LSM.4.051
CRISTALLOGRAPHIE - DIFFRACTION
TD N° 1 : RESEAUX DIRECT ET RECIPROQUE

RESEAU DIRECT

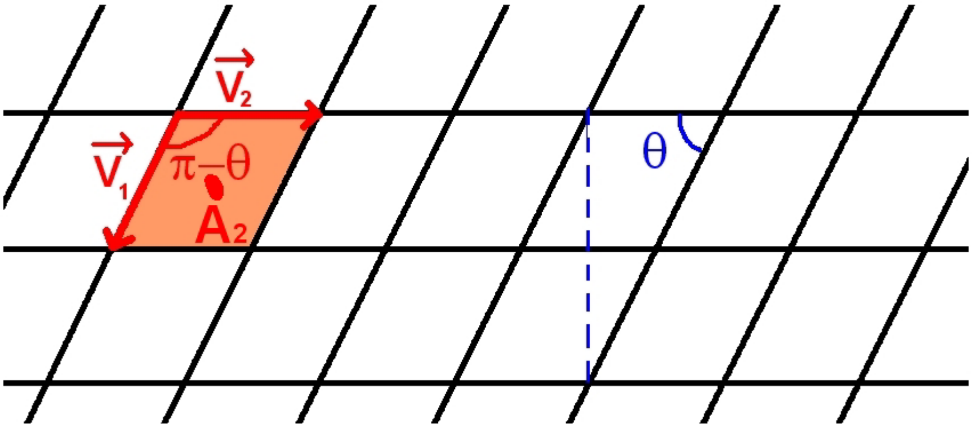
L'objectif est de se familiariser avec les notions de plans et rangées réticulaires et de maille conventionnelle ou réduite.

Exercice 1 : Généralités sur les réseaux

1er exemple : Cas à 2 dimensions : réseau défini par ($\vec{v}_1$ et $\vec{v}_2$, θ ***avec*** $\theta = Ar\cos\left(\frac{-v_2}{2v_1}\right)$ ***)***

1) *Dessinez le réseau bâti sur les vecteurs* $\vec{v}_1$ *et* $\vec{v}_2$ *. Calculez de 2 façons la surface de la maille élémentaire définie par* $\vec{v}_1$ *et* $\vec{v}_2$ *. Quels éléments de symétrie possède t'elle ?*

$\theta = Ar\cos\left(\frac{-v_2}{2v_1}\right)$ ***==> 2 v_1 cosθ = - v_2***



Surface : $\vec{S} = \vec{v}_1 \wedge \vec{v}_2$ (cf. LSM3.053, définition du produit vectoriel)

$S = v_1 v_2 \sin(\pi - \theta)$ soit $S = v_1 v_2 \cos\theta$

Aire Algébrique S<>0 !!!

ou $\vec{S} = \sqrt{Det(\vec{\vec{g}})}$ (cf. LSM3.051, Tenseur métrique)

avec $Det(\vec{\vec{g}}) = \begin{vmatrix} v_1^2 & v_1 v_2 \cos(\pi-\theta) \\ v_1 v_2 \cos(\pi-\theta) & v_2^2 \end{vmatrix}$

soit : $Det(\vec{\vec{g}}) = v_1^2 v_2^2 - v_1^2 v_2^2 \cos^2(\pi-\theta) = v_1^2 v_2^2 (1 - \cos^2(\pi-\theta))$

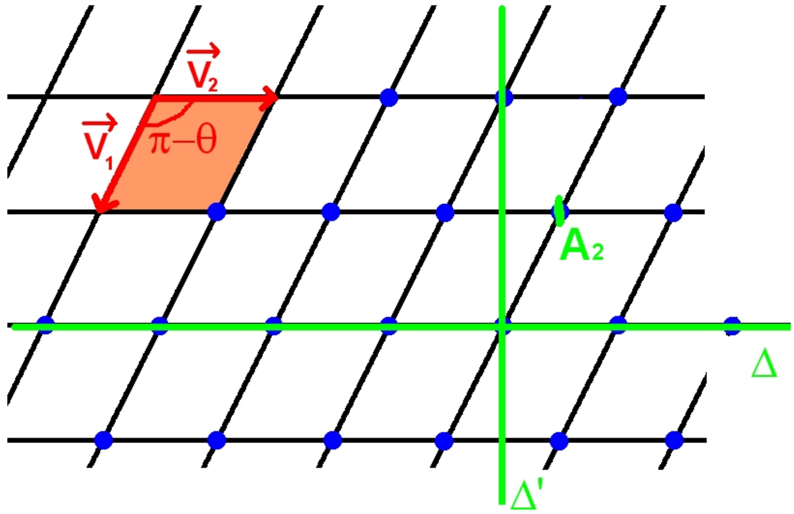
soit : $Det(\vec{\vec{g}}) = v_1^2 v_2^2 \sin^2(\pi-\theta) = v_1^2 v_2^2 \cos^2\theta$

et donc : $S = v_1 v_2 \cos\theta$

et finalement : $S = v_1 v_2 \cos\left[Ar\cos\left(\frac{-v_2}{2v_1}\right)\right]$ $S = -(v_2)^2/2$

Eléments de symétrie de la maille ($\vec{v}_1$, $\vec{v}_2$) : Axe A_2.

2) *Quels éléments de symétrie possède le réseau ? Trouvez 2 vecteurs $\vec{a}$, $\vec{b}$ permettant de définir une maille élémentaire (conventionnelle) possédant toute la symétrie du réseau. Possède t'elle des noeuds supplémentaires, à quelles coordonnées ? Quelle est sa multiplicité ?*

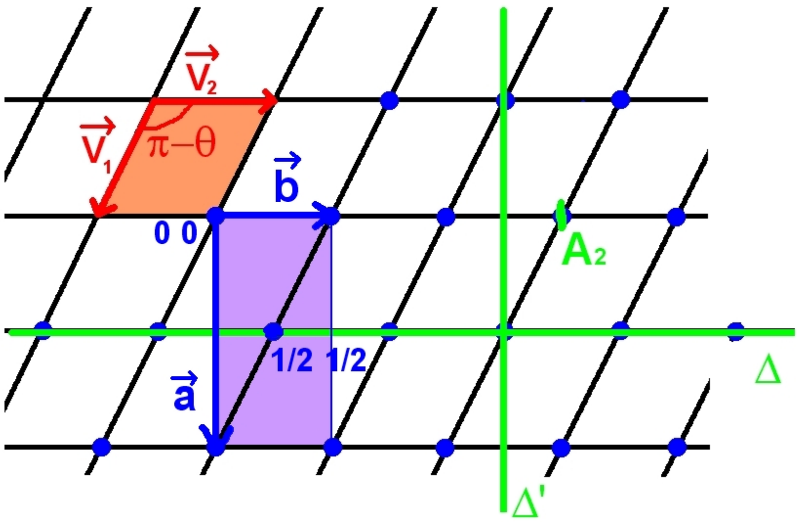


Eléments de symétrie du réseau : Axe A_2 + Droites de symétrie Δ et Δ'.

==> Symétrie du réseau supérieure à la maille ($\vec{v}_1$, $\vec{v}_2$)

==> maille ($\vec{v}_1$, $\vec{v}_2$) non conventionnelle.

==> maille conventionnelle ($\vec{a}$, $\vec{b}$) à rechercher.



Maille conventionnelle : ($\vec{a}$, $\vec{b}$) : ($\vec{a} = 2\vec{v}_1 + \vec{v}_2$, $\vec{b} = \vec{v}_2$)

La maille contient 1 noeud supplémentaire en 1/2 1/2

Calcul de la multiplicité :

on a 4 noeuds appartenant chacun à 4 mailles ("coins") : 4*1/4

on a 1 noeud central en 1/2 1/2 appartenant à 1 maille : 1*1/4

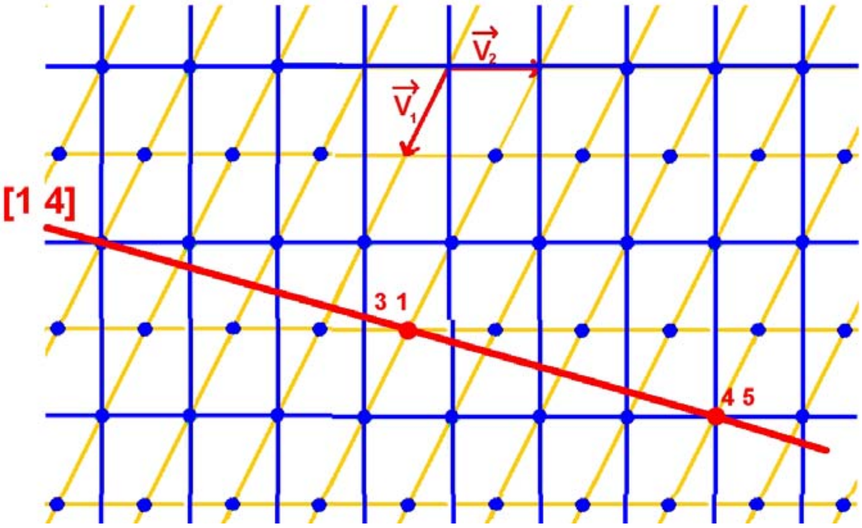
Multiplicité : M = 4*1/4 + 1*1/1 = 2 ==> Maille double.

