Announcement: بلاغ

This is to formally declare that obtaining formulas for the distributions of interatomic vectors of crystals is perfectly attainable.

نشر هذا الإعلان بغرد إعلان رسميا بان التحصل على صيغ لتوزيعات المتجهات ما بين الذرات للبلورات هو أمر قابل للتحقيق تماما.

Ceci est pour declarer officiellement qu'obtenir des formules pour les distributions des vecteurs interatomiques relatives aux cristaux est parfaitement réalisable.

Noureddine HADJI

Published in *ReseachGate* on November 4, 2019.

DOI: 10.13140/RG.2.2.31353.01127
This work is licensed under the **CC BY 4.0** License.

Expressing the atomic arrangement of a crystal through a formula giving its distribution of interatomic vectors (DIV) is perfectly achievable.

ألتعبير على الترتيب الذري لبلورة عبر صيغة معطية لتوزيعها للمتجهات ما بين الذرات هو أمر قابل للانجاز تماما.

Exprimer l'arrangement atomique d'un cristal par le biais d'une formule donnant la distribution de ses vecteurs interatomiques (DVI) est parfaitement réalisable.

Noureddine HADJI., arXiv-id

February 13, 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

Abstract

For parallelepiped crystals obtaining formulas for distributions of interatomic vectors (DIVs), and therefore for distributions of interatomic distances (DIDs), is ***fully feasible***, which, in turn, makes obtaining calculated diffracted intensities through formulas wholly possible, and a lot faster. ···

ملخص

بالنسبة للبلورات المتوازية السطوح التحصل علي صيغ لتوزيعات المتجهات ما بين الذرات (تمتم)، و بالتالي لتوزيعات المسفات ما بين الذرات (تمسم) هو أمر قابل للتحقيق، الشيء الذي، بدوره، يجعل التحصل على شدات انعراج محسوبة عبر صيغ ممكنا كليا، و أسرع بكثير.

Résumé

L'obtention de formules donnant la distribution des vecteurs interatomiques (DVI), et donc donnant la distribution des distances interatomiques (DDI), est ***pleinement faisable*** dans le cas des cristaux à formes parallélépipédiques, ce qui, à son tour, fait de l'obtention d'intensités diffractées calculées à l'aide de formules entiérement possible, et en des temps beaucoup plus courts. ⋯.

Contents

1 The declaration / التصريح / La déclaration **1**

2 The distributions of interatomic vectors and interatomic distances: definitions / توزيعات المتجهات ما بين الذرات و المسافات ما بين الذرات: تعريفين / Les distributions des vecteurs interatomiques et des distances interatomiques: définitions **3**

2.1 The distribution of interatomic vectors / توزيعات المتجهات ما بين الذرات / La distribution des vecteurs interatomiques 4

2.2 The distribution of interatomic distances / توزيعات المسافات ما بين الذرات / La distribution des distances interatomiques 5

3 Next formulas to be considered / الصيغ التي ستعتبر تاليا / Les prochaines formules à considérer **6**

4 Conclusion / خلاصة / Conclusion **6**

---

1 The declaration / التصريح / La déclaration

The existence of translational symmetry in a crystal causes a finite number of interatomic vector types to be present within the crystal each of which typifies an exact number of equal vectors present within the crystal. Because of this one can, in principle, express the DIVs of crystals with formulas. For parallelepiped crystals, *formulas can be produced* for the DIVs and DIDs and used, for instance, to calculate diffracted intensity distributions. Example: figure 1 shows an X-rays diffraction profile calculated for a polonium cubic shaped crystal using a formula suitable for the distribution of interatomic distances.
وجود التناظر المسحي قي بلورة يتسبب في عدد منته من أنواع المتجهات ما بين الذرات أن يكون موجودا في البلورة الكل واحد منها (من الأنواع) يمثل عدد مضبوط من متجهات متساوية موجودة في البلورة. لهدا السبب يستطع المرء، وهذا مبدئيا، أن يعبر عن تمتم للبلورات بواسطة صيغ. بالنسبة للبلورات، في استطاعة صيغ أن تنتج للتمتم و للتمسم و أن تستعمل، مثلا، لحساب توزيعات شداة منعرجة. مثلا: الشكل 1 يبين رسم انعراج جانبي حسب لبلورة مكعبة الشكل من البولونيوم استعمالا صيغة ملائمة لتوزيع مسافات ما بين الذرات.

