

ring. The results have contained not only all the configurations presented by Smith & Rinaldi (1962), but also some other possibilities not predicted by them, especially in the *UUUD* ring.

The derivation procedure mentioned here is completed by the symbol operation only, without treating any real or symbolized configuration models. Therefore, starting tile orientations different from those used here might lead to different patterns from those mentioned, but the number and the kinds of symbol notations for derived configurations are invariant.

The new notation system is so simple and so faithful

to the structure that it is now very easy to draw out or recall the corresponding configuration from the given symbol only.

#### References

- BERGE, C. (1971). *Principles of Combinatorics*. New York: Academic Press.  
 SADANAGA, R., MARUMO, F. & TAKEUCHI, Y. (1961). *Acta Cryst.* **14**, 1153–1163.  
 SMITH, J. V. & RINALDI, F. (1962). *Mineral. Mag.* **33**, 202–211.

*Acta Cryst.* (1979). **A35**, 553–563

## Propriétés des Réseaux de Coïncidence et DSC

PAR JEAN-JACQUES BACMANN

*Centre d'Etudes Nucléaires de Grenoble, Département de Métallurgie, Section d'Etudes de Métallurgie, 85 X-38041 Grenoble CEDEX, France*

(Reçu le 6 juin 1978, accepté le 5 février 1979)

#### Abstract

Coincidence-site lattices and pattern-shift lattices (DSC) are of importance in the structural model of grain boundaries and crystalline interfaces. If two lattices can be represented by two Poisson distributions, the scalar product and the convolution product of these two functions allow the respective definitions of the coincidence-site lattice and the DSC lattice associated with these two lattices. These two operations are associative and commutative. After specification of the conditions in which they are also distributive, it is shown that this approach allows generalization of the twin-product notion and indicates the relationships between coincidence-site and DSC lattices, in particular for cubic lattices.

#### Introduction

Les réseaux de coïncidence et DSC\* jouent un rôle important dans le modèle géométrique des joints de grains et des interfaces cristallines. L'étude de ces réseaux et de certaines de leurs propriétés, en particulier à partir de la théorie des nombres et de la théorie des groupes, a fait l'objet de nombreuses publications (Woïgard & de Fouquet, 1972; Pumphrey & Bowkett, 1972; Ishida & McLean, 1973, 1974; Fortes, 1973, 1974; Grimmer, Bollmann & Warrington, 1974; Warrington & Grimmer, 1974; Grimmer, 1974a,b; Iwasaki, 1976).

\* Le sigle DSC ou DSCL vient de l'anglais Displacement Shift Complete Lattice.

Il est possible d'aborder ces problèmes à partir de la représentation d'un réseau  $\mathcal{L}$  par une distribution de Poisson; soit

$$\mathcal{L} = \sum_m \sum_n \sum_p \delta(\mathbf{r} - m\mathbf{a}_1 - n\mathbf{a}_2 - p\mathbf{a}_3). \quad (1)$$

Dans cette expression  $m, n, p$  sont des entiers positifs ou négatifs,  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  sont des vecteurs définissant une maille primitive du réseau  $\mathcal{L}$  dont chaque point est représenté par une fonction  $\delta_{mnp}(\mathbf{r})$  locale.

Après avoir montré que les réseaux de coïncidence et DSC peuvent se définir respectivement à partir du produit scalaire et du produit de convolution de distributions de Poisson, nous étudierons des exemples de propriétés de ces réseaux, en particulier dans le système cubique.

#### Représentation algébrique des réseaux de coïncidence et DSC

Dans ce qui suit, nous nous placerons dans l'espace euclidien à trois dimensions et nous adopterons les notations suivantes: les lettres minuscules seront utilisées pour nommer des réseaux (ou les fonctions associées à ces réseaux) de l'espace direct, les lettres majuscules pour des réseaux de l'espace réciproque; ainsi,  $\mathcal{L}_\alpha$  et  $\mathcal{L}_\beta$  représenteront les réseaux  $\alpha$  et  $\beta$ ,  $\mathcal{R}_\alpha$  et  $\mathcal{R}_\beta$  leur réseau réciproque respectif,  $\mathcal{C}_{\alpha\beta}$  le réseau de coïncidence et  $\mathcal{D}_{\alpha\beta}$  le réseau DSC construits sur  $\mathcal{L}_\alpha$  et  $\mathcal{L}_\beta$ ,  $\mathcal{C}_{\alpha\beta}$  le réseau de coïncidence et  $\mathcal{D}_{\alpha\beta}$  le réseau DSC construits sur  $\mathcal{R}_\alpha$  et  $\mathcal{R}_\beta$ . De plus le passage de l'espace

direct à l'espace réciproque par la transformation de Fourier ou son inverse sera symbolisé par  $+$ : par exemple,  $\iota^+ = \mathcal{R}$  et  $\mathcal{R}^+ = \iota$ . Enfin, pour alléger l'écriture, nous écrirons les relations du type (1) sous la forme:

$$\iota_\alpha = \sum_m \delta(\mathbf{r} - m\mathbf{a}_\alpha), \quad (2)$$

dans laquelle  $m\mathbf{a}_\alpha$  est une combinaison linéaire et entière des vecteurs de base du réseau  $\alpha$ .

### Réseau de coïncidence

Considérons deux réseaux  $\iota_1$  et  $\iota_2$ , construits à partir d'une même origine, le produit scalaire  $\iota_1 \cdot \iota_2$  des distributions de Poisson qui les représentent s'écrit:

$$\iota_1 \cdot \iota_2 = \left[ \sum_m \delta(\mathbf{r} - m\mathbf{a}_1) \right] \cdot \left[ \sum_n \delta(\mathbf{r} - n\mathbf{a}_2) \right], \quad (3)$$

$$\iota_1 \cdot \iota_2 = \sum_m \sum_n \delta(\mathbf{r} - m\mathbf{a}_1) \cdot \delta(\mathbf{r} - n\mathbf{a}_2). \quad (4)$$

La fonction  $\iota_1 \cdot \iota_2$  est nulle en tout point de l'espace sauf aux points où le rayon vecteur  $\mathbf{r} = m\mathbf{a}_1 = n\mathbf{a}_2$  définit un site commun à  $\iota_1$  et à  $\iota_2$ . Ces points existent si les fonctions  $\iota_1$  et  $\iota_2$  admettent des périodes multiples communes. Lorsque ces périodes sont relatives à trois directions linéairement indépendantes, la fonction  $c_{12} = \iota_1 \cdot \iota_2$  représente le réseau de coïncidence, triplement périodique, de  $\iota_1$  et de  $\iota_2$ .

### Réseau DSC

Le réseau DSC (Bollmann, 1970) est formé des translations qui, appliquées à l'un des réseaux ( $\iota_2$  par exemple), conservent la figure constituée par les deux réseaux  $\iota_1$  et  $\iota_2$  à une translation près de l'autre réseau (ici  $\iota_1$ ). Il est constitué de toute translation somme d'une translation de  $\iota_1$  et d'une translation de  $\iota_2$  ( $\mathbf{y}$  compris  $\mathbf{0}$ ).

Considérons le produit de convolution des distributions de Poisson représentatives de  $\iota_1$  et de  $\iota_2$ :

$$\iota_1 * \iota_2 = \sum_m \sum_n \delta(\mathbf{r} - m\mathbf{a}_1 - n\mathbf{a}_2). \quad (5)$$

La fonction  $\iota_1 * \iota_2$  est nulle en tout point de l'espace sauf aux points pour lesquels le rayon vecteur  $\mathbf{r}$  est une combinaison linéaire et entière des vecteurs de base de  $\iota_1$  et des vecteurs de base de  $\iota_2$  et est donc obtenu en faisant la somme d'une translation de  $\iota_1$  et d'une translation de  $\iota_2$ ; ce qui permet d'écrire:

$$d_{12} = \iota_1 * \iota_2. \quad (6)$$

### Relation de réciprocité

D'après le théorème de Borel, la transformée de Fourier du produit de deux fonctions est le produit de convolution des transformées. Réciproquement, la transformée de Fourier du produit de convolution de deux fonctions est le produit des transformées. Avec les notations que nous avons adoptées, nous pouvons écrire, dans l'espace dual,

$$\mathcal{C}_{12} = \mathcal{R}_1 \cdot \mathcal{R}_2; \quad \mathcal{D}_{12} = \mathcal{R}_1 * \mathcal{R}_2.$$

Par transformation de Fourier inverse:

$$\mathcal{C}_{12}^+ = (\mathcal{R}_1 \cdot \mathcal{R}_2)^+ = \mathcal{R}_1^+ * \mathcal{R}_2^+ = \iota_1 * \iota_2 = d_{12}. \quad (7)$$

Réciproquement,

$$\mathcal{D}_{12}^+ = (\mathcal{R}_1 * \mathcal{R}_2)^+ = \mathcal{R}_1^+ \cdot \mathcal{R}_2^+ = \iota_1 \cdot \iota_2 = c_{12}. \quad (8)$$

Le formalisme utilisé conduit donc de façon très concise à la propriété de réciprocité démontrée par Grimmer (1974b) qui exprime la dualité des réseaux de coïncidence et DSC.

Cette dualité permet de montrer simplement que si  $c_{12}$  est un réseau tripériodique,  $d_{12}$  l'est également. En effet, considérons le premier plan d'une famille ( $hkl$ ) de  $c_{12}$ , il correspond à un plan d'une famille ( $h_1k_1l_1$ ) de  $\iota_1$  et à un plan d'une famille ( $h_2k_2l_2$ ) de  $\iota_2$  tels que  $d_{hkl} = nd_{h_1k_1l_1} = md_{h_2k_2l_2}$ ,  $m$  et  $n$  étant des entiers premiers entre eux. Dans l'espace réciproque, les rangées normales aux plans considérés de  $\iota_1$  et de  $\iota_2$  ont respectivement pour paramètre  $1/d_{h_1k_1l_1} = n/d_{hkl}$  et  $1/d_{h_2k_2l_2} = m/d_{hkl}$  qui admettent un commun multiple  $mn/d_{hkl}$ . Si  $c_{12}$  est un réseau à trois dimensions, ce raisonnement peut être fait pour trois familles de plans.  $\mathcal{C}_{12}$ , réseau de coïncidence entre  $\mathcal{R}_1$  et  $\mathcal{R}_2$  est alors à trois dimensions, son réciproque  $d_{12}$  l'est également.

