

## THEME 9 : Corrigés des exercices

Création : mars. 2006

Dernière modification :

### OBJECTIFS :

Application des rayons X : taille des monocristaux

Utilisation du Programme ORIENTEXPRESS

Matrice d'orientation.

### LISTE des EXERCICES :

T9\_01 : Sphère d'EWALD .

T9\_02 : Plans en Zone

T9\_03 : Taille d'un barreau monocristallin de Silicium.

T9\_04 : Taille d'un cristal de Quartz.

T9\_05 : Taille d'un cristal de  $MgF_2$ .

T9\_06 : Matrice d'orientation.

T9\_07 : Matrice d'ortho normalisation, réciproque , type " Büsing \_ Levy "

T9\_08 : Matrice d'ortho normalisation, réciproque , type " Hamilton "

T9\_09 : Programme OrientExpress : entrée par les fichiers d'exemple

T9\_10 : Programme OrientExpress : entrée par création de fichiers

T9\_11 : Programme OrientExpress : entrée par la matrice d'orientation

T9\_12 : Diffractomètre : recherche d'une réflexion h k l

**T9\_01 : Sphère d'EWALD**

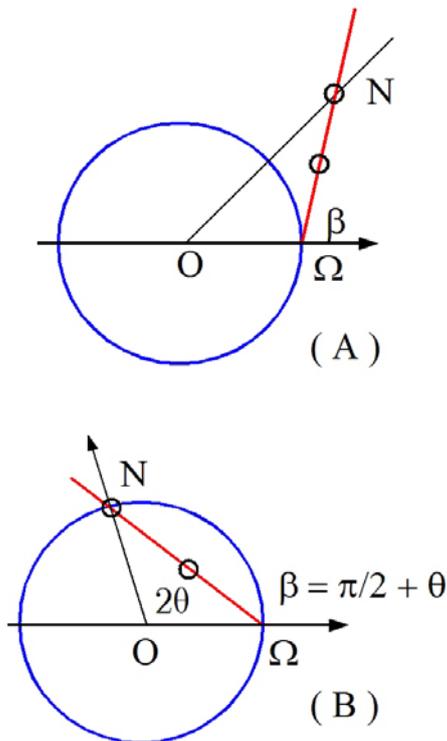
Soit  $\vec{S}_0$  le vecteur unitaire supporté par la direction du faisceau incident, et O le point d'impact de ce faisceau avec l'échantillon.

La sphère d'Ewald a pour centre O et pour rayon  $1/\lambda$  : voir **Chap. 10.5.2** et **Chap. 12.2**

$\lambda$  est la longueur d'onde. L'origine  $\Omega$  du réseau réciproque est à l'extrémité du vecteur  $\vec{S}_0 / \lambda$ .

Considérons une famille de plans réticulaires (h k l) espacés de  $D_{hkl}$  et: le vecteur du réseau réciproque  $\vec{r}_{hkl}^*$  associé à cette famille de plans : la rangée réciproque [h k l]\* est parallèle à leur normale commune et sa période est égale à  $\|\vec{r}_{hkl}^*\| = \frac{1}{D_{hkl}}$ . Le n<sup>ième</sup> nœud de cette rangée est repéré par le vecteur  $\vec{\Omega N} = n \vec{r}_{hkl}^*$   $n \in \mathbb{Z}$

I



**Figure T9\_01A** : Sphère d'EWALD

(A) le nœud  $n = 2$  de la rangée

[h k l]\* est dans une position quelconque, en dehors de la sphère d'Ewald. **Aucun faisceau diffracté.**

(B) le nœud  $n = 2$  se trouve sur la sphère d'Ewald. Les plans (h k l) sont en position de réflexion, la relation de Bragg est satisfaite : **Faisceau diffracté.**

Quelle que soit la position du nœud N :  $\vec{ON} = \vec{O\Omega} + \vec{\Omega N}$  En élevant au carré, on obtient :

$$ON^2 = O\Omega^2 + \Omega N^2 + 2O\Omega \Omega N \cos(\vec{O\Omega}, \vec{\Omega N})$$

$$\text{Soit encore : } ON^2 = \frac{1}{\lambda^2} + \left(\frac{n}{D_{hkl}}\right)^2 + 2\frac{1}{\lambda} \left(\frac{n}{D_{hkl}}\right) \cos \beta$$

Lorsque le nœud N est placé sur la sphère d'EWALD, **Fig. T9\_01A** :  $ON = \frac{1}{\lambda}$  et  $\beta = \frac{\pi}{2} + \theta$

$$\text{Alors : } \frac{n}{D_{hkl}} \left( \frac{n}{D_{hkl}} - \frac{2}{\lambda} \sin \theta \right) = 0$$

On retrouve la relation de Bragg écrite sous la forme usuelle :  $n\lambda = 2D_{hkl} \sin \theta$ .

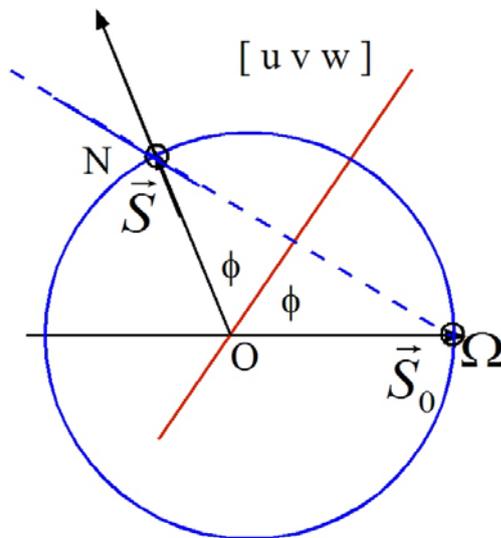
En conclusion, il est équivalent de dire " **placer le nœud h k l sur la sphère d'EWALD** " et " **satisfaire la condition de diffraction pour les plans de la famille ( h k l )** "

### T9\_02 : Plans h k l en ZONE

Soit  $\vec{S}_0$  et  $\vec{S}$  les vecteurs **unitaires** portés respectivement par la direction des faisceaux direct et diffracté..

La sphère d'Ewald a pour centre O, le point d'impact du faisceau avec l'échantillon et pour

$$\text{rayon } \|\vec{S}_0\| = \|\vec{S}\| = 1$$



**Figure T9\_02A** : Plans en ZONE

Le nœud réciproque N d'indices h k l se trouve dans le plan  $n=0$  de la famille  $(u,v,w)^*$  :

$$hu + kv + lw = 0$$

Ces plans ( h k l ) sont en **zone** avec la rangée [ u v w ]

Un nœud réciproque N, repéré par le vecteur  $\vec{ON} = n \vec{r}_{hkl}^*$   $n \in \mathbb{Z}$ , est en position de diffraction lorsqu'il se trouve sur la sphère d'Ewald, et alors,  $\vec{S} = \vec{S}_0 + \lambda \vec{r}_{hkl}^*$

Soit  $\vec{r}_{uvw}$  le vecteur unitaire supporté par la rangée [ u v w ] et  $\varphi$  l'angle entre cette rangée et la direction du faisceau incident, **Fig. T9\_02A** :

$$\cos \varphi = \left( \vec{r}_{uvw} \mid \vec{S}_0 \right) = \left( \vec{r}_{uvw} \mid \vec{S} - \lambda \vec{r}_{hkl}^* \right)$$

Si les plans ( h k l ) sont en zone avec la rangée [ u v w ], alors  $\left( \vec{r}_{uvw} \mid \vec{r}_{hkl}^* \right) = 0$

$$\text{Et } \cos \psi = \left( \vec{\tau}_{uvw} \mid \vec{S} \right) = \left( \vec{\tau}_{uvw} \mid \vec{S}_0 + \lambda \vec{r}_{hkl}^* \right) = \left( \vec{\tau}_{uvw} \mid \vec{S}_0 \right) = \cos \varphi$$

Ou encore :  $\psi = \pm \varphi + 2k\pi$

L'angle  $\psi$  entre l'axe de zone  $[u v w]$  et le faisceau diffracté d'une part, et l'angle  $\varphi$  entre cet axe de zone et le faisceau incident d'autre part, sont **égaux**.