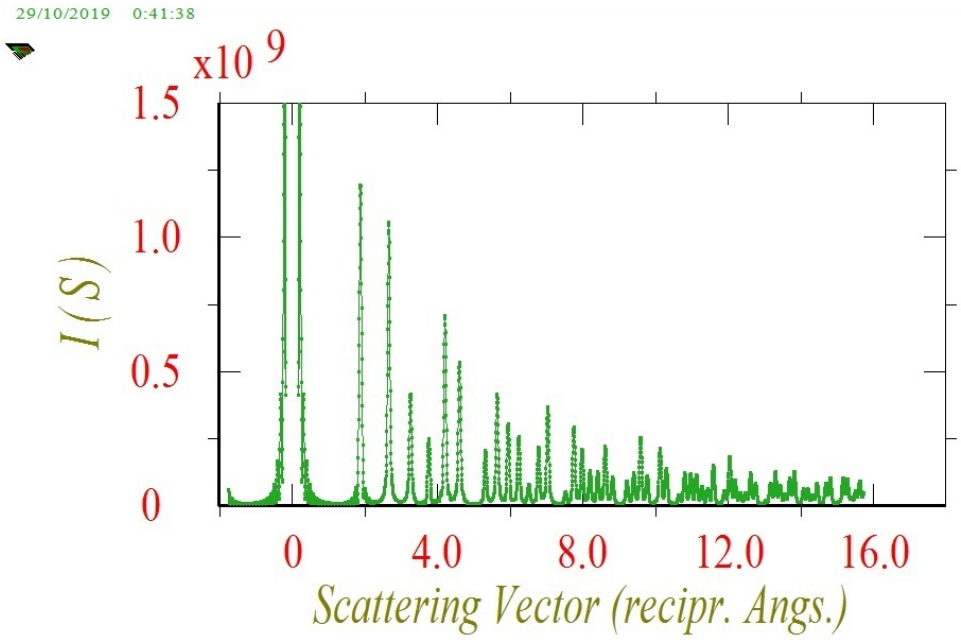

Figure 1: Diffraction profile for polonium cubic shaped crystal calculated using the DID formula for monatomic material cases with triclinic lattices. Lattice: simple cubic; crystal's edge length = 20×a, a = 3.34 Å being the relevant lattice parameter.

رسم الانعراج الجانبي لبلورة بلونيوم مكعبة الشكل حسبت استعمالا صيغة تمسم تخص المواد الأحادية الذرات ذوات الشبكات الثلاثية الميل. الشبكة : مكعب بسيط؛ طول حاشية البلورة = $20 \times a$ جيث $a = 3.34$ angs. هو المعامل الشبكي المناسب.

Profile de diffraction calculé à l'aide de la formule de la DDI relative aux cas des matériaux monoatomiques à réseaux tricliniques. Matériau: polonium; réseau: cubique simple; forme du cristal: cubique; longueur des côtés = 20×a; a = 3.34 Å étant le paramètre cristallin approprié.

L'existence de symétrie de translation dans un cristal génére, dans ce cristal, la présence d'un nombre fini de types de vecteurs interatomiques chacun desquels représente un nombre exact de vecteurs interatomiques égaux présents dans le cristal. Pour cette raison, il est possible, en principe, d'exprimer les DVIs des cristaux à l'aide de formules. Pour les cristaux parallélépipédiques, des formules peuvent être produites pour les DVIs et DDIs et utilisées, par exemple, pour calculer des distributions d'intensités diffractées. Exemple, la figure 1 illustre un profile de diffraction de rayons X calculé à l'aide d'une formule convenable de la distribution de distances interatomiques d'un cristal de polonium de forme cubique. ***The DIV and DID formulas for the case of a parallelepiped crystal from a monatomic material with triclinic lattice have been produced for the first time and will, very soon, be submitted, as part of the content of a text, for consideration for publication.***

الصيغتان للتمتم و للتمسم بالنسبة إلى الحالة المرتبطة بلورة متوازية السطوح مصنوعة من مادة أحادية الذرات ذات شبكة ثلاثية الميل أنتجت لأول مرة و ستحال، جد قريبا، كجزء من محتوى نص، من اجل اعتبار للنشر.