La relation de dualité montre également que lorsque deux cristaux sont en orientation mutuelle de coïncidence, le diagramme de diffraction électronique peut révéler des taches de double diffraction. Ces taches appartiennent, en général, au produit de composition de deux sections planes des réseaux réciproques de chacun des deux cristaux. De plus, si ces deux cristaux, ayant une interface commune, sont observés selon un pôle commun, le diagramme de diffraction peut également présenter des taches supplémentaires, associées au réseau de coïncidence. Ces taches appartiennent à une section plane du produit de composition des deux réseaux réciproques.

Les fonctions  $c_{12}$  et  $d_{12}$  déduites des relations (4) et (5) ne sont pas, en général, des distributions. Il est cependant possible de définir les opérations  $\iota_1 * \iota_2$  et  $\iota_1 \cdot \iota_2$ , au sens des distributions, si l'on borne le support de  $\iota_1$  ou de  $\iota_2$ . L'Appendice I montre comment le problème peut être traité, à partir d'un exemple à une dimension. Nous conserverons donc la notation  $d_{12} = \iota_1 * \iota_2$  qui implique, au sens des distributions, que l'un des facteurs du produit de convolution est à support borné. De

même  $c_{12} = \varepsilon_1 \cdot \varepsilon_2$  sous-entend  $c_{12} = \mathcal{D}_{12}^+ = (\mathcal{R}_1 * \mathcal{R}_2)^+$ ,  $\mathcal{R}_1$  ou  $\mathcal{R}_2$  étant à support correctement borné. La définition de  $d_{12}$  donnée dans l'Appendice I permet d'écrire  $\varepsilon = \varepsilon * \varepsilon$  et  $\varepsilon = \varepsilon \cdot \varepsilon$ . De même, la composition d'un réseau par un de ses multiples décrit le réseau lui-même ( $c_{12} * \varepsilon_1 = \varepsilon_1$ ;  $d_{12} * \varepsilon_1 = d_{12}$ ) et le produit scalaire au sens de l'Appendice I des fonctions associées à un réseau et à l'un de ses multiples décrit le réseau multiple ( $c_{12} \cdot \varepsilon_1 = c_{12}$ ;  $d_{12} \cdot \varepsilon_1 = \varepsilon_1$ ).

*Rapport des volumes des mailles primitives de  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ ,  $c_{12}$ ,  $d_{12}$*

L'Appendice I montre que pour obtenir tous les points du réseau DSC, il suffit de construire le réseau  $\varepsilon_2$  en prenant successivement pour origine chaque point du réseau  $\varepsilon_1$  contenu dans une maille primitive du réseau de coïncidence  $c_{12}$ . Par conséquent, si  $V(c_{12})$ ,  $V(\varepsilon_1)$ ,  $V(\varepsilon_2)$ ,  $V(d_{12})$  respectivement volumes des mailles primitives de  $c_{12}$ ,  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ ,  $d_{12}$  sont tels que:

$$V(c_{12}) = \Sigma_1 V(\varepsilon_1) = \Sigma_2 V(\varepsilon_2), \quad (9)$$

la maille primitive de  $c_{12}$  contient  $\Sigma_1$  noeuds de  $\varepsilon_1$  et chaque fois que l'on construit  $\varepsilon_2$  à partir de l'un de ces noeuds de  $\varepsilon_1$ , on introduit  $\Sigma_2$  noeuds de  $\varepsilon_2$  dans la maille de  $c_{12}$  considérée. Par conséquent:

$$V(c_{12}) = \Sigma_1 \Sigma_2 V(d_{12}) \quad (10)$$

et

$$V(d_{12}) = 1/\Sigma_1 V(\varepsilon_2) = 1/\Sigma_2 V(\varepsilon_1). \quad (11)$$

Un point important concerne l'étude de trois réseaux. D'une part parce que dans un polycristal, trois grains ont en générale une arête commune, d'autre part parce que cette étude conduit à des remarques intéressantes pour ce qui concerne les propriétés des réseaux de coïncidence et DSC.

*Commutativité, associativité des produits scalaires et produits de convolution*

Etant donné trois réseaux  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_3$ , l'associativité et la commutativité du produit scalaire des fonctions associées permettent d'écrire, puisque  $\varepsilon \cdot \varepsilon = \varepsilon$

$$c_{12} \cdot c_{23} = (\varepsilon_1 \cdot \varepsilon_2) \cdot (\varepsilon_2 \cdot \varepsilon_3) = \varepsilon_1 \cdot \varepsilon_2 \cdot \varepsilon_3, \quad (12)$$

c'est-à-dire:

$$c_{12} \cdot c_{23} = c_{23} \cdot c_{31} = c_{31} \cdot c_{12} = \varepsilon_1 \cdot \varepsilon_2 \cdot \varepsilon_3. \quad (13)$$

De même, pour le produit de convolution:

$$d_{12} * d_{23} = d_{23} * d_{31} = d_{31} * d_{12} = \varepsilon_1 * \varepsilon_2 * \varepsilon_3. \quad (14)$$

Afin de limiter les discussions, sauf précision contraire, nous nous restreindrons au cas de trois réseaux tridimensionnels  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_3$ , tels que  $c_{12}$  et  $c_{23}$  soient également tridimensionnels. Dans cette hypothèse, il est possible de montrer que  $c_{13}$  est un réseau à trois

dimensions. En effet, le réseau de coïncidence entre deux réseaux tridimensionnels peut être un réseau à trois dimensions ou bien dégénéré en un réseau à deux dimensions, une dimension ou même se réduire à l'origine. De même, le réseau DSC peut être un réseau à trois dimensions ou bien dégénéré en un continuum de droites parallèles, de plans parallèles ou même remplir tout l'espace. Considérons l'expression  $(\varepsilon_1 \cdot \varepsilon_2) * (\varepsilon_2 \cdot \varepsilon_3)$ , elle représente le réseau DSC construit sur deux réseaux à trois dimensions  $c_{12}$  et  $c_{23}$ . Puisque  $c_{12} * \varepsilon_2 = c_{23} * \varepsilon_2 = \varepsilon_2$ ,  $c_{12} * c_{23} * \varepsilon_2 = \varepsilon_2$ , tous les points représentés par  $(\varepsilon_1 \cdot \varepsilon_2) * (\varepsilon_2 \cdot \varepsilon_3)$  appartiennent à  $\varepsilon_2$ : cette expression ne peut-être associée à un continuum, elle représente un réseau tri périodique. Il en est donc de même de  $c_{12} \cdot c_{23}$ . Par conséquent,  $\varepsilon_2 \cdot (\varepsilon_1 \cdot \varepsilon_3)$  et  $\varepsilon_1 \cdot \varepsilon_3$  représentent des réseaux à trois dimensions. Les réseaux  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_3$  admettent deux à deux un réseau de coïncidence tri périodique. De plus, les relations (13) et (14) montrent que tous les réseaux construits à partir de  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_3$  sont tri périodiques, admettent un réseau multiple commun  $c_{123} = \varepsilon_1 \cdot \varepsilon_2 \cdot \varepsilon_3$  et sont des réseaux multiples d'un même réseau  $d_{123} = \varepsilon_1 * \varepsilon_2 * \varepsilon_3$ .

*Distributivité des deux produits*

En général, les deux opérations ne sont que semi-distributives l'une par rapport à l'autre.

En effet,  $\varepsilon_2 \cdot (\varepsilon_1 * \varepsilon_3) \supset \varepsilon_2 \cdot \varepsilon_1$  et  $\varepsilon_2 \cdot \varepsilon_3$ , par conséquent:  $\varepsilon_2 \cdot (\varepsilon_1 * \varepsilon_3) \supset (\varepsilon_2 \cdot \varepsilon_1) * (\varepsilon_2 \cdot \varepsilon_3)$ . Par ailleurs,  $\varepsilon_2 * (\varepsilon_1 \cdot \varepsilon_3) \subset \varepsilon_2 * \varepsilon_1$  et  $\varepsilon_2 * \varepsilon_3$ , par conséquent:  $\varepsilon_2 * (\varepsilon_1 \cdot \varepsilon_3) \subset (\varepsilon_2 * \varepsilon_1) \cdot (\varepsilon_2 * \varepsilon_3)$ .

Cependant, dans certains cas particuliers, les deux produits sont strictement distributifs l'un par rapport à l'autre. L'Appendice II montre que la relation

$$c_{12} * c_{13} * c_{23} = d_{12} \cdot d_{13} \cdot d_{23} \quad (15)$$

est une condition nécessaire et suffisante à la stricte distributivité. L'Appendice II donne également, à partir de l'évaluation des ordres respectifs des réseaux de coïncidence et DSC construits sur  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_3$ , la démonstration de la distributivité absolue des deux produits lorsque  $c_{12}$  et  $c_{23}$  sont tridimensionnels.

Dans le cas particulier étudié, nous retiendrons donc que les deux produits sont associatifs, commutatifs et distributifs; ils admettent un élément neutre: l'élément neutre du produit scalaire étant une fonction  $E$ , représentative de l'espace continu; l'élément neutre du produit de convolution étant la fonction  $\delta(\mathbf{r})$ ,

$$\begin{aligned} \varepsilon \cdot E &= \varepsilon, \\ \varepsilon * E &= E, \\ \varepsilon \cdot \delta(\mathbf{r}) &= \delta(\mathbf{r}), \\ \varepsilon * \delta(\mathbf{r}) &= \varepsilon. \end{aligned} \quad (16)$$

Par ailleurs, le passage de l'espace direct à l'espace réciproque s'effectue par transformation de Fourier.

