

Acta Cryst. (1968). B24, 744

A propos des structures cristallines dites fausses. Par GÉRARD VON ELLER, *Laboratoire de Rayons X de l'IRChA, 12, quai Henry IV, Paris IV^e, France*

(Reçu le 19 janvier 1968)

Combination of structure amplitudes with arbitrary phases does not lead to a 'false structure' but to an exact structure with 'false atoms'.

L'opinion est communément répandue que les séries de Fourier calculées avec les modules $|F(hkl)|$ des facteurs d'une structure cristalline affectés de phases arbitraires (dans les limites des lois du groupe spatial) représentent des 'structures fausses'. Nous nous proposons de démontrer que cette conception est inexacte.

Considérons en effet la formule générale exprimant le facteur de structure:

$$F_{\mathbf{h}} = |F_{\mathbf{h}}| \exp(i\alpha_{\mathbf{h}}) = \sum_j f_{\mathbf{h},j} \exp(i2\pi\mathbf{h}\mathbf{x}_j),$$

où \mathbf{h} est mis pour hkl , \mathbf{x}_j pour $x_j y_j z_j$ et où $f_{\mathbf{h},j}$ est la valeur prise par le facteur de diffusion de l'atome j au noeud \mathbf{h} du réseau réciproque.

Pour simplifier la représentation on suppose que tous les atomes de la maille élémentaire appartiennent à la même espèce chimique et possèdent donc le même facteur de

diffusion. Dans le cadre de la loi de Friedel $f_{\mathbf{h},j}$ est en réalité toujours réel et positif. Mais on peut imaginer de lui affecter, tout en lui conservant son module, une phase $\omega_{\mathbf{h}}$ quelconque dans les limites des lois du groupe spatial. Il deviendra $f_{\mathbf{h},j} \exp(i\omega_{\mathbf{h}})$ et $F_{\mathbf{h}}$ se transformera en $|F_{\mathbf{h}}| \times \exp[i(\alpha_{\mathbf{h}} + \omega_{\mathbf{h}})]$. Cela équivaudra à attribuer à $F_{\mathbf{h}}$ une phase 'fausse'. Notons avec insistance que l'on n'a rien changé, ce faisant, aux coordonnées \mathbf{x}_j .

Si l'on calcule à présent la série de Fourier en $F_{\mathbf{h}} \exp[i(\alpha_{\mathbf{h}} + \omega_{\mathbf{h}})]$, on obtiendra non pas une structure fausse, mais une structure *exacte* (les \mathbf{x}_j sont corrects) d'atomes faux, *tous identiques*. Malheureusement ces derniers, de forme non plus sphérique, mais quelconque aux lois du groupe spatial près, et empiétant les uns sur les autres, rendent la structure indéchiffrable à l'observateur.

Cette optique pourrait néanmoins amener des progrès dans la résolution du problème que pose la détermination des structures cristallines.