

Affinement des rapports de flipping avec FULLPROF

J. Rodríguez-Carvajal^{1,2} et C. Frontera³

¹ Institut Laue-Langevin, 6 rue Jules Horowitz, BP. 156, 38042 Grenoble Cedex 9, France

² Laboratoire Léon Brillouin (CEA-CNRS), CEA/Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France

³ Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona (ICMAB-CSIC), Bellaterra, Spain

Travail réalisé au Service de Physique Statistique, Magnétisme et Supraconductivité, MDN, CEA/Grenoble.

1 OBJECTIF

L'objectif de cet article est de fournir les principales recettes pour traiter les rapports de flipping avec FULLPROF [1]. Si l'on utilise des neutrons incidents polarisés avec un échantillon placé dans un champ magnétique vertical, on mesure généralement le rapport entre les intensités de Bragg diffractées pour des neutrons incidents de 'spin up' (I^+) et pour des neutrons de 'spin down' (I^-). Ce rapport $R = I^+/I^-$ est appelé rapport de 'flipping'. Dans ce cas, aucune analyse de polarisation n'est effectuée. La première équation de Blume-Maleyev [2], qui se simplifie par la suppression du terme chiral, est à la base de l'analyse des données. P. Coppens et P.J. Becker, dans les Tables Internationales de Cristallographie, Volume C, pp 627–645 [3], donnent une description relativement détaillée du traitement des distributions d'aimantation mesurées à l'aide de neutrons polarisés. Dans cet article, nous nous contenterons de donner seulement les expressions nécessaires à la préparation d'un fichier de contrôle, que nous désignerons dans la suite par 'fichier PCR'. Cette partie de FULLPROF est en cours de test, et il est fort probable que des changements vont intervenir dans les prochaines versions. Les modifications les plus probables concerneront sans doute les facteurs de normalisation, dans le but d'extraire des paramètres directement comparables à ceux que l'on peut obtenir d'autres programmes. Il est également prévu d'inclure dans le traitement l'effet Schwinger, la polarisation nucléaire, et une approche tensorielle des susceptibilités locales (pour les matériaux fortement anisotropes).

2 EXPRESSION UTILISÉE POUR CALCULER LE RAPPORT DE FLIPPING

Si on appelle I_h l'intensité (section efficace de diffusion) du faisceau diffracté et \mathbf{P}_i la polarisation incidente, l'équation s'écrit :

Section efficace (Equation 1) :

$$I_h = N_h N_h^* + \mathbf{M}_{\perp h} \mathbf{M}_{\perp h}^* + (N_h \mathbf{M}_{\perp h}^* + N_h^* \mathbf{M}_{\perp h}) \mathbf{P}_i \quad (2.1)$$

où N_h est le facteur de structure nucléaire de la réflexion \mathbf{h} et $\mathbf{M}_{\perp h}$ est le vecteur interaction magnétique, c'est à dire la composante du facteur de structure magnétique perpendiculaire au vecteur de diffusion ($\mathbf{Q} = 2\pi \mathbf{h}$).

La géométrie particulière d'une mesure de rapport de flipping permet d'utiliser une forme scalaire de l'expression vectorielle ci-dessus. La direction de polarisation est la même que celle du champ magnétique appliqué, selon l'axe \mathbf{z} , et le facteur de structure magnétique \mathbf{M}_h est lui aussi selon cette direction \mathbf{z} verticale ($\mathbf{M}_h = M_h \mathbf{z}$, en laissant de côté les cas de forte anisotropie !). Ainsi, si l'on appelle l'angle entre l'axe vertical et le vecteur de diffusion h , on peut écrire :

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{\perp h} &= \mathbf{e} \times \mathbf{M}_h \times \mathbf{e} = \mathbf{M}_h - \mathbf{e}(\mathbf{e} \cdot \mathbf{M}_h) = M_h \mathbf{z} - \mathbf{e} M_h \cos \alpha \\ \mathbf{e} = \mathbf{h}/h = \mathbf{Q}/Q &= (e_x, e_y, e_z) = (e_x, e_y, \cos \alpha) \quad \mathbf{P}_i = p(0, 0, 1); \quad p = \frac{n^+ - n^-}{n^+ + n^-} \end{aligned} \quad (2.2)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{\perp\mathbf{h}} &= M(\mathbf{h})(\mathbf{z} - \mathbf{e} \cos \alpha), \text{ et ainsi} \\ \mathbf{M}_{\perp\mathbf{h}} \mathbf{M}_{\perp\mathbf{h}}^* &= M(\mathbf{h})(\mathbf{z} - \mathbf{e} \cos \alpha) M^*(\mathbf{h})(\mathbf{z} - \mathbf{e} \cos \alpha) = M(\mathbf{h}) M^*(\mathbf{h}) \sin^2 \alpha \end{aligned}$$

