$\vec{S} = (hkl)\,(M)^t (N) \begin{pmatrix} \vec{A}' \\ \vec{B}' \\ \vec{C}' \end{pmatrix} \Rightarrow (N) = (M^t)^{-1}$

Conclusion $(N) = (Q)$, $(P) = (M) = (Q^t)^{-1}$

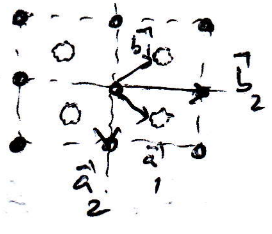
les vecteurs de bases et les indices des plans (hkl) se transforment de manière covariante.

les vecteurs de base réciproque et les indices des rangées [uvw] → transforme de manière contravariante.

I-1 réseau réciproque d'un réseau C :

soit un réseau de type C :

soient $\vec{a}_2, \vec{b}_2, \vec{c}_2$ les vecteurs de base de la maille centrée, $\vec{a}_1, \vec{b}_1$ et $\vec{c}_1$ les vecteurs de base de la maille simple.



$$\begin{cases} \vec{a}_2 = \vec{a}_1 - \vec{b}_1 \\ \vec{b}_2 = \vec{a}_1 + \vec{b}_1 \\ \vec{c}_2 = \vec{c}_1 \end{cases}$$

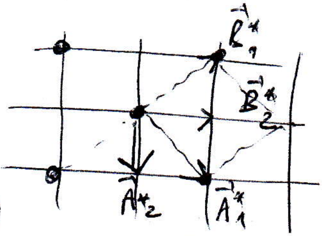
Construisons le R.R , $\vec{A}^*_1 = 2\pi \dfrac{\vec{b}_1 \wedge \vec{c}_1}{V_1}$, $\vec{B}^*_1 = 2\pi \dfrac{\vec{c}_1 \wedge \vec{a}_1}{V}$

$\vec{C}^*_1 = 2\pi \dfrac{\vec{a}_1 \wedge \vec{b}_1}{V}$

$V_2 = \vec{a}_2 \cdot (\vec{b}_2 \wedge \vec{c}_2) = (\vec{a}_1 - \vec{b}_1)\left[(\vec{a}_1 + \vec{b}_1) \wedge \vec{c}_1\right] = 2V_1$

$\vec{b}_2 \wedge \vec{c}_2 = \vec{b}_1 \wedge \vec{c}_1 - \vec{c}_1 \wedge \vec{a}_1$

$\vec{c}_2 \wedge \vec{a}_2 = \vec{c}_1 \wedge \vec{a}_1 + \vec{b}_1 \wedge \vec{c}_1$

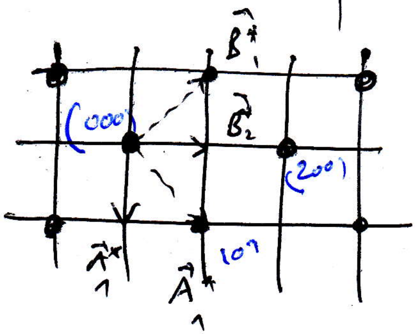


$\vec a_2 \wedge \vec b_2 = 2\vec a_1 \wedge \vec b_1$.

$$\vec A_2^* = \frac{1}{2}\left[2\pi\,\frac{\vec b_1 \wedge \vec c_1}{V_1} - 2\pi\,\frac{\vec c_1 \wedge \vec a_1}{V_1}\right] = \frac{1}{2}\left(\vec A_1^* - \vec B_1^*\right)$$

de même $\quad \vec B_2^* = \frac{1}{2}\left(\vec A_1^* + \vec B_1^*\right)$, $\vec C_2^* = \vec C_1^*$.

Le réseau construit avec les vecteurs $\vec A_2^*$, $\vec B_2^*$ et $\vec C_2^*$ possède la symétrie correcte mais il manque des nœuds. Seuls existent les nœuds tels que $h+k = 2n$ (n : entier). Il y a absence de nœuds si $h+k$ est impair $(2n+1)$.



