1 Geometry

1.1 Vecteurs de base réseau direct

$\mathbf{a}_1$ $\mathbf{a}_2$ $\mathbf{a}_3$

1.2 Vecteurs de base réseau réciproque

On construit les vecteur de base du réseau réciproque de manière à ce que les $\mathbf{b}_i$ soient orthogonaux aux $\mathbf{a}_j$ pour $i \neq j$.

$$\mathbf{b}_i = \frac{\pi}{V}\epsilon_{ijk}\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k$$

où on divise par deux car on compte $\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k - \mathbf{a}_k \times \mathbf{a}_j$.

1.3 Produit scalaire espace direct

Le produits sclaire entre deux vecteurs de base du réseau cristalin implique les longueurs et l'angle mutuelle,

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j = a_i a_j \cos\alpha_{ij}.$$

1.4 Produit scalaire espace reciproque

Le produit scalaire de deux vecteurs de la base du réseau réciproque peut être exprimé à l'aide de produits des vecteurs de base du réseau direct,

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{b}_j = \left(\frac{\pi}{V}\right)^2 \epsilon_{imn}\epsilon_{jpq}\big(\mathbf{a}_m \times \mathbf{a}_n\big) \cdot \big(\mathbf{a}_p \times \mathbf{a}_q\big).$$

On utilise l'identité vectorielle suivante,

$$\big(\mathbf{a}_m \times \mathbf{a}_n\big) \cdot \big(\mathbf{a}_p \times \mathbf{a}_q\big) = \big(\mathbf{a}_m \cdot \mathbf{a}_p\big)\big(\mathbf{a}_n \cdot \mathbf{a}_q\big) - \big(\mathbf{a}_m \cdot \mathbf{a}_q\big)\big(\mathbf{a}_n \cdot \mathbf{a}_p\big)$$

pour exprimé le résultat en fonction de produit scalaire uniquement,

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{b}_j = \left(\frac{\pi}{V}\right)^2 \epsilon_{imn}\epsilon_{jpq}\Big[\big(\mathbf{a}_m \cdot \mathbf{a}_p\big)\big(\mathbf{a}_n \cdot \mathbf{a}_q\big) - \big(\mathbf{a}_m \cdot \mathbf{a}_q\big)\big(\mathbf{a}_n \cdot \mathbf{a}_p\big)\Big].$$

À l'aide de 1.3, on obtient donc,

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{b}_j = \left(\frac{\pi}{V}\right)^2 \epsilon_{imn}\epsilon_{jpq} a_m a_n a_p a_q \big[\cos\alpha_{mp}\cos\alpha_{nq} - \cos\alpha_{mq}\cos\alpha_{np}\big].$$

1.5 Produit scalaire croisé

Par construction le produit scalaire entre un vecteur de la base directe et un vecteur de la base réciproque est,

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

1.6 Produit vectoriel espace direct

La défínion des vecteurs de base du réseau réciproque contient le produit vectoriel des vecteurs de base du réseaud direct. Pour extraire, le résultat du produit on multiplie simplement par le tenseur de Levi-Civita,

$$\begin{aligned}
\mathbf{b}_i\epsilon_{imn} &= \frac{\pi}{V}\epsilon_{imn}\epsilon_{ijk}\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k \\
&= \frac{\pi}{V}\left(\delta_{mj}\delta_{nk} - \delta_{mk}\delta_{nj}\right)\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k \\
&= \frac{\pi}{V}(\mathbf{a}_m \times \mathbf{a}_n - \mathbf{a}_n \times \mathbf{a}_m) \\
&= \frac{2\pi}{V}\mathbf{a}_m \times \mathbf{a}_n
\end{aligned}$$

On peut alors isoler le résultat,

$$\mathbf{a}_m \times \mathbf{a}_n = \frac{V}{2\pi}\epsilon_{imn}\mathbf{b}_i$$

1.7 Produit vectoriel espace réciproque

Le produit vectorielle entre les vecteurs de base du réseau réciproque prend la forme d'un produit quadruple

$$\mathbf{b}_i \times \mathbf{b}_l = \left(\frac{\pi}{V}\right)^2 \epsilon_{ijk}\epsilon_{lmn}\left(\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k\right) \times (\mathbf{a}_m \times \mathbf{a}_n)$$

qui peut être réexprimé sous la forme du produit triple.