### Relations entre réseaux de coïncidence et réseaux DSC

Etant donné trois réseaux  $\mathcal{r}_1, \mathcal{r}_2, \mathcal{r}_3$  tels que  $\mathcal{r}_1$  et  $\mathcal{r}_3$  se déduisent de  $\mathcal{r}_2$  à partir de deux transformations différentes, nous nous proposons d'évaluer la multiplicité de  $c_{13}$ , connaissant celles de  $c_{12}$  et de  $c_{23}$ . En nous limitant au cas le plus simple où  $\mathcal{r}_1$  et  $\mathcal{r}_3$  se déduisent de  $\mathcal{r}_2$  par isométrie, nous préciserons la notion de produit de maclès miroir, utilisée par Woïgard & de Fouquet (1972).

Le premier point est de connaître les conditions à remplir pour que  $\mathcal{r}_1$  et  $\mathcal{r}_3$  soient différents. Si  $\mathcal{r}_1$  et  $\mathcal{r}_3$  sont identiques, on peut écrire:

$$c_{12} = \mathcal{r}_1 \cdot \mathcal{r}_2 = \mathcal{r}_3 \cdot \mathcal{r}_2 = c_{23}, \quad (17)$$

$$d_{12} = \mathcal{r}_1 * \mathcal{r}_2 = \mathcal{r}_3 * \mathcal{r}_2 = d_{23}. \quad (18)$$

Réciproquement, considérons trois réseaux tels que les relations (17) et (18) soient satisfaites et que  $c_{12}$  soit tridimensionnel. La triple périodicité de  $c_{12}$  implique la double distributivité des deux produits. La relation (17) permet d'écrire alors:

$$\begin{aligned} \mathcal{r}_3 \cdot (\mathcal{r}_1 * \mathcal{r}_2) &= (\mathcal{r}_3 \cdot \mathcal{r}_1) * (\mathcal{r}_3 \cdot \mathcal{r}_2) = (\mathcal{r}_3 \cdot \mathcal{r}_1) * (\mathcal{r}_1 \cdot \mathcal{r}_2) \\ &= \mathcal{r}_1 \cdot (\mathcal{r}_2 * \mathcal{r}_3), \end{aligned}$$

d'après (18)

$$\mathcal{r}_3 \cdot (\mathcal{r}_1 * \mathcal{r}_2) = \mathcal{r}_3 \cdot (\mathcal{r}_2 * \mathcal{r}_3) = \mathcal{r}_3,$$

et

$$\mathcal{r}_1 \cdot (\mathcal{r}_2 * \mathcal{r}_3) = \mathcal{r}_1 \cdot (\mathcal{r}_1 * \mathcal{r}_2) = \mathcal{r}_1.$$

Par conséquent  $\mathcal{r}_3 = \mathcal{r}_1$ .

Une condition nécessaire et suffisante pour que deux réseaux  $\mathcal{r}_1$  et  $\mathcal{r}_3$  soient identiques est qu'ils admettent même réseau de coïncidence et même réseau DSC avec un troisième réseau  $\mathcal{r}_2$  tel que  $c_{12}$  soit tridimensionnel.

Afin d'éliminer le cas trivial où  $\mathcal{r}_1 = \mathcal{r}_3$ , il suffira donc de nous placer dans l'hypothèse où  $c_{12} \neq c_{23}$ . Deux cas sont alors à prendre en considération:  $d_{12} \neq d_{23}$ , ou bien  $d_{12} = d_{23}$ .

Soient trois réseaux  $\mathcal{r}_1, \mathcal{r}_2, \mathcal{r}_3$  se correspondant deux à deux par des isométries, les volumes des mailles primitives de  $c_{12}$  et de  $c_{23}$  étant tels que:

$$V(c_{12}) = \Sigma V(\mathcal{r}_1) = \Sigma V(\mathcal{r}_2) = \Sigma^2 V(d_{12}), \quad (19)$$

$$V(c_{23}) = \Sigma' V(\mathcal{r}_2) = \Sigma' V(\mathcal{r}_3) = \Sigma'^2 V(d_{23}). \quad (20)$$

Nous supposons tout d'abord que  $d_{12}$  est différent de  $d_{23}$ ;  $\Sigma'$  pouvant néanmoins prendre la valeur  $\Sigma$ . Pour résoudre le problème, il nous faut introduire une hypothèse supplémentaire. Considérons le réseau DSC construit à partir de  $c_{12}$  et de  $c_{23}$ . L'expression  $c_{12} * c_{23} = \mathcal{r}_2 \cdot (\mathcal{r}_1 * \mathcal{r}_3)$  montre que  $c_{12} * c_{23}$  représente soit le

réseau  $\mathcal{r}_2$  soit un réseau multiple de  $\mathcal{r}_2$ . Nous prendrons tout d'abord l'hypothèse:

$$c_{12} * c_{23} = \mathcal{r}_2 \quad (21)$$

et nous verrons que l'étude du cas où  $c_{12} * c_{23}$  est un réseau multiple de  $\mathcal{r}_2$  s'en déduit.

La relation (21) permet d'écrire

$$\mathcal{r}_2 \cdot (\mathcal{r}_1 * \mathcal{r}_3) = \mathcal{r}_2, \quad (22)$$

ce qui montre que  $\mathcal{r}_2$  est un réseau multiple de  $d_{13}$  et par conséquent:

$$\mathcal{r}_2 * (\mathcal{r}_1 * \mathcal{r}_3) = \mathcal{r}_1 * \mathcal{r}_3 = d_{12} * d_{23}. \quad (23)$$

Le réseau DSC construit sur  $\mathcal{r}_1$  et  $\mathcal{r}_3$  est le réseau DSC construit sur  $d_{12}$  et  $d_{23}$ .

Par ailleurs, l'Appendice III montre que si  $d_{12}$  est différent de  $d_{23}$ , la relation (23) entraîne

$$\mathcal{r}_1 \cdot \mathcal{r}_3 = \mathcal{r}_1 \cdot \mathcal{r}_2 \cdot \mathcal{r}_3 = c_{12} \cdot c_{23}. \quad (24)$$

Le réseau de coïncidence entre  $\mathcal{r}_1$  et  $\mathcal{r}_3$  est identique au réseau coïncidence entre  $c_{12}$  et  $c_{23}$ .

Puisque  $V(c_{12}) = \Sigma V(\mathcal{r}_2)$  et  $V(c_{23}) = \Sigma' V(\mathcal{r}_2)$ , les relations (10), (21) et (24) conduisent à:

$$V(c_{13}) = \Sigma \Sigma' V(\mathcal{r}_2) = \Sigma \Sigma' V(\mathcal{r}_1) = \Sigma \Sigma' V(\mathcal{r}_3) \quad (25)$$

et donc à

$$V(d_{13}) = (1/\Sigma \Sigma') V(\mathcal{r}_1) = (1/\Sigma \Sigma') V(\mathcal{r}_3). \quad (26)$$

Le réseau  $c_{13}$  est un réseau multiple d'ordre  $\Sigma \Sigma'$  par rapport à  $\mathcal{r}_1$  et à  $\mathcal{r}_3$ . Ceci est schématisé sur la Fig. 1.

Lorsque deux réseaux  $\mathcal{r}_1$  et  $\mathcal{r}_3$  sont reliés par des isométries à un troisième réseau  $\mathcal{r}_2$  et tels que  $d_{12} \neq d_{23}$  et  $c_{12} * c_{23} = \mathcal{r}_2$ ,  $c_{13}$  est un réseau multiple de  $\mathcal{r}_1, \mathcal{r}_2$  et  $\mathcal{r}_3$  dont l'ordre est égal au produit des ordres de  $c_{12}$  et de  $c_{23}$ .

Inversement, lorsque deux réseaux  $\mathcal{r}_2$  et  $\mathcal{r}_3$  reliés à un réseau  $\mathcal{r}_1$  par des isométries sont tels que  $d_{12}$  et  $c_{13}$  sont respectivement des réseaux multiples de  $d_{13}$  et de  $c_{12}$ , l'ordre de multiplicité de  $c_{23}$  est égal au rapport de l'ordre de  $c_{13}$  à celui de  $c_{12}$ .

Ces résultats permettent d'aborder le cas où  $c_{12} * c_{23}$  est un réseau multiple de  $\mathcal{r}_2$ .

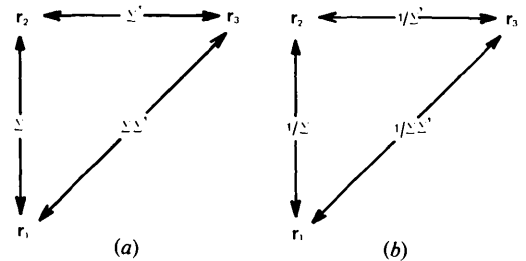


Fig. 1. Relations de multiplicité entre trois réseaux isométriques  $\mathcal{r}_1, \mathcal{r}_2, \mathcal{r}_3$  tels que:  $d_{12} \neq d_{23}$ ,  $c_{12} * c_{23} = \mathcal{r}_2$ . (a) Réseaux de coïncidence. (b) Réseaux DSC.