I-2 Étude Analytique.

Les vecteurs de bases du R. R étaient contravariants avec les vecteurs de base du R. D. Si (A) et (A^*) sont les matrices de la transformation par les vecteurs de base, on a : $(A^*) = ({}^tA)^{-1}$

pour un réseau C, on peut écrire :

$$\begin{pmatrix} \vec a_2 \\ \vec b_2 \\ \vec c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \bar 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec a_1 \\ \vec b_1 \\ \vec c_1 \end{pmatrix} \Rightarrow (A) = \begin{pmatrix} 1 & \bar 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

après l'inversion de la transposée de la matrice (Q), on lire :

$$\begin{pmatrix} \vec{A}_2^* \\ \vec{B}_2^* \\ \vec{C}_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{A}_1^* \\ \vec{B}_1^* \\ \vec{C}_1^* \end{pmatrix}$$

on peut écrire : $\vec{A}_2^* = \frac{1}{2}(\vec{A}_1^* - \vec{B}_1^*)$, $\vec{B}_2^* = \frac{1}{2}(\vec{A}_1^* + \vec{B}_1^*)$

$\vec{C}_1^* = \vec{C}_2^*$.

les nœuds du R.R par la maille simple sont tels que :

$\vec{G}_1^* = h\vec{A}_1^* + k\vec{B}_1^* + l\vec{C}_1^*$, considérons le vecteur $\vec{G}_2^* = h'\vec{A}_2^* + k'\vec{B}_2^* + l'\vec{C}_2^*$

on peut aussi écrire : $\vec{G}_2^* = \frac{1}{2}(h'+k')\vec{A}_1^* + \frac{1}{2}(k'-h')\vec{B}_1^* + l'\vec{C}_1^*$

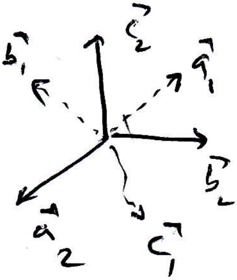
Dans le second repère, les points définis par $\vec{G}_2^*$ sont des nœuds si les coefficients sont entiers, donc si $h'+k'$ est pair.

7-3 Réseaux réciproques des réseaux F et I.

Dans la maille (F), on peut définir une maille primitive (simple), caractérisée par les vecteurs de base : $\vec{a}_1 = \frac{1}{2}(\vec{b}_2 + \vec{c}_2)$; $\vec{b}_1 = \frac{1}{2}(\vec{a}_2 + \vec{c}_2)$, $\vec{c}_1 = \frac{1}{2}(\vec{a}_2 + \vec{b}_2)$

$\vec{a}_2 = -\vec{a}_1 + \vec{b}_1 + \vec{c}_1$, $\vec{b}_2 = \vec{a}_1 - \vec{b}_1 + \vec{c}_1$

$\vec{c}_2 = \vec{a}_1 + \vec{b}_1 - \vec{c}_1$



La forme matricielle de cette

transformation est :

$$\begin{pmatrix} \vec{a}_2 \\ \vec{b}_2 \\ \vec{c}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 1 & 1 \\ 1 & \bar{1} & 1 \\ 1 & 1 & \bar{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{a}_1 \\ \vec{b}_1 \\ \vec{c}_1 \end{pmatrix}$$

Dans les réseaux réciproques on peut écrire :

$$\begin{pmatrix} \vec{A}_2^* \\ \vec{B}_2^* \\ \vec{C}_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{A}_1^* \\ \vec{B}_1^* \\ \vec{C}_1^* \end{pmatrix}$$

$\vec{A}_2^* = \frac{1}{2}(\vec{B}_1 + \vec{C}_1)$, $\vec{B}_2^* = \frac{1}{2}(\vec{A}_1 + \vec{C}_1)$, $\vec{C}_2^* = \frac{1}{2}(\vec{A}_1^* + \vec{B}_1^*)$.

