



**Université de Lorraine**

**Faculté des Sciences et Technologies**

**Département de Géosciences**

---

**Master Sciences et Technologies**

**Mention Sciences de la Terre et des Planètes Environnement**

**UE 702 Outils d'observation et d'analyse en Géosciences**

***Introduction à la diffraction et à la microscopie électronique***

***Vecteurs et matrices en cristallographie***

**Massimo Nespolo, professeur**

Laboratoire de **C**ristallographie, **R**ésonance **M**agnétique et **M**odélisations

UMR CNRS 7036

Institut Jean Barriol, FR 2843

*Polycopié mis à jours le 24 septembre 2019*

La dernière version de ce polycopié est téléchargeable sur la plate-forme ARCHE de l'UL à l'adresse <http://arche.univ-lorraine.fr/course/view.php?id=55>

## Note typographique

En accord avec les conventions établies par l'Union Internationale de Cristallographie (voir les *International Tables for Crystallography*) les vecteurs sont ici écrits en caractères minuscules gras (**a**, **b**, **c**, etc.) et les matrices et tenseurs en caractères majuscules gras (**G**, **P**, **Q**, etc.). D'autres conventions existent, selon lesquelles les vecteurs sont, par exemple, écrits avec des flèches au-dessus ( $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$ , etc.) ou soulignés ( $\underline{a}$ ,  $\underline{b}$ ,  $\underline{c}$ , etc.) ou encore avec un tilde au-dessous ( $\underset{\sim}{a}$ ,  $\underset{\sim}{b}$ ,  $\underset{\sim}{c}$ , etc.); les matrices et tenseurs avec des doubles flèches au-dessus ( $\vec{\vec{G}}$ ,  $\vec{\vec{P}}$ ,  $\vec{\vec{Q}}$ , etc.) ou avec une double soulignage ( $\underline{\underline{G}}$ ,  $\underline{\underline{P}}$ ,  $\underline{\underline{Q}}$ , etc.) ou encore avec un double tilde au-dessous ( $\underset{\sim\sim}{G}$ ,  $\underset{\sim\sim}{P}$ ,  $\underset{\sim\sim}{Q}$ , etc.).

Le **produit scalaire** est ici indiqué par le symbole «  $\cdot$  », le **produit vectoriel** par le symbole «  $\times$  ». Dans d'autres textes le symbole «  $\times$  » indique parfois le produit scalaire alors que pour le produit vectoriel le symbole «  $\wedge$  » est utilisé, alors que celui-ci devrait être réservé pour le [produit extérieur](#). La **norme** d'un vecteur **r** est indiquée par le symbole à double barre verticale :  $\|\mathbf{r}\|$ . Le symbole à une barre verticale est utilisé pour indiquer la **valeur absolue** d'un scalaire :  $|a| = a$  si  $a \geq 0$  ;  $|a| = -a$  si  $a < 0$ .

## Rappel. Produit de matrices et calcul du déterminant

Une matrice  $\mathbf{A}_{(n,m)}$  est un tableau de  $n$  lignes et  $m$  colonnes. Le produit de deux matrices  $\mathbf{A}_{(n,m)}$  et  $\mathbf{B}_{(m,p)}$  est une matrice  $\mathbf{C}_{(n,p)}$  ; l'élément  $ij$  de la matrice **C** est obtenu en sommant les produits des éléments de la  $i$ -ème ligne de **A** et ceux de la  $j$ -ème colonne de **B** :

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^m a_{ik} b_{kj} \quad (1)$$

Le nombre de lignes de la matrice **B** doit être égal au nombre de colonnes de la matrice **A** pour que le produit **AB** soit possible.

Par exemple, le produit d'une matrice  $\mathbf{A}_{(5,4)}$ , à cinq lignes et trois colonnes, et d'une matrice  $\mathbf{B}_{(4,6)}$ , à quatre lignes et six colonnes, est une matrice  $\mathbf{C}_{(5,6)}$  à cinq lignes et six colonnes. L'élément d'indices 2,3 de la matrice **C** est obtenu en sommant les produits des éléments de la deuxième ligne de **A** et ceux de la troisième colonne de **B** :

$$c_{23} = \sum_{k=1}^4 a_{2k} b_{k3} = a_{21}b_{13} + a_{22}b_{23} + a_{23}b_{33} + a_{24}b_{43}$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ \mathbf{a_{21}} & \mathbf{a_{22}} & \mathbf{a_{23}} & \mathbf{a_{24}} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \mathbf{b_{13}} & b_{14} & b_{15} & b_{16} \\ b_{21} & b_{22} & \mathbf{b_{23}} & b_{24} & b_{25} & b_{26} \\ b_{31} & b_{32} & \mathbf{b_{33}} & b_{34} & b_{35} & b_{36} \\ b_{41} & b_{42} & \mathbf{b_{43}} & b_{44} & b_{45} & b_{46} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{21} & c_{22} & \mathbf{c_{23}} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{51} & c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{56} \end{bmatrix}$$