La valeur de cet angle est indépendante des indices  $h k l$ , pourvu que les plans soient en zone.

En conclusion :

Les faisceaux diffractés par les plans de la zone  $[u v w]$  s'appuient sur **un cône** de révolution ayant pour :

**sommet**, le point d'impact du faisceau incident,

**axe**, la rangée  $[u v w]$ ,

**demi- angle au sommet**, l'angle entre cette rangée et le faisceau incident

### T9\_03 : Taille d'un barreau en Silicium monocristallin

Supposons que l'axe principal du barreau est parallèle à la rangée directe  $[1/2, 1/2, 0]$

- o la rangée  $[1/2, 1/2, 0]$  du barreau est placée **parallèlement** à l'axe **O y** de la machine.
- o la rangée  $[1, -1, 1]$  du barreau est placée **parallèlement** à l'axe **O x** de la machine.

#### 1 - : Indices des rangées parallèles aux axes de la machine de coupe

Les rangées  $[1, -1, 1]$  et  $[1/2, 1/2, 0]$  concourantes sur le nœud pris comme origine définissent un plan parallèle au plan  $x O y$  de la machine.

Ces rangées sont **orthogonales** : le produit scalaire des vecteurs joignant l'origine au premier nœud situé sur rangées est en effet nul.

Les indices de la rangée réciproque parallèle à Oz sont obtenus, par exemple, en développant le déterminant symbolique, **Chap. 5 (5.4.1)** :

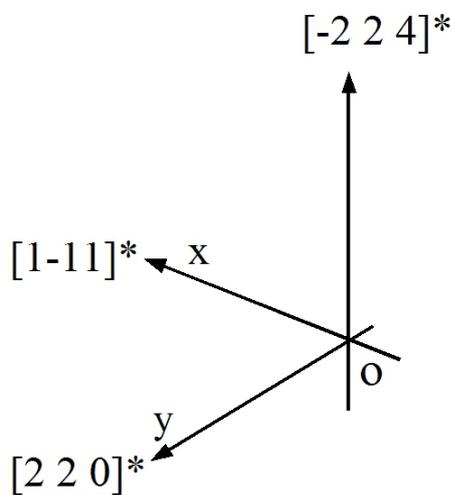
$$\begin{vmatrix} h & k & l \\ 1 & -1 & 1 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{vmatrix} \quad \text{La solution numérique est : } h = -1/2 ; k = 1/2 ; l = 1 \text{ ou } h = 1/2 ; k = -1/2 ; l = -1 \text{ en permutant les lignes 2 et 3}$$

La solution cristallographique choisie est :  $h = -2, k = 2, l = 4$ , compte tenu que les  $h k l$  sont des entiers de même parité, les plus petits possible.

On peut aussi chercher la rangée  $[h, k, l]$  orthogonale aux rangées  $[1, -1, 1]$  et  $[1/2, 1/2, 0]$  :

$$\text{Alors : } \begin{cases} h - k + l = 0 \\ h + k = 0 \end{cases}$$

Rangée	Ox	Oy	Oz
directe	$[1, -1, 1]$	$[1/2, 1/2, 0]$	$[-1/2, 1/2, 0]$
réciproque	$[1, -1, 1]^*$	$[2, 2, 0]^*$	$[-2, 2, 4]^*$



**Figure T9\_03A** : rangées réciproques placées p la rangée  $[1/2, 1/2, 0]$  du barreau est placée parallèlement à l'axe Oy de la machine.

**2 -** : Première découpe du barreau suivant les plans  $(1 -1 3)$

Il faut placer la rangée  $[1 -1 3]^*$  parallèlement à l'axe de rotation de la scie .

Cette rangée, orthogonale à la rangée  $[2, 2, 0]^*$ , se trouve dans un plan parallèle au plan  $x O z$  de la machine.

Soit  $\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*$  les vecteurs de base du réseau réciproque, on cherche à déterminer la projection du vecteur  $\vec{r}^* = \vec{a}^* - \vec{b}^* + 3\vec{c}^*$  suivant les axes Ox, Oy, **FigT9\_03A** :

Soit  $\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*$  les vecteurs de base du réseau réciproque , les vecteurs

$$\vec{r}^* = \vec{a}^* - \vec{b}^* + 3\vec{c}^* \quad ; \quad \vec{u}_x^* = (\vec{a}^* - \vec{b}^* + \vec{c}^*) \quad ; \quad \vec{u}_y^* = (-2\vec{a}^* + 2\vec{b}^* + 4\vec{c}^*)$$

joignent l'origine au premier nœud situé sur les rangées .

Ecrivons que le vecteur  $\vec{r}^*$  est combinaison linéaire des 2 vecteurs supportés par O x et O z :

$$\vec{r}^* = \alpha \vec{u}_x + \gamma \vec{u}_z$$

$$\vec{r}^* = \vec{a}^* - \vec{b}^* + 3\vec{c}^* = \alpha(\vec{a}^* - \vec{b}^* + \vec{c}^*) + \gamma(-2\vec{a}^* + 2\vec{b}^* + 4\vec{c}^*)$$

Sachant que 2 vecteurs sont égaux, si et seulement si, leurs co ordonnées dans une même base sont égales , on obtient :  $\alpha = 5/3$ ;  $\gamma = 1/3$

Les produits scalaires  $(\vec{r}^* | \vec{u}_x)$  et  $(\vec{r}^* | \vec{u}_z)$  donnent les projections orthogonales du vecteur

$$\vec{r}^* \text{ sur } O x \text{ et } O z : (\vec{r}^* | \vec{u}_x) = \|\vec{u}_x\| \text{Pr } o_{j_{Ox}}(\vec{r}^*) = \alpha \|\vec{u}_x\|^2 \text{ soit } \text{Pr } o_{j_{Ox}}(\vec{r}^*) = \alpha \|\vec{u}_x\|$$

$$\text{De même : } \text{Pr } o_{j_{Oz}}(\vec{r}^*) = \gamma \|\vec{u}_z\|$$

Finalement , FigT9\_03B :  $\text{Pr } o_{j_{Ox}}(\vec{r}^*) = \frac{5}{3} \sqrt{\frac{24}{a^2}}$  et  $\text{Pr } o_{j_{Oz}}(\vec{r}^*) = \frac{1}{3} \sqrt{\frac{3}{a^2}}$

La tangente de l'angle  $\varphi_y$  que fait la rangée  $[1 - 1 3]^*$  avec l'axe O x est égale à :

$$\text{tg } \varphi_y = \frac{\text{Pr } o_{j_{Oz}}(\vec{r}^*)}{\text{Pr } o_{j_{Ox}}(\vec{r}^*)} = \frac{2\sqrt{2}}{5} \text{ soit } \varphi_y = 29,50^\circ$$

Il faut tourner autour de l'axe O y de  $29,50^\circ$  dans le **sens trigonométrique** ( de O z vers O x ) FigT9\_03B

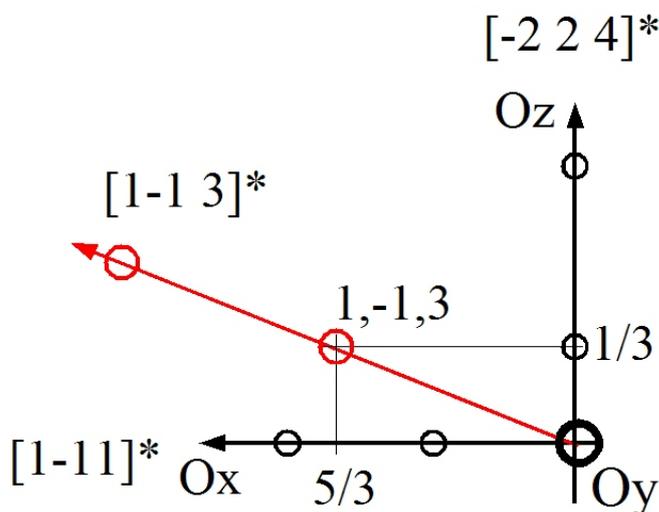


Figure T9\_03B : Position de la rangée  $[1 - 1 3]^*$  avant la mise en place pour une découpe suivant les plans  $(1 - 1 3)$

Après cette rotation, la rangée  $[h, k, l]^*$  parallèle à l'axe O z, si elle existe, est orthogonale aux rangées  $[2, 2, 0]^*$  et  $[1, -1, 3]^*$ .