3) *On considère la base non conventionnelle. Placez sur le schéma du réseau les noeuds M et N de coordonnées 3 1 et 4 5 respectivement. Quelle rangée réticulaire est définie à partir de ces 2 noeuds ? Comment se note la famille de rangées réticulaires correspondante ? Quel est son paramètre ?*

On choisit tout d'abord une origine O pour le réseau.

On place les points M et N par lesquels passe une rangée réticulaire.

Dans la base non conventionnelle, le vecteur reliant 2 noeuds successifs sur cette droite a pour coordonnées [4 1], d'où la notation de la rangée réticulaire.

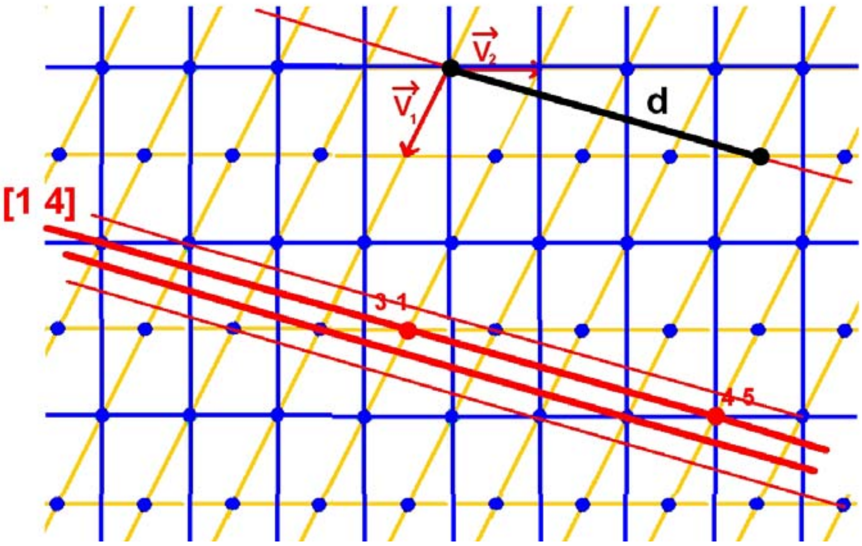


Toutes les droites parallèles à la rangée réticulaire définie par M et N appartiennent à la même famille de rangées réticulaires, repérée par les mêmes indices [1 4].

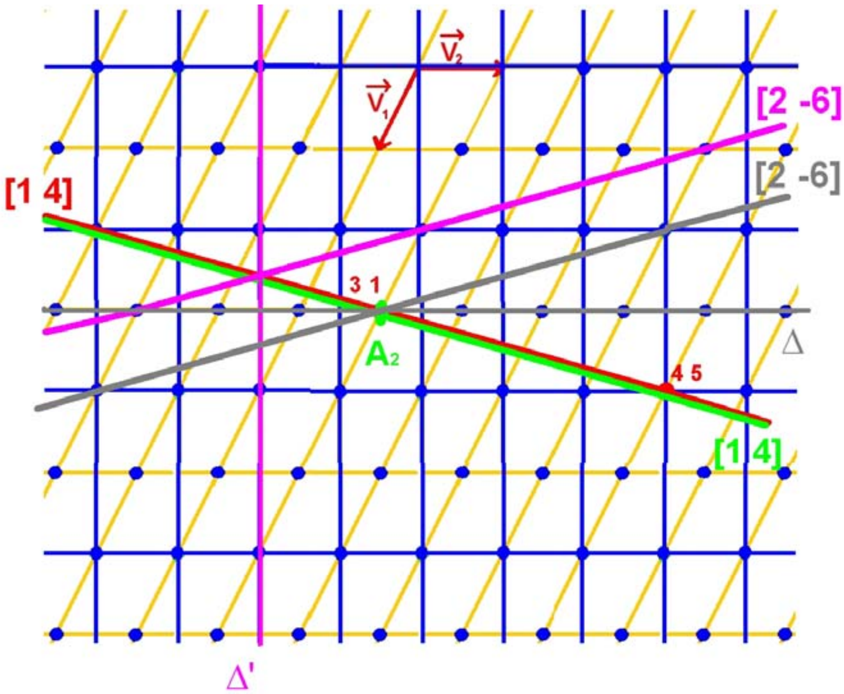
Le paramètre de la rangée réticulaire est la distance d entre 2 noeuds successifs :

$$d = \sqrt{(1\vec{v}_1 + 4\vec{v}_2)\bullet(1\vec{v}_1 + 4\vec{v}_2)} \qquad \Leftrightarrow \qquad d = \sqrt{v_1^{\ 2} + 16v_1^{\ 2} + 8\vec{v}_1 \bullet \vec{v}_2}$$

$$\Leftrightarrow \qquad d = \sqrt{v_1^{\ 2} + 16v_1^{\ 2} + 8v_1v_2\cos(\pi - \theta)}$$



4) *Comment se transforme cette famille de rangées réticulaires par les différents opérateurs de symétrie du réseau ? Quelles sont les notations des familles équivalentes ?*



---

5) *Exprimez les vecteurs de base conventionnels $\vec{a}$, $\vec{b}$ en fonction des vecteurs de base non conventionnels et déduisez-en la matrice de passage P permettant de passer de $<\vec{v}_1, \vec{v}_2|$ à $<\vec{a}, \vec{b}|$. Calculez les coordonnées de M et N dans la base conventionnelle (vérifiez graphiquement le résultat).*

On a : $\vec{a} = 2\vec{v}_1 + \vec{v}_2$ ***et*** $\vec{b} = 0\vec{v}_1 + 1\vec{v}_2$ $\quad M = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix}$, et $N = \begin{pmatrix} 4 \\ 5 \end{pmatrix}$

d'où : $P = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ et $P^{-1} = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ -1/2 & 1 \end{pmatrix}$ *(cf. LSM 3.053)*

et $M' = P^{-1}M \Leftrightarrow M' = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ -1/2 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3/2 \\ -1/2 \end{pmatrix}$ et $N' = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ -1/2 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 4 \\ 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}$

---

6) *Dans la base conventionnelle $\vec{a}$, $\vec{b}$ les opérations de symétrie du réseau s'écrivent sous une forme matricielle simple :*

$$A_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{-1} \end{pmatrix},\ A_2 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{pmatrix},\ A_3 = \begin{pmatrix} \mathbf{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{pmatrix}\ et\ A_4 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{-1} \end{pmatrix}$$

Identifiez les opérations de symétrie correspondantes.

Quelles sont leurs matrices représentatives dans la base non conventionnelle $<\vec{v}_1, \vec{v}_2|$? Retrouvez les coordonnées des familles de rangées réticulaires équivalentes par symétrie à celle définie par M et N.

$A_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{-1} \end{pmatrix}$: Axe A_2, $A_2 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{pmatrix}$: Identité

$A_3 = \begin{pmatrix} \mathbf{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{pmatrix}$: Droite de symétrie Δ $A_4 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{-1} \end{pmatrix}$: Droite de symétrie Δ'

Dans la base non conventionnelle, on a : $A' = P^{-1}AP$

$A'_1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$: Axe A_2 $A'_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$: Identité

$A'_3 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$: Droite de symétrie Δ $A'_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -2 & -1 \end{pmatrix}$: Droite de symétrie Δ'

Dans la base conventionnelle, la rangée réticulaire MN a comme indices :
$MN = \begin{pmatrix} 3/2 \\ -1/2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/2 \\ -7/2 \end{pmatrix}$ => [-1/2 -7/2]

Ses images par les différentes opérations de symétrie sont :

A_2 : $\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -1/2 \\ -7/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 7/2 \end{pmatrix}$ => [1/2 7/2] =[-1/2 -7/2]

I : $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -1/2 \\ -7/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/2 \\ -7/2 \end{pmatrix}$ => [-1/2 -7/2]

Droite Δ : $\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -1/2 \\ -7/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ -7/2 \end{pmatrix}$ => [1/2 -7/2]

Droite Δ' : $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -1/2 \\ -7/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/2 \\ 7/2 \end{pmatrix}$ => [-1/2 7/2] (=[1/2 -7/2])

2^ème^ exemple : Cas à 3 dimensions : réseau défini par ($\vec{v}_1$, $\vec{v}_2$ et $\vec{v}_3$, $v_1 = v_2$ et ($\vec{v}_1 \wedge \vec{v}_2$)≠90°***)***

Mêmes questions que précédemment, mais remplacer :

$\vec{v}_1$, $\vec{v}_2$	→	$\vec{v}_1$, $\vec{v}_2$, $\vec{v}_3$
$\vec{a}$, $\vec{b}$	→	$\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$
surface de la maille	→	volume de la maille
rangée réticulaire	→	plan réticulaire
paramètre de rangée	→	distance inter-réticulaire