Considérons  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$  reliés à un réseau  $\varepsilon_0$  par trois isométries et tels que

$$c_{23} * c_{12} = c_{02}. \tag{27}$$

Des précédents résultats, nous obtenons

$$\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_1 \cdot \varepsilon_2 = \varepsilon_1 \cdot \varepsilon_2, \tag{28}$$

$$\varepsilon_0 * \varepsilon_1 * \varepsilon_2 = \varepsilon_1 * \varepsilon_2, \tag{29}$$

$$\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_2 \cdot \varepsilon_3 = \varepsilon_2 \cdot \varepsilon_3, \tag{30}$$

$$\varepsilon_0 * \varepsilon_2 * \varepsilon_3 = \varepsilon_2 * \varepsilon_3, \tag{31}$$

ou bien, de façon équivalente

$$(\varepsilon_2 \cdot \varepsilon_0) * (\varepsilon_1 \cdot \varepsilon_0) = \varepsilon_0 \cdot (\varepsilon_1 * \varepsilon_2) = \varepsilon_0, \tag{32}$$

$$(\varepsilon_2 * \varepsilon_0) \cdot (\varepsilon_1 * \varepsilon_0) = \varepsilon_0 * (\varepsilon_1 \cdot \varepsilon_2) = \varepsilon_0, \tag{33}$$

$$(\varepsilon_3 \cdot \varepsilon_0) * (\varepsilon_2 \cdot \varepsilon_0) = \varepsilon_0 \cdot (\varepsilon_2 * \varepsilon_3) = \varepsilon_0, \tag{34}$$

$$(\varepsilon_3 * \varepsilon_0) \cdot (\varepsilon_2 * \varepsilon_0) = \varepsilon_0 * (\varepsilon_2 \cdot \varepsilon_3) = \varepsilon_0. \tag{35}$$

Le produit de convolution membre à membre des équations (32) et (34), s'écrit:

$$[\varepsilon_0 \cdot (\varepsilon_1 * \varepsilon_2)] * [\varepsilon_0 \cdot (\varepsilon_2 * \varepsilon_3)] = \varepsilon_0 \cdot (\varepsilon_1 * \varepsilon_2 * \varepsilon_3) = \varepsilon_0, \tag{36}$$

soit en faisant apparaître l'expression  $\varepsilon_0 \cdot (\varepsilon_1 * \varepsilon_3)$ :

$$[\varepsilon_0 \cdot (\varepsilon_1 * \varepsilon_3)] * (\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_2) = \varepsilon_0. \tag{37}$$

Par ailleurs;

$$\begin{aligned} [\varepsilon_0 \cdot (\varepsilon_1 * \varepsilon_3)] \cdot (\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_2) &= (\varepsilon_1 * \varepsilon_3) \cdot (\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_2) \\ &= (\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_1 \cdot \varepsilon_2) * (\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_2 \cdot \varepsilon_3). \end{aligned}$$

Compte tenu des relations (28), (30) et (27)

$$[\varepsilon_0 \cdot (\varepsilon_1 * \varepsilon_3)] \cdot (\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_2) = (\varepsilon_1 \cdot \varepsilon_2) * (\varepsilon_2 \cdot \varepsilon_3) = \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_2, \tag{38}$$

mais  $\varepsilon_0 * (\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_2) = \varepsilon_0$  et  $\varepsilon_0 \cdot (\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_2) = \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_2$ ; les réseaux  $\varepsilon_0$  et  $\varepsilon_0 \cdot (\varepsilon_1 * \varepsilon_3)$  admettent même réseau de coïncidence

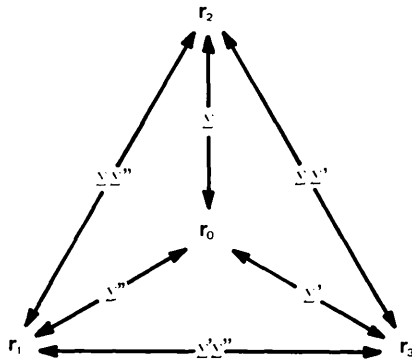


Fig. 2. Relations de multiplicité entre quatre réseaux isométriques  $\varepsilon_0, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$  tels que:  $d_{12} \neq d_{23}, c_{12} * c_{23} = c_{02}$ .

et même réseau DSC avec  $c_{02}$ : ces deux réseaux sont identiques.

$$\varepsilon_0 \cdot (\varepsilon_1 * \varepsilon_3) = \varepsilon_0. \tag{39}$$

Nous sommes ramenés au cas précédent puisque  $d_{23} = d_{02} * d_{03}$  est différent de  $d_{12} = d_{02} * d_{01}$  ce qui implique  $d_{01} \neq d_{03}$ .

Si nous posons:

$$V(c_{23}) = \Sigma \Sigma' V(\varepsilon_0) = \Sigma' V(c_{02}),$$

$$V(c_{12}) = \Sigma \Sigma'' V(\varepsilon_0) = \Sigma'' V(c_{02}),$$

il en résulte que:

$$V(c_{03}) = \Sigma' V(\varepsilon_0),$$

$$V(c_{01}) = \Sigma'' V(\varepsilon_0),$$

$$V(c_{13}) = \Sigma' \Sigma'' V(\varepsilon_0) = \Sigma' \Sigma'' V(\varepsilon_1) = \Sigma' \Sigma'' V(\varepsilon_3).$$

Ce résultat, schématisé sur la Fig. 2 peut s'énoncer de la façon suivante. Lorsque deux réseaux  $\varepsilon_1$  et  $\varepsilon_3$ , reliés par des isométries à un réseau  $\varepsilon_2$  sont tels que  $d_{12} \neq d_{23}$  et que le réseau DSC construit sur  $c_{12}$  et  $c_{23}$  est un réseau multiple de  $\varepsilon_2$ , une maille primitive de  $c_{13}$  a une multiplicité égale au produit des multiplicités non communes des mailles primitives de  $c_{12}$  et de  $c_{23}$ .

*Remarque*

Ce qui précède permet de trouver la relation qui existe entre  $d_{12}$  et  $d_{23}$ . En effet, puisque  $\varepsilon_0 * (\varepsilon_1 \cdot \varepsilon_3) = \varepsilon_0$ ,

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 * (\varepsilon_1 \cdot \varepsilon_3) * \varepsilon_2 &= \varepsilon_0 * \varepsilon_2, \\ (\varepsilon_0 * \varepsilon_1 * \varepsilon_2) \cdot (\varepsilon_0 * \varepsilon_2 * \varepsilon_3) &= \varepsilon_0 * \varepsilon_2, \\ (\varepsilon_1 * \varepsilon_2) \cdot (\varepsilon_2 * \varepsilon_3) &= \varepsilon_0 * \varepsilon_2. \end{aligned} \tag{40}$$

La relation (40) est la forme duale de la relation (27) prise comme hypothèse de départ.

Il reste à examiner le cas où  $d_{12} = d_{23}$ . Nous prendrons encore comme première hypothèse  $c_{12} * c_{23} = \varepsilon_2$  d'où l'on tire la relation (23)

$$\varepsilon_1 * \varepsilon_2 * \varepsilon_3 = \varepsilon_1 * \varepsilon_3,$$

et par conséquent:

$$d_{13} = d_{12} * d_{23} = d_{12} = d_{23}, \tag{41}$$

puisque  $V(\varepsilon_1) = V(\varepsilon_2) = V(\varepsilon_3)$  et  $V(d_{12}) = V(d_{13}) = V(d_{23})$  il vient

$$V(c_{13}) = V(c_{12}) = V(c_{23}). \tag{42}$$

Lorsque deux réseaux  $\varepsilon_1$  et  $\varepsilon_3$  se déduisant d'un réseau  $\varepsilon_2$  par deux isométries sont tels que le réseau DSC construit à partir de  $c_{12}$  et de  $c_{23}$  est  $\varepsilon_2$ , les mailles primitives de  $c_{12}, c_{23}$  et  $c_{13}$  ont même volume si  $d_{12} = d_{23}$ .

La maille primitive du réseau de coïncidence entre  $\iota_1$ ,  $\iota_2$  et  $\iota_3$  a une multiplicité égale au carré de celle de  $c_{12}$ .

Lorsque  $c_{12} * c_{23}$  est un réseau multiple de  $\iota_2$ , aux relations (27) à (39) qui restent applicables, vient s'ajouter:

$$d_{23} = d_{02} * d_{03} = d_{12} = d_{01} * d_{02}, \quad (43)$$

qui, compte tenu des relations (33) et (35), montre que

$$d_{03} = d_{01}, \quad (44)$$

comme

$$\iota_0 \cdot (\iota_1 * \iota_3) = \iota_0, \quad (39)$$

$$V(c_{01}) = V(c_{03}) = V(c_{13}).$$

Lorsque deux réseaux  $\iota_1$  et  $\iota_3$  se déduisant d'un réseau  $\iota_2$  par deux isométries sont tels que  $d_{12} = d_{23}$  et que le réseau DSC construit sur  $c_{12}$  et  $c_{23}$  est un réseau multiple de  $\iota_2$ , une maille primitive de  $c_{13}$  a une multiplicité égale au rapport de la multiplicité de la maille primitive de  $c_{12}$  (ou de  $c_{23}$ ) à la multiplicité du réseau  $c_{12} * c_{23}$ .

Ces derniers résultats sont schématisés sur la Fig. 3.

Dans tous les calculs précédents, nous avons introduit les hypothèses sous la forme  $c_{12} * c_{23} = \iota_2$  ou bien  $c_{12} * c_{23} = \iota_0 \cdot \iota_2$  et  $d_{12} \neq d_{23}$  ou bien  $d_{12} = d_{23}$ . On aurait pu tout aussi bien poser le problème à partir de  $d_{12} \cdot d_{23} = \iota_2$  ou  $d_{12} \cdot d_{23} = \iota_0 * \iota_2$  et  $c_{12} \neq c_{23}$  ou  $c_{12} = c_{23}$ . Lorsque  $c_{12} \neq c_{23}$ , les résultats sont inchangés, chaque relation existant sous sa forme duale, les propriétés des réseaux  $\mathcal{R}_1$ ,  $\mathcal{R}_2$  et  $\mathcal{R}_3$  sont les mêmes que celles de  $\iota_1$ ,  $\iota_2$ ,  $\iota_3$  dont ils sont respectivement réciproques. Par contre, lorsque  $c_{12} = c_{23}$ , la solution est donnée dans l'espace réciproque en écrivant les transformées de Fourier des relations précédemment écrites dans l'espace direct lorsque  $d_{12} = d_{23}$ .