Compte tenu que le réseau de Bravais du silicium est c.f.c. :  $[h, k, l]^* = [-6, 6, 4]^*$

**3 - : Deuxième découpe du barreau suivant les plans ( 4 0 6 )**

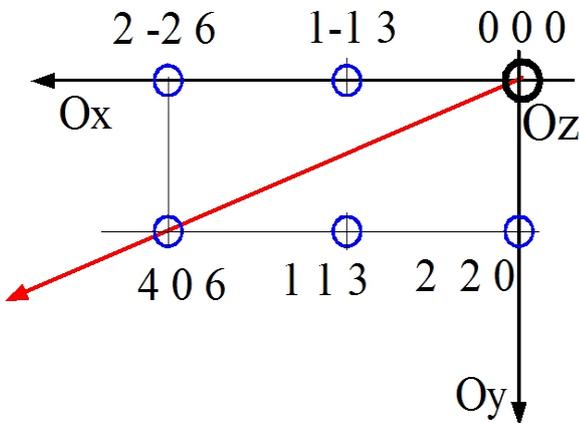
Partant de l'orientation précédente, il faut placer la rangée  $[4,0,6]^*$  parallèlement à l'axe de rotation de la scie .

Cette rangée perpendiculaire à la rangée  $[-6,6,4]^*$  est parallèle au plan x O y .

Le vecteur  $\overrightarrow{(4,0,6)^*}$  est combinaison linéaire des vecteurs  $\overrightarrow{(1,-1,3)^*}$  et  $\overrightarrow{(2,2,0)^*}$  concourants dans ce plan, **Fig. T9 - 03C** :

$$\overrightarrow{(4,0,6)^*} = \alpha \overrightarrow{(1,-1,3)^*} + \beta \overrightarrow{(2,2,0)^*}$$

On trouve :  $\alpha = 2$  ;  $\beta = 1$      $\text{Pr } oj_{Ox}(\overrightarrow{r^*}) = 2\sqrt{\frac{11}{a^2}}$  ;  $\text{Pr } oj_{Oy}(\overrightarrow{r^*}) = \sqrt{\frac{8}{a^2}}$



**Figure T9 - 03C** : Nœuds du réseau réciproque situés dans le plan passant par l'origine et parallèle au plan x O y de la machine .  
Position de la rangée  $[4,0,6]^*$

L'angle  $\varphi_z$  de la rotation autour de Oz est donnée par sa tangente :

$$\text{tg } \varphi_z = \frac{\text{Pr } oj_{Oy}(\overrightarrow{r^*})}{\text{Pr } oj_{Ox}(\overrightarrow{r^*})} = \sqrt{\frac{2}{11}} \text{ soit } \varphi_z = 23,09^\circ$$

En conclusion, pour placer la rangée  $[4\ 0\ 6]^*$  dans l'axe de la scie, il faut effectuer une rotation de  $23,10^\circ$  autour de Oz, dans le sens **opposé** au sens trigonométrique .

**T9\_04 : Taille d'un cristal de Quartz**

Le prisme hexagonal est fixé sur la table x O y de la machine de coupe :

- o la rangée **directe**  $[0,0,1]$  est parallèle à l'axe **O x**.
- o la rangée **directe**  $[1,0,0]$  est parallèle à l'axe **Oy**.

**1 - :** Indices des rangées **directes** parallèles aux axes **O x**, **Oy** et **O z** de la machine :

- o La rangée directe  $[u \ v \ w]$  parallèle à Oz est orthogonale à la rangée  $[0 \ 0 \ 1]$

$$(u \ v \ w)(G) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0 \quad \text{avec} \quad (G) = \begin{pmatrix} a^2 & -1/2a^2 & 0 \\ -1/2a^2 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{pmatrix} \quad \mathbf{w = 0}$$

- o La rangée directe  $[u \ v \ w]$  parallèle à Oz est aussi orthogonale à la rangée  $[1 \ 0 \ 0]$

$$(u \ v \ w)(G) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \quad a^2(u - \frac{1}{2}v) = 0 \quad \mathbf{u = 1, v = 2}$$

en prenant les entiers les plus petits

Finalement la rangée  $[1 \ 2 \ 0]$  est parallèle à l'axe Oz .

**2 - :** Indices des rangées **récioproques** parallèles aux axes Ox, Oy et Oz de la machine :

- o La rangée  $[h \ k \ l]^*$  réciroque parallèle à Ox est orthogonale aux rangés directes

$[0 \ 0 \ 1]$  et  $[1 \ 2 \ 0]$

$$\begin{pmatrix} h & k & l \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{soit} \quad [h \ k \ l]^* = [2 \ -1 \ 0]^*$$

- o La rangée  $[h \ k \ l]^*$  réciroque parallèle à Oy est la rangée  $[0 \ 0 \ 1]^*$ , elle est parallèle à la rangée directe  $[0 \ 0 \ 1]$ , qui est en effet parallèle à l'axe de symétrie  $A_3$

- o La rangée  $[h \ k \ l]^*$  réciroque parallèle à Oz est la rangée  $[0 \ 1 \ 0]^*$ , elle est orthogonale aux rangés directes  $[0 \ 0 \ 1]$  et  $[1 \ 0 \ 0]$

$$\begin{pmatrix} h & k & l \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{soit} \quad [h \ k \ l]^* = [0 \ 1 \ 0]^*$$

Récapitulatif :

Rangée	Ox	Oy	Oz
directe	$[1 \ 0 \ 0]$	$[0 \ 0 \ 1]$	$[1 \ 2 \ 0]$
<b>réciroque</b>	<b><math>[2 \ -1 \ 0]^*</math></b>	<b><math>[0 \ 0 \ 1]^*</math></b>	<b><math>[0 \ 1 \ 0]^*</math></b>

**3 - :** Découpe parallèle aux plans ( 1 1 0 ) du cristal :

Notons  $\overline{hkl}^*$  le vecteur joignant l'origine au premier nœud d'une rangée  $[hkl]^*$

o. **Première rotation** autour de l'axe Oy , Fig.T9\_04A :

Les vecteurs  $\overline{100}^*$  d'une part ,  $\overline{2-10}^*$  et  $\overline{010}^*$  d'autre part, sont concourants et situés dans un plan parallèle au plan x O z . Ecrivons que le vecteur  $\overline{100}^*$  est une combinaison linéaire des 2 autres vecteurs :

$$\overline{100}^* = \alpha \overline{(2-10)}^* + \gamma \overline{(010)}^* : \text{on trouve } \alpha = \gamma = \frac{1}{2}$$

$$\operatorname{tg} \varphi_0 = \frac{\|\overline{010}^*\|}{\|\overline{2-10}^*\|} \quad \operatorname{tg} \varphi_0 = \frac{1}{\sqrt{3}} \quad \varphi_0 = 30^\circ$$

