

## VI. Les indices de Miller

### VI.1. Direction cristallographique (rangée réticulaire)

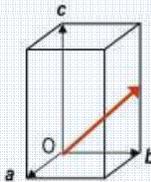
Direction = droite passant par deux nœuds du réseau, elle est désignée par 3 indices  $[u\ v\ w]$

#### Méthode pour désigner une direction :

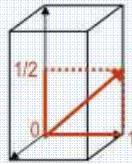
- 1) Tracer dans la maille élémentaire un vecteur parallèle à la direction et passant par l'origine ;
- 2) Projeter le vecteur sur les axes et exprimer ses coordonnées dans la base  $(a, b, c)$  ;
- 3) Ramener ces coordonnées à des valeurs entières, les plus petites possibles ;
- 4) Noter la direction de la façon suivante :  $[uvw]$  (indices de Miller de la direction)

#### Exemple :

1)



2)



3) 0, 2, 1

4)  $[021]$

minéralogiste britannique - 19<sup>e</sup> s.

#### Indice négatif noté $[u\bar{v}w]$ . Exemple : $[1\bar{1}0]$



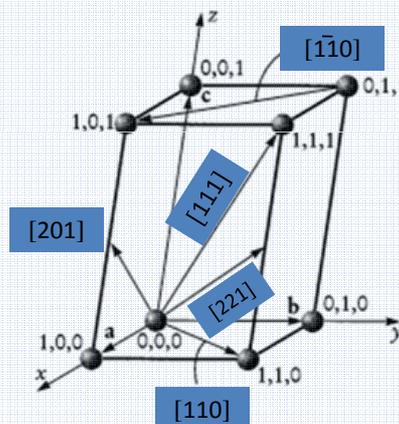
- Deux directions parallèles sont équivalentes et ont les mêmes indices
- Une famille de direction est désignée par  $\langle u\ v\ w \rangle$ .

55

## VI. Les indices de Miller

### VI.1. Direction cristallographique (rangée réticulaire)

Une direction est désignée par trois indices  $[u\ v\ w]$  qui signifie une droite partant de l'origine et passant par l'atome de coordonnées  $u, v$  et  $w$ . Une famille de direction est désignée par  $\langle u\ v\ w \rangle$ . Avec  $u, v, w$  des entiers.



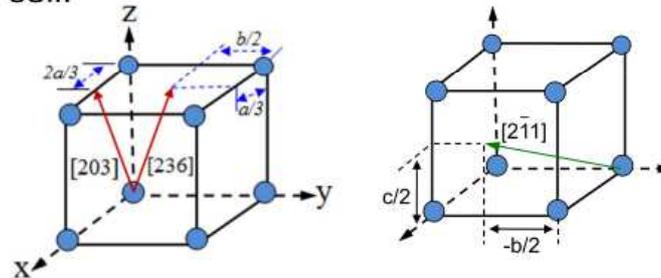
56

## VI. Les indices de Miller

### VI.1. Direction cristallographique (rangée réticulaire)

## Examples

Ex. 4: Draw the directions [236] and [203] and  $[2\bar{1}1]$  in a cubic unit cell.



57

## VI. Les indices de Miller

### VI.1. Direction cristallographique (rangée réticulaire)

#### Worked Example

Find the angle between the directions  $[2\bar{1}1]$  and  $[112]$  in a cubic crystal.

The two directions are  $[2\bar{1}1]$  and  $[112]$

We know that the angle between the two directions,

$$\cos \theta = \frac{u_1 u_2 + v_1 v_2 + w_1 w_2}{(u_1^2 + v_1^2 + w_1^2)^{1/2} \times (u_2^2 + v_2^2 + w_2^2)^{1/2}}$$

$$\therefore \cos \theta = \frac{(2 \times 1) \times (1 \times 1) + (1 \times 2)}{\sqrt{2^2 + 1^2 + 1^2} \times \sqrt{1^2 + 1^2 + 2^2}} = \frac{5}{6}$$

$$\theta = 35^\circ 35' 30''.$$

58

## VI. Les indices de Miller

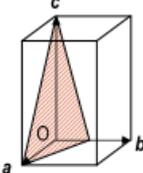
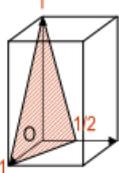
### VI.2. Plan réticulaire

Plan réticulaire = plan passant par 3 nœuds du réseau, il est désigné par 3 indices  $(hkl)$

#### Méthode pour désigner un plan :

- 1) Dessiner un plan dans la maille élémentaire qui ne passe pas par l'origine ;
- 2) Exprimer les coordonnées des points d'intersection du plan avec les 3 axes dans la base  $(a, b, c)$  ;
- 3) Prendre l'inverse de ces coordonnées (uniquement pour les plans) ;
- 4) Ramener ces coordonnées à des valeurs entières, les plus petites possibles ;
- 5) Noter le plan de la façon suivante  $(hkl)$  (indices de Miller du plan)

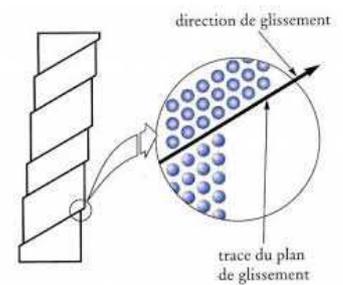
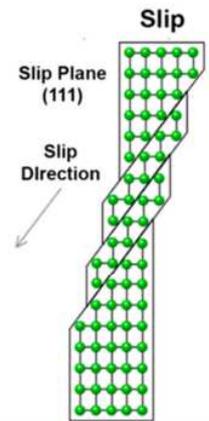
#### Exemple :