Coordonnées du point M : 2 3 0
Coordonnées du point N : 1 3 1

Exercice 2 : Changement de base

1

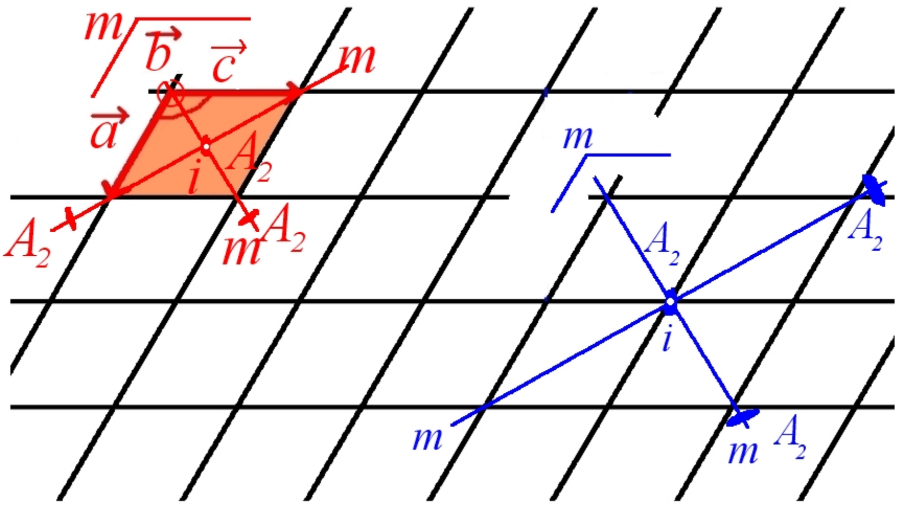
1er exemple : La mordénite

La mordénite est une zéolithe synthétique utilisée en prétrochimie. L'examen optique d'un petit cristal suggère une symétrie orthorhombique mais une mesure de diffraction X sur un cristal indique une maille primitive de paramètres de maille :

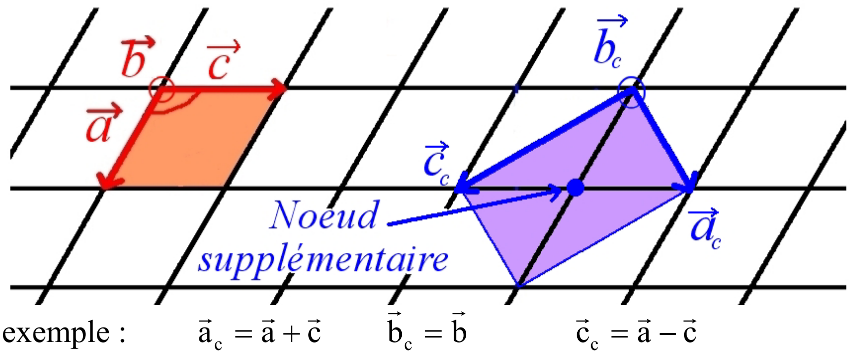
a = 13,61(1)Å, b=7,50(1)Å, c =13,61(1)Å, α=90,0(1)° β= 96,9(1)° γ =90,0(1)°

Est-il possible de réconcilier la symétrie déduite de l'observation avec la mesure de diffraction X par changement de base et introduction d'un mode de réseau non primitif ?

La morphologie reflète la symétrie du réseau : on s'attend donc que le réseau ait une symétrie orthorhombique holoèdre A_2/M A_2/M A_2/M -1. On recherche sur un dessin du réseau les éléments de symétrie correspondants et ceux de la maille proposée.



On voit que la maille proposée a une symétrie A2/M A2/M A2/M i plus élevée que la symétrie d'une maille monoclinique usuelle. La symétrie du réseau est également A2/M A2/M A2/M i. La maille possède toute la symétrie du réseau, mais elle n'a pas d'angle β droit. Les axes de la maille conventionnelle se retrouvent facilement sachant que par convention $\vec{a}_c$, $\vec{b}_c$, $\vec{c}_c$ sont parallèles aux axes A2.



On trouve par exemple : $\vec{a}_c = \vec{a} + \vec{c}$ $\vec{b}_c = \vec{b}$ $\vec{c}_c = \vec{a} - \vec{c}$

La maille est centrée B et ses paramètres valent :

$a_c = \sqrt{(\vec{a}+\vec{c}).(\vec{a}+\vec{c})} = \sqrt{a^2 + c^2 + 2ac\cos\beta}$ ***a = 18,05 Å***

$b_c = b$ ***b = 7,50 Å***

$c_c = \sqrt{(\vec{a}-\vec{c}).(\vec{a}-\vec{c})} = \sqrt{a^2 + c^2 - 2ac\cos\beta}$ ***c = 20,37 Å***

$2^{ème}$ exemple : La zéolithe A

La zéolithe A est une zéolithe synthétique utilisée, entre autres, pour l'adoucissement de l'eau et l'élaboration de lessives. Les cristaux de zéolithe A sont clairement cubiques mais les mesures de diffraction X indiquent une maille primitive de paramètres de maille :

a =17,61(1)Å, b = 17,62(1), c = 17,63(1)Å, α = 59,8(3)°, β = 59,9(3), γ = 60,0(3)°

Quelle est la maille conventionnelle de la zéolithe A ?

Aux erreurs de mesure près, la maille semble être rhomboédrique avec $a = b = c$ et $\alpha = \beta = \gamma$. Les angles prennent une valeur de 60° remarquable.

On trouve par exemple : $\vec{a}_c = \vec{a} + \vec{b} - \vec{c}$ $\vec{b}_c = \vec{b} + \vec{c} - \vec{a}$ $\vec{c}_c = \vec{c} + \vec{a} - \vec{b}$

La maille est cubique centrée F et ses paramètres valent :

$$a_c = b_c = c_c = \sqrt{(\vec{a} + \vec{b} - \vec{c})(\vec{a} + \vec{b} - \vec{c})} = \sqrt{3a^2 + 6a^2 \cos\gamma} \qquad \boldsymbol{a_c = 24{,}92\ \text{Å}}$$

$3^{ème}$ exemple : Composé organique $C_{10}\,H_{10}\,N_2\,O_2\,S$

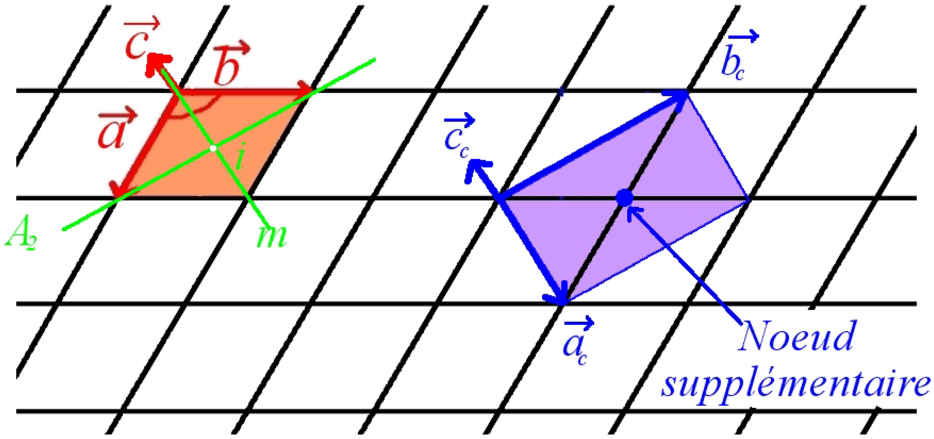
Le composé $C_{10}\,H_{10}\,N_2\,O_2\,S$ est indexé avec comme paramètres de maille :

a=8,166(1)Å, b=8,166(1)Å, c=9,669(1)Å, α=104,55(1)°, β=104,55(1)°, γ=110,30(1)°

Quelle est la maille conventionnelle de ce composé ?

On remarque que $a = b$ et $\alpha = \beta$, égalités remarquables pour une maille triclinique.

Si on dessine le réseau dans le plan ($\vec{a}, \vec{b}$), on voit apparaître des éléments de symétrie A_2 et M suggérant une symétrie monoclinique.



Les axes de la maille conventionnelle se retrouvent facilement sachant que par convention $\vec{b}_c$ ***est*** parallèle à l'axe A2, et $\vec{a}_c$ et $\vec{c}_c$ sont dans le plan du miroir.

On trouve par exemple : $\vec{a}_c = \vec{a} + \vec{b}$ $\vec{b}_c = -\vec{a} + \vec{b}$ $\vec{c}_c = \vec{c}$

La maille est centrée C et ses paramètres valent :

$$a_c = \sqrt{(\vec{a} + \vec{b})(\vec{a} + \vec{b})} = \sqrt{a^2 + b^2 + 2ab\cos\gamma} \qquad \boldsymbol{a_c = 9{,}33\ \text{Å}}$$

$$b_c = \sqrt{(-\vec{a} + \vec{b})(-\vec{a} + \vec{b})} = \sqrt{a^2 + b^2 - 2ab\cos\gamma} \qquad \boldsymbol{b_c = 13{,}40}$$

$$c_c = c \qquad \boldsymbol{c_c = 9{,}67\ \text{Å}}$$

$$\beta_c = \mathrm{Arcos}\left(\frac{\vec{a}_c.\vec{c}_c}{a_c\ c_c}\right) = \mathrm{Arcos}\left(\frac{(\vec{a} + \vec{b})\vec{c}}{a_c\ c_c}\right) = \mathrm{Arcos}\left(\frac{ac\cos\beta + bc\cos\alpha}{a_c\ c_c}\right) \qquad \beta_c = 116{,}08°$$

RESEAU RECIPROQUE

L'objectif est de se familiariser avec la notion de réseau réciproque et son utilisation en cristallographie (morphologie des cristaux) et en diffraction (détermination du mode de réseau de Bravais et calcul de distances inter-réticulaires).

