THEME 4 : Corrigés des exercices

Création : juin 2003

Dernière modification : sept 2005

EXERCICE T4_01 : Représentation MATRICIELLE des rotations d'ordre 3

A chaque opération de symétrie est associée une matrice dont l'expression dépend des vecteurs de base choisis.

1 - : Réseau rhomboédrique : **[1 1 1]**

$$\vec{a}' = \vec{b} \quad \vec{b}' = \vec{c} \quad \vec{c}' = \vec{a} \quad (A_1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

2 - : Réseau hexagonal : **[0 0 1]**

$$\vec{a}' = \vec{b} \quad \vec{b}' = \vec{a} + \vec{b} \quad \vec{c}' = \vec{c} \quad (A_2) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

3 - : Réseau cubique : **[1 -1 1]**

$$\vec{a}' = \vec{c} \quad \vec{b}' = -\vec{a} \quad \vec{c}' = -\vec{b} \quad (A_3) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

4 - : Direction de l'élément de symétrie :

$$\det(A_j) = 1 \;\; j = 1,2,3 \qquad \textit{opérations directes} \qquad 1 + 2\cos\varphi = 0 \qquad \varphi = (2\pi/3, 4\pi/3) + 2k\pi$$

$$((A_1) - (+1)(I))\vec{V} = 0 \quad \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} = 0 \text{ soit : } \qquad v_x = v_y = v_z$$

direction propre : [1 1 1]

$$((A_2) - (+1)(I))\vec{V} = 0 \quad \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ 1 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} = 0 \text{ soit :}, v_x = v_y = 0 \quad v_z \; quelconque$$

direction propre : [0 0 1]

$$((A_3)-(+1)(I))\vec{V}=0 \quad \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & -1 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix}=0 \text{ soit : } v_x=-v_y=v_z$$

direction propre : [1 -1 1]

Remarque : pour déterminer l'ordre n de la rotation, on peut aussi élever la matrice (A) à la puissance m : lorsque : $(A)^m=(E) \quad n=m$

EXERCICE T4_02 : Identification d'une opération de symétrie.

1 - : La matrice $(A)=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ représente une opération **inverse** : $\det(A)=-1$

$-(1+2\cos\varphi)=1 \qquad \varphi=\pi+2k\pi$ c'est une opération binaire inverse ou **miroir.**
Pour déterminer la direction de la **normale** du miroir, on cherche la direction propre associée à la valeur propre **-1**

$$((A)-(-1)(I))\vec{V}=0 \quad \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix}=0 \text{ soit : } v_x=0 \quad v_y \textit{ indéterminé} \quad v_z=0$$

C'est donc un miroir m_y de normale parallèle à [0 1 0]

2 - : Base de réseau :

Pour déterminer la base de réseau, on utilise **l'invariance du tenseur métrique** (c- à - d de la maille) au cours de la transformation de matrice (A) :

$$(A^t)(G)(A)=(G)$$

ce qui donne :

$$\begin{pmatrix} (\vec{a}+\vec{b})^2 & -(\vec{b}\mid\vec{a}+\vec{b}) & (\vec{c}\mid\vec{a}+\vec{b}) \\ -(\vec{b}\mid\vec{a}+\vec{b}) & b^2 & -(\vec{b}\mid\vec{c}) \\ (\vec{c}\mid\vec{a}+\vec{b}) & -(\vec{b}\mid\vec{c}) & c^2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a^2 & (\vec{a}\mid\vec{b}) & (\vec{a}\mid\vec{c}) \\ (\vec{b}\mid\vec{a}) & b^2 & (\vec{b}\mid\vec{c}) \\ (\vec{c}\mid\vec{a}) & (\vec{c}\mid\vec{b}) & c^2 \end{pmatrix}$$

De $(\vec{c}\mid\vec{a}+\vec{b})=(\vec{c}\mid\vec{a})$ on déduit que les axes c et b de la maille sont orthogonaux.

De $(\vec{a}+\vec{b})^2=(\vec{a}\mid\vec{a})^2$ on déduit que : $b(b+2a\cos\gamma)=0$.

Si on rejette la solution b = 0 , il reste $\cos\gamma=-\dfrac{b}{2a} \quad a\neq 0$

La solution cristallographique est : $a=b \quad \cos\gamma=-\dfrac{1}{2}$ c'est à dire une **maille hexagonale.**

EXERCICE T4_03 : Opérations de symétrie d'ordre 4.

