السلام عليكم و رحمة الله و بركاته و بعد:

Bonjour,

هذا يهم كل طلبة الفيزياء في مستوى "ماستير 1" لكل الأسلاك المعنيين بدراسة الإنجليزية العلمية السداسي الثاني.

Ceci est pour tous les étudiants en Physique Master 1, toutes filières confondues, concernés par l'Anglais scientifique, second semestre.

االنص العلمي المعطى أسفلا موفر لكم بغرض أن تدرسوه بمفردكم في بيوتكم و هو موفر " استبدالا " للدروس التي غير ممكن أن نأخذها مع بعضنا البعض بسبب جائحة كورون 19. و كما حصل العام الماضي، هذا، بالطبع، ما يمكن أن يكون إلا محاولة استبدال الدروس الطبيعية المألوفة شاحبة، إذ أن في الدروس الحقيقية، تلك ألتي توفر على أساس الحضور الشخصي، تقدم جمعة من المعلومات في فترات زمنية جد قصيرة. بالتالي، ما يمكن لهذه المحاولة إلا أن تقوم مقام نسب قليلة من ما كننا قادرين أن نحقق معا. كذلك، كما سبق أن جرى مع زملائكم للسنة الماضية، ما أريده منكم أن تفعلوه بهذا النص هو

1 .) أن تدرسوه جملة بجملة و أن تطبقوا طريقة تحويل معاني الجمل من لغة معطاة إلى لغة أخرى معطاة مستعينون بالقواعد النحوية الخاصة باللغتين. يمكنكم فعل ذلك بالعمل بالغتين العربية و الإنجليزية أو بالغتين الإنجليزية و الفرنسية. مثلا، مستعينون بالقواعد النحوية الأبسط، أكتب بالعربية، بدءا من جمل بالإنجليزية، جمل لديها نفس المعنى كالجمل الإنجليزية الأصلية أو بدءا من جمل إنجليزية و بالإعانة بقواعد نحوية إنجليزية و فرنسية أكتب جمل فرنسية لديها نفس المعنى كالجمل الإنجليزية. بإمكانكم أيضا، بدءا من جمل بالعربية أو بالفرنسية، أكتب جمل بالإنجليزية التي لها نفس المعنى كالجمل البدء. بالتالي، ما أريد منكم أن تفعلوه بأنفسكم في بيوتكم هو أن تتمرنوا على كتابة جمل عربية و/أو فرنسية متساوية في القيمة مع أكبر عدد ممكن من الجمل الإنجليزية الواردة في النص العلمي المعطى أسفلا، ثم في ما بعد قارنوا الجمل التي حصلتم عليها بالجمل بالعربية و/أو بالجمل بالفرنسية، هيا كذلك، معطاة في النص. بإمكانكم فعل العكس بالطبع، إذا أردتم ذلك، و كتابة جمل بالإنجليزية بدءا من جمل بالعربية أو بالفرنسية،

2 .) أن تكونوا جدولا معطيا الألفاظ (الكلمات) العلمية المجودة في النص بالإنجليزية مع مناظراتها بالعربية (أو بالفرنسية بالنسبة إلى الطلبة الغر الجزائريين) ، و

3 .) التحصل على ملخص بالغة الإنجليزية للنص الإنجليزي.

أسفلا، النص الفرنسي مكتوب بالأزرق.
نحن نثق بكم كثيرا، إذن أعملوا و كونوا في مستوى الثقة التي وضعت فيكم.
إلى حين.

Le texte scientifique donné plus bas est à travailler par vous mêmes chez-vous et est donné en "remplacement" des cours que nous ne pouvons pas avoir ensemble à cause de COVID-19. Et comme pour l'année passée, ceci, bien sûr, ne peut-être qu'une tentative pâle de remplacement des cours normaux habituels, car dans les vrais cours, ceux dispensés en présentiel, une foule de connaissances est transmise en des périodes de temps plutôt courtes. Cette tentative ne pourra, donc, valoir que quelques pour-cents de ce que nous aurions pu réaliser ensemble. Aussi, comme avec vos collègues de l'année passée, ce que je voudrais que vous fassiez de ce texte est

1 .) de travailler phrase par phrase tout en appliquant la méthode de transfère de sens de phrases d'une langue donnée à une autre langue donnée en s'aidant des règles grammaticales propres aux deux langues données. Vous pouvez faire cela en travaillant soit avec les deux langues Arabe et Anglais soit avec les deux langues Anglais et Français. Par exemple, en s'aidant des règles grammaticales les plus simples, écrire en Arabe, partant de phrases en Anglais, des phrases qui ont le même sens que les phrases anglaises d'origine ou bien partant de phrases anglaises et s'aidant de règles grammaticales de l'Anglais et du Français écrire des phrases en Français qui ont le même sens que les phrases en Anglais. Vous pouvez aussi, partant de phrases en Arabe ou en Français, écrire des phrases en Anglais qui ont le même sens que les phrases de départ. Donc, ce que je voudrais que vous fassiez chez-vous par vous-mêmes est que vous vous exerciez à écrire des phrases en Arabe et/ou en Français équivalentes à autant, que possible, de phrases anglaises contenues dans le texte scientifique donné plus bas, puis ensuite comparer les phrases que vous avez obtenues à celles en Arabe et/ou en Français, elles aussi, données dans le texte. Vous pouvez faire l'inverse bien sûr, si vous voulez, et écrire des phrases en Anglais partant de phrases en Arabe ou en Français;

2 .) de former un tableau donnant les termes (mots) scientifiques présents dans le texte en Anglais avec leurs correspondants en Arabe (ou en Français pour les étudiants non algériens); et

3 .) de faire un résumé en Anglais du texte Anglais.

Plus bas, le texte en Français est en bleu.
Nous vous faisons grandement confiance, alors travaillez et soyez à la hauteur de la confiance placée en vous.

A bientôt.

