Relations entre le repère cristallin $(O\,\vec{a}\,\vec{b}\,\vec{c})$ et le repère cartésien $(O\,\vec{i}\,\vec{j}\,\vec{k})$.

Germain Vallverdu

29 septembre 2011

1 Position du problème

Soit $\vec{a}$, $\vec{b}$ et $\vec{c}$ trois vecteurs générateurs d'un réseau cristallin de normes respectives a, b et c. Le repère $(O\,\vec{a}\,\vec{b}\,\vec{c})$ sera appelé le repère cristallin. Soit $(O\,\vec{i}\,\vec{j}\,\vec{k})$ un repère orthonormé, le vecteur $\vec{i}$ est dirigé suivant (Ox), le vecteur $\vec{j}$ suivant (Oy) et le vecteur $\vec{k}$ suivant (Oz), voir figure 1. On cherche à exprimer les vecteurs du repère cristallin dans le repère orthonormé $(O\,\vec{i}\,\vec{j}\,\vec{k})$ et inversement les vecteurs du repère orthonormé dans le repère cristallin.

On choisit le repère orthonormé de sorte que les vecteurs $\vec{a}$, $\vec{b}$ et $\vec{c}$ soient positionnés de la façon suivante, voir figure 1 :

- Le vecteur $\vec{a}$ est colinéaire au vecteur $\vec{i}$.
- Le vecteur $\vec{b}$ est dans le plan $(\vec{i}\,\vec{j})$.

Les angles α, β, γ sont définis tels que :

- $\vec{a}\cdot\vec{b} = ab\cos\gamma$
- $\vec{b}\cdot\vec{c} = bc\cos\alpha$
- $\vec{a}\cdot\vec{c} = ac\cos\beta$

2 Calcul des coordonnées des vecteurs $\vec{a}$, $\vec{b}$ et $\vec{c}$ dans le repère $(O\,\vec{i}\,\vec{j}\,\vec{k})$

Le vecteur $\vec{a}$ étant colinéaire à $\vec{i}$:

$$\vec{a} = a\vec{i} \tag{1}$$

Le vecteur $\vec{b}$ étant dans le plan $(\vec{i}\,\vec{j})$ et l'angle entre les vecteurs $\vec{i}$ (ou $\vec{a}$) et le vecteur $\vec{b}$ étant égal à γ :

$$\vec{b} = b\cos\gamma\,\vec{i} + b\sin\gamma\,\vec{j} \tag{2}$$

Pour calculer les coordonnées du vecteur $\vec{c}$ on utilise les produits scalaires $\vec{a}\cdot\vec{c}$ et $\vec{b}\cdot\vec{c}$. Les vecteurs $\vec{i}$ et $\vec{a}$ étant colinéaires, la coordonnée suivant (Ox) est directement donnée par le produit scalaire $\vec{a}\cdot\vec{c}$.

$$\begin{aligned}
\vec{a}\cdot\vec{c} &= ac\cos\beta \\
\vec{a}\cdot\vec{c} &= a_x c_x = ac_x \\
c_x &= c\cos\beta
\end{aligned}$$

Le produit scalaire $\vec{b}\cdot\vec{c}$ ne dépend que de c_x et c_y, on peut donc en déduire c_y.

$$\begin{aligned}
\vec{b}\cdot\vec{c} &= bc\cos\alpha \\
\vec{b}\cdot\vec{c} &= b_x c_x + b_y c_y = b\,(c_x\cos\gamma + c_y\sin\gamma) \\
bc\cos\alpha &= b\,(c_x\cos\gamma + c_y\sin\gamma) \\
c_y\sin\gamma &= c\cos\alpha - c_x\cos\gamma \\
c_y &= c\,\frac{\cos\alpha - \cos\beta\cos\gamma}{\sin\gamma}
\end{aligned}$$

Étant donné que l'on considère un réseau tridimensionnel, les vecteurs $\vec{a}$ et $\vec{b}$ ne sont pas colinéaires. L'angle γ n'est donc jamais un angle nul et $\sin\gamma$ est toujours différent de zéro. Pour calculer c_z on utilise la norme du vecteur $\vec{c}$:

$$\begin{aligned}
c^2 &= c_x^2 + c_y^2 + c_z^2 \\
c_z^2 &= c^2 - c_x^2 - c_y^2 \\
c_z^2 &= c^2\left[1 - \cos^2\beta - \left(\frac{\cos\alpha - \cos\beta\cos\gamma}{\sin\gamma}\right)^2\right] \\
c_z &= c\sqrt{\sin^2\beta - \left(\frac{\cos\alpha - \cos\beta\cos\gamma}{\sin\gamma}\right)^2}
\end{aligned}$$

On en déduit donc le vecteur $\vec{c}$:

$$\vec{c} = c\left[\cos\beta\,\vec{i} + \frac{\cos\alpha - \cos\beta\cos\gamma}{\sin\gamma}\,\vec{j} + \sqrt{\sin^2\beta - \left(\frac{\cos\alpha - \cos\beta\cos\gamma}{\sin\gamma}\right)^2}\,\vec{k}\right]$$

On pose

$$\begin{aligned}
p_y &= \frac{c_y}{c} = \frac{\cos\alpha - \cos\beta\cos\gamma}{\sin\gamma} \\
p_z &= \frac{c_z}{c} = \sqrt{\sin^2\beta - \left(\frac{\cos\alpha - \cos\beta\cos\gamma}{\sin\gamma}\right)^2}
\end{aligned}$$

d'où

$$\vec{c} = c\left(\cos\beta\,\vec{i} + p_y\,\vec{j} + p_z\,\vec{k}\right) \tag{3}$$