1^er^ exercice : Réseaux réciproques des réseaux de Bravais *aP, mP, oP, tP, hP,* et *cP.*

1) A partir des paramètres de maille a, b, c, et α, β, γ, déterminez l'expression des paramètres réciproques a, b*, c*, α*, β* et γ* des réseaux* ***aP, mP,oP, tP, hP, et cP.***
(Utilisez au choix la méthode vectorielle ou celle basée sur le tenseur métrique)

Méthode matricielle :
On évalue les paramètres de maille réciproques à partir du tenseur $g^* = g^{-1}$:

$$a^{*2} = g_{11}^* \qquad b^{*2} = g_{22}^* \qquad c^{*2} = g_{33}^* \qquad \text{puis} \qquad \alpha^* = \mathrm{Ar}\cos\left(\frac{\vec{b}^*.\vec{c}^*}{b^*\,c^*}\right) \ldots$$

On calcule d'abord le tenseur métrique : $$\vec{\vec{g}} = \begin{pmatrix} a^2 & ab\cos\gamma & ac\cos\beta \\ ab\cos\gamma & b^2 & bc\cos\alpha \\ ac\cos\beta & bc\cos\alpha & c^2 \end{pmatrix}$$

On inverse de façon à obtenir g* :
1) Calcul du Déterminant

$$\begin{aligned}\mathrm{Det}\left(\vec{\vec{g}}\right) &= a^2b^2c^2 + a^2b^2c^2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma + a^2b^2c^2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma \\ &\quad - a^2b^2c^2\cos^2\alpha - a^2b^2c^2\cos^2\beta - a^2b^2c^2\cos^2\gamma \\ \mathrm{Det}\left(\vec{\vec{g}}\right) &= a^2b^2c^2\left(1 + 2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma - \cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma\right) = V^2\end{aligned}$$

2) Matrice des mineurs

$$\vec{\vec{M}} = \begin{pmatrix} b^2c^2\left(1-\cos^2\alpha\right) & abc^2\left(\cos\gamma - \cos\alpha\cos\beta\right) & ab^2c\left(\cos\alpha\cos\gamma - \cos\beta\right) \\ abc^2\left(\cos\gamma - \cos\alpha\cos\beta\right) & a^2c^2\left(1-\cos^2\beta\right) & a^2bc\left(\cos\alpha - \cos\beta\cos\gamma\right) \\ ab^2c\left(\cos\alpha\cos\gamma - \cos\beta\right) & a^2bc\left(\cos\alpha - \cos\beta\cos\gamma\right) & a^2b^2\left(1-\cos^2\gamma\right) \end{pmatrix}$$

3) Matrice des cofacteurs

$$\vec{\vec{C}} = \begin{pmatrix} b^2c^2\left(1-\cos^2\alpha\right) & -abc^2\left(\cos\gamma - \cos\alpha\cos\beta\right) & ab^2c\left(\cos\alpha\cos\gamma - \cos\beta\right) \\ -abc^2\left(\cos\gamma - \cos\alpha\cos\beta\right) & a^2c^2\left(1-\cos^2\beta\right) & -a^2bc\left(\cos\alpha - \cos\beta\cos\gamma\right) \\ ab^2c\left(\cos\alpha\cos\gamma - \cos\beta\right) & -a^2bc\left(\cos\alpha - \cos\beta\cos\gamma\right) & a^2b^2\left(1-\cos^2\gamma\right) \end{pmatrix}$$ 4)

Transposée de la matrice des cofacteurs

$${}^t\vec{\vec{C}} = \begin{pmatrix} b^2c^2\left(1-\cos^2\alpha\right) & -abc^2\left(\cos\gamma - \cos\alpha\cos\beta\right) & ab^2c\left(\cos\alpha\cos\gamma - \cos\beta\right) \\ -abc^2\left(\cos\gamma - \cos\alpha\cos\beta\right) & a^2c^2\left(1-\cos^2\beta\right) & -a^2bc\left(\cos\alpha - \cos\beta\cos\gamma\right) \\ ab^2c\left(\cos\alpha\cos\gamma - \cos\beta\right) & -a^2bc\left(\cos\alpha - \cos\beta\cos\gamma\right) & a^2b^2\left(1-\cos^2\gamma\right) \end{pmatrix}$$

5) Matrice g*

$$\vec{\vec{g}}^* = \frac{1}{V}\begin{pmatrix} b^2c^2\left(1-\cos^2\alpha\right) & -abc^2\left(\cos\gamma - \cos\alpha\cos\beta\right) & ab^2c\left(\cos\alpha\cos\gamma - \cos\beta\right) \\ -abc^2\left(\cos\gamma - \cos\alpha\cos\beta\right) & a^2c^2\left(1-\cos^2\beta\right) & -a^2bc\left(\cos\alpha - \cos\beta\cos\gamma\right) \\ ab^2c\left(\cos\alpha\cos\gamma - \cos\beta\right) & -a^2bc\left(\cos\alpha - \cos\beta\cos\gamma\right) & a^2b^2\left(1-\cos^2\gamma\right) \end{pmatrix}$$

6) Identification des paramètres

$$a^{*2} = \frac{b^2c^2(1-\cos^2\alpha)}{a^2b^2c^2(-2+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma+\sin^2\alpha+\sin^2\beta+\sin^2\gamma)}$$

$$a^{*2} = \frac{(1-\cos^2\alpha)}{a^2(-2+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma+\sin^2\alpha+\sin^2\beta+\sin^2\gamma)}$$

avec $1-\cos^2\alpha = \sin^2\alpha$

$$a^* = \frac{1}{\sqrt{-2+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma+\sin^2\alpha+\sin^2\beta+\sin^2\gamma}}\frac{\sin\alpha}{a}$$

De même :

$$b^* = \frac{1}{\sqrt{-2+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma+\sin^2\alpha+\sin^2\beta+\sin^2\gamma}}\frac{\sin\beta}{b}$$

$$c^* = \frac{1}{\sqrt{-2+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma+\sin^2\alpha+\sin^2\beta+\sin^2\gamma}}\frac{\sin\gamma}{c}$$

On trouve ensuite que :

$$g_{12}^* = \frac{-abc^2(\cos\gamma-\cos\alpha\cos\beta)}{V} = a^*b^*\cos\gamma^* \quad \text{d'où} \quad \cos\gamma^* = \frac{(\cos\alpha\cos\beta-\cos\gamma)}{\sin\alpha\sin\beta}$$

De même : $\cos\beta^* = \dfrac{(\cos\alpha\cos\gamma-\cos\beta)}{\sin\alpha\sin\gamma}$ $\qquad \cos\alpha^* = \dfrac{(\cos\beta\cos\gamma-\cos\alpha)}{\sin\beta\sin\gamma}$

Réseau *aP* :

$$a^* = \frac{1}{\sqrt{-2+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma+\sin^2\alpha+\sin^2\beta+\sin^2\gamma}}\frac{\sin\alpha}{a} \qquad \cos\alpha^* = \frac{(\cos\beta\cos\gamma-\cos\alpha)}{\sin\beta\sin\gamma}$$

$$b^* = \frac{1}{\sqrt{-2+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma+\sin^2\alpha+\sin^2\beta+\sin^2\gamma}}\frac{\sin\beta}{b} \qquad \cos\beta^* = \frac{(\cos\alpha\cos\gamma-\cos\beta)}{\sin\alpha\sin\gamma}$$

$$c^* = \frac{1}{\sqrt{-2+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma+\sin^2\alpha+\sin^2\beta+\sin^2\gamma}}\frac{\sin\gamma}{c} \qquad \cos\gamma^* = \frac{(\cos\alpha\cos\beta-\cos\gamma)}{\sin\alpha\sin\beta}$$

Réseau *mP* : $\alpha = \gamma = 90°$

$$a^* = \frac{1}{\sqrt{-2+1+\sin^2\beta+1}}\frac{1}{a} = \frac{1}{a\sin\beta} \qquad \cos\alpha^* = 0 \Rightarrow \alpha^* = \pi/2$$

$$b^* = \frac{1}{\sqrt{-2+1+\sin^2\beta+1}}\frac{\sin\beta}{b} = \frac{1}{b} \qquad \cos\beta^* = -\cos\beta \Rightarrow \beta^* = \pi-\beta$$

$$c^* = \frac{1}{\sqrt{-2+1+\sin^2\beta+1}}\frac{1}{c} = \frac{1}{c\sin\beta} \qquad \cos\gamma^* = 0 \Rightarrow \gamma^* = \pi/2$$

Réseau *oP* : $\alpha = \beta = \gamma = 90°$

$$a^* = \frac{1}{a} \qquad \cos\alpha^* = 0 \Rightarrow \alpha^* = \pi/2$$

$$b^* = \frac{1}{b} \qquad \cos\beta^* = 0 \Rightarrow \beta^* = \pi/2$$

$c^* = \frac{1}{c}$ $\qquad\qquad \cos\gamma^* = 0 \Rightarrow \gamma^* = \pi/2$

Réseau *tP* : α = β= γ = 90° et *a* = *b*

$a^* = \frac{1}{a}$ $\qquad\qquad \cos\alpha^* = 0 \Rightarrow \alpha^* = \pi/2$

$b^* = \frac{1}{b} = \frac{1}{a} = a^*$ $\qquad\qquad \cos\beta^* = 0 \Rightarrow \beta^* = \pi/2$

$c^* = \frac{1}{c}$ $\qquad\qquad \cos\gamma^* = 0 \Rightarrow \gamma^* = \pi/2$

Réseau *cP* : α = β= γ = 90° et *a* = *b*= *c*

$a^* = \frac{1}{a}$ $\qquad\qquad \cos\alpha^* = 0 \Rightarrow \alpha^* = \pi/2$

$b^* = \frac{1}{b} = \frac{1}{a} = a^*$ $\qquad\qquad \cos\beta^* = 0 \Rightarrow \beta^* = \pi/2$