Presentation of the partial program, DIDprofile01, for calculating distributions of interatomic distances (DIDs) for monatomic materials using formulas.

تقديم برنامج الحاسوب الجزء، DIDprofile01، للقيام بحسابات توزيعات المسافات ما بين الذرات (تمسم) للبلورات الأحادية الذرات.

Présentation du programme partiel, DIDprofile01, pour calculer des distributions de distances interatomiques (DDIs) propres aux matériaux monoatomiques.

Noureddine HADJI., arXiv-id

April 22, 2021

138, Villa 60, Cité des Jardins, EL HADJAR, Annaba 23 200, Algeria.
Département de Physique, Université Badji Mokhtar, Annaba, BP 12 Annaba 23000, Algérie.
Email: noureddine.hadji@univ-annaba.dz

الوصول إلى ألنص الإنجليزي الأصلي المعطى هنا يتم عبر الربط التالي
https://osf.io/axuym/wiki/home/

Contents

1 *English version.* This text follows the announcement by [Hadji, 2019]. 2

2 *Arabic version.* .[Hadji, 2019] هذا النص يتبع البلاغ أعلن عنه من قبل 5

3 *French version.* Ce texte suit l'annonce faite par [Hadji, 2019]. 9

References 13

1 *English version.* This text follows the announcement by [Hadji, 2019].

The following text relates to a previous text, see [1], entitled " Expressing the atomic arrangement of a crystal through a formula giving its distribution of interatomic vectors (DIV) is perfectly achievable " and is a presentation of "DIDprofie01", the program for doing calculations related to diffraction by moving single crystals built on the first ever obtained formula for calculating DIDs. DIDprofie01 calculates DIDs for parallelepiped moving monatomic crystals only and the definition for the DID adopted here is that proposed by [1].
In fact, DIDprofile01 is a computer program for calculating DIDs when the materials (in fact crystals) considered are monatomic and is part of the projected program, DIDprofile, for calculating DIDs relative to non-monatomic crystals. DIDprofile01 does the calculations using the formula appropriate to triclinic lattices to get the DID when the crystal is monatomic, see [2] for this formula. It has been made threefold now to make its reviewing and, global, check easier: the calculations can be done through three different 'versions' each of which is accessed from a different option given in the menu of the program. The differences between the three versions are solely related to the ways used to write their respective source codes.

1. The code of Version 1 was written using the formula appropriate to triclinic lattices in its compact form, i.e. exactly as given in [2], therefore introducing no modification on its original size, and thus using the formula in its most reduced size.

2. Version 2 uses a formula fully equivalent to the formula in its original shape but with a size reached through writing it differently, that is writing it with the aim in mind of getting to a faster program. The source code of this particular version 2 corresponds to the previously source code "Calculate_Distribution_Interatomic_Distances_And_Diffr_Profile_Monat_Cryst_Using_Formulas_00.f90", but with the note (i.e. Erratum) that in the routine "DID_Monatomic_Triclinic _Formula_00(„,)" of this previous source code the instruction line R = dsqrt(auau + bvbv), appearing just after the commented line ! in [i, j, 0] directions (-u), must be set right, before use together with lattice cases for which the angle $\gamma \neq \pi/2$, by modifying it to be: R = dsqrt(auau - bvbv); the appropriate modification has been done in the source code of this routine given in the code of DIDprofile01 which has been newly provided, i.e. in " Calculate_Distribution_Interatomic_Distances_And_ Diffr_Profile_Monat_Cryst_Using_Formulas_01.f90 " (link: https://osf.io/9pwye/).

3. Version 3, also, uses the formula appropriate to triclinic lattices but with a shape that allows reaching a much faster program, especially for lattices with higher transnational symmetries, with non-triclinic lattices.

Thus the three versions give the same results but their respective execution times are different.

The part relative to monatomic materials of the program DIDprofile is of basic importance and is represented, at present, by the DIDprofile01 program. And the global check consists in comparing the results DIDprofile01 can produce according to the way its building, talking programming, was realized: three different ways of constructing were used, with the two principal aims of the check being to make sure that DIDprofile01 does really the jobs for which it is intended and that it is effectively *reliable*. The first of these ways is realized using the formula giving the DID with the strict conservation of its simplest form (i.e. without decomposing at all). This first way of building is rapid, short, condensed and, therefore, less subject to errors, like, among others, typing errors (typos). This first way allows, therefore, having a first version of the said program which, once completely checked and accepted, can be used as reference for verifying and confirming the exactitude of other programs written afterward, for instance written to be faster and, therefore, written to do the same jobs but with less costs. The other two ways of building use, they also, the formula of the DID used to construct the first version but after splitting it, without altering its value of course, into several parts so as to be able to build faster and, therefore, more advantageous versions. It is thus that the second way uses a formulation which leads to a second version of DIDprofile01 that is faster than the first one but whose rapidity can again be greatly improved. A possible appreciable improvement is that realized through the use of the third way considered here and which is a second possible manner of splitting the formula giving the DID for a monatomic material. The DIDprofile01 version obtained through this second manner of mathematically splitting the compact formula of the DID, or version 3, is of the same speed as version 2 when it comes to triclinic lattices ($a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma$) but is faster for the other lattice cases. However, the three versions thus obtained have to produce the same outcomes. This makes it possible to carry out cross-checks through comparing the results they produce, for instance for possible combinations of the different parameters a, b, c, α, β and γ leading to improvements in the speed with which the DIDs are calculated, but, nevertheless, with the condition that the conclusion reached for any of the cross-checks realized will only be considered as positively convincing and definitely acceptable if and only if the three versions produce the same results for each one of the different possible combinations. These are the method and attitude that the author has adopted, within the frame of the project relative to the construction of DIDprofile01, in order to verify, confirm and, consequently, accept the three built versions of DIDprofile01 as fully correct.