Rotation de  $30^\circ$  autour de Oy dans le **sens trigonométrique**

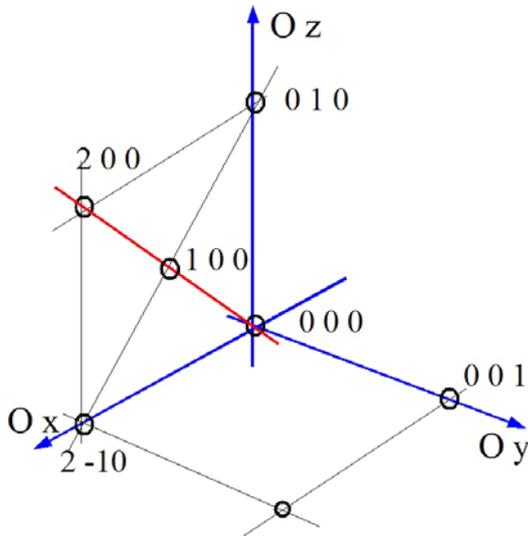


Figure T9\_04A : Nœuds réciproques

**Première rotation** autour de Oy mettant la rangée  $[100]^*$  parallèle à Ox

o. **Deuxième rotation** autour de l'axe Oz , Fig.T9\_04B

Considérons maintenant les vecteurs  $\overline{100}^*$  et  $\overline{001}^*$  concourants dans le plan x O y

Ecrivons que le vecteur  $\overline{101}^*$  situé également dans le plan x O y est la combinaison linéaire des vecteurs  $\overline{100}^*$  et  $\overline{001}^*$  :

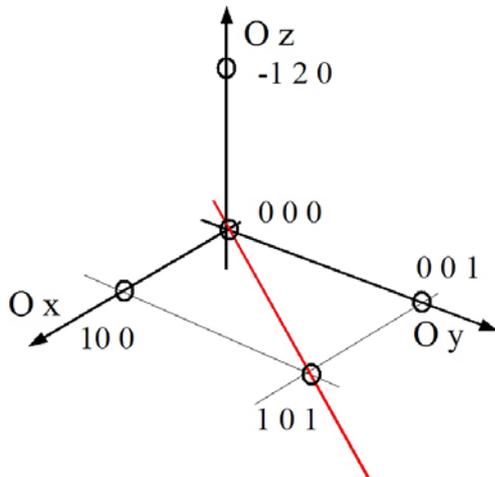


Figure T9\_04B : Nœuds réciproque

Deuxième rotation autour amenant le nœud  $(1\ 0\ 1)^*$  sur l'axe de Ox

$$\overrightarrow{101^*} = \alpha \overrightarrow{100^*} + \beta \overrightarrow{001^*} : \text{on trouve } \alpha = \beta = 1$$

$$\operatorname{tg} \varphi_{0z} = \frac{\|\overrightarrow{001^*}\|}{\|\overrightarrow{100^*}\|} = \frac{a\sqrt{3}}{2c} \quad \operatorname{tg} \varphi_{0z} = 0,787 \quad \varphi_{0z} = 38,20^\circ$$

Rotation de  $38,20^\circ$  autour de O z dans le sens **opposé** au sens trigonométrique.

Après ces opérations, on peut débiter des lamelles dans " l'orientation 1 0 1 " en déplaçant le cristal le long de l'axe Oy

### T9\_05 : Taille d'un cristal de Mg F<sub>2</sub>

Le pavé droit est fixé sur la table x O y de la machine de coupe :

- o la rangée **réciproque**  $[0,1,0]^*$  parallèle à l'axe **O x**.
- o la rangée **réciproque**  $[0,0,1]^*$  parallèle à l'axe **Oy**.
- o la rangée **réciproque**  $[1,0,0]^*$  parallèle à l'axe **Oz**.

**1 -** : Découpe parallèle aux plans  $(1\ 1\ 0)$ :

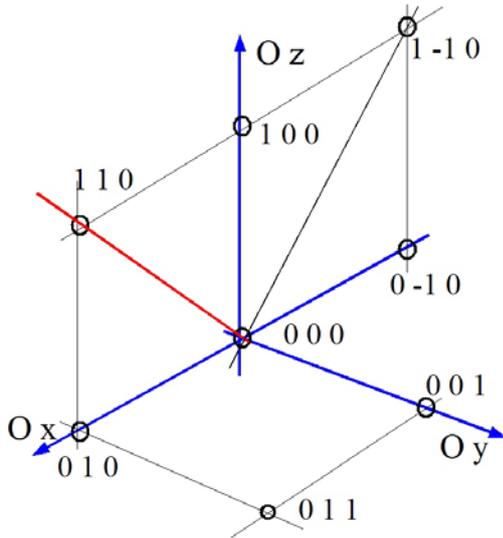


Figure T9\_05A : Nœuds réciproques

Rangées  $[110]^*$  en rouge

La rangée réciproque  $[110]^*$  se trouve dans le plan  $xOy$ , Fig. T9\_05A : une rotation de **45** degrés autour de  $Oy$ , dans le **sens trigonométrique** positionne la rangée  $[110]^*$  parallèlement à l'axe de la scie.

Nouvelle configuration :  $\overline{hkl}^*$

Axe	Ox	Oy	Oz
<b>Avant</b> rotation	$[010]^*$	$[001]^*$	$[100]^*$
<b>Après</b> rotation	$[110]^*$	$[001]^*$	$[1-10]^*$

**2 -** : Découpe parallèle aux plans  $(112)$ , Fig. T9\_05B :

Notons le vecteur  $\overline{hkl}^*$  joignant l'origine au premier de la rangée  $[hkl]^*$

Le vecteur  $\overline{112}^*$  est combinaison linéaire des 2 vecteurs  $\overline{110}^*$  et  $\overline{002}^*$ , parallèles au plan  $xOy$  et concourants sur l'origine, il se trouve donc lui-même dans le plan  $xOy$

$$\overline{112}^* = \alpha(\overline{110}^*) + \gamma(\overline{002}^*) \quad \alpha = \gamma = 1$$

La tangente de l'angle  $\varphi_1$  dont il faut tourner autour de l'axe  $Oz$  (rangée  $\overline{1-10}^*$ ) est égale

à , Fig. T9\_05B :

$$tg \varphi_1 = \frac{2c^*}{a^* \sqrt{2}} = \frac{a\sqrt{2}}{c}$$

On trouve :  $\varphi_1 = 64,98$  degrés ; il faut tourner de  $65,0^\circ$  autour de O z dans le **sens opposé** au sens trigonométrique.

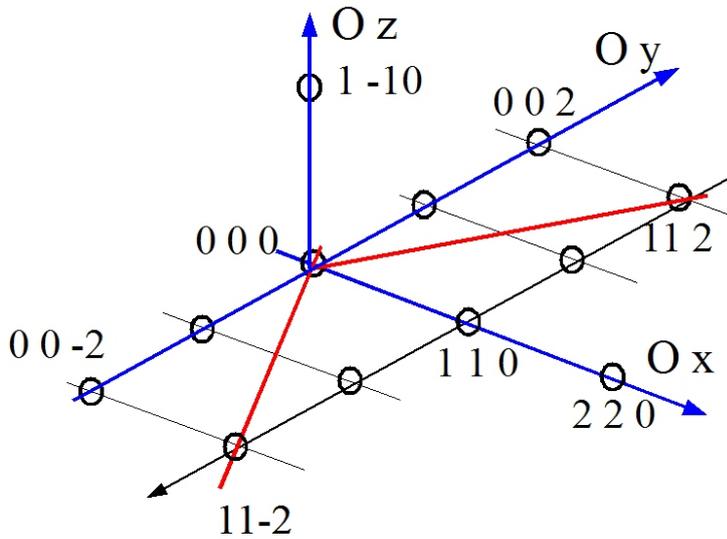


Figure T9\_05B :  
Nœuds réciproques  
Rangées [ 1 1 2 ]\* et [ 1 1 -2 ]\*  
en rouge

3 - : Découpe parallèle aux plans ( 1 1 -2 ) , Fig. T9\_05B :

Les rangées [ 1 1 2 ]\* et [ 1 1 -2 ]\* sont symétriques par rapport à la rangée [ 1 1 0 ]\*  
Partant de la position où la rangée [ 1 1 2 ]\* est parallèle à l'axe O x, il faut tourner de  $130,0^\circ$  ( $64,96 \times 2 = 129,92$ ) autour de O z dans le **sens trigonométrique** .