- 1) 
- 2) 
- 3) 1, 2, 1
- 4) 1, 2, 1
- 5) (121)

#### Plan parallèle à un axe noté 0. Exemple : (100)

#### Deux plans parallèles sont équivalents et ont les mêmes indices

#### Maille cubique → la direction $[uvw]$ est normale au plan $(uvw)$



## VI. Les indices de Miller

### VI.2. Plan réticulaire

#### Déterminer les indices de Miller d'un plan (2<sup>ème</sup> exemple)

Ce plan coupe les axes aux positions

$$3a, 2b, 3c$$



Les inverses de ces chiffres sont

$$\times 6 \rightarrow \frac{1}{3}a, \frac{1}{2}b, \frac{1}{3}c$$



Les trois plus petits entiers de même rapport sont

$$(232)$$

l'équation du plan le plus proche de l'origine est:  $hx + ky + lz = 1$

l'équation du plan de  $n^{\text{ème}}$  plan à partir de l'origine est:  $hx + ky + lz = n$

## VI. Les indices de Miller

### VI.2. Plan réticulaire

#### Worked Example:

Calculate the miller indices for the plane with intercepts  $2a$ ,  $-3b$  and  $4c$  the along the crystallographic axes.

The intercepts are 2, -3 and 4

Step 1: The intercepts are 2, -3 and 4 along the 3 axes

Step 2: The reciprocals are  $\frac{1}{2}$ ,  $\frac{1}{-3}$  and  $\frac{1}{4}$

Step 3: The least common denominator is 12.

Multiplying each reciprocal by lcd, we get 6 -4 and 3

Step 4: Hence the Miller indices for the plane is  $(6 \bar{4} 3)$

61

## VI. Les indices de Miller

### VI.2. Plan réticulaire

The purpose of using reciprocal of intercepts and not intercepts themselves in Miller indices becomes clear → the  $\infty$  are removed

**Les indices de Miller d'un plan (cas particulier)**

Ce plan coupe les axes aux positions  $2a, 2b, \infty c$

Les inverses de ces chiffres sont  $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$

$\times 2 \rightarrow \frac{1}{2}a, \frac{1}{2}b, 0c$

Les trois plus petits entiers de même rapport sont  $(110)$

Famille de plans. notation  $\{110\}$

Pour les réseaux cubiques (d'arête  $a$ ), il existe une relation entre la **distance interréticulaire** (distance entre deux plans réticulaires successifs) et les indices de Miller.

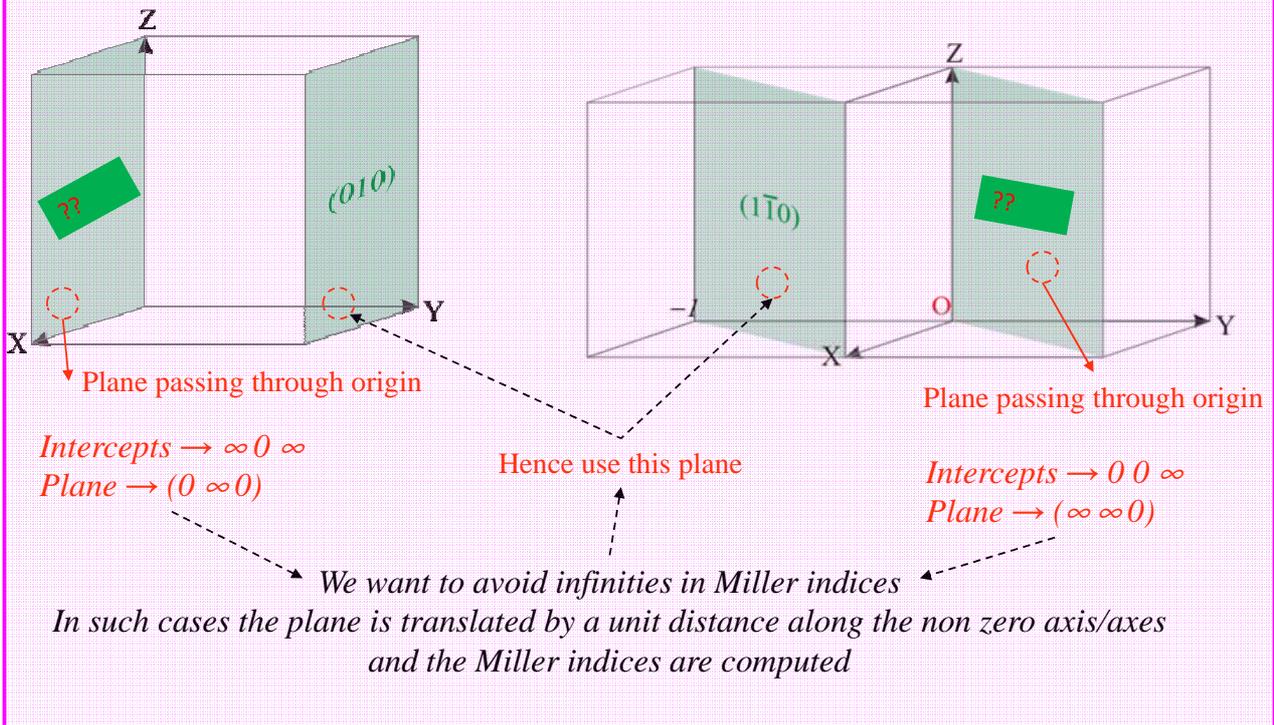
$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

62

## VI. Les indices de Miller

### VI.2. Plan réticulaire

❑ What about the plane passing through the origin?