$c^* = \frac{1}{c} = \frac{1}{a} = a^*$ $\qquad\qquad \cos\gamma^* = 0 \Rightarrow \gamma^* = \pi/2$

Réseau *hP* : α =β = 90°, γ = 120°

$a^* = \frac{1}{a\sin\gamma} = \frac{2}{\sqrt{3}\,a}$ $\qquad\qquad \cos\alpha^* = 0 \Rightarrow \alpha^* = \pi/2$

$b^* = \frac{1}{b\sin\gamma} = \frac{2}{\sqrt{3}\,a}$ $\qquad\qquad \cos\beta^* = 0 \Rightarrow \beta^* = \pi/2$

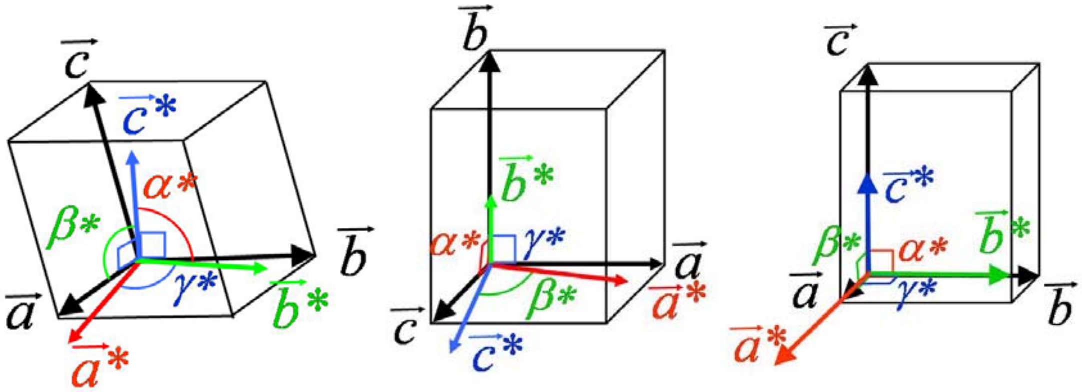
$c^* = \frac{1}{\sqrt{-2+1+\sin^2\gamma+1}}\frac{\sin\gamma}{c} = \frac{1}{c}$ $\qquad\qquad \cos\gamma^* = -\cos\gamma \Rightarrow \gamma^* = \pi - \gamma = 60°$

Remarque : la méthode géométrique est très difficilement applicable pour *aP*.

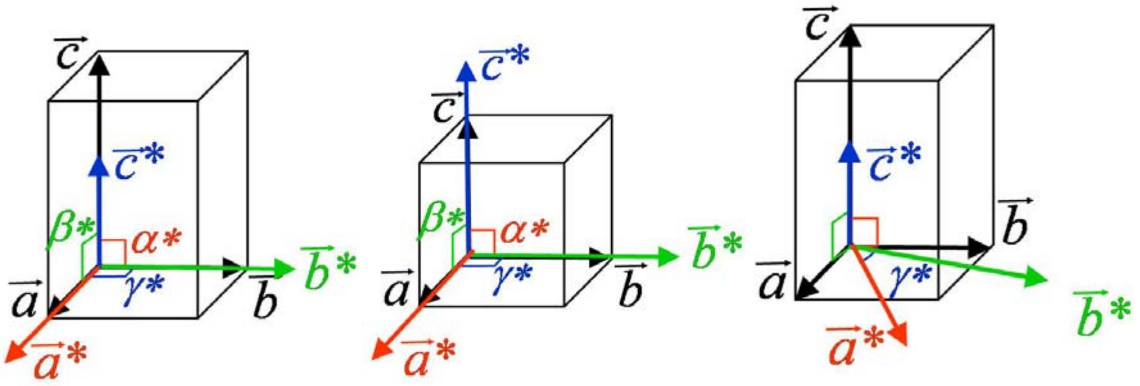
On a $\vec{a}^* = \frac{\vec{b}\wedge\vec{c}}{V}$, $\vec{b}^* = \frac{\vec{c}\wedge\vec{a}}{V}$, $\vec{c}^* = \frac{\vec{a}\wedge\vec{b}}{V}$ => $\vec{a}^* \perp \vec{b}$ et $\vec{a}^* \perp \vec{c}$ et permutations.

---

2) *Représentez sur un même dessin les réseaux direct et réciproque des réseaux* ***aP, mP, oP, tP, hP, et cP.***



Réseaux direct et réciproque Triclinique, Monoclinique et Orthorhombique



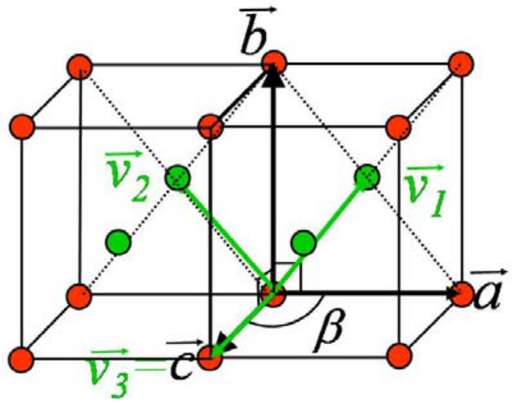
Réseaux direct et réciproque quadratique, Cubique et Hexagonal

---

2ème exercice : Réseaux réciproques de réseaux C, I, F.

Retrouvez les propriétés (métrique et absences de mode de réseau) des réseaux réciproques
- *d'un réseau direct mC*
- *d'un réseau direct cI*
- *d'un réseau direct oF.*

<u>Réseau monoclinique C centré : On a un noeud supplémentaire en (1/2 1/2 0).</u>



1) On exprime les vecteurs de la maille primitive ($\vec{v}_1$, $\vec{v}_2$, $\vec{v}_3$) en fonction de ceux de la maille conventionnelle ($\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$) : $\vec{v}_1 = \frac{\vec{a}}{2} + \frac{\vec{b}}{2}$, $\vec{v}_2 = -\frac{\vec{a}}{2} + \frac{\vec{b}}{2}$, $\vec{v}_3 = \vec{c}$

2) On calcule les paramètres de maille réciproque conventionnelle en fonction de la maille directe ainsi que le volume V de la maille:

Réseau *monoclinique* : $\alpha = \gamma = 90°$

$\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \wedge \vec{c}}{V}$ $\quad a^* = \frac{1}{a \sin\beta}$ $\qquad \cos\alpha^* = 0 \Rightarrow \alpha^* = \pi/2$

$b^* = \frac{1}{b}$ $\qquad \cos\beta^* = -\cos\beta \Rightarrow \beta^* = \pi - \beta$

$c^* = \frac{1}{c \sin\beta}$ $\qquad \cos\gamma^* = 0 \Rightarrow \gamma^* = \pi/2$

Volume : $\quad V = \vec{b} \bullet (\vec{c} \wedge \vec{a}) = bca \sin\beta$

3) On exprime les paramètres de maille réciproque primitive en fonction de la maille directe conventionnelle, après avoir calculé le volume *v* de la maille primitive :

Volume : $$v = \vec{v}_2 \bullet (\vec{v}_3 \wedge \vec{v}_1) = \left(-\frac{\vec{a}}{2}+\frac{\vec{b}}{2}\right) \bullet \left(\vec{c} \wedge \left(\frac{\vec{a}}{2}+\frac{\vec{b}}{2}\right)\right)$$

$$v = \left(-\frac{\vec{a}}{2}+\frac{\vec{b}}{2}\right) \bullet \left(\vec{c} \wedge \frac{\vec{a}}{2}\right) + \left(-\frac{\vec{a}}{2}+\frac{\vec{b}}{2}\right) \bullet \left(\vec{c} \wedge \frac{\vec{b}}{2}\right)$$

$$v = -\frac{\vec{a}}{2} \bullet \left(\vec{c} \wedge \frac{\vec{a}}{2}\right) + \frac{\vec{b}}{2} \bullet \left(\vec{c} \wedge \frac{\vec{a}}{2}\right) - \frac{\vec{a}}{2} \bullet \left(\vec{c} \wedge \frac{\vec{b}}{2}\right) + \frac{\vec{b}}{2} \bullet \left(\vec{c} \wedge \frac{\vec{b}}{2}\right)$$

$$v = 0 + \frac{1}{4}\vec{b} \bullet (\vec{c} \wedge \vec{a}) - \frac{1}{4}\vec{a} \bullet (\vec{c} \wedge \vec{b}) + 0$$

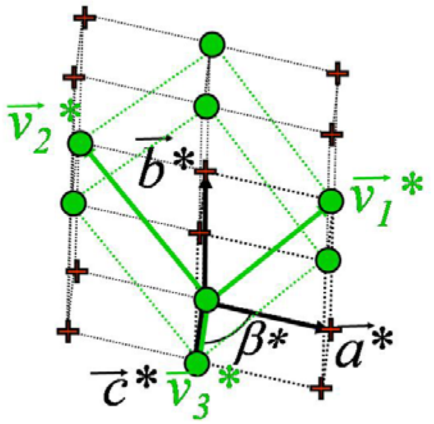
$$v = \frac{1}{4}\vec{b} \bullet (\vec{c} \wedge \vec{a}) + \frac{1}{4}\vec{a} \bullet (\vec{b} \wedge \vec{c}) = \frac{1}{2}V$$