**T9\_06 : Propriétés des Matrices d'orientation**

1 - : Produit des matrices ( $R_{13}$ ) et ( $R_{31}$ )

Effectuons le produit matriciel :

$$(R_{13})(R_{31}) = \begin{pmatrix} a_x & a_y & a_z \\ b_x & b_y & b_z \\ c_x & c_y & c_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_x^* & b_x^* & c_x^* \\ a_y^* & b_y^* & c_y^* \\ a_z^* & b_z^* & c_z^* \end{pmatrix}$$

1<sup>ère</sup> ligne :  $(\vec{a}^* | \vec{a}) = 1$  ;  $(\vec{a}^* | \vec{b}) = 0$  ;  $(\vec{a}^* | \vec{c}) = 0$

2<sup>ème</sup> ligne :  $(\vec{a}^* | \vec{b}) = 0$  ;  $(\vec{b}^* | \vec{b}) = 1$  ;  $(\vec{b}^* | \vec{c}) = 0$

3<sup>ème</sup> ligne :  $(\vec{a}^* | \vec{c}) = 0$  ;  $(\vec{a}^* | \vec{b}) = 0$  ;  $(\vec{c}^* | \vec{c}) = 1$

On reconnaît la matrice unité ( $I$ )

**Conclusion :**  $(R_{13})(R_{31}) = (UB)^{-1}(UB) = (I)$

**2 - : Produit des matrices  $(UB)^t(UB)$** 

Les matrices  $(U)$  étant le produit de matrices unitaires de rotation, est elle-même unitaire

Conclusion :  $(U)^t = (U)^{-1}$

$$(UB)^t(UB) = (B)^t(U)^t(U)(B) = (B)^t(B) = (R_{21})^t(R_{21})$$

$$(UB)^t(UB) = (R_{21})^t(R_{21}) = \begin{pmatrix} a_x^* & a_y^* & a_z^* \\ b_x^* & b_y^* & b_z^* \\ c_x^* & c_y^* & c_z^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_x^* & b_x^* & c_x^* \\ a_y^* & b_y^* & c_y^* \\ a_z^* & b_z^* & c_z^* \end{pmatrix}$$

$$1^{\text{ère}} \text{ ligne : } (\vec{a}^* | \vec{a}^*) ; (\vec{a}^* | \vec{b}^*) ; (\vec{a}^* | \vec{c}^*)$$

$$2^{\text{ème}} \text{ ligne : } (\vec{b}^* | \vec{a}^*) ; (\vec{b}^* | \vec{b}^*) ; (\vec{b}^* | \vec{c}^*)$$

$$3^{\text{ème}} \text{ ligne : } (\vec{c}^* | \vec{a}^*) ; (\vec{c}^* | \vec{b}^*) ; (\vec{c}^* | \vec{c}^*)$$

On reconnaît le tenseur métrique réciproque  $\mathbf{G}^*$

$$\text{Conclusion : } (R_{21})^t(R_{21}) = (UB)^t(UB) = \mathbf{G}^*$$

**3 - : Volume de la maille réciproque :**

Soit  $(M)$  la matrice de passage des vecteurs de base du repère (2)  $(O, \vec{I}_2, \vec{J}_2, \vec{K}_2)$

ortho normés au repère (1)  $(O, \vec{I}_1, \vec{J}_1, \vec{K}_1)$  cristallographique.

$$\begin{pmatrix} \vec{I}_1 \\ \vec{J}_1 \\ \vec{K}_1 \end{pmatrix} = (M) \begin{pmatrix} \vec{I}_2 \\ \vec{J}_2 \\ \vec{K}_2 \end{pmatrix} \quad (\vec{I}_1, \vec{J}_1, \vec{K}_1) = (\vec{I}_2, \vec{J}_2, \vec{K}_2) (M)^t$$

Soit  $(\vec{X})$  un vecteur quelconque de l'espace réciproque :

$$(\vec{X}) = (\vec{I}_1, \vec{J}_1, \vec{K}_1) \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} = (\vec{I}_2, \vec{J}_2, \vec{K}_2) \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix}$$

$$(\vec{X}) = (\vec{I}_2, \vec{J}_2, \vec{K}_2) (M)^t \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} = (\vec{I}_2, \vec{J}_2, \vec{K}_2) \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix}$$

$$\text{D'où : } (\vec{I}_2, \vec{J}_2, \vec{K}_2) \left\{ (M)^t \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix} \right\} = 0 \text{ ou encore : } \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix} = (M)^t \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix}$$

D'où :  $(R_{21}) = (M)^t$

$V_1 = \det(M) V_2$  or  $V_2 = 1$

Conclusion :  $V_1 = \det(R_{21})$

Par ailleurs :  $\det((R_{21})^t (R_{21})) = \det(G^*)$   
 $\det((R_{21})^t (R_{21})) = (\det(R_{21}))^2 = V_1^2$

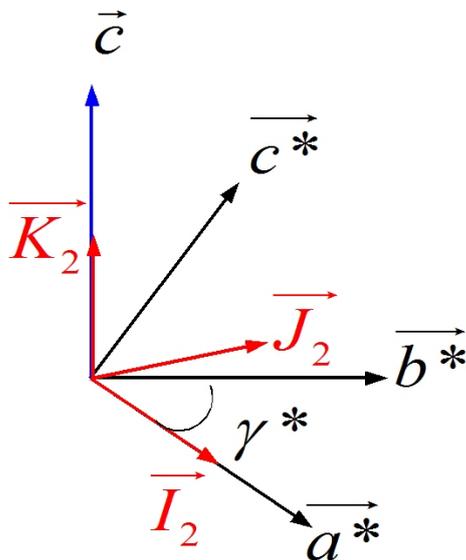
Conclusion :  $V_1^2 = \det(G^*)$

**T9\_07 : Matrices d'ortho normalisation , type " Busing Levy "**

On cherche la matrice de transformation des vecteurs de base des axes cristallographiques en des vecteurs de base des axes orthonormés

Les vecteurs de base du repère ( 2 ) orthonormé  $(O, \vec{I}_2, \vec{J}_2, \vec{K}_2)$  sont choisis de la manière suivante , Fig. T9\_07A :

- $\vec{I}_2$  a la direction de  $\vec{a}^*$
- $\vec{J}_2$  se trouve dans le plan  $\vec{a}^*, \vec{b}^*$  perpendiculaire au vecteur  $\vec{a}^*$ .
- $\vec{K}_2$  est normal au plan  $\vec{a}^*, \vec{b}^*$ , orienté de façon que le trièdre  $(\vec{I}_2, \vec{J}_2, \vec{K}_2)$  soit direct, il est donc parallèle au vecteur direct  $\vec{c}$ .



**Figure T9-07A** : ortho normalisation d'une maille triclinique .  
**En rouge**, vecteurs de base du repère orthonormé du réseau réciproque.

**1 - : Détermination de la matrice  $(R_{21})$**

On exprime les vecteurs de base du repère ( 1 )  $(\vec{I}_1 = \vec{a}^*, \vec{J}_1 = \vec{b}^*, \vec{K}_1 = \vec{c}^*)$  en fonction des vecteurs de base  $(\vec{I}_2, \vec{J}_2, \vec{K}_2)$  du repère ( 2 ) , Fig. T9 - 07A :

On pose  $\|\vec{a}^*\| = a^*$  ;  $\|\vec{b}^*\| = b^*$  ;  $\|\vec{c}^*\| = c^*$  :

$$\frac{\vec{a}^*}{a^*} = \vec{I}_2$$

$$\frac{\vec{b}^*}{b^*} = \cos \gamma^* \vec{I}_2 + \sin \gamma^* \vec{J}_2$$

$$\frac{\vec{c}^*}{c^*} = \cos \gamma_i \vec{I}_2 + \cos \gamma_j \vec{J}_2 + \cos \gamma_k \vec{K}_2$$

Evaluons ces cosinus directeurs, sachant que le repère  $(O, \vec{I}_2, \vec{J}_2, \vec{K}_2)$  est **orthonormé**,