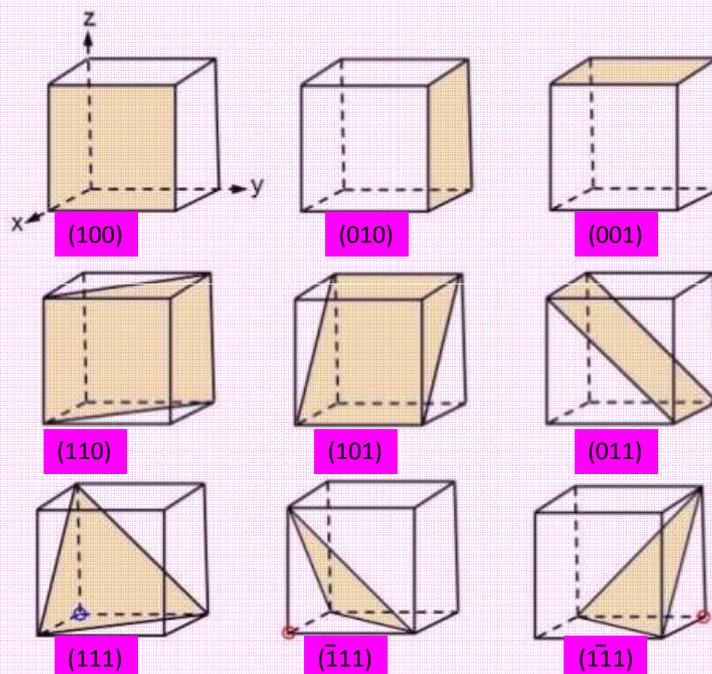


63

## VI. Les indices de Miller

### VI.2. Plan réticulaire

Déterminer les indices de Miller des familles de plans suivants :



64

## VII. Le réseau réciproque

Le **réseau réciproque** dont la notion n'est pas indispensable en cristallographie géométrique, permet cependant d'en simplifier certains calculs et surtout est très **important pour la théorie de la diffraction** des rayonnements par les structures périodiques.

Ce réseau est situé dans **un espace 3D** dont les vecteurs de base  $\mathbf{a}^*$ ,  $\mathbf{b}^*$  et  $\mathbf{c}^*$  sont définis par rapport aux vecteurs de base  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$  et  $\mathbf{c}$  avec lesquels nous avons choisi de construire un réseau dans un espace que nous appellerons direct. Nous avons donc **le réseau direct**.

Les relations de définitions sont les suivantes :

$\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}^* = 1$	$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}^* = 0$	$\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}^* = 0$
$\mathbf{b} \cdot \mathbf{a}^* = 0$	$\mathbf{b} \cdot \mathbf{b}^* = 1$	$\mathbf{b} \cdot \mathbf{c}^* = 0$
$\mathbf{c} \cdot \mathbf{a}^* = 0$	$\mathbf{c} \cdot \mathbf{b}^* = 0$	$\mathbf{c} \cdot \mathbf{c}^* = 1$

On en déduit que  $\mathbf{a}^*$  doit être perpendiculaire à  $\mathbf{b}$  et  $\mathbf{c}$ , ce qui implique :

$$\mathbf{a}^* = \alpha (\mathbf{b} \wedge \mathbf{c})$$

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}^* = \alpha \mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \wedge \mathbf{c}) = \alpha v = 1 \quad \Rightarrow \quad \alpha = 1/v \quad \Rightarrow \quad \mathbf{a}^* = \frac{\mathbf{b} \wedge \mathbf{c}}{v}$$

$v$  est le volume de la maille construite sur  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$  et  $\mathbf{c}$

65

De la même façon on obtient pour  $\mathbf{b}^*$  et  $\mathbf{c}^*$  :

$$\mathbf{b}^* = \frac{\mathbf{c} \wedge \mathbf{a}}{v} \qquad \mathbf{c}^* = \frac{\mathbf{a} \wedge \mathbf{b}}{v}$$

Compte tenu des définition **le réseau réciproque du réseau réciproque est le réseau direct**. En effet :

$$(\mathbf{a}^* \wedge \mathbf{b}^*) = (\mathbf{b} \wedge \mathbf{c}) \wedge (\mathbf{c} \wedge \mathbf{a}) / v^2 = [\underbrace{\mathbf{c} \cdot ((\mathbf{b} \wedge \mathbf{c}) \cdot \mathbf{a})}_{=v} - \underbrace{\mathbf{a} \cdot ((\mathbf{b} \wedge \mathbf{c}) \cdot \mathbf{c})}_{=0}] \cdot 1/v^2 = \mathbf{c}v/v^2$$