The source codes of the three versions of the thus built DIDprofile01 are provided in the

source file, see [3]: “ Calculate_Distribution_Interatomic_Distances_And_Diffr_Profile_Monat_Cryst_Using_Formulas_01.f90 ” in the form of routines and used to generate the “substances” of the options “C”, “L” and “F” of the ’Menu’ which displays at the opening of the DIDprofile01 program, therefore the three versions are executable from the same application. It is thus that the three options “C”, “L” and “F” of the Menu of the program obtained on compiling and linking “ Calculate_Distribution_Interatomic_Distances_And_Diffr_Profile_Monat_Cryst_Using_Formulas_01.f90 ”, as it is, correspond to the versions, respectively, 1 (slow and reference version), 2 (less slow version) and 3 (much faster version).

Gathering the three versions in a same application is susceptible to make the cross-checking work a little easier.

In practice, DIDprofile01 determines the DID of the crystal under consideration through the formula of the DID for a monatomic crystal with triclinic sort of lattice first and then calculates the relevant diffraction profile using the thus calculated DID. The program uses the lattice parameters of the parallelepiped crystal together with its dimensions to produce the DID. The dimensions are provided to the program as numerical entities represented by Nx, Ny, and Nz and given by $Nx = lx/a = (NAx - 1)$, $Ny = ly/b = (NAy - 1)$ and $Nz = lz/c = (NAz - 1)$ where lx, ly and lz, are the actual crystal edge lengths along, respectively, the x-, y- and z-axes, a, b and c are the moduli of the base vectors $\vec{a}$, $\vec{b}$ and $\vec{c}$ (these are along, respectively, the x-, y- and z-axes, as shown in Figure 1) and, thus, are the usual three lattice spacing parameters. And NAx, NAy and NAz are, therefore, the numbers of the lattice points along the x-, y- and z-axes.

The angles between $\vec{b}$ and $\vec{c}$, $\vec{a}$ and $\vec{c}$ and $\vec{a}$ and $\vec{b}$ are, respectively, α, β and γ and are

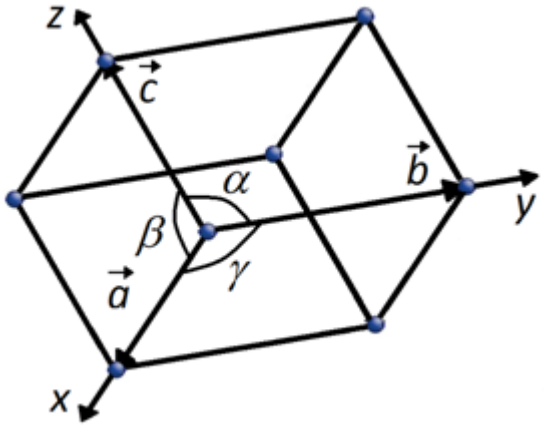

Figure 1: Primitive cell representation. Angular parameters and base vectors illustrations.

provided to the program in radian units. The default data for these parameters are those for, simple cubic, polonium. Once the calculations completed the program files the determined DID under a filename composed of one of the strings " DID_MonoTricl_COMPACT_Formula_", " DID_MonoTricl_" and "DID_MonoTricl_Much_Faster_" according to which of the options of the menu was used plus the symbol of the chemical element the crystal is made up of, the file format is ".txt".

After providing the program with the channel width, profile length and 'channel number for zero angle of scattering' required for profile calculation, one can either proceed with using the installed default values for the various parameters needed for x-rays atomic scattering factor calculations, or proceed with providing new values for these parameters or just return to the main Menu.

These parameters are the ones needed for use together with the parameterized representation of x-rays atomic scattering factors, due to [4], to generate x-rays atomic scattering factors. The installed values for these parameters are for polonium and were taken from [5]. The data used to draw the figure given in [1] and those used to draw the figure given in [2] were obtained using a program corresponding to option "F" of DIDprofile. Therefore one can reach these data by just changing the default values for the crystal numerical dimensions installed in DIDprofile to 20, 20 and 20 and executing to get to the data of the figure given in [1] and to 5, 5 and 10 plus executing to get to the data of Figure 2 given in [2].

The first line in each of the DID- and profile-related saved files is used to store the value of the total number of data points calculated and the channel number relative a) to the zero interatomic distance, $r = 0$, for the saved DID and b) to the position of $S = 0$, i.e. the 'zero scattering vector' or, equivalently, of the zero angle of scattering in the case of the diffraction profile, these two being interrelated; with the note that the relationship between them used here follows from $\vec{S} = 4\pi/\lambda \sin\theta.\vec{u}$, where $\vec{S}$ is the scattering vector, λ is the incident beam wavelength, 2θ is the scattering angle and $\vec{u}$ the unit vector defining the direction of $\vec{S}$. The channel width, being the modulus of the distance between any two adjacent data points of the calculated intensity profile, can be recovered from the saved profile data by taking the modulus of the difference between any two adjacent S-related values within the saved profile data. The last column of the profile data file gives the S-related values.

The work given here intimately relates to the project "Disordered Materials Structural Studies Through Diffraction", see [6].

2 *Arabic version.* هذا النص يتبع البلاغ أعلن عنه من قبل [Hadji, 2019].

النص التالي يتصل بنص سابق، شاهد [1] ، بعنوان

“ Expressing the atomic arrangement of a crystal through a formula giving its distribution of interatomic vectors (DIV) is perfectly achievable”
[= " التعبير عن الترتيب الذري لبلورة عبر صيغة تعطى توزيعها المتجهات ما بين الذرات قابل للانجاز (للتحقيق) تماماً ``] و هو تقديم DIDprofile01 البرنامج للقيام بحسابات لها علاقة بالانعراج (الحيود) ببلورات متحركة عزبة (لوحدها) مبني على أول صيغة حصل عليها على الإطلاق لحسابات توزيعات تمسم. ينتج DIDprofile01 عن طريق حسابات تمسم لبلورات متوازية السطوح أحدية الذرات متحركة فقط و تعريف التمسم المتبنى و المستعمل هنا هو ذلك الذي اقترح من قبل [1].

