrow F(hkl) = [1 + \exp i\pi(h+k)] \sum_{1/2} f_K \exp i 2\pi (hx_K + ky_K + lz_K)$

La condition de présence est donc : $h+k = 2n$.

Comme on le voit, les extinctions systématiques caractéristiques des modes de réseaux proviennent du fait qu'il existe des translations autres que celles qui font passer d'un sommet de maille à un autre. Nous allons voir maintenant que toute opération de symétrie qui fait intervenir une translation entraine des extinctions systématiques dans le spectre de diffraction.

### * Axe hélicoïdal :

Soit un axe $4_1$ // [001]

$x\,y\,z\,,\; y\,\bar{x}\,z+\frac{1}{4}\,,\; \bar{x}\,\bar{y}\,z+\frac{2}{4}\,,\; \bar{y}\,x\,z+\frac{3}{4}$

$\Rightarrow F(00l) = 1 + \exp i\frac{\pi}{2}l + \exp i\pi l + \exp i\frac{3\pi}{2}l) \sum_{1/4} f_K \exp i 2\pi l z_K$

[Puisque l'axe $4_1$ (qui est parallèle à [001]) n'a pas de conséquence sur le facteur de structure, sauf si $h = k = 0$].

$F(00l) = 0$ sauf si $l = 4n \Rightarrow$ il y a extinction lorsque $h = k = 0$ et que $l \neq 4n$

### * Plan de glissement :

Si le plan (010) est un plan c $\Rightarrow x\,y\,z\,,\; x\,\bar{y}\,z+\frac{1}{2}$.

$$\Rightarrow F(hkl) = \sum_{1/2} f_K \exp i2\pi(hx_K + ky_K + lz_K) + \sum_{1/2} f_K \exp i2\pi[hx_K - ky_K + l(z_K + \tfrac{1}{2})].$$

Cette expression ne se simplifie pas, sauf si $k = 0$.

$\Rightarrow F(h0l) = (1 + \exp i\pi l) \sum_{1/2} f_K \exp i2\pi(hx_K + lz_K)$.

et $F(h0l) = 0$ si $l = 2n+1$

Ainsi dans le plan réciproque $(h0l)$ seules existent les rangées pour lesquelles $l = 2n$.

De même façon on trouve pour des axes hélicoïdaux dirigés suivant c :

| | | | |
|---|---|---|---|
| $2_1$ | | $L = 2n$ | |
| $3_1$ ou $3_2$ | | $L = 3n$ | (conditions de présences) |
| $4_1$ ou $4_3$ | 00l (Région du réseau réciproque concernée) | $L = 4n$ | |
| $4_2$ | | $L = 2n$ | |
| $6_1$ ou $6_5$ | | $L = 6n$ | |
| $6_2$ ou $6_4$ | | $L = 3n$ | |
| $6_3$ | | $L = 2n$ | |

## 5- Facteur de structure et densité électronique:

Nous considérons les atomes comme des diffuseurs sphériques donnant une composante de diffusion d'amplitude (a) dépendant de la nature de l'atome. Mais nous savons que ce sont en réalité les (ē) qui diffusent le R.X. On peut donc considérer que le milieu diffractant (le cristal) est constitué d'un ensemble continu d'elements de volume caractérisé chacuns par leurs densité $\rho$ en (ē) et diffusent proportionnellement du nbre d'(ē) $\rho\, d\tau$ qu'il contient. Donc le facteur de structure s'écrit : $F(\vec{H}) = \int_V \rho(r) \exp(i 2\pi\, \vec{r}\, \vec{H})\, d\tau$.

$\vec{r} = x\vec{a} + y\vec{b} + z\vec{c}$ est le vecteur de position de volume $d\tau$

$d\tau = V\, dx\, dy\, dz$ ($V$ = volume de la maille).

$\vec{H} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$

$\vec{r}\vec{H} = hx + ky + lz$.

$$F(hkl) = V \iiint \rho(xyz) \exp[i 2\pi (hx + ky + lz)]\, dx\, dy\, dz.$$

$$\Rightarrow \rho(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_H F(\vec{H}) \exp -(i 2\pi\, \vec{r}\, \vec{H}).$$

les $F(\vec{H})$ sont les integrales de fourier donnant les coefficients de développement en série de fourier de la densité $\rho(\vec{r})$.

## 6- Facteur de temperature:

La structure d'un cristal n'est pas figée puisque les atomes vibrent avec une amplitude de vibration d'autant plus grandes que la temperature est plus élevée (amplitude de l'onde de 0,1 A° à temperature ordinaire et les distances de liaisons d'atomes C, N, O = 1,2 à 1,5 A°).

$$F(\vec{H}) = \sum_K f \exp i 2\pi (\vec{r}_K + \vec{t}_K).\vec{H} = \sum_K f_K . T_K \exp i 2\pi (\vec{r}_K\, \vec{H})$$

↳ Facteur de structure instantané).

$\vec{r}_K$ = vecteur de position moyen de l'atome K.

$\vec{r}_K + \vec{t}_K$ = vecteur de position instantanée

$\vec{T}_K = \exp i 2\pi (\vec{t}_K . \vec{H})$ (varie avec le temps et d'une maille à une autre)