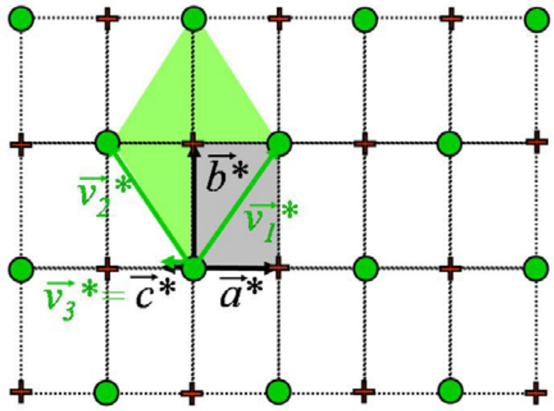
$$\vec{v}_1^{\,*} = \frac{\vec{v}_2 \wedge \vec{v}_3}{v} = \frac{\frac{-\vec{a}+\vec{b}}{2} \wedge \vec{c}}{V/2} = \vec{b}^* + \vec{a}^*$$

$$\vec{v}_2^{\,*} = \frac{\vec{v}_3 \wedge \vec{v}_1}{v} = \frac{\vec{c} \wedge \frac{\vec{a}+\vec{b}}{2}}{V/2} = \vec{b}^* - \vec{a}^*$$

$$\vec{v}_3^{\,*} = \frac{\vec{v}_1 \wedge \vec{v}_2}{v} = \frac{\frac{\vec{a}+\vec{b}}{2} \wedge \frac{-\vec{a}+\vec{b}}{2}}{V/2} = \frac{\frac{2(\vec{a} \wedge \vec{b})}{4}}{V/2} = \frac{\vec{a} \wedge \vec{b}}{V} = \vec{c}^*$$

4) Les noeuds "réels" du réseau réciproque sont ceux associés à la maille primitive.



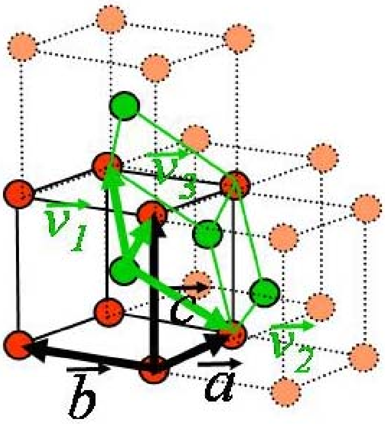


Leurs coordonnées sont : $H\vec{v}_3^{\,*} + K\vec{v}_2^{\,*} + L\vec{v}_1^{\,*}$ (H, K et L entiers)

soit : $(H-K)\vec{a}^* + (H+K)\vec{b}^* + L\vec{c}^* \Leftrightarrow h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$

Si H = 2n (pair) et K=2m (pair) ==> h = 2(m+n) pair et k = 2(m-n) pair
Si H = 2n (pair) et K=2m+1 (impair) ==> h = 2(m+n)+1 impair et k = 2(m-n)+1 impair
Si H = 2n+1 (impair) et K=2m (pair) ==> h = 2(m+n)+1 impair et k = 2(m-n)+1 impair
Si H = 2n+1 (impair) et K=2m+1 (impair) ==> h = 2(m+n)+2 pair et k = 2(m-n)+2 pair
d'où la règle d'absence de mode de réseau C (maille conventionnelle):
Les noeuds présents sont ceux tels que : h et k sont pairs ou bien h et k sont impairs
<==> Les noeuds absents sont ceux tels que : h+k est impair.

Réseau cubique centré I : On a un noeud supplémentaire en (1/2 1/2 1/2).



1) $\vec{v}_1 = \frac{\vec{a}}{2} + \frac{\vec{b}}{2} + \frac{\vec{c}}{2}$, $\vec{v}_2 = \frac{\vec{a}}{2} - \frac{\vec{b}}{2} - \frac{\vec{c}}{2}$, $\vec{v}_3 = -\frac{\vec{a}}{2} - \frac{\vec{b}}{2} + \frac{\vec{c}}{2}$

2) $a^* = \frac{1}{a}$ $\quad \alpha^* = \pi/2$ $\quad b^* = \frac{1}{b}$ $\quad \beta^* = \pi/2$ $\quad c^* = \frac{1}{c}$ $\quad \gamma^* = \pi/2$

$a^* = b^* = c^*$ $\quad$ Volume : $\quad V = \vec{a} \bullet (\vec{b} \wedge \vec{c}) = abc = a^3$

3) Volume : $\quad v = \vec{v}_1 \bullet (\vec{v}_2 \wedge \vec{v}_3) = \left(\frac{\vec{a}}{2} + \frac{\vec{b}}{2} + \frac{\vec{c}}{2}\right) \bullet \left(\left(\frac{\vec{a}}{2} - \frac{\vec{b}}{2} - \frac{\vec{c}}{2}\right) \wedge \left(-\frac{\vec{a}}{2} - \frac{\vec{b}}{2} + \frac{\vec{c}}{2}\right)\right)$

$$v = \frac{\vec{a}}{2} \bullet \left(-\frac{\vec{b}}{2} \wedge \frac{\vec{c}}{2} + \frac{\vec{c}}{2} \wedge \frac{\vec{b}}{2}\right) + \frac{\vec{b}}{2} \bullet \left(\frac{\vec{a}}{2} \wedge \frac{\vec{c}}{2} + \frac{\vec{c}}{2} \wedge \frac{\vec{a}}{2}\right) + \frac{\vec{c}}{2} \bullet \left(-\frac{\vec{a}}{2} \wedge \frac{\vec{b}}{2} + \frac{\vec{c}}{2} \wedge \frac{\vec{a}}{2}\right)$$

$$v = \frac{2\vec{a}}{2} \bullet \left(\frac{\vec{c}}{2} \wedge \frac{\vec{b}}{2}\right) + 0 + \frac{2\vec{c}}{2} \bullet \left(\frac{\vec{b}}{2} \wedge \frac{\vec{a}}{2}\right) = -\frac{\vec{a}}{4} \bullet (\vec{b} \wedge \vec{c}) - \frac{\vec{c}}{4} \bullet (\vec{a} \wedge \vec{b}) = -\frac{V}{2}$$

Remarque v < 0 (volume algébrique)

$$\vec{v}_1^{\,*} = \frac{\vec{v}_2 \wedge \vec{v}_3}{v} = \frac{\frac{\vec{a} - \vec{b} - \vec{c}}{2} \wedge \frac{-\vec{a} - \vec{b} + \vec{c}}{2}}{-V/2} = \vec{a}^* - \vec{c}^*$$

$$\vec{v}_2^{\,*} = \frac{\vec{v}_3 \wedge \vec{v}_1}{v} = \frac{\frac{-\vec{a} - \vec{b} + \vec{c}}{2} \wedge \frac{\vec{a} + \vec{b} + \vec{c}}{2}}{-V/2} = \vec{a}^* - \vec{b}^*$$

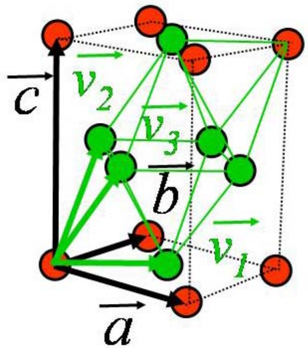
$$\vec{v}_3^{\,*} = \frac{\vec{v}_1 \wedge \vec{v}_2}{v} = \frac{\frac{\vec{a} + \vec{b} + \vec{c}}{2} \wedge \frac{\vec{a} - \vec{b} - \vec{c}}{2}}{-V/2} = \vec{c}^* - \vec{b}^*$$

4) Coordonnées des noeuds : $\quad H\vec{v}_3^{\,*} + K\vec{v}_2^{\,*} + L\vec{v}_1^{\,*}$ $\quad$ (H, K et L entiers)

soit : $\quad (H + K)\vec{a}^* + (-K - L)\vec{b}^* + (-L + H)\vec{c}^* \Leftrightarrow h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$

Si H = 2n, K=2m, L=2p $\quad$ => h, k et l pairs
Si H = 2n, K=2m et L=2p +1 $\quad$ => h pair, et k et l impairs (et permutation circulaire)
Si H = 2n, K=2m+1 et L=2p +1 $\quad$ => k pair, et h et l impairs (et permutation circulaire)
Si H = 2n+1, K=2m+1 et L=2p +1 $\quad$ => h, k et l pairs.
d'où la règle d'absence de mode de réseau I (maille conventionnelle):
Les noeuds présents sont ceux tels que : (h + k + l) est pair.
<==> Les noeuds absents sont ceux tels que : (h + k + l) est impair.

Réseau orthorhombique F : 3 noeuds supplémentaires en (0 1/2 1/2), (1/2 0 1/2) et (1/2 1/2 0).