Les formules des DVI et DDI relatives au cas d'un cristal parallélépipédique d'un matériau monoatomique ayant un réseau triclinique ont été produites pour la premiére fois et seront, très bientôt, soumises, en tant que partie du contenu d'un texte, pour considération pour publication.

The content of the said text concerns expressions for the diffracted intensity from a material that can be used, in connection with experimental data analyses, with **no approximation and no assumption additional to those made within the frame of the kinematic approach to diffraction**.

محتوى النص المذكور يتعلق بتعبيرات للشدة "المنعرجة" من مادة التي تستطيع أن تستعمل، بالارتباط بتحليلات بيانات تجريبية، بدون استعمال أي تقريب أو افتراض إضافي لتلك التي اتخذت في إطار المقاربة الكينماتية (الحركية) للانعراج.

Le contenu du dit texte est en rapport avec des expressions obtenues pour l'intensité diffractée par un matériau qui ont la capacité d'être utilisées, en relation avec les analyses de données expérimentales, **sans approximation et sans supposition additionnelles à celles considérées dans le cadre de l'approche cinématique de la diffraction**.

2 The distributions of interatomic vectors and interatomic distances: definitions / توزيعات المتجهات ما بين الذرات و المسافات ما بين الذرات: تعريفين / Les distributions des vecteurs interatomiques et des distances interatomiques: définitions

Using, in the literature, identical, and agreed on, definitions for the distributions of interatomic vectors and interatomic distances should lead to texts, connected to these entities, with increased "harmony" and benefit. It is in the context of this observation that the author is proposing the following definitions for these two important distributions.

استعمال، في النصوص الأدبية العلمية، تعريفين متطابقين، و متفق عليهما، في ما يخص التوزيعين للمتجهات ما بين الذرات و المسفات مابين الذرات من المفروض أن يؤدي إلى نصص، لها علقة بهذين الكيانين، ذات "انسجام، وآم ..." و فائدة مرتفعين أكثر. ففي قرينة (بيئة، محيط، ...) هذه المشاهدة يقترح الكاتب التعريفين التاليين لهدين التوزيعين المهمين.

L'utilisation dans la littérature de définitions des distributions des vecteurs interatomiques et des distances interatomiques identiques, et acceptées par tous, devrait conduire à des textes ayant une "harmonie" et un bénéfice plus élevés. C'est dans le contexte de cette observation que l'auteur propose les définitions suivantes pour ces deux distributions importantes.

2.1 The distribution of interatomic vectors / توزيعات المتجهات ما بين الذرات / La distribution des vecteurs interatomiques

Any piece of material is constituted by a finite number of atoms, for instance equal to N. The center of each, e.g. the ith, of these atoms can be related to the center of any other, e.g. to the jth, atom by a vector, e.g. written $\vec{r}_{ij}$. Such a vector is called an interatomic vector. The total of the interatomic vectors present within the piece of material is equal to N^2, i.e. including the vector $\vec{r}_{ii} = \vec{0}$ corresponding to the atom self-pairing. And if some degree of translational ordering exists in the piece of material considered then there will exist in this piece of material various groups, e.g. in number of M indexed using $p(= 1, 2, \cdots, M)$, of interatomic vectors each of which is made up of, e.g. $n(\vec{r}_p)$, equal interatomic vectors. Thus each of the M groups represents a unique vector type, $\vec{r}_p$, and therefore constitutes a component of the spectrum realizable using the two interconnected $n(\vec{r}_p)$ and $\vec{r}_p$ parameters: this spectrum is the distribution of the interatomic vectors relative to the piece of material under consideration.

تكون أي قطعة من مادة من عدد منته من الذرات، مثلا يساوي "N". مركز كل، مثلا الi، واحدة من هته الذرات يمكن أن يربط بمركز أي ذرة آخر، مثلا الj ، بمتجه، مثلا مكتوبا $\vec{r}_{ij}$. يسمى متجه كهذا متجه ما بين الذرات. مجموع المتجهات ما بين الذرات الموجودة في قطعة من المادة يساوي N^2، و هذا العدد يشمل المتجه $\vec{r}_{ii} = \vec{0}$ المقابل للاقتران الذري الذاتي. و إذا وجدت في القطعة من المدة المعتبرة أي درجة من الترتيب المسحي ستكون عندئذ موجدة في القطعة من المدة مختلف مجموعات، مثلا عددها يساوي M و يشار إليها بالعلامة p، $(p = 1, 2, ..., M)$، من المتجهات ما بين الذرات كل واحدة منها مكونة من، مثلا $n(\vec{r}_p)$، متجهات ما بين الذرات متساوية. هكذا كل واحدة من الM مجموعات تمثل نوعا وحيدا من المتجهات، $\vec{r}_p$، و بالتالي يؤلف مكونا للطيف الممكن تحقيقه استعمالا المعاملين $\vec{r}_p$ و $n(\vec{r}_p)$: هذا الطيف هو التوزيع للمتجهات ما بين الذرات المتعلق ب (المنتسب إلى) القطعة من المادة التي هي في الحسبان.