En omettant l'indice décrivant le vecteur de diffusion, l'intensité qui dépend de la polarisation incidente est donnée par :

$$\begin{aligned} I^+ &= NN^* + MM^* \sin^2 \alpha + (NM^* + N^*M) p \sin^2 \alpha \\ I^- &= NN^* + MM^* \sin^2 \alpha - (NM^* + N^*M) p \sin^2 \alpha \end{aligned} \quad (2.3)$$

La quantité p peut être inférieure à 1 à cause du fait que le faisceau incident peut ne pas être parfaitement polarisé. Dans les expressions (2) les quantités n^+ et n^- représentent le nombre de neutrons du faisceau incident ayant un spin 'up' (respectivement 'down'). Si l'on suppose que le faisceau incident est constitué de neutrons de spin 'up', un 'flipper' est nécessaire pour transformer ce faisceau en un faisceau incident de neutrons de spin 'down' avant la mesure de I^- . Nous devons également prendre en compte la possibilité que ce dispositif ne soit pas parfait. Si e est la fraction de neutrons dont le spin est effectivement renversé par le 'flipper', les expressions ci-dessus deviennent alors :

$$\begin{aligned} I^+ &= MN^* + MM^* \sin^2 \alpha + (NM^* + N^*M) p \sin^2 \alpha \\ I^- &= MN^* + NM^* \sin^2 \alpha - (NM^* + N^*M) p(2e - 1) \sin^2 \alpha \end{aligned} \quad (2.4)$$

Le rapport de flipping est donné par :

$$R = \frac{I^+}{I^-} = \frac{NN^* + NM^* q^2 + (NM^* + N^*M) p^+ q^2}{NN^* + MM^* q^2 - (NM^* + N^*M) p^- q^2} \quad (2.5)$$

où $q^2 = \sin^2 \alpha$ et p^+ et p^- sont les polarisations effectives pour les deux états 'up' et 'down' du faisceau incident. Dans l'appendice 1, une expression plus complète est donnée, prenant en compte l'effet de l'extinction.

3 QUE PEUT FAIRE FULLPROF ?

Le programme FULLPROF peut être utilisé pour affiner, par moindres carrés, un jeu de rapports de flipping mesurés. La fonction minimisée est :

$$\chi^2 = \sum_i \frac{\{R_i(obs) - R_i(calc, \beta)\}^2}{\sigma_i^2(R(obs))} \quad (3.1)$$

où le vecteur β représente la liste des paramètres libres. FULLPROF calcule le facteur de structure nucléaire à partir de la description fournie par l'utilisateur et fait une correction d'extinction. Le facteur de structure magnétique est calculé de façon simplifiée, puisque l'on suppose que seule la composante selon l'axe \mathbf{z} contribue. Des formes complexes du facteur de forme magnétique sont néanmoins disponibles. L'expression simplifiée du facteur de structure magnétique (sans prendre en compte de façon explicite la symétrie du cristal) est :

$$M(\mathbf{h}) = p_B \sum_{j=1}^n O_j T_j f_j(\mathbf{h}) \exp\{2\pi i \mathbf{h} \mathbf{r}_j\} \quad (3.2)$$

La somme est étendue à tous les atomes de la maille possédant des électrons non appariés, le facteur $p_B = r_e \gamma / 2 = 0.2695$ permettant quant à lui la mise à l'échelle des magnétons de Bohr (μ_B) et les longueurs de diffusion (en 10^{-12} cm). Le facteur de forme $f_j(\mathbf{h})$, transformée de Fourier de la distribution d'aimantation, peut dépendre du vecteur de diffusion \mathbf{h} et pas seulement de son amplitude $|\mathbf{h}| = h$.

Il contient implicitement le nombre effectif d'électrons non appariés (moment magnétique) en μ_B . Les coefficients O_j et T_j sont respectivement les facteurs d'occupation et de Debye-Waller.