La matrice transposée  $\mathbf{A}^t$  d'une matrice donnée **A** est la matrice qu'on obtient à partir de **A** en échangeant lignes et colonnes :

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} \end{bmatrix} \quad \mathbf{A}^t = \begin{bmatrix} a_{11}^t = a_{11} & a_{12}^t = a_{21} & a_{13}^t = a_{31} & a_{14}^t = a_{41} & a_{15}^t = a_{51} \\ a_{21}^t = a_{12} & a_{22}^t = a_{22} & a_{23}^t = a_{32} & a_{24}^t = a_{42} & a_{25}^t = a_{52} \\ a_{31}^t = a_{13} & a_{32}^t = a_{23} & a_{33}^t = a_{33} & a_{34}^t = a_{43} & a_{35}^t = a_{53} \\ a_{41}^t = a_{14} & a_{42}^t = a_{24} & a_{43}^t = a_{34} & a_{44}^t = a_{44} & a_{45}^t = a_{54} \\ a_{51}^t = a_{15} & a_{52}^t = a_{25} & a_{53}^t = a_{35} & a_{54}^t = a_{45} & a_{55}^t = a_{55} \end{bmatrix}$$

Une **matrice ligne** est une matrice  $\mathbf{A}_{(1,n)}$  qui contient une ligne et  $n$  colonnes :

$$\mathbf{A}_{(1,n)} = (a_{11} \quad a_{12} \quad a_{13} \quad \cdots \quad a_{1n})$$

Une **matrice colonne** est une matrice  $\mathbf{B}_{(n,1)}$  qui contient  $n$  lignes et une colonne :

$$\mathbf{B}_{(n,1)} = \begin{pmatrix} b_{11} \\ b_{21} \\ b_{31} \\ \vdots \\ b_{n1} \end{pmatrix}$$

Évidemment, la matrice transposée d'une matrice ligne est une matrice colonne, et vice versa.

Nous sommes ici intéressés par des matrices carrées, ayant le même nombre de lignes et colonnes. En particulier, nous traiterons des matrices  $3 \times 3$ , car la plupart des problèmes cristallographiques auxquels nous nous adressons sont limités à l'espace Euclidien tridimensionnel.

Le déterminant  $\det(\mathbf{A})$  d'une matrice  $\mathbf{A}_{(3,3)}$  peut se calculer aisément grâce à la méthode des mineurs on à la règle de Sarrus. La règle de Sarrus est plus simple.

Les éléments reliés par la même ligne sont multipliés entre eux, les produits ainsi obtenus sont sommés, avec le signe plus ceux à gauche, avec le signe moins ceux à droite.

$$\det(\mathbf{A}) = a_{11}a_{22}a_{33} + a_{21}a_{32}a_{13} + a_{31}a_{12}a_{23} - a_{13}a_{22}a_{31} - a_{23}a_{32}a_{11} - a_{33}a_{21}a_{12} \quad (2)$$

## Notation de Dirac pour vecteurs et matrices

La notation de Dirac est une notation synthétique très utile. Une matrice ligne est indiquée par un « bra »  $\langle$  |, et une matrice colonne est indiquée par un « ket »  $| \rangle$ :

$$(a_1 a_2 \cdots a_n) = \langle a_1 a_2 \cdots a_n | ; \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = | b_1 b_2 \cdots b_n \rangle \quad (3)$$

La transformation d'un bra en un ket ou vice versa correspond à l'opération de transposition. Appliquons cette transformation à des vecteurs :

$$\mathbf{a} \rightarrow \mathbf{a}^t \equiv \langle \mathbf{a} | \rightarrow | \mathbf{a} \rangle ; \mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}^t \equiv | \mathbf{r} \rangle \rightarrow \langle \mathbf{r} | \quad (4)$$

Le produit d'un bra et d'un ket est un scalaire (tenseur de rang zéro). Bra et ket doivent avoir le même nombre d'éléments:

$$\langle a_1 a_2 \cdots a_n | b_1 b_2 \cdots b_n \rangle = \sum_{j=1}^n a_j b_j = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \cdots + a_n b_n \quad (5)$$