N'importe quel morceau de matière est composée d'un nombre fini d'atomes, par exemple égal à N. Le centre de chacun, ex. le $i$eme, de ces atomes peut être relié au centre de n'importe quel autre atome, ex. au $j$eme, par un vecteur, ex. écrit $\vec{r}_{ij}$. Un tel vecteur est appelé vecteur interatomique. La totalité des vecteurs interatomiques présents dans le morceau de matière est égale à N^2, i.e. y compris le vecteur correspondant à l'auto-pairage des atomes. Et si un certain degré d'ordre de translation existe dans le morceau de matière considéré alors il existera dans ce morceau de matière divers groupes, ex. en nombre de M et indexés à l'aide de $p(= 1, 2, \cdots, M)$, de vecteurs interatomiques chacun desquels est constitué de, ex. $n(\vec{r}_p)$, vecteurs interatomiques égaux. Ainsi chacun de ces M groupes représente un type de vecteurs unique, $\vec{r}_p$, et donc constitue une composante du spectre réalisable à l'aide des deux paramètres inter-reliés $n(\vec{r}_p)$ et $\vec{r}_p$: ce spectre est la distribution des vecteurs interatomiques relative au morceau de matière en considération.

When the piece of material in question is a crystal with parallelepiped form, then its distribution of interatomic vectors can be formulated using the various parameters defining it. But when the atomic arrangement in the piece of material is such that no equal non-zero vectors are present then the relevant DIV will be made up of components that, apart from the $\vec{0}$-related component, represent no more than one vector each and the

total number of components is given by: $N(N-1)+1$, the $\vec{0}$-related component representing N null vectors.
لما القطعة المادية المعتبر هي بلورة ذات شكل له سطوح متوازية يستطيع توزيع المتجهات ما بين الذرات أن يصاغ استعمالا المعاملات المختلفة التي تعرفه. لكن لما التوزيع الذري هو بحيث أن لا توجد في القطعة المادية أي متجهات متساوية التي هيا ليس سفر فالتمتم المناسب سيكون مكونا من مركبات، بغض النظر عن المركب المرتبط ب $\vec{0}$، التي ما تمثل كل واحدة منها إلى متجه واحد و العدد الإجمال للمركبات سيكون معطى من قبل: $N(N-1)+1$، المركب المرتبط ب $\vec{0}$ ممثلا لN متجهات عديمة القيمة.

Quand le morceau de matière en question est un cristal de forme parallélépipédique, alors sa distribution de vecteurs interatomiques peut être formulée au moyen des différents paramètres le définissant. Mais quand l'arrangement atomique du morceau de matériau est tel qu'il ne contient pas de vecteurs interatomiques non nuls égaux alors la DVI appropriée sera constituée de composantes qui, à l'exception de celle associée avec le vecteur $\vec{0}$, ne représentent qu'un seul vecteur chacune et le nombre total de composantes est donné par: $N(N-1)+1$, la composante relative à $\vec{0}$ représentant N vecteurs nuls.