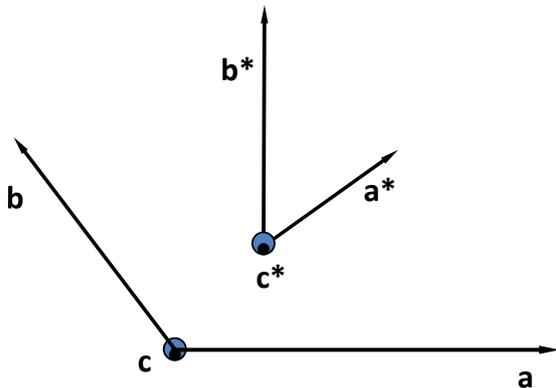
$$(\mathbf{a}^* \wedge \mathbf{b}^*) = \mathbf{c}/v$$

$$\text{Or } (\mathbf{a}^* \wedge \mathbf{b}^*) \cdot \mathbf{c}^* = v^* = \mathbf{c} \cdot \mathbf{c}^* / v \quad \Rightarrow \quad v^* = 1/v \quad \Rightarrow \quad \mathbf{v} \mathbf{v}^* = 1 \quad \left. \vphantom{\mathbf{v} \mathbf{v}^* = 1} \right\} \mathbf{c} = (\mathbf{a}^* \wedge \mathbf{b}^*) / v^*$$

66

Il faut « voir » les réseaux direct et réciproque comme liés l'un à l'autre. Lorsque l'un des réseaux tourne autour d'un axe par exemple, l'autre tourne également autour du même axe dans le même sens et du même angle. Les deux origines  $O$  et  $O^*$  de ces deux réseaux peuvent être confondus ou séparés, par contre leurs orientations sont liées par les relations de définition.

En effet la définition de  $\mathbf{a}^*$  par exemple, lui impose d'être perpendiculaire à  $\mathbf{b}$  et  $\mathbf{c}$ .



$\mathbf{a}^*$  doit être perpendiculaire à  $\mathbf{b}$  et  $\mathbf{c}$

$\mathbf{b}^*$  doit être perpendiculaire à  $\mathbf{a}$  et  $\mathbf{c}$

Cet exemple est celui d'une maille monoclinique avec  $\mathbf{c}$  perpendiculaire à  $\mathbf{a}$  et  $\mathbf{b}$ .

67

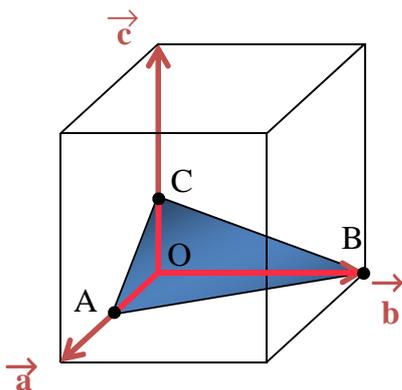
Compte tenu des relations entre les deux réseaux direct (RD) et réciproque (RR), il est possible de faire des opérations telles que le produit scalaire ou le produit vectoriel en utilisant des vecteurs des deux espaces.

$$\mathbf{R} = r_1 \mathbf{a} + r_2 \mathbf{b} + r_3 \mathbf{c}$$

$$\mathbf{N}^* = n_1 \mathbf{a}^* + n_2 \mathbf{b}^* + n_3 \mathbf{c}^*$$

$$\mathbf{R} \cdot \mathbf{N}^* = r_1 n_1 + r_2 n_2 + r_3 n_3$$

### La relation entre le plan $(h k l)$ du RD et La rangée $[h k l]^*$ du RR ?



Considérons maintenant le plan de la famille de plans réticulaires  $(h k l)$  le plus proche de l'origine, son équation dans l'espace direct est  $hx+ky+lz = 1$  et soient A, B et C les intersections de ce plan avec les trois axes. Les vecteurs  $\mathbf{AB}$  et  $\mathbf{AC}$  appartiennent à ce plan.

$$\mathbf{AB} = \mathbf{AO} + \mathbf{OB} = -\mathbf{a}/h + \mathbf{b}/k \quad \mathbf{AC} = -\mathbf{a}/h + \mathbf{c}/l$$

68

Soit  $\mathbf{N}_{hkl}^*$  le vecteur du RR tel que  $\mathbf{N}_{hkl}^* = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$

Ce vecteur définit une rangée de la famille  $[h\ k\ l]^*$  du RR.

Les trois nombres entiers  $h, k,$  et  $l$  étant premiers entre eux le nœud du RR extrémité de  $\mathbf{N}_{hkl}^*$  est le premier nœud de la rangée à partir de l'origine.

$$\mathbf{AB} \cdot \mathbf{N}_{hkl}^* = (-a/h + b/k) \cdot (h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*) = -\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}^* + \mathbf{b} \cdot \mathbf{b}^* = 0$$

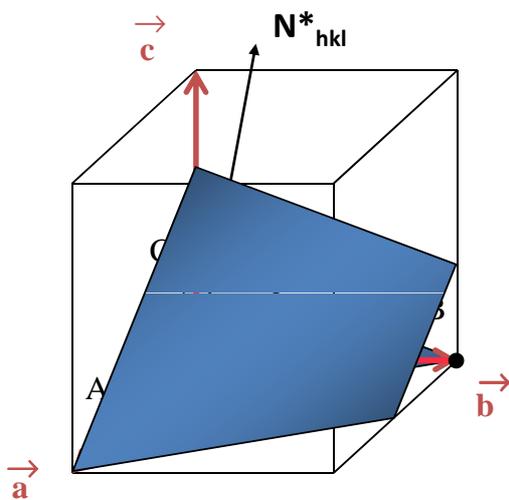
$$\mathbf{AC} \cdot \mathbf{N}_{hkl}^* = (-a/h + c/l) \cdot (h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*) = -\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}^* + \mathbf{c} \cdot \mathbf{c}^* = 0$$

Les deux vecteurs du plan  $(h\ k\ l)$   $\mathbf{AB}$  et  $\mathbf{AC}$  sont donc perpendiculaires au vecteur  $\mathbf{N}_{hkl}^*$  du RR.