Le produit d'un ket  $\mathbf{b}_{(n,1)}$  pour un bra  $\mathbf{a}_{(1,m)}$  est une matrice  $\mathbf{C}_{(n,m)}$ ; bra et ket peuvent avoir un nombre différent d'éléments:

$$| b_1 b_2 \cdots b_n \rangle \langle a_1 a_2 \cdots a_m | = \mathbf{C}_{(n,m)} \quad (6)$$

$$c_{ij} = a_i b_j, 1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq m$$

## Composantes covariantes et contravariantes

Soit  $Oabc$  ( $O$  = origine) une base cristallographique dans l'espace tridimensionnel et  $R$  un point relié à l'origine  $O$  par un vecteur  $\mathbf{r}$ . La rotation horaire de la base d'un angle  $\varphi$  ne change pas la position de  $R$ , mais elle change l'expression du vecteur  $\mathbf{r}$ , qui dépend de la base. On obtient la même transformation si, au lieu d'une rotation horaire de la base, on effectue une rotation antihoraire (toujours de  $\varphi$ ) du vecteur  $\mathbf{r}$  (le point  $R$  va en  $R'$ ).

La **Figure 1** montre, en projection dans le plan (001), cette équivalence, dans le cas d'une rotation autour de l'axe  $c$  (pour simplicité de représentation). La **Figure 1(a)** est la situation originale. La **Figure 1(b)** montre l'effet de la rotation horaire de la base, et la **Figure 1(c)** l'effet de la rotation antihoraire du vecteur  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'$ . Évidemment, les deux transformations ont le même résultat. Toute quantité qui se transforme comme les vecteurs de la base est dite **covariante**, et toute quantité qui se transforme comme le vecteur  $\mathbf{r}$  est dite **contravariante**.

En accord avec les conventions établies par l'Union International de Cristallographie, on utilise des matrices lignes (« bras ») pour les composantes covariantes et des matrices colonne (« kets ») pour les composantes contravariantes :

$\langle abc  $	vecteurs base de l'espace direct
$\langle hkl  $	indices de Miller d'un plan dans l'espace direct ; indices de Laue d'une diffraction ; coordonnées d'un point de l'espace réciproque
$  xyz \rangle$	coordonnées d'un point de l'espace direct
$  \mathbf{a}^* \mathbf{b}^* \mathbf{c}^* \rangle$	vecteurs base de l'espace réciproque
$  uvw \rangle$	indices d'une direction de l'espace direct