في الحقيقة DIDprofile01 هو برنامج حاسوب لحساب تمسم لما تكون المواد (قي الحقيقة البلورات) المعتبرة، ألتي هيا تحت الدراسة، أحدية الذرات و هو جزء من البرنامج المشروع، DIDprofile، لحساب التمسم المتصلة بالبلورات الغر الأحادية الذرات. يقوم DIDprofile01 بالحسابات استعمالا الصيغة اللائقة بالشبكات الثلاثية الميل للتحصل على التمسم لما تكون البلورة أحادية الذرات، شاهد [2] من أجل هذه الصيغة. أعطي DIDprofile01 الآن ميزة ثلاثية ليجعل فحصه و التحقق، إجماليا، من صحته أسهل: يمكن للحسابات أن يقام بها عبر ثلاثة إصدارات مختلفة و يتم الوصول لكل واحد منها عبر اختيار مختلف معطى في قائمة البرنامج. الاختلافات ما بين الإصدارات الثلاثة مرتبطة بالطريقة المستعملة دون سواها في كتابة شفرة المصدر ألتعليماتي البرمجي الخاصة بكل إصدار.

1.) كتبت شفرة الإصدار 1 استعمالا الصيغة الملائمة للشبكات الثلاثية الميل على شكلها المكثف، أي بالضبط كما هو معطى في [2].، بالتالي لم يدخل أي تغيير على كبرها الأصلي، و هكذا استعمالا الصيغة و هي على كبرها الأكثر تقليصا.

2.) الإصدار 2 يستعمل صيغة متساوية القيمة تماما مع الصيغة على شكلها الأصلي لكن لديها كبر محصل عليه عبر كتابتها بطريقة أخرى، يعني بكتابتها و في الدهن غرض (بهدف) الوصول إلى برنامج (حاسوب) أسرع. الرمز المصدري للإصدار الخاص هذا يتوافق مع الرمز المصدري السابق
“Calculate_Distribution_Interatomic_Distances_And_Diffr_Profile _Monat_Cryst_Using_Formulas_00.f90”,
لكن مع الإشارة (أي خطأ مطبعي) بأنه في الروتين
“DID_Monatomic_Triclinic_Formula_00(„,)”
للرمز المصدري السابق هذا السطر تعليمي
المتضحة بعد الخط المنتقد تماما
R = dsqrt(auau + bvbv),
line ! in [i, j, 0] directions (-u),
ليس هناك حل آخر إلا أن يضبط قبل استعماله بالنسبة إلى الحالات الشبكية ذوات زاوية $\gamma \neq \pi/2$، بإدخال تغيير عليه حتى يصبح R = dsqrt(auau - bvbv); الذي وفر من جديد، أي DIDprofile01 أدخل التغيير الملائم على الرمز المصدري ل في
“Calculate_Distribution_Interatomic_Distances_And_Diffr_Profile_Monat_Cryst_Using_Formulas_01.f90” (link: https://osf.io/9pwye/).

3.) الإصدار 3، هو كذلك، يستعمل الصيغة المناسبة للشبكات الثلاثية الميل لكن بشكل لهى يسمح بالوصول إلى برنامج حاسوب أسرع بكثير، خاصة بالنسبة إلى الشبكات ذوات تناظرات انسحابية

أعلى، ذوات شبكات غير ثلاثية الميل.

وهكذا الإصدارات الثلاثة تعطي نفس الحصائل (النتائج) لكن بزمن تنفيذ مختلف لكل إصدار.

الجزء، الممثل في الوقت الحالي بالبرنامج DIDPROFILE01، من البرنامج المعلوماتي DIDPROFILE المتصل بالمواد الأحادية الذرات له أهمية أساسية. و التحقق الإجمالي يتكون من مقارنة الحاصلات التي يستطيع DIDPROFILE01 أن ينتجها حسب الطريقة ألتي استعملت لبنائه، و هذا في إطار البرمجة المعلوماتية: ثلاث طرق بناء مختلفة استعملت و الهدفين الرئيسيين المرادين من التحقق هما لضمان أن DIDPROFILE01 يقوم حقيقة بالأعمال ألتي أنشئ من أجلها و أنه حقيقة قابل أن يعول عليه. أول هته الطرق تحقق استعمالا الصيغة ألتي تعطي التمسم مع الاحتفاظ على شكلها الأبسط على نحو كامل (بدون حلها على الإطلاق). هذه طريقة البناء سريعة، قصيرة و، بالتالي، أقل عرضة للأخطاء، مثل، ما بين أخطاء أخرى، الأخطاء المطبعية. هذه الطريقة الأولى تسمح، بالتالي، بالتحصل على نسخة أولى للبرنامج المذكور الذي، من بعد التحقق من أمره بصفة كاملة و قبوله، يكون قادرا على أن يستعمل كمرجع للتحقق و التأكد من صحة برامج أخرى تكتب في ما بعد، مثلا تكتب بغرض أن تكون أسرع و، بالتالي، أن تقوم بنفس الأعمال لكن بتكاليف أقل. ألطريقإين للبناء الأجرتين تستعملان، هما كذلك، الصيغة للتمسم التي استعملت أثناء بناء الإصدار (النسخة) الأول لكن من بعد انفلاقه، بدو إدخال تغيير على قيمته بالطبع، إلى عدة أجزاء حتى يصبح ممكنا بناء إصدارات أسرع و، بالتالي، مفيدة أكثر. فهو هكذا أن الطريقة الثانية تستعمل صياغة للتمسم ألتي تؤدي إلى إصدار ثاني لDIDPROFILE01 أسرع من الأول و لكن يبقى ممكن تحسين كثيرا سرعته. تحسين معتبر ممكن هو ذلك الذي حقق عبر استعمال الطريقة الثالثة المستعمل هنا والذي هو طريقة ثانية ممكنة لانفلاق الصيغة التي تعطي تمسم لمادة أحادية الذرات. الإصدار لDIDPROFILE01 المحصل عليه عبر هذه الطريقة الثانية لانفلاق رياضيا للصيغة المندمجة للتمسم، أي الإصدار 3، يتمتع بنفس السرعة كالإصدار 2 لما يتعلق الأمر بالشبكات الثلاثية الميل ($a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma$) و لكنه أسرع بالنسبة للشبكات الأخرى. ولكن الإصدارات الثلاثة المحصل عليها هكذا أن تنتج نفس الحصائل.
الشيء الذي يجعل ممكنا القيام بتحقيقات تشارك فيها لإصدارات الثلاث عبر مقارنة الحصائل التي تنتجها، مثلا بالنسبة إلى تركيبات ممكنة للمعاملات المختلفة **(**$a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$**)** قادرة على أن تؤدي إلى تحسينات في سرعة القيام بحسابات التمسم، لكن، مع ذلك، بالشرط أنه ما يقبل أن تعتبر الخلاصة التي يوصل إليها بالنسبة إلى أي تحقيق مشترك يقام بيه كمقنعة بصفة موجبة و أنها بالتأكيد مقبولة إلا إذا و إذا فقط أعطت الإصدارات الثلاث نفس النتائج بالنسبة إلى كل واحدة من التركيبات المختلفة الممكنة. تلك هما الطريقة و الموقف الذين اعتمدهما المؤلف، في إطار المشروع المتصل ببناء DIDPROFILE01، للتحقق و التأكد في شأن الإصدارات الثلاثة لDIDPROFILE01 ألتي تم بناءها بأنها صحيحة تماما.