$$\left(\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k\right) \times (\mathbf{a}_m \times \mathbf{a}_n) = \left[\mathbf{a}_j, \mathbf{a}_k, \mathbf{a}_n\right]\mathbf{a}_m - \left[\mathbf{a}_j, \mathbf{a}_k, \mathbf{a}_m\right]\mathbf{a}_n$$

Le produit triple des vecteurs de base du réseau cristallin donne le volume de la maille élémentaire. Ce produit peut être fait dans les deux sens.

$$\left[\mathbf{a}_j, \mathbf{a}_k, \mathbf{a}_n\right] = V\epsilon_{jkn} - V\epsilon_{nkj}$$

Cela nous permet d'écrire le produit vectorielle de deux vecteur de base du réseau réciproque comme une combinaison linéaire des vecteur de base du réseau cristlin.

$$\mathbf{b}_i \times \mathbf{b}_l = \frac{(2\pi)^2}{V}\epsilon_{ilm}\mathbf{a}_m$$

1.8 Produit vectoriel croisé

$$\begin{aligned}
\mathbf{a}_i \times \mathbf{b}_j &= \frac{\pi}{V}\epsilon_{jmn}\mathbf{a}_i \times (\mathbf{a}_m \times \mathbf{a}_n) \\
&= \frac{\pi}{V}\epsilon_{jmn}[(\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_n)\mathbf{a}_m - (\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_m)\mathbf{a}_n] \\
&= \frac{2\pi}{V}\epsilon_{jmn}(\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_n)\mathbf{a}_m \\
&= \frac{2\pi}{V}\epsilon_{jmn}a_i a_n \cos\alpha_{in}\mathbf{a}_m
\end{aligned}$$

1.9 Volume cellule unité

Par définition le volume de la cellule unité est,

$$V = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$$

Il est plus pratique d'exprimer le carré de ce volume,

$$\begin{aligned}
V^2 &= (\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3))(\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)) \\
&= \det\left\{ \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_3 \\ \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3 \\ \mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_3 \end{pmatrix} \right\} \\
&= \det\left\{ \begin{pmatrix} a_1^2 & a_1 a_2 \cos \alpha_{12} & a_1 a_3 \cos \alpha_{13} \\ a_1 a_2 \cos \alpha_{12} & a_2^2 & a_2 a_3 \cos \alpha_{23} \\ a_1 a_3 \cos \alpha_{13} & a_2 a_3 \cos \alpha_{23} & a_3^2 \end{pmatrix} \right\} \\
&= a_1^2 a_2^2 a_3^2 (1 + 2\cos\alpha_{12} \cos\alpha_{23} \cos\alpha_{13} - \cos^2\alpha_{12} - \cos^2\alpha_{23} - \cos^2\alpha_{13})
\end{aligned}$$

1.10 Vecteur du réseau direct

Les vecteurs du réseau direct peuvent être construits grâce au trio d'entier pqr :

$$\mathbf{R}_{pqr} = p\mathbf{a_1} + q\mathbf{a_2} + r\mathbf{a_3}.$$

1.11 Vecteur du réseau réciproque

Les vecteurs du réseau réciproque peuvent être construits grâce au trio d'entier hkl :

$$\mathbf{G}_{hkl} = h\mathbf{b_1} + k\mathbf{b_2} + l\mathbf{b_3}.$$

1.12 Produit scalaire direct

$$\mathbf{R}_{pqr} \cdot \mathbf{R}_{p'q'r'} = pp'\mathbf{a_1} \cdot \mathbf{a_1} + qq'\mathbf{a_2} \cdot \mathbf{a_2} + rr'\mathbf{a_3} \cdot \mathbf{a_3} + (pq' + qp')\mathbf{a_1} \cdot \mathbf{a_2} + (qr' + rq')\mathbf{a_2} \cdot \mathbf{a_3} + (rp' + pr')\mathbf{a_3} \cdot \mathbf{a_1}.$$

1.13 Produit scalaire réciproque

Le produit scalaire entre deux de ces vecteur s'exprime, en générale, de la manière suivante,

$$\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{G}_{h'k'l'} = hh'\mathbf{b_1} \cdot \mathbf{b_1} + kk'\mathbf{b_2} \cdot \mathbf{b_2} + ll'\mathbf{b_3} \cdot \mathbf{b_3} + (hk' + kh')\mathbf{b_1} \cdot \mathbf{b_2} + (kl' + lk')\mathbf{b_2} \cdot \mathbf{b_3} + (lh' + hl')\mathbf{b_3} \cdot \mathbf{b_1}.$$

