## AAA

```
In[232]:= ClearAll["Global`*"]
(*200*)
h = 2;
k = 0;
l = 0;
\beta = 90;
a = 10.784;
b = 8.201;
c = 10.380;
 (*monoclinic*)
                                                 аbс
      \frac{a b c}{\sqrt{a^2 c^2 k^2 - 2 a b^2 c h l Cot[°β] Csc[°β] + b^2 c^2 h^2 Csc[°β]^2 + a^2 b^2 l^2 Csc[°β]^2}};
 (*---*)
\lambda = 1.541;
\lambda / (2d);
\theta = ArcSin[\lambda / (2 d)] * 180 / \pi;
2θ;
Print["d(200) = ", d]
Print["2\theta = ", 2\theta]
d(200) = 5.392
2⊖ = 16.431
```

## **BBB**

```
In[247]:= ClearAll["Global`*"]
    (*200*)
   h = 2;
   k = 0;
   l = 0;
   \beta = 90;
   a = 10.784;
   b = 8.201;
   c = 10.380;
    (*monoclinic*)
   d = \frac{\frac{1}{\sqrt{\frac{1}{\sin[\beta \text{ Degree}]^2} \left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2 * \sin[\beta \text{ Degree}]^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} - \frac{2 \text{ hl } Cos[\beta \text{ Degree}]}{a \text{ c}}\right)}};
   \lambda = 1.541;
   \lambda / (2 d);
   \theta = ArcSin[\lambda / (2 d)] * 180 / \pi;
   2θ;
    Print["d(200) = ", d]
   Print["2\theta = ", 2\theta]
   d(200) = 5.392
    2⊖ = 16.431
```

## Storage

$$\begin{split} n\lambda &= 2d\sin\theta \\ &\text{In[262]:= ClearAll["Global`*"];} \\ &\text{Solve}\Big[\frac{1}{\mathsf{d}^2} = \frac{1}{\mathsf{Sin[\beta\,Degree]}^2} \left(\frac{\mathsf{h}^2}{\mathsf{a}^2} + \frac{\mathsf{k}^2 * \mathsf{Sin[\beta\,Degree]}^2}{\mathsf{b}^2} + \frac{\mathsf{l}^2}{\mathsf{c}^2} - \frac{2\,\mathsf{h}\,\mathsf{l}\,\mathsf{Cos[\beta\,Degree]}}{\mathsf{a}\,\mathsf{c}}\right),\,\mathsf{d}\Big] \\ &\text{Out[263]:= } \left\{ \left\{ \mathsf{d} \to -\frac{\mathsf{a}\,\mathsf{b}\,\mathsf{c}}{\sqrt{\mathsf{a}^2\,\mathsf{c}^2\,\mathsf{k}^2 - 2\,\mathsf{a}\,\mathsf{b}^2\,\mathsf{c}\,\mathsf{h}\,\mathsf{l}\,\mathsf{Cot[}^\circ\,\beta]\,\,\mathsf{Csc[}^\circ\,\beta] + \mathsf{b}^2\,\mathsf{c}^2\,\mathsf{h}^2\,\mathsf{Csc[}^\circ\,\beta]^2 + \mathsf{a}^2\,\mathsf{b}^2\,\mathsf{l}^2\,\mathsf{Csc[}^\circ\,\beta]^2}} \right\},\\ &\left\{ \mathsf{d} \to \frac{\mathsf{a}\,\mathsf{b}\,\mathsf{c}}{\sqrt{\mathsf{a}^2\,\mathsf{c}^2\,\mathsf{k}^2 - 2\,\mathsf{a}\,\mathsf{b}^2\,\mathsf{c}\,\mathsf{h}\,\mathsf{l}\,\mathsf{Cot[}^\circ\,\beta]\,\,\mathsf{Csc[}^\circ\,\beta] + \mathsf{b}^2\,\mathsf{c}^2\,\mathsf{h}^2\,\mathsf{Csc[}^\circ\,\beta]^2 + \mathsf{a}^2\,\mathsf{b}^2\,\mathsf{l}^2\,\mathsf{Csc[}^\circ\,\beta]^2}} \right\} \right\} \end{split}$$

Nishiyama 2022. J. AM. CHEM. SOC. 2002, 124, 9074-9082