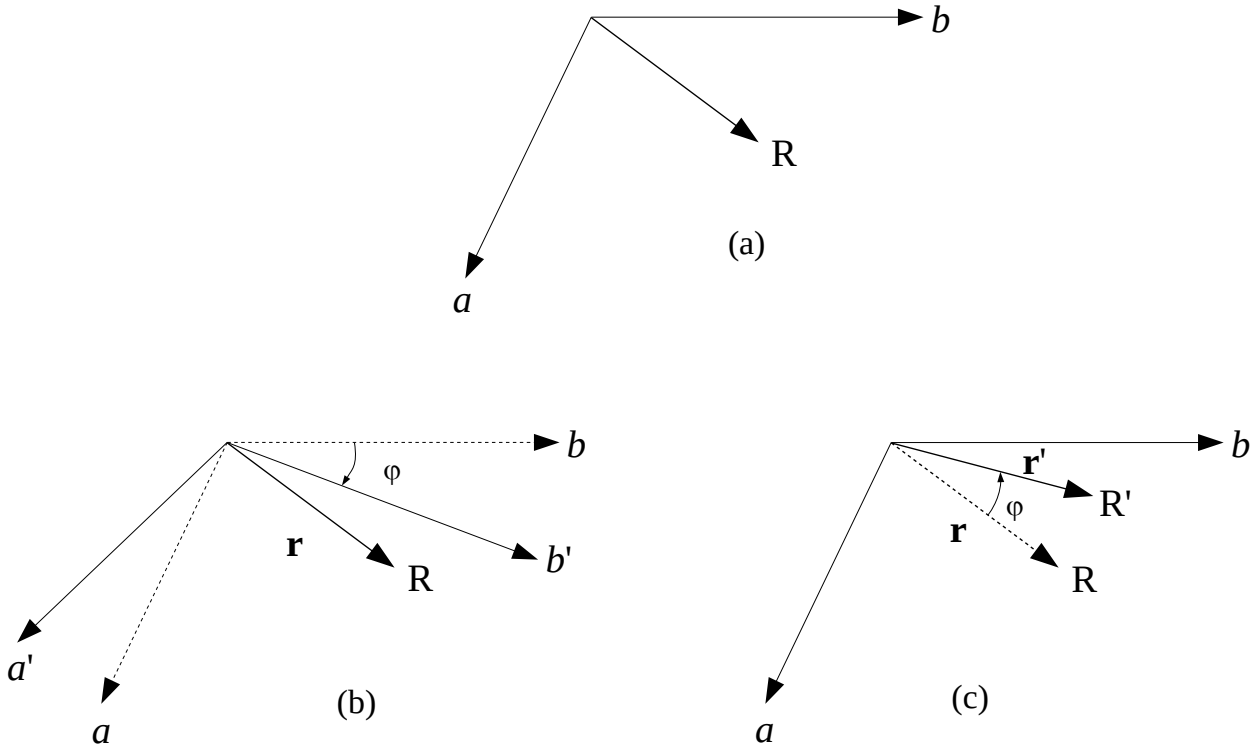


Figure 1 : la rotation d'un angle  $\varphi$  d'un vecteur  $\mathbf{r}$  par rapport à la base  $\mathbf{ab}$  peut être réalisée en tournant le vecteur de  $\varphi$  ou les vecteurs de la base de  $-\varphi$ .

## Le produit scalaire et le tenseur métrique

Le produit scalaire de deux vecteurs  $\mathbf{r}_1$  et  $\mathbf{r}_2$  correspond à la composante de  $\mathbf{r}_1$  (vecteur projeté) dans la direction de  $\mathbf{r}_2$ , fois la norme de  $\mathbf{r}_2$ . Si  $\varphi$  est l'angle entre  $\mathbf{r}_1$  et  $\mathbf{r}_2$ , le résultat est :

$$\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2 = \|\mathbf{r}_1\| \|\mathbf{r}_2\| \cos \varphi \quad (7)$$

Le produit scalaire s'exprime aussi en fonction des composantes  $x, y, z$  des deux vecteurs par rapport à une base. Si la base est orthonormale ( $\mathbf{Oijk}$ ,  $O$  = origine), on obtient le résultat bien connu :

$$\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2 = x_1 x_2 + y_1 y_2 + z_1 z_2 = \langle x_1 y_1 z_1 | x_2 y_2 z_2 \rangle \quad (8)$$

qui montre que le vecteur projeté  $\mathbf{r}_1$  est transposé.

Si la base n'est pas orthonormale mais générale ( $\mathbf{Oabc}$ ,  $O$  = origine) – évidemment nous sommes intéressés aux bases cristallographiques – les deux vecteurs doivent être exprimés par rapport à cette base. Définissons d'abord la  $\mathbf{B}$  matrice qui transforme la base orthonormale en la base cristallographique :

$$\langle \mathbf{abc} | = \langle \mathbf{ijk} | \begin{pmatrix} a_i & b_i & c_i \\ a_j & b_j & c_j \\ a_k & b_k & c_k \end{pmatrix} = \langle \mathbf{ijk} | \mathbf{B}$$

Les coordonnées, contravariantes par rapport à la base, sont transformées par la matrice inverse :

$$|xyz\rangle_{\text{abc}} = \begin{pmatrix} a_i & b_i & c_i \\ a_j & b_j & c_j \\ a_k & b_k & c_k \end{pmatrix}^{-1} |xyz\rangle_{\text{ijk}} = \mathbf{B}^{-1} |xyz\rangle_{\text{ijk}}$$

Le produit scalaire par rapport à la base **Oabc** est obtenu à l'aide de la matrice qui opère le changement de base :

$$\mathbf{r} = x\mathbf{a} + y\mathbf{b} + z\mathbf{c} = \langle \mathbf{abc} | xyz \rangle_{\text{abc}} = \langle \mathbf{abc} | \mathbf{B} \mathbf{B}^{-1} | xyz \rangle_{\text{ijk}}$$

$$\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2 = \langle x_1 y_1 z_1 |_{\text{ijk}} \mathbf{B}^{\text{T},-1} \mathbf{B}^{\text{T}} |_{\text{ijk}} \rangle \langle \mathbf{ijk} | \mathbf{B} \mathbf{B}^{-1} | x_2 y_2 z_2 \rangle_{\text{ijk}} = \langle x_1 y_1 z_1 |_{\text{abc}} \mathbf{B}^{\text{T}} \mathbf{B} | x_2 y_2 z_2 \rangle_{\text{abc}}$$

où le dernier membre est obtenu compte tenu du fait que  $|\mathbf{ijk}\rangle\langle\mathbf{ijk}|$  est la matrice identité. Le résultat est ainsi le suivant :

$$\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2 = \langle x_1 \ y_1 \ z_1 | \begin{pmatrix} a^2 & ab \cos \gamma & ac \cos \beta \\ ab \cos \gamma & b^2 & bc \cos \alpha \\ ac \cos \beta & bc \cos \alpha & c^2 \end{pmatrix} | x_2 \ y_2 \ z_2 \rangle = \langle x_1 \ y_1 \ z_1 | \mathbf{G} | x_2 \ y_2 \ z_2 \rangle \quad (9)$$

où **G** est la matrice 3×3 que l'on appelle *tenseur métrique* (ou *matrice métrique*). Si la base est orthonormale, **G** = **I** (où **I** est la matrice identité) et l'équation 9 redevient l'équation 8.