**La rangée  $[h\ k\ l]^*$  du RR est donc normale au plan  $(h\ k\ l)$  du RD.**

69

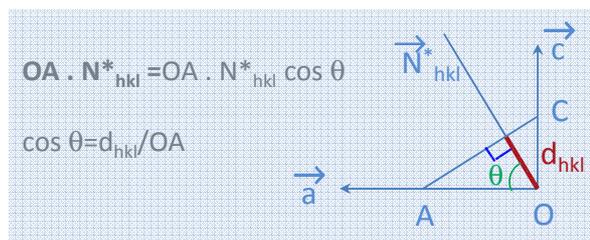
### Distance interréticulaire $d_{hkl}$



Le plan qui coupe les trois axes en A, B et C est l'un des plans de la famille de plans réticulaires  $(h\ k\ l)$ .

Ces plans sont parallèles et équidistants. Soit  $d_{hkl}$  la distance entre deux plans voisins de la famille. Cette distance est égale à la projection du vecteur  $\mathbf{OA}$  sur la normale aux plans  $\mathbf{N}_{hkl}^*$ .

$$d_{hkl} = \mathbf{OA} \cdot \mathbf{N}_{hkl}^* / N_{hkl}^*$$



$$\mathbf{OA} \cdot \mathbf{N}_{hkl}^* = \mathbf{OA} \cdot N_{hkl}^* \cos \theta$$

$$\cos \theta = d_{hkl} / \mathbf{OA}$$

$$d_{hkl} = \mathbf{a} / h \cdot (h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*) / N_{hkl}^* = \mathbf{a} \cdot \mathbf{a}^* / N_{hkl}^* \Rightarrow d_{hkl} = 1 / N_{hkl}^*$$

$$d_{hkl} N_{hkl}^* = 1$$

70

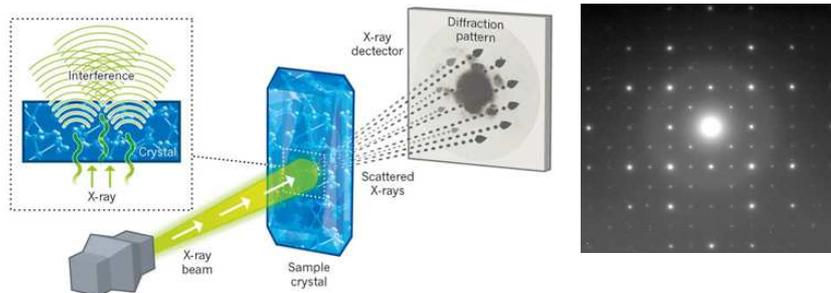
## Réseau réciproque du réseau réciproque

A toute famille de plans réticulaires  $(h\ k\ l)$  du RD on peut associer la rangée  $[h\ k\ l]^*$  du RR qui lui est orthogonale;  $h$ ,  $k$  et  $l$  étant premiers entre eux l'inverse de la norme du vecteur  $\mathbf{N}_{hkl}^*$  du RR est égale à la distance interréticulaire  $d_{hkl}$ .

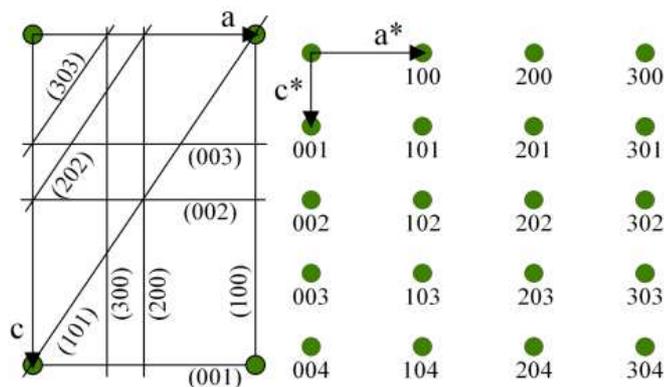
Le réseau réciproque du réseau réciproque étant le réseau direct on peut également dire qu'à toute famille de plans réticulaires  $(u\ v\ w)^*$  du RR on peut associer la rangée  $[u\ v\ w]$  du RD qui lui est orthogonale;  $u$ ,  $v$  et  $w$  étant premiers entre eux, l'inverse de la norme du vecteur  $\mathbf{R}_{uvw}$  du RD est égale à la distance interréticulaire  $d_{uvw}^*$ .