Il est supposé dans un tel traitement que la structure cristallographique et les paramètres d'extinction ont été affinés au préalable à partir d'un grand nombre de réflexions collectées à la même température que les rapports de flipping. En effet, les paramètres structuraux et d'extinction doivent être fixés lors de l'affinement des rapports de flipping. Le vecteur β dépend du modèle particulier choisi pour l'affinement. Les différents modèles qui existent dans FULLPROF correspondent à différentes manières de calculer $f_j(\mathbf{h})$. Le choix particulier de facteur de forme donné à chaque atome/ion se fait par l'intermédiaire d'un mot clé que nous expliciterons lors de la description de chaque modèle. Le programme est également capable de calculer des rapports de flipping en l'absence de toute donnée expérimentale. C'est ce que nous allons voir dans les paragraphes suivants.

4 AFFINEMENTS SPHÉRIQUES

C'est le modèle le plus simple, et donc le premier à essayer, pour modéliser les distributions d'aimantation. On suppose que cette distribution est dominée principalement par la fonction d'onde radiale des électrons non appariés. Si l'on considère en outre que cette fonction d'onde n'est que très peu modifiée par rapport à celle de l'atome (ion) libre, on peut utiliser des valeurs tabulées et n'affiner qu'un tout petit nombre de coefficients par atome magnétique. Le facteur de forme magnétique ne dépend alors que de l'amplitude du vecteur de diffusion. Si l'on utilise la variable $s = \sin \theta / \lambda$, alors l'expression du facteur de forme utilisé dans FULLPROF à insérer dans l'équation (7) est la suivante :

$$f(|\mathbf{h}|/2) = f(s) = \sum_{i=0,2,4,6} W_i \langle j_i(s) \rangle \quad (4.1)$$

Dans FULLPROF, les fonctions $\langle j_l(s) \rangle = \int_0^\infty U^2(r) j_l(4\pi sr) 4\pi r^2 dr$ sont tabulées sous forme d'approximation (voir Tables Internationales de Cristallographie, Volume C, sect. 4.4.5 [4]). Les paramètres affinés sont les coefficients W_l . L'unité de ces coefficients est le magnéton de Bohr et W_0 donne la valeur du moment magnétique porté par l'atome.

Les expressions approximatives pour calculer les $\langle j_l(s) \rangle$ sont les suivantes :

$$\begin{aligned} \langle j_l(s) \rangle &= s^2 (A_l \exp\{-a_l s^2\} + B_l \exp\{-b_l s^2\} + C_l \exp\{-c_l s^2\} + D_l) \quad \text{for } l = 2, 4, 6 \\ \langle j_0(s) \rangle &= A_0 \exp\{-a_0 s^2\} + B_0 \exp\{-b_0 s^2\} + C_0 \exp\{-c_0 s^2\} + D_0 \end{aligned} \quad (4.2)$$

On peut trouver les coefficients A_l , B_l , C_l , et D_l , dans la référence citée ci-dessus et dans le fichier de sortie de FULLPROF. Un atome/ion est ainsi traité par le programme si le nom de son facteur de forme est déclaré comme étant **MPOL** dans le fichier PCR. Il existe une autre manière de faire un tel affinement sphérique : il suffit de réaliser un affinement multipolaire (voir le paragraphe suivant) en mettant à zéro une partie des coefficients.

5 AFFINEMENTS MULTIPOLAIRES

Dans cette approche, un repère local cartésien est nécessaire pour définir les fonctions harmoniques sphériques. Par défaut, FULLPROF définit (dans l'option rapport de flipping) un repère cartésien attaché au cristal, ayant la même origine, l'axe \mathbf{x} coïncidant avec l'axe \mathbf{a} , \mathbf{y} dans le plan (\mathbf{a}, \mathbf{b}) et \mathbf{z} défini comme étant $\mathbf{z} = \mathbf{x} \times \mathbf{y}$. Les repères locaux cartésiens, attachés à chaque atome, à partir desquels vont être définis les vecteurs \mathbf{r} , \mathbf{r}_0 , et les angles sphériques qui vont intervenir dans les formules suivantes,

peuvent être choisis par l'utilisateur sous forme d'une simple rotation du repère par défaut autour d'une direction cristallographique fournie également. Nous discuterons ce point dans la partie consacrée à la description du fichier d'entrée.