1 - : Points équivalents :

Le groupe cyclique d'ordre 4, comprend les éléments $A_4^1 \quad A_4^2 \quad A_4^3 \quad A_4^4 = E$, représentant des rotations de $2\pi/4 \quad 4\pi/4 \quad 6\pi/4 \quad 8\pi/4$ autour d'un axe parallèle à $[0\,0\,1]$

$$(A_4) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (A_4)\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -y \\ x \\ z \end{pmatrix} \qquad (A_4^2) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (A_4^2)\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ z \end{pmatrix}$$

$$(A_4^3) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (A_4^3)\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y \\ -x \\ z \end{pmatrix} \qquad (A_4^4) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (A_4^4)\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

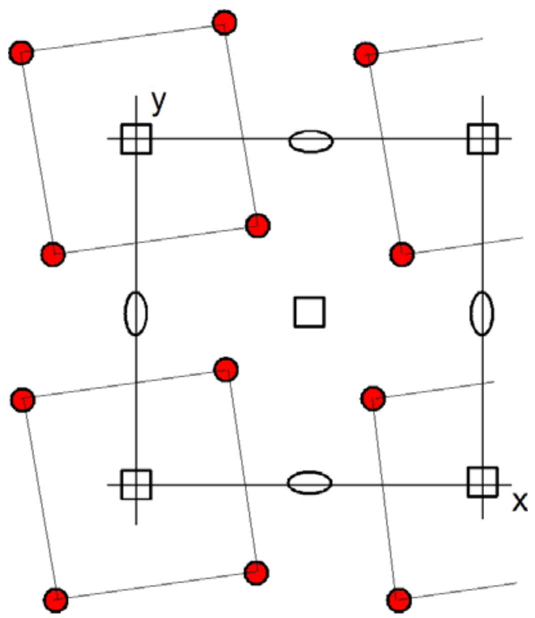

Figure T4_03 : **Motif** obtenu par l'application des opérations de symétrie sur **l'unité asymétrique** composée d'un seul ''atome'' situé en :
x = 1/4 y = 1/3 z = 0

3- : Représentation matricielle de **l'axe binaire décalé** passant en (0 ½ 0) :

La relation $\left(E - A_0\right)\vec{u} = \vec{t}_{\perp}$ (pour la notation voir les paragraphes 6.4.1 et 6.4.2 du cours)

s'écrit sous la forme matricielle :

$$\left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{\perp x} \\ t_{\perp y} \\ t_{// z} \end{pmatrix}$$

soit : $t_{\perp x}=0 \quad t_{\perp y}=1 \quad t_{//z}$ *est indéterminé*

d'où la matrice augmentée (4,4) : $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

(x y z) est transformé en (-x 1-y z)

Représentation matricielle de **l'axe quaternaire décalé** passant en (½ ½ 0) :

la matrice augmentée (4,4) s'écrit : $\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

4 - : Coordonnées des positions équivalentes situées à l' intérieur de la maille :

x y z ; 1-y x z ; 1-x 1-y z ; y 1-x z **(1)**

Atome **''vert(1)''** situé , par exemple, en x = 4/12 y = 3/12 z , Fig.T4-03 :

4/12 3/12 z ; 9/12 4/12 z ; 8/12 9/12 z ; 3/12 8/12 z

Atome **''vert(2)''** situé en x = 2/12 y = 5/12 z . etc ….

Atome **''rouge ''** situé en x= 3 /12 y = 4/12 etc ….

5- : L'unité asymétrique est composée de 3 atomes : 1 **''rouge ''** et 2 **''verts''** disposés de part et d'autre .

Le motif est composé de 12 atomes : leurs positions sont obtenues en donnant par exemple les valeurs ci-dessus aux coordonnées x et y (z est quelconque] 0,1 [ ) de (1) .

Remarque : vérifier, Fig.T4-03 , que la transformation par un axe décalé est équivalente à une rotation, de même nature, autour d'un axe passant par l'origine, suivie de la translation $\vec{t}_{\perp}$

EXERCICE T4_04 : Opérations de symétrie d'ordre 6 avec glissement c/2.