71

## DIFFRACTION DES RAYONS X X-RAY DIFFRACTION XRD

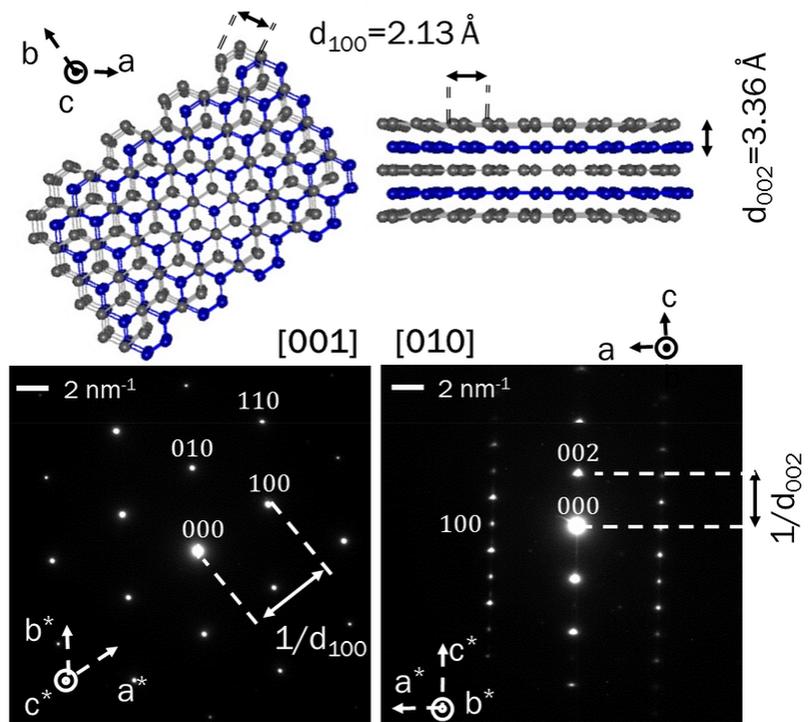


il y a correspondance entre la famille de plans  $(h\ k\ l)$  du réseau direct et le nœud  $P_{hkl}$  du réseau réciproque. A chaque famille de plans du réseau direct, on associe un nœud du réseau réciproque



Correspondance entre familles de plans du réseau direct et nœuds du réseau réciproque.

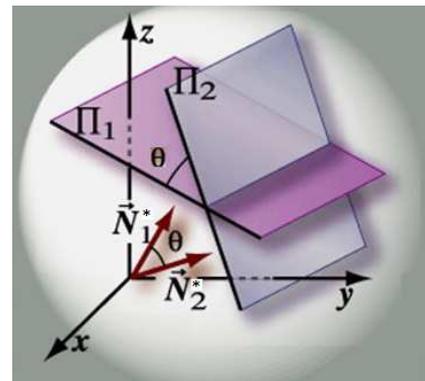
72



Exemple de figures de diffraction d'un monocristal de graphite selon les axes de zone [001] (gauche) et [010] (droite). Les réseaux direct et réciproque ainsi que deux distances interréticulaire sont indiqués.

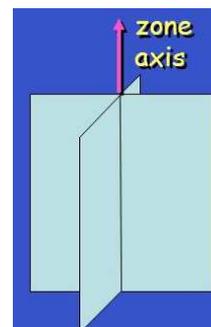
L'introduction du R.R simplifie considérablement de nombreux calculs, comme par exemple l'angle entre deux plans réticulaires  $(h_1k_1l_1)$  et  $(h_2k_2l_2)$

$$\cos\Phi = \frac{\vec{N}_1 \cdot \vec{N}_2}{|\vec{N}_1| |\vec{N}_2|}$$



Il permet aussi de déterminer l'axe de zone de deux plans ou la rangée normale au plan d'un diagramme par la relation:

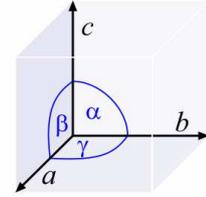
$$\vec{N}_{zone} = \vec{N}_1 \wedge \vec{N}_2$$



## VII. Le réseau réciproque

### VI.2. Distance interréticulaire (réseau triclinique)

$$a \neq b \neq c \\ \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



- Soit une famille de plans réticulaires (h k l) à laquelle correspond le vecteur du RR  $\mathbf{N}_{hkl}^* = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$
- La distance interréticulaire  $d_{hkl}$  est égale à l'inverse de la norme du vecteur  $\mathbf{N}_{hkl}^*$  :

$$1/d_{hkl} = (\mathbf{N}_{hkl}^* \cdot \mathbf{N}_{hkl}^*)^{1/2} = [(h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*) \cdot (h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*)]^{1/2}$$

$$(1/d_{hkl})^2 = h^2\mathbf{a}^{*2} + k^2\mathbf{b}^{*2} + l^2\mathbf{c}^{*2} + 2hk\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{b}^* + 2hl\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{c}^* + 2kl\mathbf{b}^* \cdot \mathbf{c}^*$$