## Utilisations du tenseur métrique

### Norme d'un vecteur

Si  $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1$ , l'équation 9 nous donne la norme du vecteur :

$$\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_1 = \langle x_1 y_1 z_1 | \mathbf{G} | x_1 y_1 z_1 \rangle = \|\mathbf{r}_1\| \|\mathbf{r}_1\| \cos(\varphi = 0^\circ) = \|\mathbf{r}_1\|^2 \rightarrow \|\mathbf{r}_1\| = \sqrt{\langle \mathbf{r}_1 | \mathbf{G} | \mathbf{r}_1 \rangle} \quad (10)$$

### Angle entre deux vecteurs

On obtient l'angle entre des vecteurs  $\mathbf{r}_1$  et  $\mathbf{r}_2$  sur la base des (7) et (11) :

$$\cos \varphi = \frac{\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2}{\|\mathbf{r}_1\| \|\mathbf{r}_2\|} = \frac{\langle \mathbf{r}_1 | \mathbf{G} | \mathbf{r}_2 \rangle}{\sqrt{\langle \mathbf{r}_1 | \mathbf{G} | \mathbf{r}_1 \rangle} \sqrt{\langle \mathbf{r}_2 | \mathbf{G} | \mathbf{r}_2 \rangle}} \quad (11)$$

### Distance entre deux atomes

Soit **Oabc** une base cristallographique, et soient  $\mathbf{r}_1$  et  $\mathbf{r}_2$  les vecteurs de l'origine O à la position de deux atomes 1 et 2. Le vecteur qui relie les deux atomes est  $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$  (**Figure 4**) et la distance est  $d = \|\mathbf{r}_{12}\|$ , que l'on peut calculer sur la base de l'équation 10 :

$$\begin{aligned} d^2 = \|\mathbf{r}_{12}\|^2 &= \langle \mathbf{r}_{12} | \mathbf{G} | \mathbf{r}_{12} \rangle = \langle x_2 - x_1; y_2 - y_1; z_2 - z_1 | \mathbf{G} | x_2 - x_1; y_2 - y_1; z_2 - z_1 \rangle = \langle \Delta x \ \Delta y \ \Delta z | \mathbf{G} | \Delta x \ \Delta y \ \Delta z \rangle = \\ &= \langle \Delta x \ \Delta y \ \Delta z | \begin{bmatrix} a^2 & ab \cos \gamma & ac \cos \beta \\ ab \cos \gamma & b^2 & bc \cos \alpha \\ ac \cos \beta & bc \cos \alpha & c^2 \end{bmatrix} | \Delta x \ \Delta y \ \Delta z \rangle = \\ &= a^2(\Delta x)^2 + b^2(\Delta y)^2 + c^2(\Delta z)^2 + 2ab \cos \gamma \Delta x \Delta y + 2ac \cos \beta \Delta x \Delta z + 2bc \cos \alpha \Delta y \Delta z \end{aligned} \quad (12)$$

Cette expression est la plus générale, valable pour tous les systèmes réticulaires. Dans les systèmes plus symétriques que le triclinique le tenseur métrique a des éléments nuls, et donc la forme explicite de l'équation 12 devient plus simple.

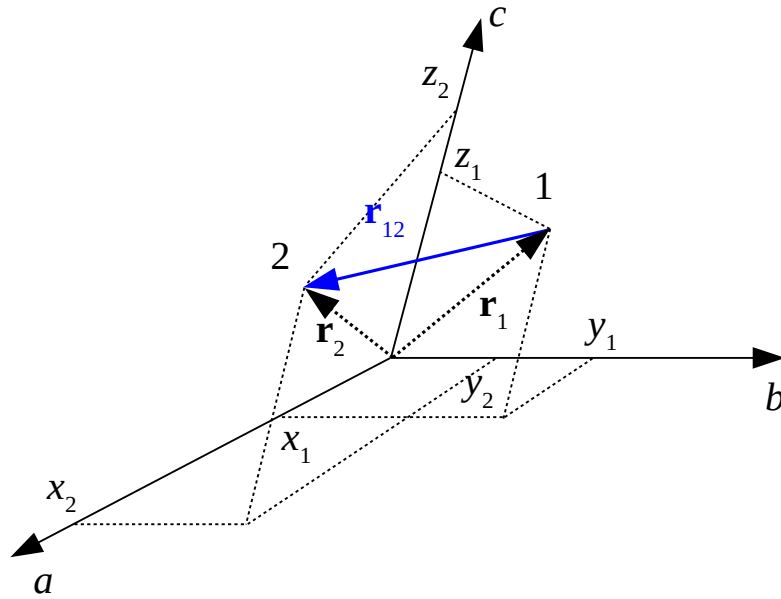


Figure 2: la distance interatomique est calculée comme norme du vecteur qui relie les deux atomes.