الرموز المصدرية الإصدارات الثلاثة ألتي تم بناءها هكذا موفرة في الملف المصدري ، شاهد [3]
“ Calculate_Distribution_Interatomic_Distances_And_Diffr_Profile_Monat_Cryst_Using_Formulas_01.f90 ”
على شكل إجراءات و مستعملة لإنشاء "محتويات" الخيارات “C”, “L” و “F” الموجودة في "القائمة" ألتي تعرض عند بداية تشغيل البرنامج DIDPROFILE01 و، إذا، فالإصدارات الثلاثة تشغل انطلاقا من نفس التطبيق . فهو هكذا أن الخيارات “ C ”, “ L ” و “F” لقائمة البرنامج المحصل عليه على إثر ترجمة و ربط
“ Calculate_Distribution_Interatomic_Distances_And_Diffr_Profile_Monat_Cryst_

Using_Formulas_01.f90 ”
كما هو، توافق الإصدارات، على التوالي، 1 (الإصدار البطيء و المرجعي)، 2 (إصدار أقل بطء) و 3 (إصدار أسرع بكثير).

جمع الإصدارات الثلاثة في نفس التطبيق قادر على أن يجعل أعمال المرتبطة بالتحقيقات"المشتركة ما بين" الإصدارات الثلاث أسهل قليلا.

في التطبيق، يحصل DIDPROFILE01 على المتسم للبلورة المعتبرة (التي هي على قيد الدراسة) عبر صيغة متسم لبلورة أحدية الذرات ذات شبكة من النوع الثلاثي الميل ثم يقوم بحساب معطيات رسم الانعراج الجانبي المناسب استعمالا المتسم المحصل عليه هكذا. البرنامج يستعمل معاملات شبكة البلورة المتوازية السطوح معا مع أبعادها لإنتاج المتسم. يتم تزويد الأبعاد إلى البرنامج ككيانات رقمية ممثلة ب Nx، Ny و Nz هيا معطاة من قبل $(NAx-1)=lx/a=Nx$، $(NAy-1)=ly/b=Ny$ و $(NAz-1)=lz/c=Nz$ حيث lz,ly,lx هيا أطوال جوانب البلورة الحقيقية على طول، على التوالي، المحاور z,y,x و c,b,a هيا أطوال المتجهات القاعدية $\vec{a}$، $\vec{b}$ ، $\vec{c}$ على التوالي و هيا على طول المحاور x, y , z، كما هو مبين في الشكل 2) و، بالتالي، فهيا معاملات المسافة الشبكية الثلاثة العادية. و NAx, NAy , NAz هيا أعداد نقاط الشبكة على طول المحاور x, y, z، بالتتالي.
الزوايا ما بين $\vec{b}$ و $\vec{c}$، و $\vec{a}$ و $\vec{c}$، و $\vec{a}$ و $\vec{b}$ هيا، على التوالي، α، β و γ و هيا تزود إلى البرنامج

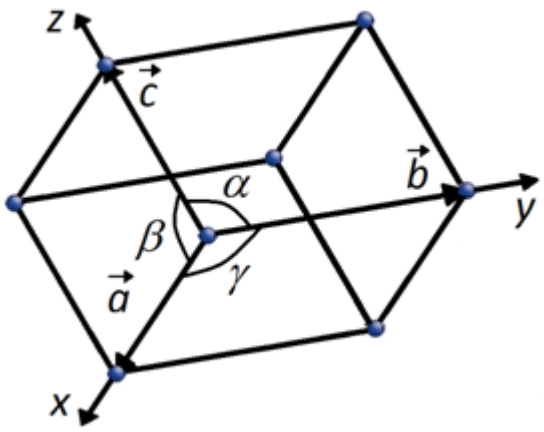

Figure 2: تمثيل الخلية البدائية. رسومات تبيانية للمعاملات الزاوية و المتجهات القاعدية.

بوحدات ”RADIAN“. البيانات (المعطيات) الافتراضية لهذه المعاملات هيا تلك للبلونيوم، المكعب البسيط. بمجرد إتمام الحسابات يسجل البرنامج المتسم المنتجة (المحسوبة) تحت اسم مؤلف من أحد من السلاسل ”DID_MONOTRICL_“، ”DID_MONOTRICL_COMPACT_FORMULA_“ و ” DID_MONOTRICL_MUCH_FASTER_“ حسب الاختيار لقائمة الاختيارات المستعمل زائد رمز العنصر الكيميائي المكونة منه البلورة، بنية الملف هو ”.TXT“.