1) $\vec{v}_1 = \frac{\vec{a}}{2} + \frac{\vec{b}}{2}$, $\vec{v}_2 = \frac{\vec{b}}{2} + \frac{\vec{c}}{2}$, $\vec{v}_3 = \frac{\vec{a}}{2} + \frac{\vec{c}}{2}$

2) $a^* = \frac{1}{a}$ $\alpha^* = \pi/2$ $b^* = \frac{1}{b}$ $\beta^* = \pi/2$ $c^* = \frac{1}{c}$ $\gamma^* = \pi/2$

Volume : $V = \vec{a} \bullet (\vec{b} \wedge \vec{c}) = abc$

3) Volume : $v = \vec{v}_1 \bullet (\vec{v}_2 \wedge \vec{v}_3) = \left(\frac{\vec{a}}{2} + \frac{\vec{b}}{2}\right) \bullet \left(\left(\frac{\vec{b}}{2} + \frac{\vec{c}}{2}\right) \wedge \left(\frac{\vec{a}}{2} + \frac{\vec{c}}{2}\right)\right)$

$$v = \frac{\vec{a}}{2} \bullet \left(\frac{\vec{b}}{2} \wedge \frac{\vec{c}}{2}\right) + \frac{\vec{b}}{2} \bullet \left(\frac{\vec{c}}{2} \wedge \frac{\vec{a}}{2}\right) \qquad v = \frac{2\vec{a}}{2} \bullet \left(\frac{\vec{b}}{2} \wedge \frac{\vec{c}}{2}\right) = \frac{V}{4}$$

$$\vec{v}_1^{\,*} = \frac{\vec{v}_2 \wedge \vec{v}_3}{v} = \frac{\frac{\vec{b}+\vec{c}}{2} \wedge \frac{\vec{a}+\vec{c}}{2}}{V/4} = \vec{a}^* + \vec{b}^* - \vec{c}^*$$

$$\vec{v}_2^{\,*} = \frac{\vec{v}_3 \wedge \vec{v}_1}{v} = \frac{\frac{\vec{a}+\vec{c}}{2} \wedge \frac{\vec{a}+\vec{b}}{2}}{V/4} = -\vec{a}^* + \vec{b}^* + \vec{c}^*$$

$$\vec{v}_3^{\,*} = \frac{\vec{v}_1 \wedge \vec{v}_2}{v} = \frac{\frac{\vec{a}+\vec{b}}{2} \wedge \frac{\vec{b}+\vec{c}}{2}}{-V/2} = \vec{a}^* - \vec{b}^* + \vec{c}^*$$

4) Coordonnées des noeuds : $H\vec{v}_3^{\,*} + K\vec{v}_2^{\,*} + L\vec{v}_1^{\,*}$ (H, K et L entiers)

soit : $(H - K + L)\vec{a}^* + (-H + K + L)\vec{b}^* + (H + K - L)\vec{c}^* \Leftrightarrow h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$

Si H = 2n, K=2m, L=2p => h, k et l pairs
Si H = 2n, K=2m et L=2p +1 => h, k et l impairs (et permutation circulaire)
Si H = 2n, K=2m+1 et L=2p +1 => h, k et l pairs (et permutation circulaire)
Si H = 2n+1, K=2m+1 et L=2p +1 => h, k et l impairs.
d'où la règle d'absence de mode de réseau F (maille conventionnelle):
Les noeuds présents sont ceux tels que : (h + k) et (k + l) et (l + h) est pair.
<==> Les noeuds absents sont ceux tels que : (h + k) ou (k + l) ou (l + h) est impair.

3ème exercice : "Visualisation" des absences de mode de réseau : Cliche de Précession obtenu en diffraction des rayons X - Identification du réseau de Bravais.

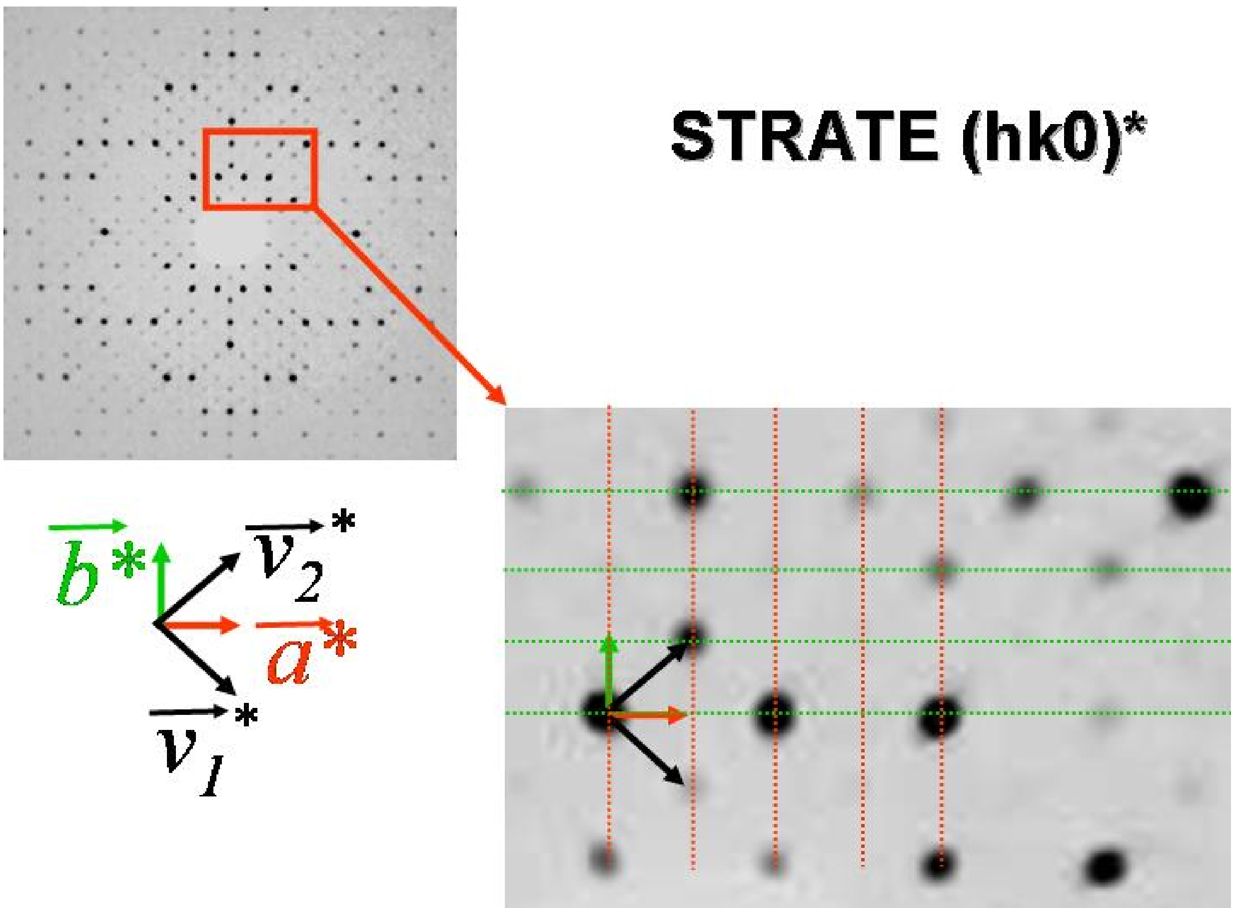
La méthode de précession est une technique de diffraction permettant d'obtenir une image non déformée du réseau réciproque d'un cristal sur un détecteur bidimensionnel (plaque photographique ou "image plate").

On a enregistré de telles images pour un cristal inconnu et on dispose ainsi d'une "cartographie" des noeuds de son réseau réciproque" (cf. cours).
A partir de ces images, retrouver :

- *l'orientation de $\vec{a}^*$, $\vec{b}^*$, $\vec{c}^*$ sur les images.*
- *le système cristallin*
- *le mode de réseau de Bravais*
- *les valeurs relatives a:b:c et les angles α, β, γ*

du réseau direct du cristal.

Orientation de $\vec{a}^*$, $\vec{b}^*$, $\vec{c}^*$:
Les taches de diffraction sur les images de précession dessinent directement les noeuds du réseau réciproque, strate à strate. La strate (hk0)* contient les noeuds $h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + 0\vec{c}^*$, la strate (hk1)*, les noeuds $h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$, la strate (hk3)*, les noeuds $h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + 3\vec{c}^*$ ...