**Fig. T9 - 07A** :

$$\left(\frac{\vec{c}^*}{c^*} \middle| \vec{I}_2\right) = \cos \gamma_i = \cos \beta^*$$

$$\left(\frac{\vec{c}^*}{c^*} \middle| \vec{J}_2\right) = \cos \gamma_j$$

Pour déterminer  $\cos \gamma_j$ , il faut calculer le produit scalaire  $\frac{1}{b^* c^*} (\vec{b}^* \middle| \vec{c}^*) = \cos \alpha^*$

$$\frac{1}{b^* c^*} (\vec{b}^* \middle| \vec{c}^*) = \cos \alpha^* = (\cos \gamma^* \vec{I}_2 + \sin \gamma^* \vec{J}_2 \middle| \cos \beta^* \vec{I}_2 + \cos \gamma_j \vec{J}_2 + \cos \gamma_k \vec{K}_2)$$

Sachant que le repère  $(O, \vec{I}_2, \vec{J}_2, \vec{K}_2)$  est **orthonormé**, il vient :

$$\frac{1}{b^* c^*} (\vec{b}^* \middle| \vec{c}^*) = \cos \alpha^* = (\cos \gamma^* \cos \beta^* + \sin \gamma^* \cos \gamma_j)$$

$$\frac{\cos \alpha^* - \cos \beta^* \cos \gamma^*}{\sin \gamma^*} = \cos \gamma_j = -\cos \alpha \sin \beta^*$$

$$\left(\frac{\vec{c}^*}{c^*} \middle| \vec{K}_2\right) = \frac{1}{c^* c} \quad \text{en effet:} \quad \left(\frac{\vec{c}^*}{c^*} \middle| \vec{K}_2\right) = \left(\frac{\vec{c}^*}{c^*} \middle| \frac{\vec{c}}{c}\right) = \frac{(\vec{c}^* \middle| \vec{c})}{c^* c} = \frac{1}{c^* c}$$

Finalement :

$$\frac{\vec{c}^*}{c^*} = \cos \beta^* \vec{I}_2 - \cos \alpha \sin \beta^* \vec{J}_2 + \frac{1}{c} \vec{K}_2$$

Ecrivons maintenant la matrice (**M**) :

$$\begin{pmatrix} \overline{a^*} \\ \overline{b^*} \\ \overline{c^*} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a^* & 0 & 0 \\ b^* \cos \gamma^* & b^* \sin \gamma^* & 0 \\ c^* \cos \beta^* & -c^* \cos \alpha \sin \beta^* & \frac{1}{c} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \overline{I_2} \\ \overline{J_2} \\ \overline{K_2} \end{pmatrix}$$

La matrice transposée ( $R_{21}$ ) porte sur les coordonnées :

$$\begin{pmatrix} H = x_2 \\ K = y_2 \\ L = z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a^* & b^* \cos \gamma^* & c^* \cos \beta^* \\ 0 & b^* \sin \gamma^* & -c^* \cos \alpha \sin \beta^* \\ 0 & 0 & \frac{1}{c} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h = x_1 \\ k = y_1 \\ l = z_1 \end{pmatrix}$$

**Remarque :** les indices h k l sont entiers relatifs, mais les indices H K L ne le sont pas nécessairement.

## 2 - : Application : matrice d'ortho normalisation de la base de réseau monoclinique

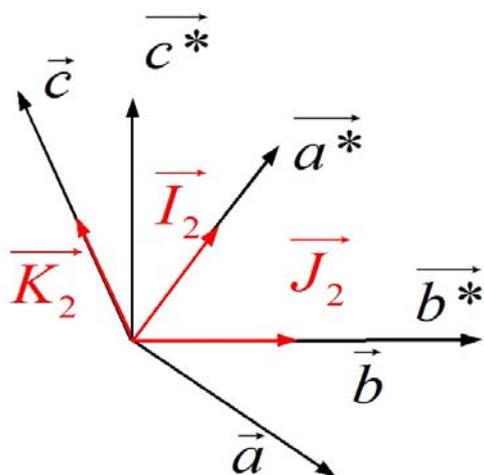


Figure T9\_07B : ortho normalisation d'un repère **monoclinique** .

**En rouge :** vecteurs de la base du repère orthonormé

Dans cette configuration :  $\gamma^* = \frac{\pi}{2}$  ;  $\alpha = \frac{\pi}{2}$  ;  $\beta^* = \pi - \beta$  ,  $c^* = \frac{1}{c \sin \beta}$

la matrice  $(R_{21})$  s'écrit :  $(R_{21}) = \begin{pmatrix} a^* & 0 & c^* \cos \beta^* \\ 0 & b^* & 0 \\ 0 & 0 & c^* \sin \beta^* \end{pmatrix}$

Vérification :

--- en effectuant le produit :  $(R_{21})^t (R_{21})$  on trouve :  $(R_{21})^t (R_{21}) = G^*$

$G^*$  est le tenseur métrique réciproque :

$$(G^*) = \begin{pmatrix} a^{*2} & 0 & a^* c^* \cos \beta^* \\ 0 & b^{*2} & 0 \\ a^* c^* \cos \beta^* & 0 & c^{*2} \end{pmatrix}$$

--- volume de la maille :  $V^* = a^* b^* c^* \sin \beta^*$

--- déterminant de  $(R_{21})$  :  $\det(R_{21}) = a^* b^* c^* \sin \beta^*$

$$\det(R_{21}) = V^*$$

--- déterminant du tenseur métrique ( $G^*$ ) :  $\det(G^*) = (a^* b^* c^* \sin \beta^*)^2$

$$\det(G^*) = V^{*2}$$

### 3 - : Application : matrice d'ortho normalisation de la base de réseau **hexagonal**

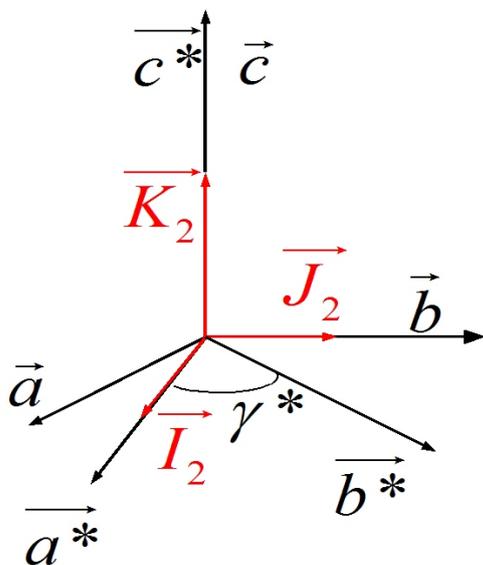


Figure T9\_07B : ortho normalisation d'un repère **hexagonal**.

**En rouge** : vecteurs de la base du repère orthonormé

Dans cette configuration :  $\gamma^* = \frac{\pi}{3}$  ;  $\alpha = \frac{\pi}{2}$  ;  $\beta^* = \frac{\pi}{2}$  ,  $c^* = \frac{1}{c}$

la matrice  $(R_{21})$  s'écrit :  $(R_{21}) = \begin{pmatrix} a^* & b^* \cos \frac{\pi}{3} & 0 \\ 0 & b^* \sin \frac{\pi}{3} & 0 \\ 0 & 0 & c^* \end{pmatrix}$   $(R_{21}) = \begin{pmatrix} a^* & \frac{b^*}{2} & 0 \\ 0 & \frac{b^* \sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & c^* \end{pmatrix}$

Exemple : calcul de la distance inter réticulaire  $D_{111}$

Les indices ( h = 1 k = 1 l = 1 ) rapportés à la maille cristallographique deviennent ( H K L ) lorsqu'ils sont rapportés au repère ( 2 ) :

$$\begin{pmatrix} H \\ K \\ L \end{pmatrix} = (R_{21}) \begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix} \text{ soit : } \begin{pmatrix} H = 3a^*/2 \\ K = b^* \sqrt{3}/2 \\ L = c^* \end{pmatrix} \text{ et } \frac{1}{D_{111}^2} = H^2 + K^2 + L^2 = 3a^{*2} + c^{*2}$$

Ou encore en fonction des paramètres directs:  $\frac{1}{D_{111}^2} = \frac{4}{a^2} + \frac{1}{c^2}$

### T9\_08 : Matrices d'ortho normalisation , type " Hamilton "

Les vecteurs de base du repère ( 2 ) orthonormé  $(O, \vec{I}_2, \vec{J}_2, \vec{K}_2)$  sont choisis de la manière suivante , Fig. T9\_08A :

- $\vec{I}_2$  se trouve dans le plan  $\vec{a}^*, \vec{b}^*$  perpendiculaire au vecteur  $\vec{b}^*$ .
- $\vec{J}_2$  a la direction de  $\vec{a}^*$
- $\vec{K}_2$  est normal au plan  $\vec{a}^*, \vec{b}^*$ , orienté de façon que le trièdre  $(\vec{I}_2, \vec{J}_2, \vec{K}_2)$  soit direct, il est donc parallèle au vecteur direct  $\vec{c}$ .