بعد تزويد البرنامج ب عرض القناة، طول رسم الانعراج الجانبي و 'عدد القناة المناسب لزاوية التبعثر سفر ' الضرورية للقيام بحساب رسم الانعراج الجانبي، يستطيع الواحد (المرء) إما أن يستمر و يستعمل القيم الافتراضية المثبتة في البرنامج لمختلف المعاملات المطلوبة للقيام بحسابات عوامل تبعثر

الذري (تشتيت) الأشعة السينية، أو يستمر بإمداد قيم جديدة لهذه المعاملات أو فقط العودة إلى القائمة الرئيسة.

هته المعاملات هيا المعاملات الضرورية للاستعمال مع التمثيل ألمعاملي لعوامل التشتيت الذري للأشعة السينية، العائدة إلى [4]، لتوليد)لحساب(عوامل التشتيت الذري للأشعة السينية. القيم المثبتة في البرنامج لهته العوامل هيا للبلونيوم و أخذت من [5]. المعطيات التي استعملت لرسم الشكل المعطى في [1] و تلك ألتي استعملت لرسم الشكل 2 المعطى في [2] حصل عليها باستعمال برنامج موافق للاختيار "F" ل DIDprofile01. بالتالي يستطيع المرء أن يصل إلى هته المعطيات بتغيير القيم الرقمية المثبتة في البرنامج و المرتبطة بأبعاد البلورة إلى 20 ، 20 و 20 و بالتنفيذ للتحصل على بيانات الشكل المعطى في [1] و إلى 5 ، 5 و 10 زايد التنفيذ للوصول إلى بيانات الشكل 2 المعطى في [2].

أول سطر لكل من الملفين المحفوظين المرتبطين بالتمتم و بالرسم الانعراج الجانبي يستعمل لخزن قيمة العدد الكلي لنقاط المعطيات المحسوبة و عدد القنوات ذو صلة ا) بالمسافة ما بين الذرات سفر، $r = 0$، بالنسبة لي التمتم المسجلة (المدونة) و ب) بالموقع $S = 0$ في رسم الانعراج الجانبي، أي 'متجه التشتيت سفر' أو، بصفة متساوية في القيمة، لزاوية التبعثر سفر في الحالة للرسم الانعراج الجانبي، كون هاتين مرتبطين يبعضهما البعض. مع التنبيه إلى أن العلاقة بينهما المستعملة هنا، في هذا العمل، يتبع العلاقة التالية $\vec{S} = 4\pi/\lambda \sin\theta.\vec{u}$، حيث $\vec{S}$ هو متجه التبعثر، λ هو طول موجة الحزمة الواردة، 2θ هي زاوية التبعثر و $\vec{u}$ هو المتجه الوحدة الذي يعرف اتجاه S. في استطاعة عرض القناة، بسبب كونه طويلة الفرق بين أي نقطتين بيانيتين متجاورتين من التشكيل الجانب المحسوب، أن يسترجع من معطيات التشكيل الجانب المسجل باتخاذ طويلة الفرق بين أي قيمتين متجاورتين مرتبطتين بS موجودتين ضمن معطيات التشكيل الجانب المسجل. العمود الأخير لملف معطيات التشكيل الجانب تعطي القيم المرتبطة ب S.

العمل المعطى هنا يرتبط بصفة حميمة بالمشروع
"Disordered Materials Structural Studies Through Diffraction"، شاهد [6].

3 *French version.* Ce texte suit l'annonce faite par [Hadji, 2019].

Le texte suivant s'associe avec le texte précédent, voir [1]), titré "Expressing the atomic arrangement of a crystal through a formula giving its distribution of interatomic vectors (DIV) is perfectly achievable" et est une présentation de "DIDprofie01", le programme pour faire des calculs liés à la diffraction par des cristaux singles construits sur la base de la première formule jamais obtenue pour calculer des DDIs. DIDprofie01 calcule des DDIs pour des cristaux monoatomiques parallélépipédiques en mouvement seulement et la définition adoptée ici pour la DDI est celle proposée par [1].

En réalité, DIDprofile01 est un programme d'ordinateur pour calculer des DDI quand les matériaux (cristaux en fait) considérés sont monoatomiques et constitue une partie

du programme projeté, DIDprofile, pour calculer des DDIs relatives aux cristaux non-monoatomiques. DIDprofile01 fait les calculs en utilisant la formule adéquate pour les réseaux tricliniques pour obtenir la DDI quand le cristal est monoatomique, voir [2] for this formula. Il a été donné, maintenant, un caractère triple (est maintenant à trois volets) pour rendre sa révision et sa vérification, globale, plus faciles: les calculs peuvent être faits à travers trois 'versions' différentes chacune desquelles est accédée à partir d'une option différente donnée dans le menu du programme. Les différences qu'il y a entre les trois versions sont exclusivement liées aux façons utilisées d'écrire leurs codes sources respectifs.

1. Le code de la version 1 fut écrit en utilisant la formule adéquate aux réseaux tricliniques dans sa forme compacte, ç.-à-d. exactement comme donnée dans [2], donc en n'introduisant aucune modification sur sa taille d'origine, et ainsi en utilisant la formule dans sa taille la plus réduite.