1.14 Produit scalaire croisé

$$\mathbf{R}_{pqr} \cdot \mathbf{G}_{hkl} = ph + qk + rl$$

1.15 Produit vectoriel direct

$$\begin{aligned}
\mathbf{R} \times \mathbf{R}' &= p_i p'_j \mathbf{a}_i \times \mathbf{a}_j \\
&= \frac{V}{2\pi} \epsilon_{ijk} p_i p'_j \mathbf{b}_k
\end{aligned}$$

1.16 Produit vectoriel réciproque

$$\begin{aligned}
\mathbf{G} \times \mathbf{G}' &= h_i h'_j \mathbf{b}_i \times \mathbf{b}_j \\
&= \frac{(2\pi)^2}{V} \epsilon_{ijk} h_i h'_j \mathbf{a}_k
\end{aligned}$$

1.17 Produit vectoriel croisé

$$\begin{aligned}
\mathbf{G} \times \mathbf{R} &= h_i p_j \mathbf{b}_i \times \mathbf{a}_j \\
&= \frac{2\pi}{V} \epsilon_{jmn} h_i p_j a_i a_n \cos \alpha_{in} \mathbf{a}_m \\
&= \frac{2\pi}{V} \epsilon_{jmn} h_i p_j (\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_n) \mathbf{a}_m
\end{aligned}$$

1.18 Angle entre deux vecteur du réseau réciproque

Grâce au produit sclaire, on peut être l'angle entre ces deux vecteurs.

$$\cos \theta_{hkl,h'k'l'} = \frac{\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{G}_{h'k'l'}}{|\mathbf{G}_{hkl}||\mathbf{G}_{h'k'l'}|} = \frac{\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{G}_{h'k'l'}}{(\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{G}_{hkl})^{1/2} (\mathbf{G}_{h'k'l'} \cdot \mathbf{G}_{h'k'l'})^{1/2}}$$

1.19 Projection sur un vecteur du réseau réciproque

Projeté sur $\mathbf{G}_{HKL}$,

$$(\mathbf{G}_{hkl})_{\parallel \mathbf{G}_{HKL}} = \frac{\mathbf{G}_{HKL} \cdot \mathbf{G}_{hkl}}{\mathbf{G}_{HKL} \cdot \mathbf{G}_{HKL}} \mathbf{G}_{HKL}$$

Projeté sur le plan,

$$(\mathbf{G}_{hkl})_{\perp \mathbf{G}_{HKL}} = \mathbf{G}_{hkl} - \frac{\mathbf{G}_{HKL} \cdot \mathbf{G}_{hkl}}{\mathbf{G}_{HKL} \cdot \mathbf{G}_{HKL}} \mathbf{G}_{HKL}$$

Produit de phase $\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}$

$$\mathbf{G} = h_i \mathbf{b}_i \qquad\qquad \mathbf{r} = \eta_j \mathbf{a}_j$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{G} \cdot \mathbf{r} &= h_i \eta_j \mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j \\
&= 2\pi h_i \eta_j
\end{aligned}$$

2 Espace

On peut définir la position d'un réseau dans l'espace en stipulant la direction d'un vecteur du réseau réciproque selon $\hat{\mathbf{z}}$ et un vecteur du réseau cristalin selon $\hat{\mathbf{x}}$:

$$\mathbf{G}^{(z)} = G^{(z)}\hat{\mathbf{z}} \quad \text{et} \quad \mathbf{R}^{(x)} = R^{(x)}\hat{\mathbf{x}}$$

où

$$\mathbf{R}_{pqr} = p\mathbf{a_1} + q\mathbf{a_2} + r\mathbf{a_3}$$

Ces deux vecteur doivent être orthogonaux et donc

$$\mathbf{G}^{(z)} \cdot \mathbf{R}^{(x)} = 2\pi\Big(h^{(z)}p^{(x)} + k^{(z)}q^{(x)} + l^{(z)}r^{(x)}\Big) = G^{(z)}R^{(x)}\hat{\mathbf{z}} \cdot \hat{\mathbf{x}} = 0$$