5.1 Approche densité

Lorsque la distribution d'aimantation dévie notablement de l'image sphérique, il faut utiliser des descriptions plus sophistiquées. Considérons la distribution d'aimantation autour d'un atome situé à

l'origine de la maille. On peut développer cette distribution sous forme d'harmoniques sphériques réelles :

$$m(\mathbf{r}) = \sum_{i=0}^4 R_i^{dens}(r) \sum \beta_i^{m,p} y_i^{m,p}(\mathbf{r}_0) \quad (5.1)$$

où le vecteur unitaire \mathbf{r}_0 collinéaire à \mathbf{r} est paramétré en fonction des angles sphériques locaux (θ, φ) . Les harmoniques sphériques réelles sont définies dans la référence M. Kara et K. Kurki-Suonio, Acta Cryst. **A37**, 201 (1981) [5] :

$$y_l^{m,p}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2(1 + \delta_{m0})p}} \{(-1)^m Y_l^{+m}(\theta, \varphi) + p Y_l^{-m}(\theta, \varphi)\}$$

avec $0 \leq m \leq l$ et $p = \pm 1$. La transformée de Fourier de l'expression (10) n'est autre que le facteur de forme, qui s'écrit :

$$f(\mathbf{h}) = \sum_{l=0}^4 i^l \langle j_l(2\pi h) \rangle \sum_{m,p} \beta_l^{m,p} y_l^{m,p}(\mathbf{h}_0) \quad (5.2)$$

où $\langle j_l(s) \rangle$ sont les transformées de Fourier-Bessel de la densité radiale :

$$\langle j_l(s) \rangle = \int_0^{\infty} R_l^{dens}(r) j_l(sr) r^2 dr \quad (5.3)$$

et j_l les fonctions de Bessel sphériques. Les coefficients $\beta_l^{m,p}$ sont les occupations ajustables des différentes harmoniques sphériques. On peut choisir les fonctions radiales de la densité sous forme de fonctions de type Slater :

$$R_l^{dens}(r) = \text{Slater}(n_l, \zeta; r) = \frac{\zeta^{n_l+3}}{(n_l+2)!} r^{n_l} \exp\{-\zeta r\} \quad (5.4)$$

On peut également ajuster les facteurs de volume ζ_1 . Un atome/ion sera traité de cette façon si on déclare le nom de son facteur de forme comme étant **MULT** dans le fichier PCR.

Dans FULLPROF, l'expression utilisée pour calculer le facteur de forme est très similaire à l'équation (11), à ceci près que deux termes $l=0$ sont autorisés, et que les coefficients réels sont notés A au lieu de β . Avec ces nouvelles notations, la distribution d'aimantation s'écrit :

$$m(\mathbf{r}) = \text{Slater}(n_{s1}, \zeta_{s1}; r) y_0^{0+}(\mathbf{r}_0) + B_0^{0+} \text{Slater}(n_{s2}, \zeta_{s2}; r) y_0^{0+}(\mathbf{r}_0) + \sum_{l=1}^4 \text{Slater}(n_l, \zeta_l; r) \sum_{m=0, \dots, l; p=\pm} A_l^{m,p} y_l^{m,p}(\mathbf{r}_0) \quad (5.5)$$

Si l'on veut se ramener à l'approche sphérique, il ne faut considérer que le premier (et/ou le second) terme $l = 0$ de l'expression (11) ou de (13') afin que le facteur de forme puisse s'écrire.

$$f(\mathbf{h}) = \langle j_0(2\pi h)_A \rangle A_0^{0+} y_0^{0+}(\mathbf{h}_0) + \langle j_0(2\pi h)_B \rangle B_0^{0+} y_0^{0+}(\mathbf{h}_0).$$

5.2 Approche orbitale

Dans cette approche, la contribution à la distribution d'aimantation de chaque ion est décrite en terme d'une orbitale centrée sur cet ion. Cette orbitale est supposée avoir un moment orbital bien défini (à part dans le cas d'une orbitale hybride s-p). Ainsi, en général :

$$m(\mathbf{r}) = |\phi_l(\mathbf{r})|^2 \quad (5.6)$$

où l'orbitale ϕ_l peut être soit de type p , d ou f , et est exprimée sous forme d'harmoniques sphériques réelles :

$$\phi_l(\mathbf{r}) = R_l(r) \sum_{m,p} A_l^{m,p} y_l^{m,p}(\mathbf{r}_0) \quad (5.7)$$

En général, les coefficients $A_l^{m,p}$ sont des nombres complexes ($A_l^{m,p} = |A_l^{m,p}| \exp\{i\phi_l^{m,p}\}$), mais la phase est arbitraire et on fixe ϕ_l^{l+} à zéro. Chaque type d'orbitale conduit à une distribution d'aimantation qui peut s'exprimer d'une manière très similaire à l'équation (10) :

$$m(\mathbf{r}) = |\phi_l(\mathbf{r})|^2 = \left| R_l(r) \sum_{m,p} A_l^{m,p} y_l^{m,p}(\mathbf{r}_0) \right|^2 = R_l^2(r) \sum_{l'=0,2,\dots,2l} \beta_{l'}^{m,p} y_{l'}^{m,p}(\mathbf{r}_0) \quad (5.8)$$