Identité de Binet-Cauchy

$$\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{b}^* = \frac{\mathbf{b} \wedge \mathbf{c} \cdot \mathbf{c} \wedge \mathbf{a}}{V} = \frac{(\mathbf{b} \cdot \mathbf{c})(\mathbf{c} \cdot \mathbf{a}) - (\mathbf{b} \cdot \mathbf{a})(\mathbf{c} \cdot \mathbf{c})}{V^2} = \frac{abc^2}{V^2} (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma)$$

$$\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{c}^* = \frac{ab^2c}{V^2} (\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta) \quad \mathbf{b}^* \cdot \mathbf{c}^* = \frac{a^2bc}{V^2} (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha)$$

$$\mathbf{a}^* = \frac{bc \sin \alpha}{V} \quad \mathbf{b}^* = \frac{ac \sin \beta}{V} \quad \mathbf{c}^* = \frac{ab \sin \gamma}{V}$$

$$V = abc \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma} \quad (\text{Voir TD})$$

75

## VII. Le réseau réciproque

### VI.2. Distance interréticulaire

- Pour les différents systèmes :

– Monoclinique

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} - \frac{2hl}{ac} \cos \beta\right) \frac{1}{\sin^2 \beta} + \frac{k^2}{b^2}}}$$

– Orthorhombique

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$$

– Quadratique  
(tetragonal)

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$$

– Hexagonal

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{4}{3} \frac{h^2 + k^2 + hk}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$$

– Cubique

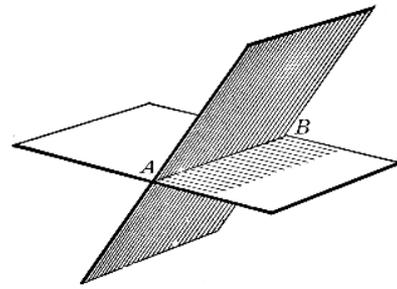
$$d_{hkl} = \frac{a_0}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

76

## VII. Le réseau réciproque

### VI.3. Calcul RD-RR

En utilisant les propriétés des RD et RR il est simple de faire un certain nombre de calculs cristallographiques.



#### Rangée intersection de deux plans $(h_1 k_1 l_1)$ et $(h_2 k_2 l_2)$ du RD

Soient les deux vecteurs  $\mathbf{N}_1^* = h_1\mathbf{a}^* + k_1\mathbf{b}^* + l_1\mathbf{c}^*$  et  $\mathbf{N}_2^* = h_2\mathbf{a}^* + k_2\mathbf{b}^* + l_2\mathbf{c}^*$  du RR normaux respectivement aux deux plans le vecteur  $\mathbf{N}_1^* \wedge \mathbf{N}_2^*$  est parallèle à la rangée recherchée caractérisée par  $\mathbf{R} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}$ . Cela donne :

$$\mathbf{N}_1^* \wedge \mathbf{N}_2^* = (h_1\mathbf{a}^* + k_1\mathbf{b}^* + l_1\mathbf{c}^*) \wedge (h_2\mathbf{a}^* + k_2\mathbf{b}^* + l_2\mathbf{c}^*)$$

$$\mathbf{N}_1^* \wedge \mathbf{N}_2^* = h_1k_2\mathbf{a}^* \wedge \mathbf{b}^* + h_1l_2\mathbf{a}^* \wedge \mathbf{c}^* + k_1h_2\mathbf{b}^* \wedge \mathbf{a}^* + k_1l_2\mathbf{b}^* \wedge \mathbf{c}^* + l_1h_2\mathbf{c}^* \wedge \mathbf{a}^* + l_1k_2\mathbf{c}^* \wedge \mathbf{b}^*$$

$$\mathbf{N}_1^* \wedge \mathbf{N}_2^* = (k_1l_2 - l_1k_2)\mathbf{b}^* \wedge \mathbf{c}^* + (l_1h_2 - h_1l_2)\mathbf{c}^* \wedge \mathbf{a}^* + (h_1k_2 - k_1h_2)\mathbf{a}^* \wedge \mathbf{b}^*$$

$$\mathbf{N}_1^* \wedge \mathbf{N}_2^* = v^*[(k_1l_2 - l_1k_2)\mathbf{a} + (l_1h_2 - h_1l_2)\mathbf{b} + (h_1k_2 - k_1h_2)\mathbf{c}] = \alpha\mathbf{R}$$

Par identification on obtient :  $u = k_1l_2 - l_1k_2; v = l_1h_2 - h_1l_2; w = k_2 - k_1h_2$

#### Crystal Directions

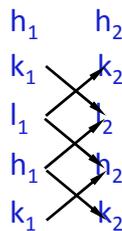
➤ The line which passes through  $uvw$  will also pass through  $2u2v2w$  and  $\frac{1}{2}u \frac{1}{2}v \frac{1}{2}w$ . Hence  $[uvw]$ ,  $[2u2v2w]$  and  $[\frac{1}{2}u \frac{1}{2}v \frac{1}{2}w]$  are same and written as  $[uvw]$ .

77

## VII. Le réseau réciproque

### VI.3. Calcul RD-RR

Méthode pratique



$$u = k_1l_2 - l_1k_2$$

$$v = l_1h_2 - h_1l_2$$

$$w = h_1k_2 - k_1h_2$$

#### Plans en zone, axes de zone

Des plans sont « en zone » quand ils sont parallèles à une direction commune. Leurs indices respectifs vérifient la condition

$$(\mathbf{N}_1^* \wedge \mathbf{N}_2^*) \cdot \mathbf{N}_3^* = 0 \quad \Rightarrow \quad \begin{vmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \\ h_3 & k_3 & l_3 \end{vmatrix} = 0$$

On appelle axe de zone la rangée commune à deux des plans. Ses composantes  $[u v w]$  sont déterminées par :

$$\mathbf{R} = (\mathbf{N}_1^* \wedge \mathbf{N}_2^*) \quad \Rightarrow \quad [u v w] = (h_1 k_1 l_1) \wedge (h_2 k_2 l_2)$$

78

## VII. Le réseau réciproque

### VI.3. Calcul RD-RR

Indices d'une famille de plans réticulaires parallèles à deux rangées  $[u_1 \ v_1 \ w_1]$  et  $[u_2 \ v_2 \ w_2]$ .

