

EX 2: 6^{pts} facteur de structure de \underline{NaCl} et \overline{KCl}

ou a: $Cl: (01010), (\frac{1}{2}\frac{1}{2}0), (0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}), (\frac{1}{2}01\frac{1}{2})$ (015)
 $K, Na: (\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}), (\frac{1}{2}00), (0,\frac{1}{2},0), (001\frac{1}{2})$ (015)

on pose: $X \equiv Na$ ou K d'où \boxed{XCl}

Alors: $F_{hkl}(XCl) = \left[f_{Cl} \begin{pmatrix} c_{\bar{h}}(h+k) & c_{\bar{h}}(h+k) & c_{\bar{h}}(k+l) \\ 1+e & +e & +e \end{pmatrix} + f_X \begin{pmatrix} c_{\bar{h}}(h+k+l) & c_{\bar{h}}h & c_{\bar{h}}k & c_{\bar{h}}l \\ e & +e & +e & +e \end{pmatrix} \right]$ (015)

ou a: $f_X e \begin{pmatrix} c_{\bar{h}}(h+k+l) & -c_{\bar{h}}(k+l) - c_{\bar{h}}(h+l) - c_{\bar{h}}(h+k) \\ 1+e & +e & +e \end{pmatrix}$
 $= f_X e \begin{pmatrix} c_{\bar{h}}(h+k+l) & c_{\bar{h}}(h+k) & c_{\bar{h}}(k+l) & c_{\bar{h}}(h+l) \\ 1+e & +e & +e & +e \end{pmatrix} / \boxed{\cos \pi = \cos -\pi}$

d'où $\boxed{F_{hkl}(XCl) = \begin{pmatrix} c_{\bar{h}}(h+k) & c_{\bar{h}}(k+l) & c_{\bar{h}}(h+l) \\ 1+e & +e & +e \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_{Cl} + f_X e \\ e \end{pmatrix}}$ (1)

est le facteur de structure du composé XCl

pour $X=Na \rightarrow F_{hkl}(NaCl) = \begin{cases} 4(f_{Cl} - f_{Na}) & \text{si } (hkl) \text{ impaire} \\ 4(f_{Cl} + f_{Na}) & \text{si } (hkl) \text{ paire} \end{cases}$ (1)

pour $X=K \rightarrow F_{hkl}(KCl) = \begin{cases} 4(f_{Cl} - f_K) \approx 0 & \text{si } (hkl) \text{ impaire} \\ 4(f_{Cl} + f_K) & \text{si } (hkl) \text{ paire} \end{cases}$ (1)

ou a: $Na^+ = 10e, K^+ = 18e, Cl^- = 18e$

Alors le facteur de forme atomique de K^+ est de même ordre que le facteur de forme de Cl^-

donc: $f_{Cl^-} - f_{K^+} \approx 0$ et $f_{Cl^-} - f_{Na^+} \neq 0$ (1)

c'est pour ça qu'il existe des extinctions supplémentaires de celle induite par $NaCl$