Un des buts de ce travail étant de trouver les relations entre réseaux de coïncidence et entre réseaux DSC pour le système cubique, nous poursuivrons cette étude en éliminant le cas où  $d_{12} = d_{23}$  qui ne peut être rencontré pour des réseaux cubiques. En effet, les isométries reliant  $\iota_1$  et  $\iota_3$  à  $\iota_2$  relient également  $\mathcal{R}_1$  et  $\mathcal{R}_3$  à  $\mathcal{R}_2$  respectivement réciproques de  $\iota_1$ ,  $\iota_3$  et  $\iota_2$ . Par ailleurs,  $\mathcal{R}_1$ ,  $\mathcal{R}_2$  et  $\mathcal{R}_3$  sont également cubiques, les

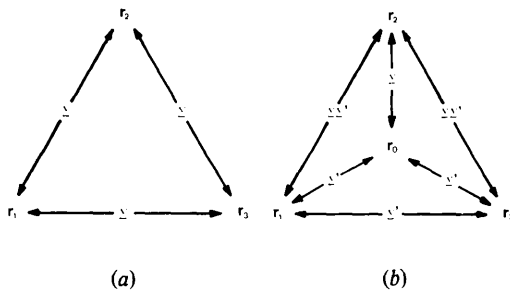


Fig. 3. Relations de multiplicité entre réseaux isométriques tels que:  $d_{12} = d_{23}$ . (a)  $c_{12} * c_{23} = \iota_2$ . (b)  $c_{12} * c_{23} = c_{02}$ .

indices de multiplicités sont les mêmes dans l'espace direct et dans l'espace réciproque et toute relation de l'espace direct peut être écrite dans l'espace réciproque. Par exemple; si  $c_{12} = c_{23}$ , il en résulte que  $\mathcal{C}_{12} = \mathcal{C}_{23}$  et donc  $d_{12} = d_{23}$ . Par conséquent, en restant dans l'hypothèse des réseaux de coïncidence à trois dimensions, pour que deux réseaux cubiques  $\iota_1$  et  $\iota_3$  soient confondus, il faut et il suffit qu'ils se déduisent par des isométries d'un troisième réseau  $\iota_2$  avec lequel ils admettent même réseau de coïncidence ou même réseau DSC.

Par ailleurs, nous nous limiterons à l'hypothèse  $c_{12} * c_{23} = \iota_2$ , le cas où  $c_{12} * c_{23} = \iota_0 \cdot \iota_2$  s'en déduisant immédiatement.

**Relations entre réseaux de coïncidence et DSC dans le système cubique**

Nous poursuivrons l'analyse précédente en complétant le schéma de la Fig. 1. Pour cela, nous y introduirons le réseau  $\iota_4$  relié à  $\iota_3$  par l'isométrie  $S$  qui permet de construire  $\iota_1$  à partir de  $\iota_2$  (Fig. 4).

Nous nous proposons d'évaluer  $\sigma$  indice de multiplicité de  $c_{34}$  en fonction de  $\Sigma$  et de  $\Sigma'$ . Afin de simplifier la discussion, nous choisissons pour  $S$  une opération de symétrie plane par rapport à un plan  $(hkl)$  du réseau  $\iota_2$ , les résultats étant inchangés lorsque  $S$  est une rotation. Par suite,  $c_{14}$  et  $c_{24}$  sont respectivement symétriques de  $c_{23}$  et de  $c_{13}$ ; les multiplicités des réseaux  $c_{14}$  et  $c_{24}$ , par rapport aux réseaux dont ils sont issus sont respectivement  $\Sigma'$  et  $\Sigma\Sigma'$  ainsi que cela est indiqué sur la Fig. 4.

L'évaluation de  $\sigma$  nécessite de distinguer les deux cas suivants: ou bien  $c_{24}$  et  $c_{23}$  admettent  $\iota_2$  comme réseau DSC, ou bien  $c_{24}$  est un réseau multiple de  $c_{23}$ .

(1)  $c_{24} * c_{23} = \iota_2$  donc

$$d_{24} \cdot d_{23} = \iota_2, \quad (45)$$

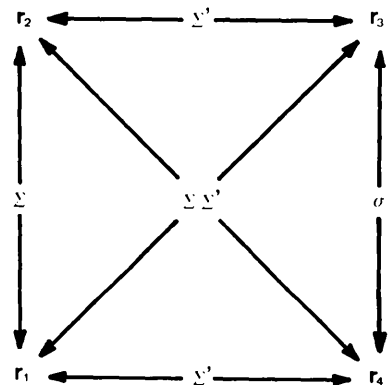


Fig. 4. Relations de multiplicité entre quatre réseaux cubiques  $\iota_1$  et  $\iota_4$  étant les symétriques respectifs de  $\iota_2$  et de  $\iota_3$  par rapport à un plan réticulaire de  $\iota_2$ .

et par raison de symétrie:

$$\begin{aligned} c_{13} * c_{14} &= \varepsilon_1, \\ d_{13} \cdot d_{14} &= \varepsilon_1, \end{aligned} \quad (46)$$

des égalités (45) et (46), nous tirons:

$$\begin{aligned} \varepsilon_2 \cdot (\varepsilon_3 \cdot \varepsilon_4) &= \varepsilon_3 \cdot \varepsilon_4, \\ \varepsilon_1 \cdot (\varepsilon_3 \cdot \varepsilon_4) &= \varepsilon_3 \cdot \varepsilon_4. \end{aligned} \quad (47)$$

Par conséquent:

$$\begin{aligned} c_{23} \cdot c_{24} &= c_{34}, \\ c_{13} \cdot c_{14} &= c_{34}, \end{aligned} \quad (48)$$

et

$$\begin{aligned} d_{23} * d_{24} &= d_{34}, \\ d_{13} * d_{14} &= d_{34}. \end{aligned} \quad (49)$$

L'hypothèse  $c_{24} * c_{23} = \varepsilon_2$  conduit à la valeur  $\Sigma'^2 \Sigma$  pour  $\sigma$ .

La macle miroir d'indice  $\Sigma$  du réseau  $\varepsilon_2$  est une macle miroir d'indice  $\Sigma'^2 \Sigma$  pour le réseau  $\varepsilon_3$ . De plus, les relations (48) et (49) permettent d'écrire:

$$\begin{aligned} c_{23} \cdot c_{14} &= c_{24} \cdot c_{13} = c_{34}, \\ d_{23} * d_{14} &= d_{24} * d_{13} = d_{34}. \end{aligned} \quad (50)$$

Ce qui montre que la macle miroir d'indice  $\Sigma$  dans  $\varepsilon_2$  définit une macle miroir d'indice  $\Sigma \Sigma'$  dans  $c_{23}$  et  $d_{23}$  et une macle d'indice  $\Sigma'$  dans  $c_{13}$  et  $d_{13}$ .

Il est possible de montrer que  $c_{23} * c_{14} = d_{12}$  d'où l'on tire que  $c_{13} * c_{24} = c_{12}$ . En effet:

$$\begin{aligned} c_{23} * c_{14} &= (\varepsilon_2 \cdot \varepsilon_3) * (\varepsilon_1 \cdot \varepsilon_4) \\ &= (\varepsilon_1 * \varepsilon_2) \cdot (\varepsilon_1 * \varepsilon_3) \cdot (\varepsilon_2 * \varepsilon_4) \cdot (\varepsilon_3 * \varepsilon_4), \end{aligned} \quad (51)$$

$d_{12}$  étant un réseau multiple de  $d_{13}, d_{24}$  et  $d_{34}$ ,

$$c_{23} * c_{14} = d_{12}, \quad (52)$$

de même, on montrerait que:

$$d_{23} \cdot d_{14} = c_{12}. \quad (53)$$

Considérons  $c_{13} * c_{24}$ . D'après la relation (24), on peut écrire

$$c_{13} * c_{24} = (c_{12} \cdot c_{23}) * (c_{12} \cdot c_{14}) = c_{12} \cdot (c_{23} * c_{14}). \quad (54)$$

Compte tenu de (52)

$$c_{13} * c_{24} = c_{12} \cdot d_{12} = c_{12}. \quad (55)$$

De même, on montrerait que:

$$d_{13} \cdot d_{24} = d_{12} \quad (56)$$

(2)  $c_{24}$  est un réseau multiple de  $c_{23}$ . L'hypothèse se traduit par:

$$c_{24} * c_{23} = c_{23}, \quad (57)$$

et par raison de symétrie

$$c_{13} * c_{14} = c_{14}. \quad (58)$$

D'où nous tirons, d'après les résultats schématisés par la Fig. 1

$$\begin{aligned} c_{23} \cdot c_{34} &= c_{24}, \\ c_{14} \cdot c_{34} &= c_{13}, \end{aligned} \quad (59)$$

ainsi que:

$$\begin{aligned} d_{23} * d_{34} &= d_{24}, \\ d_{14} * d_{34} &= d_{13}, \end{aligned} \quad (60)$$

et  $\sigma = \Sigma$ .

La macle miroir d'indice  $\Sigma$  pour le réseau  $\varepsilon_2$  est également une macle miroir d'indice  $\Sigma$  pour le réseau  $\varepsilon_3$ . Il en est de même pour le réseau  $c_{23}$ . En effet, considérons l'expression (54):

$$c_{13} * c_{24} = c_{12} \cdot (c_{23} * c_{14}).$$

$c_{23} * c_{14}$  peut être tiré de la relation (51) en remarquant qu'avec les hypothèses faites,  $d_{12}$  est un réseau multiple de  $d_{13}$  et de  $d_{24}$ ,

$$c_{23} * c_{14} = d_{12} \cdot d_{13} \cdot d_{24} \cdot d_{34} = d_{12} \cdot d_{34}.$$

Il vient alors:

$$c_{13} * c_{24} = c_{12} \cdot d_{12} \cdot d_{34} = c_{12} \cdot d_{34},$$

soit en développant:

$$\begin{aligned} c_{13} * c_{24} &= \varepsilon_1 \cdot \varepsilon_2 \cdot (\varepsilon_3 * \varepsilon_4) = \varepsilon_1 \cdot [(\varepsilon_2 \cdot \varepsilon_3) * (\varepsilon_2 \cdot \varepsilon_4)] \\ &= \varepsilon_1 \cdot (\varepsilon_2 \cdot \varepsilon_3) = \varepsilon_1 \cdot \varepsilon_3. \end{aligned}$$

Ce qui montre que  $c_{24}$  est un réseau multiple de  $c_{13}$  qui, ayant même volume de maille primitive que  $c_{13}$ , est confondu avec lui.