Le plan  $(h \ k \ l)$  recherché est tel que le vecteur du RR  $\mathbf{N}^*$  qui s'écrit :  $\mathbf{N}^* = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$  est perpendiculaire aux deux rangées  $\mathbf{R}_1 = u_1 \mathbf{a} + v_1 \mathbf{b} + w_1 \mathbf{c}$  et  $\mathbf{R}_2 = u_2 \mathbf{a} + v_2 \mathbf{b} + w_2 \mathbf{c}$

Autrement dit  $\mathbf{N}^* = \mathbf{R}_1 \wedge \mathbf{R}_2$

$$\begin{aligned} h &= v_1 w_2 - w_1 v_2 \\ k &= w_1 u_2 - u_1 w_2 \\ l &= u_1 v_2 - v_1 u_2 \end{aligned}$$

79

## VII. Le réseau réciproque

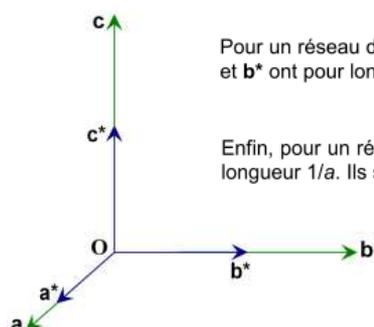
### VI.4. Réseaux réciproques de quelques systèmes cristallins

#### Réseaux réciproques des réseaux directs cubiques, tétraonaux et orthorhombiques.

Les réseaux directs cubiques, tétraonaux et orthorhombiques ont en commun que les angles entre les vecteurs de translation qui les définissent,  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{c}$ , sont égaux à  $90^\circ$ . Prenons le cas le plus général d'un réseau orthorhombique ( $a \neq b$  ;  $b \neq c$  ;  $c \neq a$ ).

$$\mathbf{a}^* = \frac{1}{abc} \cdot bc \cdot \frac{\mathbf{a}}{a} = \frac{1}{a} \cdot \frac{\mathbf{a}}{a}$$

Le vecteur  $\mathbf{a}^*$  est donc parallèle à  $\mathbf{a}$ , de même sens et de longueur  $1/a$ . De même, le vecteur  $\mathbf{b}^*$  est parallèle à  $\mathbf{b}$ , de même sens et de longueur  $1/b$  ; le vecteur  $\mathbf{c}^*$  est parallèle à  $\mathbf{c}$ , de même sens et de longueur  $1/c$



Pour un réseau direct tétraonal ( $a = b$ ),  $\mathbf{a}^*$ ,  $\mathbf{b}^*$ ,  $\mathbf{c}^*$  sont parallèles à  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{c}$  et de même sens.  $\mathbf{a}^*$  et  $\mathbf{b}^*$  ont pour longueur  $1/a$  ;  $\mathbf{c}^*$  a pour longueur  $1/c$ .

Enfin, pour un réseau cubique ( $a = b = c$ ), les trois vecteurs du réseau réciproque ont la même longueur  $1/a$ . Ils sont parallèles aux vecteurs du réseau direct et de même sens.

80

## VII. Le réseau réciproque

### VI.4. Réseaux réciproques de quelques systèmes cristallins

#### Réseau réciproque du réseau direct hexagonal.

Le réseau hexagonal est défini par  $a = b$  et  $\gamma = 120^\circ$ . Le vecteur  $\mathbf{a}^*$  est, par définition, normal à  $\mathbf{b}$  et  $\mathbf{c}$ . Sa longueur est déduite sans difficulté de l'équation :

$$|\mathbf{a}^*| = \left| \frac{1}{V} (\mathbf{b} \wedge \mathbf{c}) \right| = \frac{1}{a^2 c \frac{\sqrt{3}}{2}} ac = \frac{2}{a\sqrt{3}}$$

Le vecteur  $\mathbf{b}^*$  est normal à  $\mathbf{c}$  et  $\mathbf{a}$  et de même longueur :

$$|\mathbf{b}^*| = \left| \frac{1}{V} (\mathbf{c} \wedge \mathbf{a}) \right| = \frac{2}{a\sqrt{3}}$$

$\mathbf{a}^*$  et  $\mathbf{b}^*$  se trouvent dans le plan défini par  $\mathbf{a}$  et  $\mathbf{b}$  et forment un angle de  $60^\circ$ . Le vecteur  $\mathbf{c}^*$  est normal à  $\mathbf{a}$  et  $\mathbf{b}$  donc parallèle à  $\mathbf{c}$  ; sa longueur vaut :

$$|\mathbf{c}^*| = \frac{1}{V} |\mathbf{a} \wedge \mathbf{b}| = \frac{1}{a^2 c \frac{\sqrt{3}}{2}} a^2 \frac{\sqrt{3}}{2} = \frac{1}{c}$$