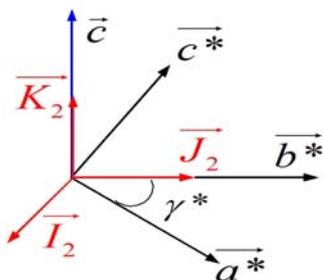


Figure T9-08A : ortho normalisation d'une maille triclinique .

En rouge, vecteurs de base du repère orthonormé du réseau réciproque.

Type " Hamilton "

**1 - :** Détermination de la matrice **réciroque** ( $R_{21}$ )

On exprime les vecteurs de base du repère ( 1 ) ( $\vec{I}_1 = \vec{a}^*$ ,  $\vec{J}_1 = \vec{b}^*$ ,  $\vec{K}_1 = \vec{c}^*$ ) en fonction des vecteurs de base ( $\vec{I}_2, \vec{J}_2, \vec{K}_2$ ) du repère ( 2 ), Fig. T9 - 08A :

On pose  $\|\vec{a}^*\| = a^*$  ;  $\|\vec{b}^*\| = b^*$  ;  $\|\vec{c}^*\| = c^*$  :

$$\frac{\vec{a}^*}{a^*} = \sin \gamma^* \vec{I}_2 + \cos \gamma^* \vec{J}_2$$

$$\frac{\vec{b}^*}{b^*} = \vec{J}_2$$

$$\frac{\vec{c}^*}{c^*} = \cos \gamma_i^* \vec{I}_2 + \cos \alpha^* \vec{J}_2 + \left( \begin{array}{c} \vec{c}^* \\ \vec{c}^* \end{array} \middle| \begin{array}{c} \vec{c} \\ \vec{c} \end{array} \right) \vec{K}_2$$

Pour la détermination de  $\cos \gamma_i^*$  il faut calculer le produit scalaire  $\left( \begin{array}{c} \vec{a}^* \\ \vec{a}^* \end{array} \middle| \begin{array}{c} \vec{c}^* \\ \vec{c}^* \end{array} \right) = \frac{1}{a^* c^*} (\vec{a}^* | \vec{c}^*)$

En poursuivant un calcul similaire au précédent, on arrive la matrice ( $R_{21}$ ) :

$$\begin{pmatrix} H = x_2 \\ K = y_2 \\ L = z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a^* \sin \gamma^* & 0 & -c^* \cos \beta \sin \alpha^* \\ a^* \cos \gamma^* & b^* & c^* \cos \alpha^* \\ 0 & 0 & \frac{1}{c} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h = x_1 \\ k = y_1 \\ l = z_1 \end{pmatrix}$$

**2 - :** Matrice " directe " ( $R_{21}$ )

$$(R_{21}) = \begin{pmatrix} a \sin \gamma & 0 & -c \cos \beta \sin \alpha \\ a \cos \gamma & b & c \cos \alpha \\ 0 & 0 & \frac{1}{c^*} \end{pmatrix}$$

**3 - :** Volume de la maille " directe " :

$$V_1 = \det(R_{21}) = ab \sin \gamma \frac{1}{c^*}$$

En remplaçant  $\frac{1}{c^*}$  par des paramètres " directs ", exercice T2 – 15 :

$$\text{Il vient : } V_1^2 = a^2 b^2 \sin^2 \gamma^2 \frac{1}{c^{*2}} = a^2 b^2 c^2 \sin^2 \gamma^2 \sin^2 \alpha \sin^2 \beta^*$$

En remplaçant  $\sin \beta^*$  par des paramètres " **directs** ", **exercice T2 – 15**,

on arrive au carré du volume de la maille triclinique :

$$V_1^2 = a^2 b^2 c^2 \{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma\}$$

$$\text{Vérification : } V^2 = \det(G)$$

### EXERCICE T9\_09 : Programme OrientExpress : entrée par les fichiers d'exemple

Système cubique

**1 - :** Indexation du diagramme sur la base des taches 1 et 2 :  
tache 1 : -1 -1 -1 tache 2 : -1 0 0

**2 - :** Indices de la courbe zonale [u v w] [0 -1 1] ou [0 1 -1]

**3 - :** Réorientation du cristal : rangée [0 -1 1] parallèle à l'axe Oz de la chambre avec les rotations  $\varphi_x$  et  $\varphi_z$

**4 - :** Indices des plans dont la normale à été placée parallèlement au faisceau direct

Symétrie compatible avec le système **cubique**

- o **quaternaire** -1 0 0  $\varphi_z = 0,00$
- o **ternaire** -1 1 1  $\varphi_z = 55^\circ,00$  (54°,74)
- o **binaire** 0 1 1  $\varphi_z = 89^\circ,90$  (90°,00)
- o **ternaire** 1 1 1  $\varphi_z = 125^\circ,10$  (125°,00)
- o **quaternaire** 1 0 0  $\varphi_z = 180^\circ.00$  (54°,74)

### EXERCICE T9\_10 : Programme OrientExpress : entrée par création de fichiers

Système trigonal

**1 - :** Indexation du diagramme sur la base des taches 1 et 2 :  
tache 1 : -2 1 -2 tache 2 : -1 1 -2

**2 - :** Indices de la courbe zonale contenant les taches 2 et 4 :  
Tache 2 : -1 1 -2 tache 4 : -2 2 1 [u v w] [1 1 0]

**3 - :** Réorientation du cristal : rangée [1 1 0] parallèle à l'axe Oz de la chambre avec les rotations  $\varphi_x$  et  $\varphi_z$

**4 - :** Indices des plans dont la normale à été placée parallèlement au faisceau direct

Symétrie compatible avec la maille **hexagonale** :

- **binaire** -1 1 0  $\varphi_Z = 0,00$
- **senaire** 0 0 1  $\varphi_Z = 90^\circ,00$
- **binaire** 1 -1 0  $\varphi_Z = 180^\circ,00$

**5 - :** Indices des plans dont la normale à été placée parallèlement au faisceau direct la rangée [0 0 1] étant parallèle à l'axe O z

Symétrie compatible avec la maille hexagonale :

- **binaire** -1 -1 0  $\varphi_Z = 0,00$
- **binaire** 0 -1 0  $\varphi_Z = 30^\circ,00$
- **binaire** 1 -2 0  $\varphi_Z = 60^\circ,00$
- **binaire** 1 -1 0  $\varphi_Z = 90^\circ,00$
- **binaire** 2 -1 0  $\varphi_Z = 120^\circ,00$
- **binaire** 1 -2 0  $\varphi_Z = 150^\circ,00$
- **binaire** 1 1 0  $\varphi_Z = 180^\circ,00$

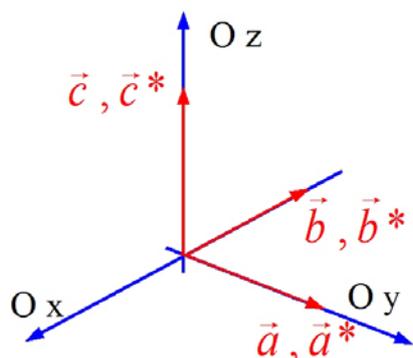
### EXERCICE T9\_11 : Programme OrientExpress : entrée par la matrice d'orientation

**1 - :** Matrice d'orientation :

Paramètres de maille :  $a = b = 4,59\text{Å}$   $c = 2,96\text{Å}$   $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Les **rangées** ( $R_{i3}$ ) sont les projections des vecteurs de base **directs** sur les axes Oxyz

Les **colonnes** ( $R_{3i}$ ) sont les projections des vecteurs de base **réciroques** sur les axes Oxyz



$$(R_{13}) = \begin{pmatrix} a_x & a_y & a_z \\ b_x & b_y & b_z \\ c_x & c_y & c_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 4,59 & 0 \\ -4,59 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2,96 \end{pmatrix}$$

$$(R_{31}) = \begin{pmatrix} a_x^* & b_x^* & c_x^* \\ a_y^* & b_y^* & c_y^* \\ a_z^* & b_z^* & c_z^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -0,218 & 0 \\ 0,218 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,338 \end{pmatrix}$$

Axe binaire suivant la direction du faisceau incident

**2 - :** Rubrique **Réorientation**. Rotation de  $45^\circ$  autour de l'axe Oz

Axe **binaire** suivant la direction du faisceau incident .