Par conséquent:

$$c_{13} = c_{24} = c_{13} \cdot c_{24} = c_{23} \cdot c_{14}, \quad (61)$$

$c_{13}$  est un réseau multiple d'indice  $\Sigma$  de  $c_{23}$ .

A partir de ces deux cas précédents, il est possible d'imaginer des exemples plus complexes. A titre d'illustration, la Fig. 5 représente une situation que l'on

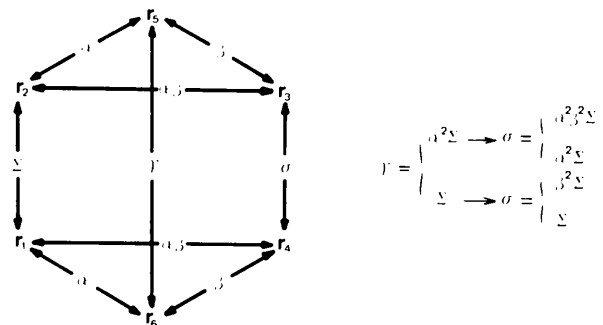


Fig. 5. Cas de la Fig. 4 avec décomposition de  $\Sigma'$  en  $\alpha$  et  $\beta$ .

peut rencontrer lorsque  $\Sigma' = \alpha\beta$ ,  $c_{23}$  étant un réseau multiple d'un réseau  $z_5$  tel que:

$$\begin{aligned} V(c_{25}) &= \alpha V(z_2) = \alpha V(z_5), \\ V(c_{53}) &= \beta V(z_5) = \beta V(z_3). \end{aligned}$$

Le réseau  $z_6$  étant le symétrique de  $z_5$  par rapport au plan  $(hkl)$  de  $z_2$  définissant dans  $z_2$  une macle miroir d'indice  $\Sigma$ , la multiplicité  $\gamma$  du réseau  $c_{56}$  peut prendre deux valeurs:  $\gamma = \alpha^2 \Sigma$  et  $\gamma = \Sigma$  ce qui conduit pour  $\sigma$ , multiplicité de  $c_{34}$ , à quatre valeurs:  $\sigma = \alpha^2 \beta^2 \Sigma$ ,  $\sigma = \alpha^2 \Sigma$ ,  $\sigma = \beta^2 \Sigma$ ,  $\sigma = \Sigma$ .

### Conclusion

Avec la représentation d'un réseau par une distribution de Poisson, le réseau de coïncidence et le réseau DSC associés à deux réseaux  $z_1$  et  $z_2$  peuvent se définir respectivement à partir du produit scalaire et du produit de convolution des distributions représentatives de  $z_1$  et de  $z_2$ . Le passage de l'espace direct à l'espace réciproque, par transformation de Fourier, permet de mettre en évidence la dualité entre réseau de coïncidence et réseau DSC.

Pour les problèmes à trois réseaux, les deux opérations précitées sont associatives et commutatives. De plus, elles sont distributives lorsque les réseaux de coïncidence ont mêmes dimensions que les réseaux dont ils sont issus (réseaux tri périodiques par exemple). Les propriétés de ces opérations permettent d'étudier, en général assez simplement les réseaux de coïncidence et DSC. En particulier, la généralisation de la notion de produit de macles conduit à la mise en évidence de relations entre réseaux de coïncidence ou entre réseaux DSC qui peuvent aboutir à des méthodes de construction de ces réseaux (en préparation).

Ce travail a bénéficié des critiques et des conseils de M le Professeur P. Perio qui a, en particulier, suggéré d'aborder ces problèmes de réseaux à partir des distributions de Poisson et de mettre en évidence la dualité entre réseaux de coïncidence et DSC par la transformation de Fourier.

### APPENDICE I

#### Représentation des réseaux de coïncidence et DSC par des distributions de Poisson

Considérons deux réseaux  $z_1$  et  $z_2$  portés par l'axe  $Ox$ :  $z_1 = \sum_n \delta(x - na_1)$ ,  $z_2 = \sum_m \delta(x - ma_2)$  et supposons qu'ils admettent une période multiple commune  $T_1 a_1 = T_2 a_2$  qui définit une maille primitive du réseau de coïncidence  $c_{12}$ :

$$c_{12} = \sum_p \delta(x - pT_1 a_1) = \sum_p \delta(x - pT_2 a_2).$$

Tout réseau  $z_1$  peut être obtenu à partir de la composition de l'un de ses réseaux multiples  $c_{12}$  par le motif de la maille primitive du réseau multiple considéré. Ce motif est obtenu à partir de l'expression  $z_1 = \sum_n \delta(x - na_1)$  en limitant la sommation aux points de  $z_1$  compris dans une maille primitive de  $c_{12}$ . Nous noterons ce motif  $z_1/c_{12}$  qui représente le groupe quotient associé au groupe de translations  $z_1$  et à son sous-groupe  $c_{12}$ . En termes de distributions,  $z_1/c_{12}$  est défini comme le produit de  $z_1$  par une fonction porte de largeur  $T_1 a_1$  soit:

$$z_1/c_{12} = \Pi(x/T_1 a_1) \cdot \sum_n \delta(x - na_1).$$

$\Pi(x/t_1 a_1)$  est une fonction nulle si  $|x| > T_1 a_1/2$ , égale à 1 si  $|x| < T_1 a_1/2$  et égale à  $\frac{1}{2}$  si  $|x| = T_1 a_1/2$ . Avec ces notations:

$$\begin{aligned} z_1 &= c_{12} * (z_1/c_{12}) \\ &= \left[ \sum_p \delta(x - pT_1 a_1) \right] * \left[ \Pi(x/T_1 a_1) \cdot \sum_n \delta(x - na_1) \right], \end{aligned}$$

de même:

$$\begin{aligned} z_2 &= c_{12} * (z_2/c_{12}) \\ &= \left[ \sum_p \delta(x - pT_2 a_2) \right] * \left[ \Pi(x/T_2 a_2) \cdot \sum_m \delta(x - ma_2) \right]. \end{aligned}$$

La relation (6), qui s'écrit

$$d_{12} = z_1 * z_2 = (z_1/c_{12}) * c_{12} * c_{12} * (z_2/c_{12}),$$

a une signification claire en ce qui concerne les réseaux. Pour la lui conserver au sens des distributions, il est nécessaire d'éliminer la double composition par  $c_{12}$  qui bien que n'apportant pas d'élément étranger au produit  $z_1/c_{12} * c_{12} = z_1$ , affecte chaque point d'une infinité de fonctions pic. Au sens des distributions,  $d_{12}$  s'écrira donc:

$$d_{12} = (z_1/c_{12}) * c_{12} * (z_2/c_{12}). \quad (A1,1)$$

Dans cette expression, tous les produits de convolution des termes pris deux à deux ont un sens puisque au moins une des distributions est à support borné. Le produit de convolution (A1,1) est donc associatif et

$$d_{12} = z_1 * (z_2/c_{12}) = z_2 * (z_1/c_{12}),$$

ou bien

$$\begin{aligned} d_{12} &= \left[ \Pi(x/T_1 a_1) \cdot \sum_n \delta(x - na_1) \right] * \sum_m \delta(x - ma_2) \\ &= \left[ \Pi(x/T_2 a_2) \cdot \sum_m \delta(x - ma_2) \right] * \sum_n \delta(x - na_1). \end{aligned} \quad (A1,2)$$



Le passage à l'espace dual par transformation de Fourier permet de définir le réseau de coïncidence, au sens des distributions, et de vérifier que l'expression (AI,2) représente le réseau  $d_{12}$  par un peigne de Dirac. En effet:

$$d_{12}^+ = \left[ (\pi X)^{-1} (\sin \pi X T_1 a_1) \right.$$

$$\left. * (1/a_1) \sum_n \delta(X - n/a_1) \right] (1/a_2) \sum_m \delta(X - m/a_2). \quad (AI,3)$$

La fonction  $(\sin \pi X T_1 a_1)/(\pi X)$  vaut  $T_1 a_1$  à l'origine et est nulle aux points  $X = k/T_1 a_1 = k/T_2 a_2$ . Dans la relation (AI,3), le crochet représente la répétition de la fonction  $(\sin \pi X T_1 a_1)/(\pi X a_1)$  en tout point de  $\mathcal{R}_1$  réciproque de  $\mathcal{R}_1$ ; il vaut  $T_1$  aux points  $X = n/a_1$  et 0 aux points  $X = k/T_1 a_1 = k/T_2 a_2 \neq n/a_1$ . Par conséquent,  $d_{12}^+$  est une fonction nulle en tout point sauf aux points où les réseaux  $\mathcal{R}_1$  et  $\mathcal{R}_2$ , réciproques de  $\mathcal{R}_1$  et  $\mathcal{R}_2$ , coïncident; c'est-à-dire pour  $X = NT_2/a_1 = NT_1/a_2$ . Ceci peut s'écrire

$$d_{12}^+ = \mathcal{C}_{12} = (T_1/a_2) \sum_N \delta(X - NT_1/a_2). \quad (AI,4)$$

Dans l'espace réciproque, les relations (AI,3) et (AI,4) représentent le réseau de coïncidence par une distribution de Poisson dont la transformée de Fourier inverse est

$$d_{12} = \mathcal{C}_{12}^+ = \sum_N \delta(x - Na_2/T_1) = \sum_N \delta(x - Na_1/T_2). \quad (AI,5)$$

Réciproquement, on peut écrire

$$c_{12} = \mathcal{L}_{12}^+. \quad (AI,6)$$

La relation (AI,5) montre que le vecteur de composante  $a_2/T_1 = a_1/T_2$  est une combinaison linéaire et entière des vecteurs ayant respectivement pour composante  $a_1$  et  $a_2$ .