### Angle entre deux liaisons (trois atomes)

Soit  $Oabc$  une base cristallographique, et soient  $\mathbf{r}_1$ ,  $\mathbf{r}_2$  et  $\mathbf{r}_3$  les vecteurs de l'origine  $O$  à la position de trois atomes 1, 2 et 3. Lors que l'atome 1 forme des liaisons chimiques avec les atomes 2 et 3, les vecteurs qui correspondent à ces liaisons sont  $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$  et  $\mathbf{r}_{13} = \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1$ . L'angle entre ces deux liaisons est calculé en fonction du produit scalaire  $\mathbf{r}_{12} \cdot \mathbf{r}_{13}$  :

$$\mathbf{r}_{12} \cdot \mathbf{r}_{13} = \|\mathbf{r}_{12}\| \|\mathbf{r}_{13}\| \cos \varphi$$

$$\varphi = \cos^{-1} \frac{\mathbf{r}_{12} \cdot \mathbf{r}_{13}}{\|\mathbf{r}_{12}\| \|\mathbf{r}_{13}\|} = \cos^{-1} \frac{\langle \mathbf{r}_{12} | \mathbf{G} | \mathbf{r}_{13} \rangle}{\sqrt{\langle \mathbf{r}_{12} | \mathbf{G} | \mathbf{r}_{12} \rangle} \sqrt{\langle \mathbf{r}_{13} | \mathbf{G} | \mathbf{r}_{13} \rangle}} \quad (13)$$

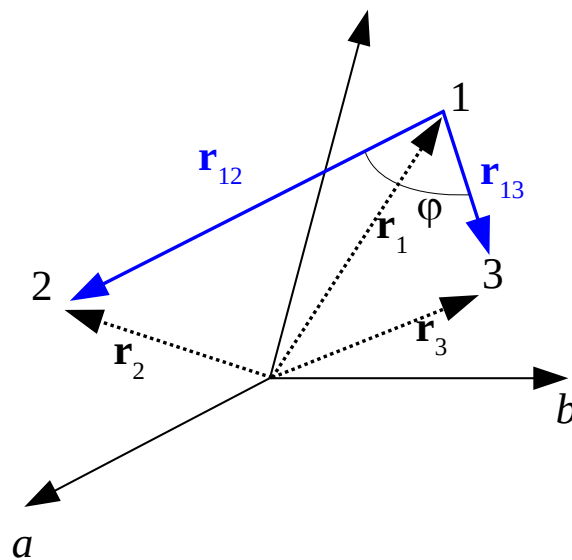


Figure 3 : l'angle entre trois atomes et calculé comme l'angle entre deux vecteurs interatomiques.

## Volume de la maille

Le volume de la maille est donné par le produit mixte des vecteurs de la base :

$$V = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c} = \|\mathbf{a}\| \|\mathbf{b}\| \|\mathbf{c}\| \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma} = \sqrt{\det(\mathbf{G})} \quad (14)$$

où « det » est le déterminant.

## Calculs dans l'espace réciproque

Le tenseur métrique  $\mathbf{G}^*$  du réseau réciproque est défini exactement comme celui de l'espace direct, en remplaçant les paramètres de maille  $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$  dans l'équation 9 par ceux de l'espace réciproque  $a^*, b^*, c^*, \alpha^*, \beta^*, \gamma^*$ . On peut également calculer la matrice inverse, puisque  $\mathbf{G}^* = \mathbf{G}^{-1}$ . Les relations entre paramètres du réseau direct et ceux du réseau réciproque sont les suivantes.