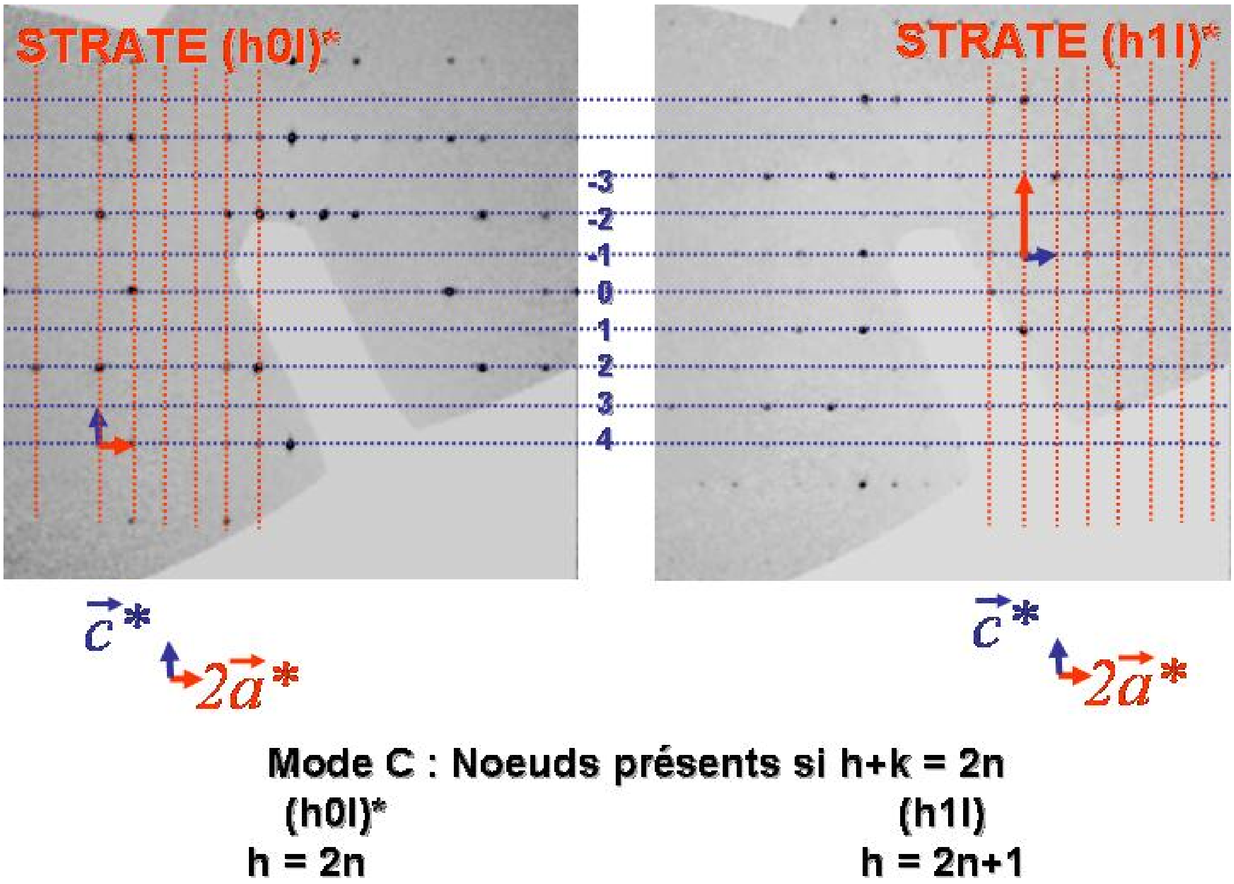
Strates (hk0)*, (hk1)* (hk2)* (hk3)*

On voit que le réseau a une symétrie rectangulaire (maille conventionnelle $\vec{a}^*$ $\vec{b}^*$).
On a $\vec{a}^* \perp \vec{b}^*$ et $a^*/b^* \sim 1{,}11$ (mesure sur la feuille).

La maille conventionnelle réciproque prévoit 2 fois trop de noeuds par rapport à la maille losange ($\vec{v}_1^*$, $\vec{v}_2^*$) Les noeuds $h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + 0\vec{c}^*$) absents sont ceux tels

que h+k=2n+1 => mode C

(le même raisonnement s'applique aux strates $(hk1)^*$, $(hk2)^*$ et $(hk3)^*$).



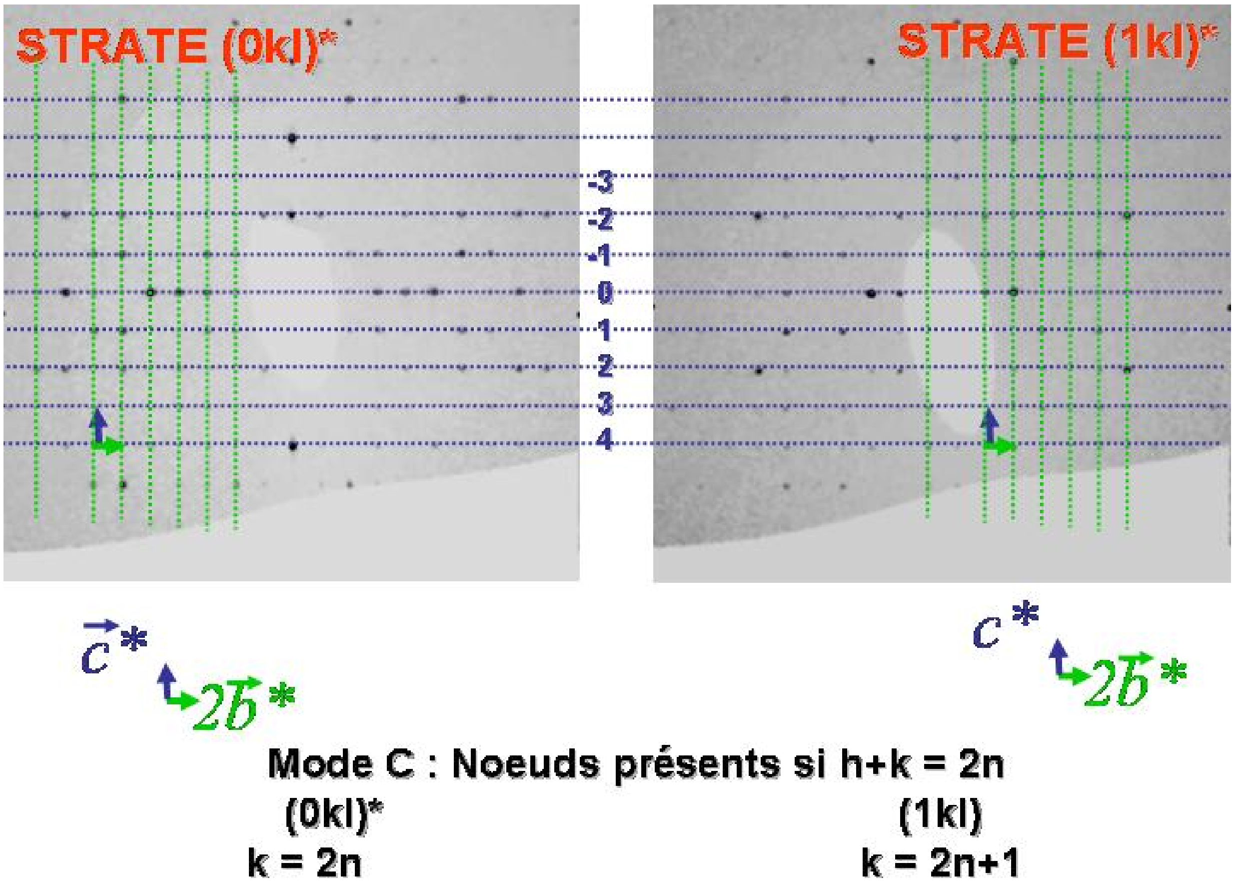
Strates $(h0l)^*$, $(h1l)^*$, $(h2l)^*$, $(h3l)^*$

Le réseau a une symétrie rectangulaire (maille conventionnelle $\vec{a}^*$ $\vec{c}^*$).

On a $\vec{a}^* \perp \vec{c}^*$ et $a^*/c^* \sim 0{,}41$ (mesure sur la feuille).

La maille conventionnelle réciproque prévoit le bon nombre de noeuds => mode P

(le même raisonnement s'applique aux strates $(h1l)^*$, $(h2l)^*$ et $(h3l)^*$).



Strates $(0kl)^*$, $(1kl)^*$, $(2kl)^*$, $(3kl)^*$

Le réseau a une symétrie rectangulaire (maille conventionnelle $\vec{b}^* \ \vec{c}^*$).

On a $\vec{b}^* \perp \vec{c}^*$ et $b^*/c^* \sim 0{,}37$ (mesure sur la feuille).

La maille conventionnelle réciproque prévoit le bon nombre de noeuds => mode P (le même raisonnement s'applique aux strates $(1kl)^*$, $(2kl)^*$ et $(3kl)^*$).

Bilan : On a $a : b : c = 2{,}41 : 2{,}69 : 1$ et $\alpha = \beta = \gamma = 90°$

$4^{ème}$ exercice : La pigeonite : morphologie et diffraction

On considère un cristal de pigeonite (Mg, Fe, Ca)(Mg, Fe) $(SiO_3)_2$ de groupe d'espace $P2_1/c$

Ses paramètres de maille sont : a = 9,476(1) Å, b = 8,953(1)Å, c = 5,256(1)Å, b = 103,16°.
Les formes présentes dans sa morphologie sont : {100}, {010}, {001} et {110}.

1) *Calculez l'angle entre les faces :*
(100) et (010), (100) et (001), (001) et (110).

L'angle entre les faces (du réseau direct (hkl) et (h'k'l')) est l'angle α entre les rangées réticulaires du réseau réciproques correspondantes $[hkl]^*$ et $[h'k'l']^*$.

$$\alpha = \mathrm{Ar}\cos\left(\frac{[hkl]^*.[h'k'l']^*}{\|hkl\|^*.\|h'k'l'\|^*}\right) \quad \text{avec} \quad [hkl]^*.[h'k'l']^* = \langle hkl|\,\vec{g}^*\,|h'k'l'\rangle \ \text{ et } \ \|hkl\|^{*2} = \langle hkl|\,\vec{g}^*\,|hkl\rangle .$$

$$\vec{g}^* = \begin{pmatrix} a^{*2} & 0 & a^* c^* \cos\beta^* \\ 0 & b^{*2} & 0 \\ a^* c^* \cos\beta^* & 0 & c^{*2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0{,}011745 & 0 & 0{,}004821 \\ 0 & 0{,}012476 & 0 \\ 0{,}004821 & 0 & 0{,}038177 \end{pmatrix}$$

$||100||^*$ = 0,108376 $Å^{-1}$ $||010||^*$ = 0,111700 $Å^{-1}$ $||001||^*$ = 0,195400 $Å^{-1}$

(100)^(010)=90° (100)^(001)=103,76° (001)^(110)=80,87°

2) *Calculez l'expression générale de la distance réticulaire d_{hkl}.*
Application numérique : calcul de d_{010}, d_{020}, d_{001}, d_{110}, d_{111}

La distance réticulaire d_{hkl} vaut : $$d_{hkl} = \frac{1}{\|hkl\|^*}$$

Les distances $||hkl||^*$ ont été calculées au 2).

On trouve :

d_{010} =8,952Å d_{020}= 4,477Å d_{001} = 5,118Å d_{110} = 6,425Å d_{111} = 3,726Å