1 - : Représentation de Seitz –Bauer des opérations de symétrie groupe éléments :

Glissement suivant un axe parallèle à l'axe c de la maille et passant par l'origine :

$\vec{t}_{\perp}=0 \quad \vec{t}_{//}=1/2$

$$6_3 : \left\{0\,0\,\frac{3}{6}\,|\,6_z\right\} \qquad 6_3^2 : \left\{0\,0\,\frac{6}{6}\,|\,6_z^2\right\}=3 \qquad 6_3^3 : \left\{0\,0\,\frac{9}{6}\,|\,6_z^3\right\}=2_1$$

$$6_3^4 : \left\{0\,0\,\frac{12}{6}\,|\,6_z^4\right\}=3^2 \qquad 6_3^5 : \left\{0\,0\,\frac{15}{6}\,|\,6_z^5\right\}=6_3 \qquad 6_3^6 : \left\{0\,0\,\frac{18}{6}\,|\,6_z^6\right\}=E$$

Remarque :

$$6_3^2 : \left\{0\,0\,\frac{3}{6}\,|\,6_z\right\}\left\{0\,0\,\frac{3}{6}\,|\,6_z\right\}=\left\{(0\,0\,\frac{3}{6})+6_z(0\,0\,\frac{3}{6})\,|\,6_z^2\right\}=\left\{001\,|\,6_z^2\right\}=3$$

2 - : Représentation matricielle :

$$6_3 : \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad 6_3^2 : \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad 6_3^5 : \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$x-y \quad y \quad z+1/2 \qquad\qquad -y \quad x-y \quad z \qquad\qquad y \quad y-x \quad z+1/2$$

$$6_3^5 : \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad 6_3^6 : \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$y \quad y-x \quad z+1/2 \qquad\qquad x \quad y \quad z+1$$

EXERCICE T4_ 05 : : Dénombrement des opérations de symétrie compatible avec un réseau de translation (complément de cours).

Soit (A) une matrice représentant une opération de symétrie, elle laisse invariant le tenseur métrique associé à la base $(\vec{a},\vec{b},\vec{c})$ *:*

$$(G) = (A)^t (G)(A)$$

Soit $a_{ij} \in \mathbb{Z}$ les coefficients de la matrice représentant l'opération de symétrie et a,b,c les paramètres de la maille .

La relation d'invariance se réduit aux 3 équations suivantes correspondant aux éléments de la diagonale principale, les seuls qui ne sont pas nuls :

1 - : Réseau orthorhombique : $a \neq b \neq c$

Ligne 1,colonne 1 de ***(A)^t (G) (A)*** : $a^2a_{11}^2 + b^2a_{21}^2 + c^2a_{31}^2 = a^2$

Ligne 2,colonne 2 de ***(A)^t (G) (A)*** : $a^2a_{12}^2 + b^2a_{22}^2 + c^2a_{32}^2 = b^2$

Ligne 3,colonne 3 de ***(A)^t (G) (A)*** : $a^2a_{13}^2 + b^2a_{23}^2 + c^2a_{33}^2 = c^2$

Sachant que les $a_{ij} \in \mathbb{Z}$, on déduit de ces équations que :

$$a_{11} = \pm 1 \quad ; \quad a_{22} = \pm 1 \quad ; \quad a_{33} = \pm 1$$
$$a_{21} = a_{31} = 0 \quad ; \quad a_{12} = a_{32} = 0 \quad ; \quad a_{13} = a_{23} = 0$$

En conclusion , les matrices sont **toutes diagonales :** $(A) = \begin{pmatrix} \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{pmatrix}$

Leur dénombrement conduit à **8 opérations** de symétrie compatibles avec le système **orthorhombique** :

3 signes **+** : **E** ; 3 signes **-** : **C** ; 1 signe **-** : $m_x\ m_y\ m_z$; 1 signe **+** : $2_x\ 2_y\ 2_z$

2 - : Réseau quadratique : $a = b \neq c$

Ligne 1,colonne 1 de ***(A)^t (G) (A)*** : $a^2\ (a_{11}^2 + a_{21}^2) + c^2 a_{31}^2 = a^2$

Ligne 2,colonne 2 de ***(A)^t (G) (A)*** : $a^2\ (a_{12}^2 + a_{22}^2) + c^2 a_{32}^2 = b^2$

Ligne 3,colonne 3 de ***(A)^t (G) (A)*** : $a^2 (a_{13}^2 + a_{23}^2) + c^2 a_{33}^2 = c^2$