Système réticulaire	$a^*$	$b^*$	$c^*$	$\alpha^*$	$\beta^*$	$\gamma^*$
triclinique	$\frac{bc \sin \alpha}{V}$	$\frac{ac \sin \beta}{V}$	$\frac{ab \sin \gamma}{V}$	$\sin^{-1} \frac{V}{abc \sin \beta \sin \gamma}$	$\sin^{-1} \frac{V}{abc \sin \alpha \sin \gamma}$	$\sin^{-1} \frac{V}{abc \sin \alpha \sin \beta}$
monoclinique	$1/a \sin \beta$	$1/b$	$1/c \sin \beta$	$90^\circ$	$\pi - \beta$	$90^\circ$
orthorhombique	$1/a$	$1/b$	$1/c$	$90^\circ$	$90^\circ$	$90^\circ$
tétragonal	$1/a$	$= a^*$	$1/c$	$90^\circ$	$90^\circ$	$90^\circ$
rhomboédrique (axes rhomboédriques)	$\frac{\sin \alpha}{a \sqrt{1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha}}$	$= a^*$	$= a^*$	$\cos^{-1} \left( \frac{-\cos \alpha}{1 + \cos \alpha} \right)$	$= \alpha^*$	$= \alpha^*$
hexagonal / rhomboédrique (axes hexagonaux)	$2/a\sqrt{3}$	$= a^*$	$1/c$	$90^\circ$	$90^\circ$	$60^\circ$
cubique	$1/a$	$= a^*$	$= a^*$	$90^\circ$	$90^\circ$	$90^\circ$

$$V^* = 1/V; V = \|\mathbf{a}\| \|\mathbf{b}\| \|\mathbf{c}\| \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma} = \sqrt{\det(\mathbf{G})}.$$

## Norme d'un vecteur du le réseau réciproque

Soit  $Oa^*b^*c^*$  une base de l'espace réciproque et soit  $\mathbf{r}_{hkl}^*$  un vecteur du réseau réciproque ayant coordonnées  $h, k$  et  $l$ . La norme  $\|\mathbf{r}_{hkl}^*\|$  est la racine carrée du produit scalaire du vecteur avec soi-même.

$$\begin{aligned} \|\mathbf{r}_{hkl}^*\|^2 &= \langle \mathbf{r}_{hkl}^* | \mathbf{G}^* | \mathbf{r}_{hkl}^* \rangle = \langle hkl | \mathbf{G}^* | hkl \rangle = \\ &= \langle h \ k \ l | \begin{bmatrix} a^{*2} & a^*b^*\cos\gamma^* & a^*c^*\cos\beta^* \\ a^*b^*\cos\gamma^* & b^{*2} & b^*c^*\cos\alpha^* \\ a^*c^*\cos\beta^* & b^*c^*\cos\alpha^* & c^{*2} \end{bmatrix} | h \ k \ l \rangle \end{aligned} \quad (15)$$

On obtient ainsi la distance inter-planaire  $d_{hkl}$  qui est le réciproque de la norme du vecteur du réseau réciproque :

$$d_{hkl} = 1/\|\mathbf{r}_{hkl}^*\| = \sqrt{\langle hkl | \mathbf{G}^* | hkl \rangle}^{-1/2} \quad (16)$$



### Angle entre deux faces ou entre deux vecteurs du réseau réciproque

L'angle entre deux faces d'un cristal est défini comme l'angle entre les *normales* à ces faces. Mais la direction normale à une face dont les indices sont  $(hkl)$  est un vecteur du réseau réciproque de mêmes indices. Le calcul de l'angle entre deux faces se réduit donc au calcul de l'angle entre deux vecteurs de l'espace réciproque, qui consiste en appliquer l'équation 11 à cet espace :

$$\cos(h_1 \ k_1 \ l_1 | h_2 \ k_2 \ l_2) = \frac{\langle h_1 \ k_1 \ l_1 | \mathbf{G}^* | h_2 \ k_2 \ l_2 \rangle}{\sqrt{\langle h_1 \ k_1 \ l_1 | \mathbf{G}^* | h_1 \ k_1 \ l_1 \rangle} \sqrt{\langle h_2 \ k_2 \ l_2 | \mathbf{G}^* | h_2 \ k_2 \ l_2 \rangle}} \quad (17)$$

où  $\mathbf{G}^*$  est le tenseur métrique dans l'espace réciproque.

### Changement de la base cristallographique

Soient  $O\mathbf{abc}$  et  $O\mathbf{a'b'c'}$  deux bases cristallographiques dans l'espace tridimensionnel, avec l'origine  $O$  en commune. Soit  $\mathbf{P}$  la matrice qui transforme  $O\mathbf{abc}$  en  $O\mathbf{a'b'c'}$  et  $\mathbf{P}^{-1}$  la matrice inverse, qui transforme  $O\mathbf{a'b'c'}$  en  $O\mathbf{abc}$  :

$$\langle \mathbf{abc} | \mathbf{P} = \langle \mathbf{a'b'c'} \quad (18)$$

$$\langle \mathbf{a'b'c'} | \mathbf{P}^{-1} = \langle \mathbf{abc} \quad (19)$$

La matrice  $\mathbf{P}$  conserve la chiralité de la base (droite  $\rightarrow$  droite, gauche  $\rightarrow$  gauche) ou la change (droite  $\rightarrow$  gauche, gauche  $\rightarrow$  droite) selon que  $\det(\mathbf{P}) > 0$  ou  $\det(\mathbf{P}) < 0$ . Toute base cristallographique est droite : les matrices  $\mathbf{P}$  qui effectuent un changement de base cristallographique ont donc toujours  $\det(\mathbf{P}) > 0$ .