Lorsque le réseau  $c_{12}$  se réduit à l'origine,  $T_1 = T_2$  tend vers l'infini. L'équation (AI,4) montre que le premier point de  $\mathcal{C}_{12}$  est rejeté à l'infini:  $\mathcal{C}_{12}$  se réduit à l'origine. Le réseau  $d_{12}$  dont le paramètre tend vers 0 (AI,5) a pour limite le continuum de l'espace auquel appartiennent  $\mathcal{R}_1$  et  $\mathcal{R}_2$  (ici l'axe  $Ox$ ).

## APPENDICE II

**Condition nécessaire et suffisante à la stricte distributivité des produit scalaire et produit de convolution:  $c_{12} * c_{13} * c_{23} = d_{12} \cdot d_{13} \cdot d_{23}$**

### (a) Condition nécessaire

Si les deux produits sont strictement distributifs, l'expression  $c_{12} * c_{23} * c_{13}$  peut se développer de la façon suivante:

$$\begin{aligned} c_{12} * c_{23} * c_{13} &= [z_2 \cdot (z_1 * z_3)] * c_{13} \\ &= (z_2 * c_{13}) \cdot (z_1 * z_3 * c_{13}) \\ &= (z_2 * z_1) \cdot (z_2 * z_3) \cdot (z_1 * z_3), \\ c_{12} * c_{23} * c_{13} &= d_{12} \cdot d_{23} \cdot d_{13}. \end{aligned} \quad (AII,1)$$

### (b) Réciproque

Supposons la relation (AII,1) vérifiée. Puisque

$$d_{12} \cdot d_{13} \supset z_1 * (z_2 \cdot z_3), d_{12} \cdot d_{13} \cdot d_{23} \supset [z_1 * (z_2 \cdot z_3)] \cdot d_{23}. \quad (AII,2)$$

Par ailleurs,  $c_{12} * c_{13} \subset z_1$ ,  $c_{13} * c_{23} \subset z_3$ ,  $c_{23} * c_{12} \subset z_2$ , par conséquent  $d_{12} \cdot d_{13} \cdot d_{23} = c_{12} * c_{13} * c_{23} \subset z_1 * c_{23}$  et  $d_{12} \cdot d_{13} \cdot d_{23} = c_{12} * c_{13} * c_{23} \subset d_{23}$  d'où:

$$d_{12} \cdot d_{13} \cdot d_{23} \subset [z_1 * (z_2 \cdot z_3)] \cdot d_{23}. \quad (AII,3)$$

La condition (AII,1) implique la coexistence des relations (AII,2) et (AII,3) par conséquent:

$$d_{12} \cdot d_{13} \cdot d_{23} = [z_1 * (z_2 \cdot z_3)] \cdot d_{23}, \quad (AII,4)$$

de même,  $(d_{12} \cdot d_{13}) * d_{23} = z_1 * (z_2 \cdot z_3) * d_{23}$ ; en effet:

$$z_1 * (z_2 \cdot z_3) * d_{23} = z_1 * d_{23} = z_1 * z_2 * z_3. \quad (AII,5)$$

Mais

$$\begin{aligned} d_{12} \cdot d_{13} \supset z_1 \quad \text{et} \quad (d_{12} \cdot d_{13}) * d_{23} \supset z_1 * d_{23} \\ = z_1 * z_2 * z_3. \end{aligned} \quad (AII,6)$$

Inversement,  $z_1 * z_2 * z_3 \supset d_{23}$  et  $z_1 * z_2 * z_3 = d_{12} * d_{13} \supset d_{12} \cdot d_{13}$ , donc

$$z_1 * z_2 * z_3 \supset (d_{12} \cdot d_{13}) * d_{23} \quad (AII,7)$$

et

$$(d_{12} \cdot d_{13}) * d_{23} = z_1 * z_2 * z_3. \quad (AII,8)$$

Des relations (AII,5) et (AII,8) on tire

$$(d_{12} \cdot d_{13}) * d_{23} = z_1 * (z_2 \cdot z_3) * d_{23}. \quad (AII,9)$$

Les réseaux  $(d_{12} \cdot d_{13})$  d'une part et  $z_1 * (z_2 \cdot z_3)$  d'autre part admettent même réseau de coïncidence (AII,4) et même réseau DSC (AII,9) avec  $d_{23}$ . Si la maille primitive de  $d_{12} \cdot d_{13} \cdot d_{23} = [z_1 * (z_2 \cdot z_3)] \cdot d_{23}$  contient  $N$  noeuds de  $d_{23}$ ,  $N_1$  noeuds de  $d_{12} \cdot d_{13}$  et  $N_2$  noeuds de  $z_1 * (z_2 \cdot z_3)$  [ $N_1 > N_2$  car  $d_{12} \cdot d_{13} \supset z_1 * (z_2 \cdot z_3)$ ], elle contient  $NN_1$  noeuds de  $(d_{12} \cdot d_{13}) * d_{23}$  et  $NN_2$  noeuds de  $z_1 * (z_2 \cdot z_3)$ . Compte tenu de la relation (AII,9):  $NN_1 = NN_2$  et  $N_1 = N_2$ . Le réseau  $z_1 * (z_2 \cdot z_3)$  multiple d'ordre 1 du réseau  $d_{12} \cdot d_{13}$  est confondu avec ce dernier.

Le même raisonnement peut être fait pour montrer que  $c_{12} * c_{13} = z_1 \cdot (z_2 * z_3)$ . La relation (AII,1) implique la double distributivité absolue des deux produits.

**Remarque**

Le raisonnement précédent, basé sur le dénombrement des noeuds de  $\varepsilon_1 * \varepsilon_2 * \varepsilon_3$  contenus dans une maille primitive de  $d_{12} \cdot d_{13} \cdot d_{23}$  ne peut être tenu si  $d_{12} \cdot d_{13} \cdot d_{23}$  et son homologue de l'espace réciproque  $\mathcal{L}_{12} \cdot \mathcal{L}_{13} \cdot \mathcal{L}_{23}$  dégèrent chacun en un continuum. Cependant, on pourrait vérifier que cette dégénérescence est incompatible avec la relation (AII, 1) prise pour hypothèse.

A titre d'illustration la Fig. 6 donne un exemple de semi-distributivité et de stricte distributivité.

**Condition suffisante à la double distributivité des deux produits: triple périodicité de  $c_{12}$  et  $c_{23}$**

Trois réseaux  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$  étant donnés, dans l'hypothèse où  $c_{12}$  et  $c_{23}$  sont à trois dimensions, tous les réseaux que l'on peut construire à partir de  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$  sont à trois dimensions et sont des réseaux multiples d'un réseau  $d_{123}$ ;

$$d_{123} = \varepsilon_1 * \varepsilon_2 * \varepsilon_3 = d_{12} * d_{13} = d_{12} * d_{23} = d_{13} * d_{23}. \quad (14)$$

Soient  $a, b, c$  les rapports des volumes des mailles primitives de  $d_{12}, d_{13}$  et  $d_{23}$  au volume de la maille primitive de  $d_{123}$ ,

$$\begin{aligned} V(d_{12}) &= a V(d_{123}), \\ V(d_{13}) &= b V(d_{123}), \\ V(d_{23}) &= c V(d_{123}), \end{aligned} \quad (AII, 10)$$

soient  $\rho_1 = d_{12} \cdot d_{13}, \rho_2 = d_{23} \cdot d_{12}, \rho_3 = d_{13} \cdot d_{23}$ .

Des relations (14) et (10), nous tirons alors

$$\begin{aligned} V(\rho_1) &= ab V(d_{123}), \\ V(\rho_2) &= ac V(d_{123}), \\ V(\rho_3) &= bc V(d_{123}). \end{aligned} \quad (AII, 11)$$

Les réseaux  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$  sont des réseaux multiples respectivement de  $\rho_1, \rho_2, \rho_3$ ; posons

$$V(\varepsilon_1) = \alpha V(\rho_1) = \alpha ab V(d_{123}) = \alpha a V(d_{13}) = \alpha b V(d_{12}),$$

$$V(\varepsilon_2) = \beta V(\rho_2) = \beta ac V(d_{123}) = \beta c V(d_{12}) = \beta a V(d_{23}),$$

$$V(\varepsilon_3) = \gamma V(\rho_3) = \gamma bc V(d_{123}) = \gamma b V(d_{23}) = \gamma c V(d_{13}).$$

$$(AII, 12)$$

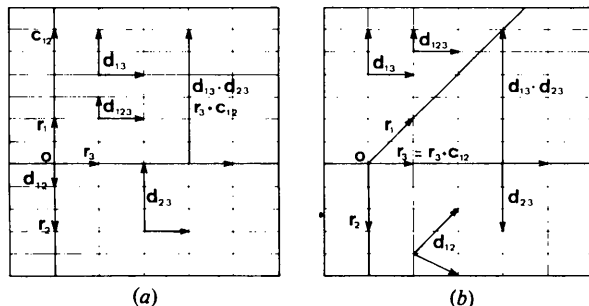


Fig. 6. Exemples de stricte distributivité et de semi-distributivité des deux opérations. (a)  $c_{12} * c_{23} * c_{31} = d_{12} \cdot d_{23} \cdot d_{31}$ , stricte distributivité. (b)  $c_{12} * c_3 * c_{31} \neq d_{12} \cdot d_{23} \cdot d_{31}$ , semi-distributivité.