Sachant que les $a_{ij} \in \mathbb{Z}$, on déduit de ces équations que :

$$a_{31} = 0 \quad ; \quad a_{11}^2 + a_{21}^2 = 1 \quad ; \quad a_{11} = \pm 1 \quad a_{21} = 0 \quad ou \quad a_{11} = 0 \quad a_{21} = \pm 1$$
$$a_{32} = 0 \quad ; \quad a_{12}^2 + a_{22}^2 = 1 \quad ; \quad a_{22} = \pm 1 \quad a_{12} = 0 \quad ou \quad a_{22} = 0 \quad a_{21} = \pm 1$$

$$a_{33}^2 = 1 \quad a_{33} = \pm 1 \quad a_{13}^2 + a_{23}^2 = 0 \quad ; \quad a_{13} = 0 \quad et \quad a_{23} = 0$$

En conclusion, **2** types de matrice : $(A_1) = \begin{pmatrix} \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{pmatrix}$ et $(A_2) = \begin{pmatrix} 0 & \pm 1 & 0 \\ \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{pmatrix}$

Les matrices du type '' 1'' représentent 8 opérations de symétrie (c f orthorhombique), les matrices du type ''2'' représentent 8 autres opérations de symétrie qui sont :

$$2_{xy}\ 2_{yx} \quad m_{xy}\ m_{yx} \quad 4_z\ 4_z^3 \quad \bar{4}_z\ \bar{4}_z^3$$

Finalement, il y a au maximum **16 opérations de symétrie** compatibles avec le système quadratique.

3 - : Réseau cubique : $a = b = c$

En exprimant que **(G) = (A)^t (G) (A)** on arrive aux conclusions suivantes :

- la somme des carrés des éléments d'une colonne est égale à 1

$$a_{11}^2 + a_{21}^2 + a_{31}^2 = 1 \quad etc....$$

- la somme des produits des éléments de 2 colonnes différente est nulle

$$a_{11}a_{12} + a_{21}a_{22} + a_{31}a_{32} = 0 \quad etc.....$$

Sachant que les $a_{ij} \in \mathbb{Z}$, on en déduit que :

- chaque colonne possède un seul élément égal à 1, les 2 autres étant nuls
- les éléments égaux à 1 se trouvent dans des lignes différentes

Dénombrement des opérations de symétrie :

- 3 éléments positifs : **6**

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = E \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = m_{\bar{y}x} \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = 3_{111} \quad etc....$$

- 1 négatif , 2 positifs : 6 x 3 =18

$$\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = m_x \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = m_y \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} = m_z \quad etc......$$

- 2 négatifs, 1 positif : 6 x 3 =18

$$\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = 2_z \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} = 2_x \quad \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} = 2_y \quad etc......$$

- 3 négatifs : 6

$$\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} = C \quad \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} = 2_{\bar{y}x} \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & \bar{1} \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \end{pmatrix} = \bar{3}_{111} \quad etc....$$

soit au total : 6 + 18 + 18 + 6 = **48**

Remarque :

Le groupe **holoèdre** est le groupe ponctuel compatible avec la symétrie du réseau et possédant le maximum d'éléments : **6, 8, 48** respectivement pour les réseaux orthorhombique, quadratique, cubique, cf. **9.5**

EXERCICE 07_ 06 : Réduction d'une maille cristalline

1- : Les plans de la famille (0 k 0) sont parallèles aux axes a et c de la maille, ils pour normale l'axe b.

Les nœuds du plan n=0 ont pour indices **u 0 w** , quel que soit la valeur de k :
$(0 \times u + k \times 0 + 0 \times w) = 0$, Fig. T4_06.

Les nœuds du plan n =1 de la famille $(0\,1\,0)$ ont pour indices **u 1 w** :
$(0\times u+1\times 1+0\times w)=1$