Par rapport à ces deux bases  $O\mathbf{abc}$  et  $O\mathbf{a'b'c'}$ , les vecteurs de l'origine au point  $R$  sont :

$$\mathbf{r} = \langle \mathbf{abc} | xyz \rangle ; \mathbf{r}' = \langle \mathbf{a'b'c'} | x'y'z' \rangle \quad (20)$$

Comme  $\mathbf{r}$  et  $\mathbf{r}'$  représentent le même point  $R$  dans deux bases différentes [Figure 4, projection sur le plan (001)]:

$$\mathbf{r}' = \langle \mathbf{a'b'c'} | x'y'z' \rangle = \mathbf{r} = \langle \mathbf{abc} | xyz \rangle = \langle \mathbf{abc} | \mathbf{I} | xyz \rangle = \langle \mathbf{abc} | \mathbf{PP}^{-1} | xyz \rangle \quad (21)$$

et donc:

$$\mathbf{P}^{-1} | xyz \rangle = | x'y'z' \rangle \quad (22)$$

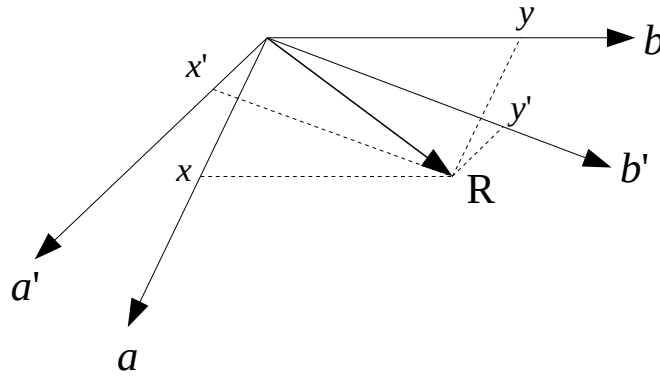


Figure 4: le vecteur qui relie point R à l'origine a composantes différentes dans des référentiels différents.

La transformation des coordonnées (et plus en général des composantes contravariantes) est effectuée par la matrice inverse de celle qui transforme la base (et plus en général les composantes covariantes).

*D'après certains textes, un seul type de matrice (fréquemment la matrice colonne ou « ket ») est utilisée pour les deux types de composantes, covariantes et contravariantes. Cette convention alternative présente au moins deux désavantages : elle ne montre pas la nature différente (covariante vs. contravariante) des vecteurs; en outre, la matrice qui transforme les composantes contravariantes est **inverse et transposée** ( $\mathbf{P}^{-t}$ ) de la matrice qui transforme les composantes covariantes.*

La relation entre les tenseurs métriques des deux bases est obtenue de manière similaire :

$$\mathbf{G}' = |\mathbf{a}'\mathbf{b}'\mathbf{c}'\rangle\langle\mathbf{a}'\mathbf{b}'\mathbf{c}'| = \mathbf{P}^t|\mathbf{a}\mathbf{b}\mathbf{c}\rangle\langle\mathbf{a}\mathbf{b}\mathbf{c}|\mathbf{P} = \mathbf{P}^t\mathbf{G}\mathbf{P} \quad (23)$$

où  $\mathbf{P}^t$  est la matrice  $\mathbf{P}$  transposée. La transformation de la base change le volume de la maille :

$$\det(\mathbf{G}') = V'^2 = \det(\mathbf{P}^t\mathbf{G}\mathbf{P}) = \det(\mathbf{P}^t)\det(\mathbf{G})\det(\mathbf{P})$$

et comme l'opération de transposition ne change pas le déterminant :

$$V'^2 = \det(\mathbf{P})^2\det(\mathbf{G}) = \det(\mathbf{P})^2V^2 \rightarrow V' = \det(\mathbf{P})V \quad (24)$$

$\det(\mathbf{P})$  donne donc la variation de volume de la maille dans les deux bases. Ceci ne change pas seulement si  $\det(\mathbf{P}) = +1$ , les cas  $\det(\mathbf{P}) = -1$  étant exclus puisque la chiralité de la base ne doit pas changer.