**3 - :** Rotation de  $90^\circ$  autour de l'axe Oy

Axe **quaternaire** suivant la direction du faisceau incident .

Commentaire : axes binaires, à  $45^\circ$  les uns des autres, dans un plan perpendiculaire à l'axe quaternaire

### EXERCICE T9\_12 : Diffractomètre : recherche d'une réflexion h k l

**1 - :** Matrice d'orientation :

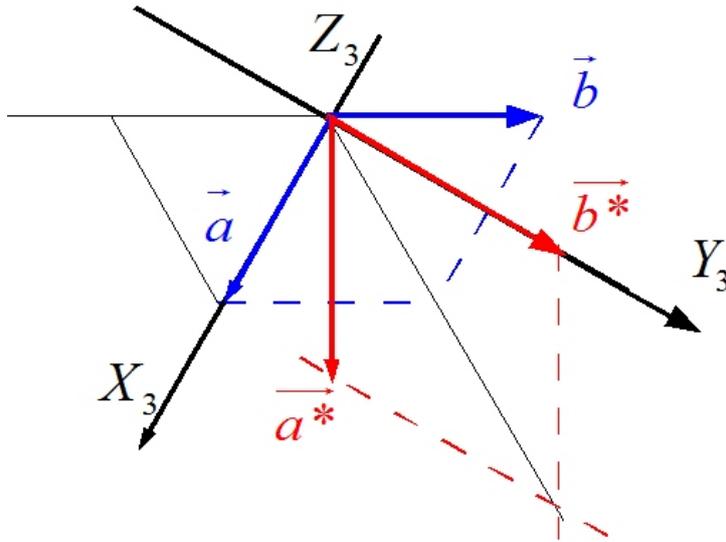
Paramètres de maille :  $a = b = 4,7587 \text{ \AA}$   $c = 12,9929 \text{ \AA}$   $\alpha = \beta = 90^\circ$   $\gamma = 120^\circ$

**Rappel :** FigT9\_12A

○ Les rangées ( $R_{13}$ ) sont les projections des vecteurs de base **directs** sur les axes

orthogonaux  $O X_3, Y_3, Z_3$  attachés au diffractomètre .

○ Les colonnes ( $R_{31}$ ) sont les projections des vecteurs de base **réciroques** sur les mêmes axes.



**Figure T9\_12A :**  
Positionnement du cristal  
par rapport aux axes  
 $O X_3, Y_3, Z_3$   
du diffractomètre

$$a^* = b^* = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{1}{a} \quad c^* = \frac{1}{c}$$

$$a^* = b^* = 2,426_5 \text{ nm}^{-1} \quad c^* = 0,769_{67} \text{ nm}^{-1}$$

$$(R_{31}) = (UB) = \begin{pmatrix} a^* \cos 30^\circ & 0 & 0 \\ a^* \cos 60^\circ & b^* & 0 \\ 0 & 0 & c^* \end{pmatrix} \text{ soit } (R_{31}) = (UB) = \begin{pmatrix} 2,101 & 0 & 0 \\ 1,213 & 2,427 & 0 \\ 0 & 0 & 0,770 \end{pmatrix} \text{ nm}^{-1}$$

$$(R_{13}) = (UB)^{-1} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ -b \cos 60^\circ & b \cos 30^\circ & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix} \text{ soit}$$

$$(R_{13}) = (UB)^{-1} = \begin{pmatrix} 0,476 & 0 & 0 \\ -0,238 & 0,412 & 0 \\ 0 & 0 & 1,299 \end{pmatrix} \text{ nm}$$

On vérifiera que le produit  $(UB)(UB)^{-1}$  est bien égal à la matrice unité

**2 - :** Position de réflexion pour des plans (h k l)

**Plans (0 0 6) :**

La rangée [006]\* se trouve dans le plan  $O Y_3, OZ_3$  :  $\chi = 0$  et  $\varphi$  est indéterminé,

**Fig. T9\_12A :**

$$\begin{pmatrix} x_3 \\ y_3 \\ z_3 \end{pmatrix} = (R_{31}) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 6 \end{pmatrix} \quad x_3 = 0; y_3 = 0; z_3 = 4,62 \text{ nm}^{-1}$$

Les relations ( 3 ) du **complément 04** permettent le calcul des angles du diffractomètre où le faisceau diffracté est attendu :

$$\varphi \text{ indéterminé}; \chi = 0; \omega = \theta = 20,84^\circ$$

**Plans ( 1 1 0 ) :**

La rangée [ 110 ]\* se trouve dans le plan  $O X_3, O Y_3$ :  $\chi = 0$  et  $\varphi = 60^\circ$ , Fig. T9\_12A

$$\begin{pmatrix} x_3 \\ y_3 \\ z_3 \end{pmatrix} = (R_{31}) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad x_3 = 2,101 \text{ nm}^{-1}; y_3 = 3,640 \text{ nm}^{-1}; z_3 = 0,0 \text{ nm}^{-1}$$

$$\text{Soit : } \chi = 0; \varphi = 60,0^\circ; \omega = \theta = 18,88^\circ; 2\theta = 37,76^\circ$$

**Plans ( 1 0 4 ) :**

La rangée [ 104 ]\* se trouve dans le plan  $O X_3, O Z_3$ , Fig. T9\_12A

$$\begin{pmatrix} x_3 \\ y_3 \\ z_3 \end{pmatrix} = (R_{31}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix} \quad x_3 = 2,101 \text{ nm}^{-1}; y_3 = 1,213 \text{ nm}^{-1}; z_3 = 3,078 \text{ nm}^{-1}$$

$$\text{Soit : } \chi = 51,75^\circ; \varphi = 30,0^\circ; \omega = \theta = 17,56^\circ; 2\theta = 35,12^\circ$$

**3 - :** Indexation d'une réflexion ( h k l ) centrée :

$$\chi = 25,62^\circ; \varphi = 49,11^\circ; \omega = \theta = 33,26^\circ$$

$$H = \frac{2 \sin \theta}{\lambda} \quad H = 7,12 \text{ nm}^{-1}$$

Les relations ( 2 ) du **complément 04** permettent le calcul des projections du vecteur de diffusion sur les axes  $O X_3, Y_3, Z_3$  du diffractomètre :

$$x_3 = 4,203 \text{ nm}^{-1}; y_3 = 4,853 \text{ nm}^{-1}; z_3 = 3,079 \text{ nm}^{-1}$$

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} = (R_{13}) \begin{pmatrix} x_3 \\ y_3 \\ z_3 \end{pmatrix} \text{ donne les coordonnées de ce vecteur diffusion sur les axes } O X_1, Y_1, Z_1$$

$$\text{du cristal : } x_1 = 2,000; y_1 = 0,999; z_1 = 4,003$$

Les indices sont donc : h = 2 k = 1 l = 4 : les plans ( 2 1 4 ) sont en position de diffraction ! .

FIN