

STRUCTURE CRISTALLINE DE $K_3(Nb_3Ti_2)O_{11}F_4$

**Z. LADJEROUD¹, F. BALEGROUNE¹, A. GUEHRIA¹,
L. BENZIADA¹, S. TRIKI² et J. RAVEZ³**

¹ *Laboratoire de Cristallographie Appliquée, Institut de Chimie, U.S.T.H.B.,
BAB-EZZOUAR 16111, Alger, Algérie.*

² *Laboratoire de Cristalchimie, Université de Rennes I, France.*

³ *Laboratoire de Chimie du Solide du C.N.R.S., Université de Bordeaux I,
33405 TALENCE, France.*

L'étude structurale a été effectuée à partir d'un monocristal de forme prismatique. Les intensités diffractées ont été enregistrées à l'aide d'un diffractomètre Enraf-Nonius (4 cercles), en utilisant la radiation $K\alpha$ du molybdène ($\lambda = 0,71073 \text{ \AA}$), avec un monochromateur à lame de graphite. La maille élémentaire a été déterminée par indexation automatique de 25 taches de réflexions, également réparties dans l'espace réciproque ($14^\circ < 2\theta < 27^\circ$). Les paramètres de maille sont:

$$a = 12,582 (2) \text{ \AA} \quad ; \quad c = 3,937 (2) \text{ \AA}$$

La structure a été résolue par les méthodes directes dans le groupe spatial centrosymétrique $P4/mbm$. La centrosymétrie a été déterminée au préalable par un test d'optique non linéaire. Au cours de la résolution, un désordre statistique entre les atomes de niobium et de titane et les atomes d'oxygène et de fluor a été observé. L'affinement a été effectué par la méthode des moindres carrés sur la base de 343 réflexions répondant au critère $I \geq 6\sigma(I)$. Le facteur de reliabilité se stabilise à $R = 0,047$ ($R_w = 0,072$).