On peut obtenir les composantes selon $\hat{\mathbf{z}}$ et $\hat{\mathbf{x}}$ d'un vecteur du réseau réciproque dans cette espace en le projetant sur $\mathbf{G}^{(z)}$, $\mathbf{R}^{(x)}$.

$$\mathbf{G}_{hkl} \cdot \hat{\mathbf{z}} = \frac{\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{G}^{(z)}}{\left|\mathbf{G}^{(z)}\right|} \qquad \mathbf{G}_{hkl} \cdot \hat{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{R}^{(x)}}{\left|\mathbf{R}^{(x)}\right|}$$

On obtient la direction de $\hat{\mathbf{y}}$ à partir de $\mathbf{G}^{(z)}$, $\mathbf{R}^{(x)}$ de la manière suivante,

$$\hat{\mathbf{y}} = \hat{\mathbf{z}} \times \hat{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{G}^{(z)} \times \mathbf{R}^{(x)}}{\left|\mathbf{G}^{(z)}\right|\left|\mathbf{R}^{(x)}\right|}$$

On peut donc écrire la rpojection selon $\hat{\mathbf{y}}$ grâce à un produit triple. On doit alors être en mesure d'effectuer un produit vectorielle entre deux vecteurs du réseau réciproque.

$$\mathbf{G}_{hkl} \cdot \hat{\mathbf{y}} = \frac{\mathbf{G}_{hkl} \cdot \left(\mathbf{G}^{(z)} \times \mathbf{R}^{(x)}\right)}{\left|\mathbf{G}^{(z)}\right|\left|\mathbf{R}^{(x)}\right|} = \frac{\mathbf{R}^{(x)} \cdot \left(\mathbf{G}_{hkl} \times \mathbf{G}^{(z)}\right)}{\left|\mathbf{G}^{(z)}\right|\left|\mathbf{R}^{(x)}\right|}$$

Pour ce faire il est plus pratique d'écrire ce produit grâce à une notation indicielle

$$\mathbf{G} = h_i\mathbf{b}_i \qquad \mathbf{G} \times \mathbf{G}' = h_i h'_l \mathbf{b}_i \times \mathbf{b}_l$$

On arrive à une conclusion similaire pour deux vecteurs du réseau réciproque.

$$\mathbf{G} \times \mathbf{G}' = \frac{4\pi^2}{V}\epsilon_{ilm} h_i h'_l \mathbf{a}_m$$

Les coeifficient devant $\mathbf{a}_m$ peuvent donc être considérés comme des composante pqr.

Les composante d'un vecteur $\mathbf{R}_{pqr}$ se trouve de manière similaire. D'abord pour les composante selon $\hat{\mathbf{z}}$ et $\hat{\mathbf{x}}$.

$$\mathbf{R}_{pqr} \cdot \hat{\mathbf{z}} = \frac{\mathbf{R}_{pqr} \cdot \mathbf{G}^{(z)}}{\left|\mathbf{G}^{(z)}\right|} \qquad \mathbf{R}_{pqr} \cdot \hat{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{R}_{pqr} \cdot \mathbf{R}^{(x)}}{\left|\mathbf{G}^{(x)}\right|}$$

La projection selon $\hat{\mathbf{y}}$ fait également intervenir un produit vectorielle, mais entre des vecteurs du réseau direct.

$$\mathbf{R}_{pqr} \cdot \hat{\mathbf{y}} = \frac{\mathbf{R}_{pqr} \cdot \left(\mathbf{G}^{(z)} \times \mathbf{R}^{(x)}\right)}{\left|\mathbf{G}^{(z)}\right|\left|\mathbf{R}^{(x)}\right|} = \frac{\mathbf{G}^{(z)} \cdot \left(\mathbf{R}^{(x)} \times \mathbf{R}_{pqr}\right)}{\left|\mathbf{G}^{(z)}\right|\left|\mathbf{R}^{(x)}\right|}$$

$$\mathbf{R} = p_i\mathbf{a}_i \qquad \mathbf{R} \times \mathbf{R}' = p_i p'_l \mathbf{a}_i \times \mathbf{a}_l$$

$$\mathbf{R} \times \mathbf{R}' = \frac{V}{2\pi}\epsilon_{ilk} p_i p'_l \mathbf{b}_k$$