D'où, en utilisant à nouveau la relation (10):

$$\begin{aligned} V(c_{12}) &= \alpha \beta c V(d_{12}) = \beta c V(\varepsilon_1) = \alpha b V(\varepsilon_2) \\ &= \alpha \beta abc V(d_{123}), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} V(c_{13}) &= \alpha \gamma a c V(d_{13}) = \gamma c V(\varepsilon_1) = \alpha a V(\varepsilon_3) \\ &= \alpha \gamma abc V(d_{123}), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} V(c_{23}) &= \beta \gamma a b V(d_{23}) = \gamma b V(\varepsilon_2) = \beta a V(\varepsilon_3) \\ &= \beta \gamma abc V(d_{123}). \end{aligned} \quad (AII, 13)$$

Il reste à évaluer le volume de la maille primitive de  $c_{123}$ , réseau de coïncidence entre  $c_{12}, c_{13}$  et  $c_{23}$ . Pour ce faire, on peut remarquer que les réseaux  $c_{12}, c_{13}$  et  $c_{23}$  sont des multiples de  $\rho = d_{12} \cdot d_{13} \cdot d_{23}$ . De la relation (AII,8) il vient:

$$\rho_1 * d_{23} = d_{123},$$

puisque  $V(\rho_1) = ab V(d_{123})$  et  $V(d_{23}) = c V(d_{123})$ , l'équation (10) conduit à:

$$V(\rho) = abc V(d_{123}). \quad (AII, 14)$$

Par ailleurs, considérons les réseaux  $\rho_4 = \varepsilon_1 \cdot d_{23}, \rho_5 = \varepsilon_2 \cdot d_{13}$  et  $\rho_6 = \varepsilon_3 \cdot d_{12}$ . Il est clair que:

$$\begin{aligned} &= \varepsilon_1 \cdot \rho_3 \cdot d_{12} = \varepsilon_1 \cdot \varepsilon_2, \\ &= \varepsilon_2 \cdot \rho_4 \cdot \rho_5 \\ &= \varepsilon_3 \cdot \rho_5 \cdot \rho_6 \\ &= \varepsilon_1 \cdot \rho_4 \cdot \rho_6 = c_{123}. \end{aligned} \quad (AII, 15)$$

Nous pouvons évaluer  $V(c_{123})$  à partir des relations (AII,14) et (10) si nous montrons que  $\rho_4 * \rho_5 = \rho_4 * \rho_6 = \rho_5 * \rho_6 = \rho$ .

Les trois réseaux  $\rho_4, \rho_5, \rho_6$  sont des réseaux multiples de  $\rho$ . En effet:

$$\rho_4 \cdot \rho = \varepsilon_1 \cdot d_{23} \cdot d_{12} \cdot d_{13} \cdot d_{23} = \varepsilon_1 \cdot d_{23} = \rho_4,$$

de même  $\rho_5 \cdot \rho = \rho_5$  et  $\rho_6 \cdot \rho = \rho_6$ . Les réseaux  $\rho_4 * \rho_5, \rho_5 * \rho_6$  et  $\rho_4 * \rho_6$  sont également des réseaux multiples de  $\rho$ . De plus, les relations (AII,10), (AII,12), et (10) permettent d'écrire, compte tenu de (AII, 14)

$$\begin{aligned} V(\rho_4) &= \alpha abc V(d_{123}) = \alpha V(\rho), \\ V(\rho_5) &= \beta abc V(d_{123}) = \beta V(\rho), \\ V(\rho_6) &= \gamma abc V(d_{123}) = \gamma V(\rho). \end{aligned} \quad (AII, 16)$$

Des relations (AII,15), (AII,13) et (AII,16) et (10) nous tirons:

$$V(c_{12}) = \alpha \beta V(\rho) = \beta V(\rho_4) = \alpha V(\rho_5) = \alpha \beta V(\rho_4 * \rho_5),$$

$$V(c_{13}) = \alpha \gamma V(\rho) = \alpha V(\rho_6) = \gamma V(\rho_4) = \alpha \gamma V(\rho_4 * \rho_6),$$

$$V(c_{23}) = \beta \gamma V(\rho) = \gamma V(\rho_5) = \beta V(\rho_6) = \beta \gamma V(\rho_5 * \rho_6).$$

$$(AII, 17)$$

Ce qui montre que  $\rho_4 * \rho_5, \rho_4 * \rho_6, \rho_5 * \rho_6$ , multiples d'ordre 1 de  $\rho$  sont confondus avec  $\rho$  et  $\rho_4 * \rho_5 = \rho_5 * \rho_6$

$= \rho_6 * \rho_4 = \rho_4 * \rho_5 * \rho_6 = \rho$ . La relation (AII,14) démontrée pour  $\rho_1, \rho_2, \rho_3$  s'applique aux réseaux  $\rho_4, \rho_5, \rho_6$  et:

$$\begin{aligned} \alpha &= c, \\ \beta &= b, \\ \gamma &= a, \end{aligned}$$

$$V(c_{123}) = \alpha\beta\gamma V(\rho) = \alpha\beta\gamma abc V(d_{123}). \quad (\text{AII},18)$$

En répétant le raisonnement dans l'espace réciproque par exemple, on montrerait que  $c_{12} * c_{13} * c_{23}$  a une maille primitive de volume  $V(\rho)$ , c'est un réseau multiple d'ordre 1 de  $\rho$  et  $c_{12} * c_{13} * c_{23} = d_{12} \cdot d_{13} \cdot d_{23}$ .

Il suffit donc que  $c_{12}$  et  $c_{23}$  soient à trois dimensions pour que la relation (AII,1) soit vérifiée et donc pour que les deux produits soient strictement distributifs l'un par rapport à l'autre.

### APPENDICE III

#### Relations entre les volumes des mailles primitives des réseaux construits à partir de trois réseaux $\rho_1, \rho_2, \rho_3$ ayant des mailles primitives de même volume

Si  $V(\rho_1) = V(\rho_2) = V(\rho_3)$ , des équations (AII,12) nous tirons

$$\alpha ab = \beta ac = \gamma bc,$$

soit

$$\begin{aligned} \alpha b &= \beta c, \\ \beta a &= \gamma b, \\ \alpha a &= \gamma c. \end{aligned} \quad (\text{AIII},1)$$

Les relations (AIII,1) sont vérifiées quels que soient  $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ , en particulier si ces entiers sont des nombres premiers. Ceci impose deux solutions au système (AIII,1).

La première solution est telle que

$$\begin{aligned} \alpha &= c, \\ \beta &= b, \\ \gamma &= a. \end{aligned} \quad (\text{AIII},2)$$

La seconde solution est telle que:

$$\begin{aligned} a &= b = c, \\ \alpha &= \beta = \gamma. \end{aligned} \quad (\text{AIII},3)$$

En effet, de (AIII,1) nous tirons par exemple:  $\alpha = \beta c/b$ ; cette relation doit être vérifiée quels que soient  $\beta, c, b$  y compris lorsqu'ils sont premiers entre eux. Ceci impose pour  $b$  de ne prendre pour valeur que  $\beta, c$  ou 1.

(1)  $b = \beta$ ; de  $\beta a = \gamma b$  nous obtenons  $\gamma = a$  et de  $\alpha a = \gamma c$  nous obtenons  $\alpha = c$ . Soit la première solution:

$$(2) \quad b = c; \alpha = \beta c/c = \beta = \gamma b/a.$$

$\gamma, b$  et  $a$  pouvant être premiers entre eux, cette condition impose pour  $a$  les valeurs  $\gamma, b$  ou 1.

(a)  $a = \gamma$  correspond à la solution

$$\begin{aligned} a &= \gamma, \\ \alpha &= \beta = b = c, \end{aligned}$$

qui est un cas particulier de la solution précédente.

(b)  $a = 1, b = c, \alpha = \beta = \gamma c$  ce qui n'autorise pour  $\gamma$  que les valeurs 1 ou  $\beta$ , d'où les solutions

$$\begin{aligned} a &= \gamma = 1, \\ \alpha &= \beta = b = c, \end{aligned}$$

solution particulière de la précédente et

$$\begin{aligned} a &= b = c = 1, \\ \alpha &= \beta = \gamma, \end{aligned}$$

qui représente un cas particulier de la solution (AIII,3).

(c)  $b = a, a = b = c$  conduit à  $\alpha = \beta = \gamma$  constituant la solution (AIII,3).

Enfin, le même raisonnement pour  $b = 1$  conduirait aux mêmes solutions que précédemment.

Ces résultats montrent que lorsque  $d_{12} \neq d_{23}$  et  $d_{13} = d_{123}$  ( $b = 1$ ), seule la solution (AIII,2) est acceptable, ce qui implique  $\beta = 1$ , c'est-à-dire  $c_{13} = c_{123}$ .

### Références

- BOLLMANN, W. (1970). *Crystal Defects and Crystalline Interfaces*. Berlin: Springer Verlag.  
 FORTES, M. A. (1973). *Philos. Mag.* **28**, 1165-1170.  
 FORTES, M. A. (1974). *Philos. Mag.* **30**, 457-459.  
 GRIMMER, H. (1974a). *Acta Cryst.* **A30**, 680.  
 GRIMMER, H. (1974b). *Scr. Metall.* **8**, 1221-1224.  
 GRIMMER, H., BOLLMANN, W. & WARRINGTON, D. H. (1974). *Acta Cryst.* **A30**, 197-207.  
 ISHIDA, Y. & MCLEAN, M. (1973). *Philos. Mag.* **27**, 1125-1134.  
 ISHIDA, Y. & MCLEAN, M. (1974). *Philos. Mag.* **30**, 453-456.  
 IWASAKI, Y. (1976). *Acta Cryst.* **A32**, 59-65.  
 PUMPHREY, P. H. & BOWKETT, K. M. (1972). *Scr. Metall.* **6**, 31-34.  
 WARRINGTON, D. H. & GRIMMER, H. (1974). *Philos. Mag.* **30**, 461-468.  
 WOIRGARD, J. & DE FOUQUET, J. (1972). *Scr. Metall.* **6**, 21-30.