Les nœuds du RR sont donnés par :

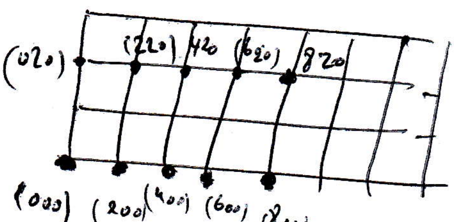
$\vec{\varsigma}_1 = h\vec{A}_1^* + k\vec{B}_1^* + l\vec{C}_1^*$ soit ; $\vec{\varsigma}_2 = h'\vec{A}_2 + k'\vec{B}_2 + l'\vec{C}_2$

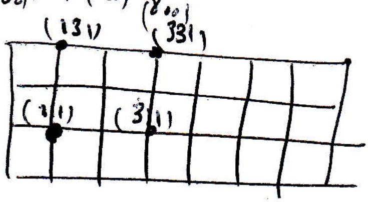
$= \frac{1}{2}(k'+l')\vec{A}_1^* + \frac{1}{2}(h'+l')\vec{B}_1^* + \frac{1}{2}(h'+k')\vec{C}_1^*$

Dans la maille multiple, les points définis par $\vec{\varsigma}_2$ sont des nœuds si les coefficients de $\vec{A}_1^*$, $\vec{B}_1^*$ et $\vec{C}_1^*$ sont des entiers.

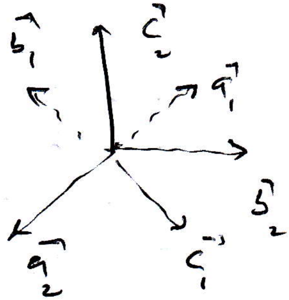
C'est-à-dire si h', k' et l' ont tous les trois la même parité.

Par construction, un réseau dont les nœuds obéissent à cette condition à un réseau de type I.





par un réseau direct de type I, on peut faire une étude semblable, on peut définir une maille primitive caractérisée par les vecteurs de base :



$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \frac{1}{2}(-\vec{a}_2 + \vec{b}_2 + \vec{c}_2) \\ \vec{b}_1 = \frac{1}{2}(\vec{a}_2 - \vec{b}_2 + \vec{c}_2) \\ \vec{c}_1 = \frac{1}{2}(\vec{a}_2 + \vec{b}_2 - \vec{c}_2) \end{cases}$$

d'où $\vec{a}_2 = \vec{b}_1 + \vec{c}_1$, $\vec{b}_2 = \vec{a}_1 + \vec{c}_1$, $\vec{c}_2 = \vec{a}_1 + \vec{b}_1$

$$\begin{pmatrix} \vec{a}_2 \\ \vec{b}_2 \\ \vec{c}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{a}_1 \\ \vec{b}_1 \\ \vec{c}_1 \end{pmatrix}$$

. calcul la transposée et l'inverse on a :

$$\begin{pmatrix} \vec{A}_2 \\ \vec{B}_2 \\ \vec{C}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{A}_1 \\ \vec{B}_1 \\ \vec{C}_1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} \vec{A}_2 = \frac{1}{2}(-\vec{A}_1 + \vec{B}_1 + \vec{C}_1) \\ \vec{B}_2 = \frac{1}{2}(\vec{A}_1 - \vec{B}_1 + \vec{C}_1) \\ \vec{C}_2 = \frac{1}{2}(\vec{A}_1 + \vec{B}_1 - \vec{C}_1) \end{cases}$$

soit $\vec{G}_2 = h'\vec{A}_2 + k'\vec{B}_2 + l'\vec{C}_2$

$= \frac{1}{2}\vec{A}_1(k' + l' - h') + \frac{1}{2}\vec{B}_1(h' - k' + l') + \frac{1}{2}\vec{C}_1(h' + k' - l')$

dans la maille multiple les points définis par $\vec{G}_2$ par ses nœuds si les coefficients des $\vec{A}_1$, $\vec{B}_1$ et $\vec{C}_1$ sont des entiers.

soient h', k', l' soit tous pairs ou bien deux impairs et un pair.

par Construction, un réseau [illegible]
n'ont obéissent à cette condition sur
un réseau de type (F)