2.2 The distribution of interatomic distances / توزيعات المسافات ما بين الذرات / La distribution des distances interatomiques

The distribution of interatomic distances associated with a given piece of material deduces from the distribution of interatomic vectors of that piece of material through taking the moduli of the constituting interatomic vectors. Therefore, if the degree of translational symmetry present within the given piece of material is such that the distribution of interatomic distances can be written as $n(r_q)$, with $q = 1, 2, \cdots, M$, which means that the two DIV and DID have an equal number of distinct components, then one has: $n(r_q) = n(\vec{r}_q)$. This is with the note that in this formulation case the two components of the distribution of interatomic distances which correspond to the two components relative to the two vectors $\vec{r}_p$ and $-\vec{r}_p$ $(p \neq 0)$ of the distribution of interatomic vectors are considered as two distinct components. This is possible for the reason that they come from two different vectors each of which corresponds to a different term within the expression of the intensity diffracted by the piece of material.
توزيع المسافات ما بين الذرات المرافق لقطعة من مادة يستدل من توزيع المتجهات ما بين الذرات لتلك القطعة المادية عبر اتخاذ طويلات المتجهات ما بين الذرات المكونة له. لذلك، لو أن لدرجة التناظر المسحي الموجود في القطعة المادية المعطاة مدى يجعل التوزيعات للمسافات ما بين الذرات قادرة على أن يعبر عليها بواسطة (أن تكتب ك)$n(r_q)$، حيث $q = 1, 2, \cdots, M$، هذا (الشيء الذي) يعني أن الاثنين التمتم و التمسم لهما عدد متساوي (لهما فسس العدد) من مركبات متميزة (بمعناه أن كل مركب يختلف عن المركبات الأخرى)، عندئذ المرء لديه (لدينا): $n(r_q) = n(\vec{r}_q)$. هذا مع الإشارة إلى أن في هذه الحالة من الصياغة المركبان لتوزيع المسافات ما بين الذرات اللذان يقابلان المركبين المناسبين للمتجهين $\vec{r}_p$ و $-\vec{r}_p$ $(p \neq 0)$ لتوزيع المتجهات ما بين الذرات يعتبران كمركبين متميزين من بعضهما البعض. هذا ممكن بسبب أنهما يأتيان من متجهين مختلفين الكل واحد منهما يتوافق مع لفظ مختلف لعبارة الشدة المنعرجة (المحيدة) بواسطة القطعة المادية.
La distribution des distances interatomiques associée à un morceau de matière donné se

déduit de la distribution des vecteurs interatomiques de ce morceau en prenant les modules des vecteurs interatomiques la constituant. Par conséquent, si le degré de symétrie de translation présent dans le moreau de matière donné est tel que la distribution des distances interatomiques peut être écrite $n(r_q)$, où $q = 1, 2, \cdots, M$, ce qui signifie que les deux DVI et DDI ont un nombre égal de composantes, alors on a: $n(r_q) = n(\vec{r}_q)$. Ceci est en notant que dans ce cas de formulation les deux composantes de la distribution des distances interatomiques qui correspondent aux deux composantes relatives aux deux vecteurs $\vec{r}_p$ and $-\vec{r}_p$ $(p \neq 0)$ de la distribution des vecteurs interatomiques sont considérées comme étant deux composantes distinctes. Ceci est possible parce qu'elles viennent de deux vecteurs différents chacun desquels correspond à un terme différent dans l'expression de l'intensité diffractée par le morceau de matière.

Thus, in this (distribution) case also, when the piece of material is a crystal with parallelepiped form, the distribution of interatomic distances can be formulated using the various parameters defining the crystal.

هكذا، في هذه الحالة (التوزيعية) كذلك، لما تكون القطعة المادية بلورة ذات شكل متوازية السطوح، فيكون في استطاعة توزيع المسافات ما بين الذرات أن تصاغ استعمالا المعاملات المتنوعة المعرفة للبلورة.

Ainsi, dans ce cas (de distribution) aussi, quand le morceau de matière est un cristal de forme parallélépipédique, la distribution des distances interatomiques peut se formuler au moyen des divers paramètres définissant le cristal.

3 Next formulas to be considered / الصيغ التي ستعتبر تاليا / Les prochaines formules à considérer

The DIV and DID formulas to be considered next are those relative to the particular case of diatomic parallelepiped crystals.

الصيغتين للتمتم و للتمسم التي ستعتبر تاليا هيا تلك التي تنتسب إلى الحالة الخاصة للبلورات المتوازية السطوح الثنائية الذرات.

Les formules de DVI et de DDI considérées prochainement sont celles relatives au cas des cristaux parallélépipédiques diatomiques.

4 Conclusion / خلاصة / Conclusion

Progress in diffraction analytic techniques is possible in the future.

تقدم في التقنيات التحليلية للانعراج ممكن في المستقبل.

Réalisation future de progrès dans les techniques d'analyse en diffraction n'est pas à écarter.