etc …

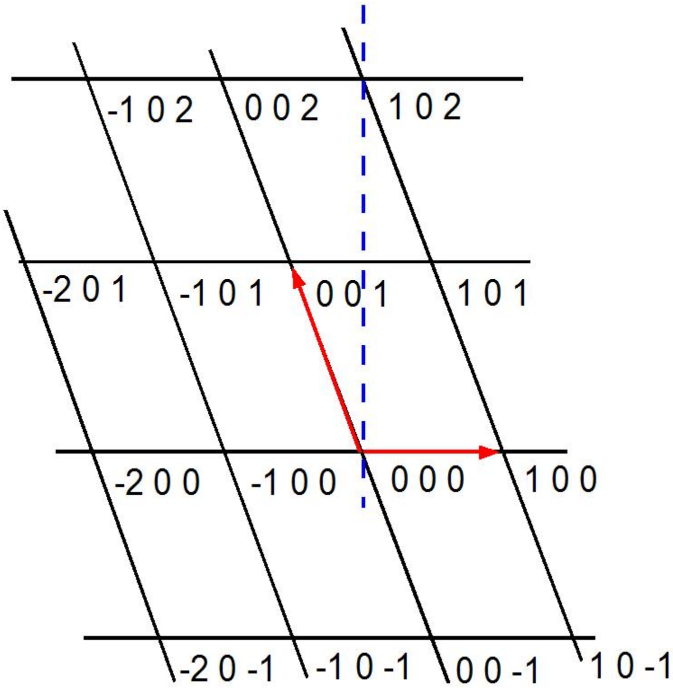

Figure T4_06 : Plan n = 0 de la famille (0 k 0)

2- : Matrice associée à l'opération de symétrie : $(A)=\begin{pmatrix}1 & 0 & -1\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}$:

$\det(A)=1 \quad 1+2\cos\varphi=-1 \quad \varphi=\pi$ axe binaire direct , direction propre associée à la valeur propre **+1 : [1 0 0]**

Cette opération de symétrie est compatible avec le réseau si elle laisse invariant le tenseur métrique associé , ce qui donne donc :

$$\begin{pmatrix}a^2 & 0 & ac\cos\beta\\ 0 & b^2 & 0\\ ac\cos\beta & 0 & c^2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a^2 & 0 & -(a^2+ac\cos\beta)\\ 0 & b^2 & 0\\ -(a^2+ac\cos\beta) & 0 & a^2+c^2+ac\cos\beta\end{pmatrix}$$

soit : $\cos\beta=-\dfrac{a}{2c}$

3 - : Application numérique : valeur **mesurée** de $\beta = (109{,}83 \pm 0{,}06)°$

$$\Delta\beta \le \frac{1}{|tg\beta|}\left(\frac{\Delta a}{a} + \frac{\Delta c}{c}\right) \qquad \Delta\beta \le 0{,}08°$$

valeur **calculée** de $\beta = (109{,}85 \pm 0{,}08)°$

Compte - tenu des incertitudes sur les valeurs mesurées de a et de c , il faut que β mesuré soit compris entre 109,77° et 109,93° pour qu'on puisse conclure à l'existence d'un axe binaire suivant **[1 0 0] .**

Le réseau peut donc être décrit par une maille plus symétrique que la maille monoclinique.

4 - : Rangée [u v w] orthogonale aux axes a et b :

$$(u\ v\ w) = (G)\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad (u\ v\ w) = (G)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad avec \quad (G) = \begin{pmatrix} a^2 & 0 & ac\cos\beta \\ 0 & b^2 & 0 \\ ac\cos\beta & 0 & c^2 \end{pmatrix} \text{C}$$

Compte- tenu que $\cos\beta = -\dfrac{a}{2c}$, il vient : v = 0 et (2u – w) = 0

La rangée **[1 0 2]** .perpendiculaire à 2 axes binaires orthogonaux est elle même parallèle à un axe binaire. (voir. **8**.2.1.)

5 - : Nouvelle maille $\left(\vec{A} \quad \vec{B} \quad \vec{C}\right)$ Fig. T4_06 :

$$\left(\vec{A} \quad \vec{B} \quad \vec{C}\right) = \left(\vec{a} \quad \vec{b} \quad \vec{c}\right)(M) \qquad (M) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

$\det(M) = 2$: la maille contient 2 noeuds . Le tenseur métrique transformé s'écrit :

$$(G) = \begin{pmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & 4c^2 - a^2 & 0 \\ 0 & 0 & b^2 \end{pmatrix} \qquad \text{d'où} \quad A = a \quad B = \sqrt{4c^2 - a^2} \quad C = b$$

La maille $\left(\vec{A} \quad \vec{B} \quad \vec{C}\right)$ est **orthorhombique C centrée** , de paramètres :

A = 0,6331 nm B = 1,754 nm C = 0,9323 nm

6 - : Programme **LEPAGE** de réduction de maille

Les mailles **orthorhombiques** proposées qui ont un volume **2** fois plus grand que celui de la maille d'origine monoclinique, sont les plus symétriques.

Les matrices de transformation proposées sont similaires à la matrice (M)