2. La version 2 utilise une formule totalement équivalente à la formule sous sa forme d'origine mais ayant une taille atteinte en l'écrivant différemment, ceci est en l'écrivant avec en tête le but d'arriver à un programme plus rapide. Le code source de cette version particulière 2 correspond au code source précédent "Calculate_Distribution_Interatomic_Distances_And_Diffr_Profile_Monat_Cryst _Using_Formulas_00.f90", mais avec la note (ç.-ç.-d. Erratum) que dans la routine "DID_Monatomic_Triclinic_Formula_00(,,)" de ce code source précédent la ligne instruction R = dsqrt(auau + bvbv), apparaissant juste après la ligne commentée: ! in [i, j, 0] directions (-u), n'a pas d'autres choix que d'être corrigée, avant utilisation en rapport avec les cas de réseaux pour lesquels l'angle $\gamma \neq \pi/2$, en la modifiant pour être: R = dsqrt(auau - bvbv); la modification appropriée a été faite dans le code source de cette routine donné dans le code source de DIDprofile01 qui a été nouvellement fourni, ç.-à-d. dans "Calculate_Distribution_Interatomic_Distances_And_Diffr_Profile_Monat_Cryst_Using_Formulas_01.f90"
(lien: https://osf.io/9pwye/).

3. La version 3, aussi, utilise la formule adéquate aux réseaux tricliniques mais avec une forme qui permet d'atteindre un programme beaucoup plus rapide, surtout pour les réseaux ayant des symétries de translation plus élevées, ayant des réseaux non-tricliniques.

Ainsi le trois versions donnent les mêmes résultats mais leurs temps d'exécution respectifs sont différents.

La partie relative aux matériaux monoatomiques du programme DIDprofile est d'importance fondamentale et est représentée, à présent, par le programme DIDprofile01. Et la vérification globale consiste en la comparaison des résultats que peut produire DIDprofile01 selon la façon dont sa construction, programmation parlant, fut réalisée: trois façons différentes de construire furent utilisées; les deux buts principaux de la vérification étant de s'assurer que DIDprofile01 fait réellement le travaux pour lesquels il est

destiné et qu'il est effectivement *fiable*. La première de ces façons est réalisée à partir de la formule donnant la DDI en conservant strictement sa forme la plus simple (sans la décomposée aucunement). Cette première façon de construire est rapide, courte, condensée et, donc, moins sujette aux erreurs, comme, entre autres, les erreurs de frappe. Cette première façon permet, donc, d'avoir une première version du dit programme qui, une fois complètement vérifiée et acceptée, peut servir de référence pour vérifier et confirmer l'exactitude d'autres programmes écrits postérieurement, par exemple écrits pour être plus rapides et, donc, écrits pour faire les mêmes travaux mais à moindre coûts. Les deux autres façons de construire utilisent, elles aussi, la formule de la DDI utilisée dans la construction de la première version mais après avoir été décomposée, sans altérer sa valeur bien entendu, en plusieurs parties afin de pouvoir construire des versions plus rapides et, donc, plus avantageuses. C'est ainsi que la seconde façon utilise une formulation de la DDI qui conduit à une deuxième version de DIDprofile01 qui est plus rapide que la première mais dont la rapidité peut encore être grandement améliorée. Une amélioration appréciable possible est celle réalisée à travers l'utilisation de la troisième façon considérée ici et qui est une deuxième manière possible de décomposer la formule donnant la DDI d'un matériau monoatomique. La version de DIDprofile01 obtenue à travers cette deuxième manière de décomposer mathématiquement la formule compacte de la DDI, ou version 3, est de même rapidité que la version 2 quand il s'agit de réseaux tricliniques ($a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma$) mais est plus rapide pour les autres cas de réseaux. Cependant, les trois versions ainsi obtenues doivent produire les mêmes résultats. Ce qui fait qu'il est possible de procéder à des vérifications "croisées" en comparant les résultats qu'elles produisent, par exemple pour des combinaisons possibles des différents paramètres a, b, c, α, β et γ conduisant à des améliorations dans la rapidité avec laquelle sont calculées les DDIs, mais, néanmoins, avec la condition que la conclusion atteinte pour toute vérification croisée réalisée ne sera considérée comme étant positivement convaincante et définitivement acceptable que si et seulement si les trois versions donnent les mêmes résultats pour chacune des différentes combinaisons possibles. Ceux sont là la méthode et l'attitude que l' auteur a adoptées, dans le cadre du projet relatif à la construction de DIDprofile01, pour vérifier, confirmer et, par conséquent, accepter les trois versions de DIDprofile01 construites comme étant pleinement correctes.

Les trois versions de DIDprofile01 ainsi construites sont fournies dans le fichier source " Calculate_Distribution_Interatomic_Distances_And_Diffr_Profile_Monat_Cryst_Using_Formulas_01.f90 " sous forme de routines et utilisées pour générer les "substances" des options "C", "L" et "F" du 'Menu' qui s'affiche à l'ouverture du programme DIDprofile01 et, donc, sont exécutables à partir d'une même application. C'est ainsi que les trois options "C", "L" et "F" du Menu du programme obtenu en compilant et en linkant " Calculate_Distribution_Interatomic_Distances_And_Diffr_Profile_Monat_Cryst_Using_Formulas_01.f90 ", tel qu'il est, correspondent aux versions, respectivement, 1 (version lente et de référence), 2 (version moins lente) et 3 (version beaucoup plus rapide).

Le rassemblement des trois versions dans une même application est susceptible de

rendre un peu plus facile les travaux relatifs aux vérifications croisées.

Dans la pratique, DIDprofile01 détermine en premier lieu la DDI du cristal considéré à travers la formule de la DDI pour un cristal monoatomique ayant un réseau du genre triclinique puis calcule le profile de diffraction pertinent à l'aide de la DDI ainsi calcule. Le programme utilise les paramètres du réseau et les dimensions du cristal parallélépipédique pour produire la DDI. Les dimensions sont fournies au programme sous forme d'entités numériques représentées par Nx, Ny, et Nz et données par $Nx = lx/a = (NAx - 1)$, $Ny = ly/b = (NAy - 1)$ et $Nz = lz/c = (NAz - 1)$ où lx, ly et lz sont les vrais côtés du cristal le long des axes, respectivement, x, y et z, a, b et c sont les modules des vecteurs fondamentaux $\vec{a}$, $\vec{b}$ et $\vec{c}$ (ceux-ci sont le long des axes, respectivement, x, y et z, comme montré sur la figure 3) et, ainsi, sont les trois paramètres de longueur habituels du réseau. Et NAx, NAy et NAz sont, donc, les nombres de nœuds du réseau le long des axes x, y et z.