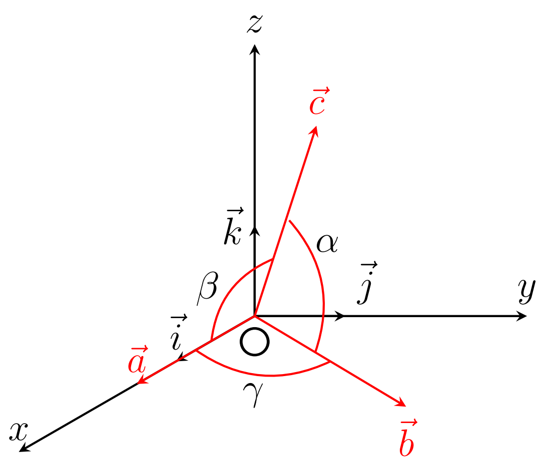

FIG. 1 – Position des vecteurs $\vec{a}$, $\vec{b}$ et $\vec{c}$ dans le repère $(O\,\vec{i}\,\vec{j}\,\vec{k})$.

3 Calcul des coordonnées des vecteurs $\vec{i}$, $\vec{j}$ et $\vec{k}$ dans le repère $(O\,\vec{a}\,\vec{b}\,\vec{c})$

Il faut inverser les équations 1, 2 et 3. On déduit $\vec{i}$ de l'équation 1 :

$$\vec{i} = \frac{1}{a}\vec{a}$$

Connaissant $\vec{i}$, on obtient $\vec{j}$ à partir de l'équation 2 :

$$\begin{aligned}
\vec{b} &= b\cos\gamma\vec{i} + b\sin\gamma\vec{j} \\
\vec{b} &= \frac{b\cos\gamma}{a}\vec{a} + b\sin\gamma\vec{j} \\
\vec{j} &= -\frac{\cot\gamma}{a}\vec{a} + \frac{1}{b\sin\gamma}\vec{b}
\end{aligned}$$

Enfin, connaissant $\vec{i}$ et $\vec{j}$, on obtient $\vec{k}$ à partir de l'équation 3 :

$$\begin{aligned}
\vec{c} &= c\left(\cos\beta\,\vec{i} + p_y\,\vec{j} + p_z\,\vec{k}\right) \\
p_z\,\vec{k} &= \frac{1}{c}\vec{c} - \cos\beta\,\vec{i} - p_y\,\vec{j} \\
p_z\,\vec{k} &= \frac{1}{c}\vec{c} - \frac{\cos\beta}{a}\vec{a} - p_y\left(-\frac{\cot\gamma}{a}\vec{a} + \frac{1}{b\sin\gamma}\vec{b}\right) \\
\vec{k} &= \frac{1}{a}\left(\frac{p_y}{p_z}\cot\gamma - \frac{\cos\beta}{p_z}\right)\vec{a} - \frac{p_y}{bp_z\sin\gamma}\vec{b} + \frac{1}{cp_z}\vec{c}
\end{aligned}$$

Conclusion

Coordonnées des vecteurs $\vec{a}$, $\vec{b}$ et $\vec{c}$ dans le repère $(O\,\vec{i}\,\vec{j}\,\vec{k})$:

$$\begin{aligned}
\vec{a} &= a\,\vec{i} \\
\vec{b} &= b\left(\cos\gamma\,\vec{i} + \sin\gamma\,\vec{j}\right) \\
\vec{c} &= c\left(\cos\beta\,\vec{i} + p_y\,\vec{j} + p_z\,\vec{k}\right)
\end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned}
p_y &= \frac{\cos\alpha - \cos\beta\cos\gamma}{\sin\gamma} \\
p_z &= \sqrt{\sin^2\beta - \left(\frac{\cos\alpha - \cos\beta\cos\gamma}{\sin\gamma}\right)^2}
\end{aligned}$$

Coordonnées des vecteurs $\vec{i}$, $\vec{j}$ et $\vec{k}$ dans le repère $(O\,\vec{a}\,\vec{b}\,\vec{c})$

$$\begin{aligned}
\vec{i} &= \frac{1}{a}\vec{a} \\
\vec{j} &= -\frac{\cot\gamma}{a}\vec{a} + \frac{1}{b\sin\gamma}\vec{b} \\
\vec{k} &= \frac{1}{a}\left(\frac{p_y}{p_z}\cot\gamma - \frac{\cos\beta}{p_z}\right)\vec{a} - \frac{p_y}{bp_z\sin\gamma}\vec{b} + \frac{1}{cp_z}\vec{c}
\end{aligned}$$

On en déduit les matrices de passages entre le repère cartésien et le repère cristallographique. Soit $M_{abc\rightarrow xyz}$ la matrice de passage des coordonnées réduites, dans le repère cristallin aux coordonnées cartésiennes dans le repère orthonormé. Son expression est :

$$M_{abc\rightarrow xyz} = \begin{pmatrix} a & b\cos\gamma & c\cos\beta \\ 0 & b\sin\gamma & cp_y \\ 0 & 0 & cp_z \end{pmatrix}$$

Soit $M_{xyz\rightarrow abc}$ la matrice de passage des coordonnées cartésiennes aux coordonnées réduites. Elle est liée à $M_{abc\rightarrow xyz}$ par :

$$M_{xyz\rightarrow abc} = M^{-1}_{abc\rightarrow xyz}$$

$M_{xyz\rightarrow abc}$ est définie par :

$$M_{xyz\rightarrow abc} = \begin{pmatrix} \frac{1}{a} & -\frac{\cot\gamma}{a} & \frac{1}{a}\left(\frac{p_y}{p_z}\cot\gamma - \frac{\cos\beta}{p_z}\right) \\ 0 & \frac{1}{b\sin\gamma} & -\frac{p_y}{bp_z\sin\gamma} \\ 0 & 0 & \frac{1}{cp_z} \end{pmatrix}$$