Les angles entre $\vec{b}$ et $\vec{c}$, $\vec{a}$ et $\vec{c}$ et $\vec{a}$ et $\vec{b}$ sont, respectivement, α, β et γ sont four-

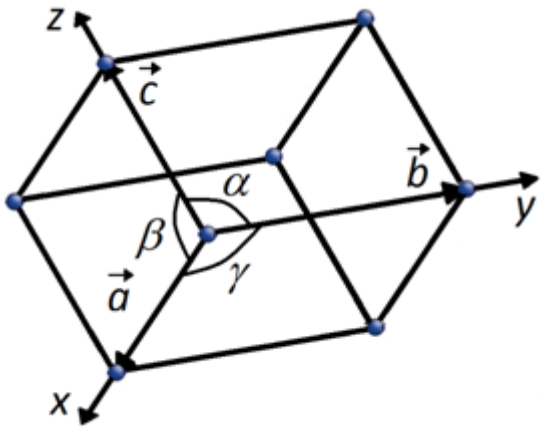

Figure 3: Représentation de la maille élémentaire. Illustrations des paramètres angulaires et vecteurs fondamentaux.

nis au programme en radians. Les données par défaut pour ces paramètres sont celles du polonium, cubique simple. Une fois les calculs terminés le programme sauvegarde la DDI déterminée sous le nom de fichier composé de l'une des chaines " DID_MonoTricl_COMPACT_Formula ", " DID_MonoTricl_" et " DID_MonoTricl_Much_Faster_" selon l'option du menu utilisée plus le symbol de l'élément chimique dont le cristal est fabriqué, le format du fichier est "txt".

Après avoir fourni au programme la largeur de canal, la longueur du profile et 'le nombre du canal correspondant à l'angle de diffusion zéro' nécessaires pour le calcul du profile, on peut soit continuer en utilisant les valeurs par défaut installés pour les différents

paramètres nécessaires pour les calculs des facteurs de diffusion atomique de rayons X, ou continuer en fournissant de nouvelles valeurs pour ces paramètres ou juste retourner au menu principal.

Ces paramètres sont ceux nécessaires pour l'utilisation avec la représentation paramétrée des facteurs de diffusion atomique des rayons X, due à [4], pour générer des facteurs de diffusion atomique de rayons X. Les valeurs installées pour ces paramètres sont celle du polonium et furent prises de [5]. Les données utilisées pour tracer la figure donnée dans [1] et celles utilisées pour tracer la figure donnée dans [2] furent obtenues à l'aide d'un programme correspondant à l'option "F" de DIDprofile. Donc on peut atteindre ces données en juste changeant les valeurs par défaut des dimensions numériques du cristal installées dans DIDprofile pour qu'elles soient 20, 20 et 20 et exécuter pour obtenir les données de la figure donnée dans [1] et pour être 5, 5 et 10 plus exécuter pour obtenir les données de la Figure 2 donnée dans [2].

La première ligne dans chacun des fichiers liés aux DDI et profile sauvegardés est utilisé pour stocker la valeur du nombre total de points de données calculés et du nombre correspondant au canal relatif a) à la valeur de la distance interatomique zéro, $r = 0$, pour la DDI sauvegardée et b) à la position $S = 0$, ç.-à-d. le 'vecteur de diffusion zéro' ou, d'une manière équivalente, de l'angle de diffusion zéro dans le cas du profile de diffraction, ces deux entités étant inter-reliés; avec la note que la relation entre elles utilisée ici vient de $\vec{S} = 4\pi/\lambda \sin\theta.\vec{u}$, où $\vec{S}$ est le vecteur de diffusion, λ est la longueur d'onde du faisceau incident, 2θ est l'angle de diffusion et $\vec{u}$ le vecteur définissant la direction de $\vec{S}$. La largeur de canal, étant le module de la distance entre deux points de données quelconques adjacents du profile d'intensité calculé, peut être récupéré des données du profile sauvegardé en prenant le module de la différence entre deux valeurs adjacentes quelconques liées à S parmi celles du profile sauvegardé.

Le travail donné ici est intimement lié au projet "Disordered Materials Structural Studies Through Diffraction", voir [6].

References

[1] Noureddine HADJI. (2019) Expressing the atomic arrangement of a crystal through a formula giving its distribution of interatomic vectors (DIV) is perfectly achievable. DOI: 10.13140/RG.2.2.31353.01127.

[2] Noureddine HADJI (2021a) Expressions and Formulas to Expand and Add Potentiality to Knowledge Underlying Diffraction. arXiv:2013.08063[cond-mat.mtrl-sci] (Link to pdf: https://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/2103/08063.pdf)

[3] Noureddine HADJI (2021b) "Calculate_distribution-Interatomic-Distances-and-Diffract-Profile-Using-Formulas_monat-Triclinic-Crystal."

OSF. January 11. Link code source: https://osf.io/9pwye/ in project: https://doi.org/10.17605/OSF.IO/NGVHB

[4] P.A. DOYLE AND P.S. TURNER (1968) Relativistic Hartree-Fock X-ray Electron Scattering Factors. *Acta Cryst.* A24, 390-97.

[5] E. Prince. (Editor). International Tables for Crystallography, Mathematical, Physical and Chemical Tables. In IUCr Series. International Tables of Crystallography. Table 6.1.1.4, Volume C. (2004) pp. 578-580.

[6] Noureddine HADJI (2018) https://www.researchgate.net/project/Disordered-Materials-Structural-Studies-Through-Diffraction