Le facteur de forme magnétique de chaque ion peut maintenant s'écrire :

$$f(\mathbf{h}) = \sum_{l'=0,2,\dots,2l} i^{l'} \langle j_{l'}(2\pi h) \rangle \sum_{m,p} \beta_{l'}^{m,p} y_{l'}^{m,p}(\mathbf{h}_0) \quad (5.9)$$

où, dans ce cas, $\langle j_{l'}(s) \rangle$ est relié à $R_l(r)$ par

$$\langle j_{l'}(s) \rangle = \int_0^\infty r^2 R_l^2(r) j_{l'}(sr) dr \quad (5.10)$$

La partie radiale est traitée dans FULLPROF de trois manières différentes.

La première approche consiste à prendre les $\langle j_{l'}(s) \rangle$ sous forme d'approximation tabulée, comme dans le cas simple des affinements sphériques (voir équation (9)).

La deuxième approche consiste à approximer $R_l(r)$ par une fonction radiale de type hydrogène de nombre quantique principal n ($n \geq l+1$), l étant le même nombre quantique que dans la partie angulaire. L'expression de telles fonctions peut se trouver dans de nombreux ouvrages.

$$rR_{nl}(r) = \left\{ \frac{\xi}{2n} (n-l-1)!(n+l)! \right\}^{1/2} \exp\left\{ -\frac{\xi r}{2} \right\} (\xi r)^{l+1} \times \sum_{\nu=0}^{n-l-1} \frac{(-\xi r)^\nu}{\nu!(\nu+2l+1)!(n-l-1-\nu)!} \quad (5.11)$$

où $\xi = \frac{2Z_{eff}}{na_0}$, avec $a_0=0.52918 \text{ \AA}$. Dans cette approche, l'utilisateur peut choisir la valeur de n (à la restriction évidente près que $n \geq l+1$) et Z_{eff} est un paramètre ajustable.

La troisième approche consiste quant à elle à approximer $R_l(r)$ par une fonction radiale de type Slater, que l'on écrit dans ce cas :

$$R(r) = \text{Slater}(n, \eta; r) = \frac{(2\eta)^{2n+3}}{(2n+2)!} r^n \exp\{-\eta r\} \quad (5.12)$$

Pour décrire de telles orbitales de type p , d ou f dans ce genre d'approches, on doit associer à l'atome/ion un nom de facteur de forme égal à **DIPO**, **QUAD** ou **HXP** dans le fichier PCR. On peut traiter également un autre cas : celui d'une orbitale hybride $s-p$. Pour cela, on suppose que l'expression de l'orbitale est la suivante :

$$\phi_{s-p}(\mathbf{r}) = R_p(r) \sum_{m,p} A_1^{m,p} y_1^{m,p}(\mathbf{r}_0) + R_s(r) A_0^{0+} y_0^{0+}(\mathbf{r}_0) \quad (5.13)$$

L'expression de la distribution d'aimantation est tout à fait analogue à celle de l'équation (5.8), mais avec $l'=0, 1, 2$. Si l'on choisit ce type d'orbitale, $\langle j_l'(s) \rangle$ ne peut être calculé qu'en supposant que R_p et R_s sont des fonctions de type hydrogène avec le même nombre quantique principal n . Un atome/ion est traité de la sorte en lui associant le nom **DISP** dans le fichier PCR.

Le choix entre les trois approches pour traiter la partie radiale se fait dans le fichier PCR à l'aide de la valeur donnée à la variable `Radial_Model` (voir ci dessous).

Dans l'appendice II, le calcul de la distribution d'aimantation en fonction des coefficients des orbitales est développé.

6 COMMENT CALCULER LES RAPPORTS DE FLIPPING DANS FULLPROF

Le format du fichier d'entrée pour les calculs basés sur des rapports de flipping est le même que pour tout calcul sur les monocristaux, hormis le fait que l'option **JBT=10** est obligatoire. Afin d'avoir une description complète de tous les mots clé d'un fichier PCR, le lecteur est invité à consulter le manuel du programme. **FULLPROF** sait qu'il doit traiter des rapports de flipping en lisant le type de données cristallographiques (voir ci dessous) où par une indication implicite dans le fichier PCR dans le cas d'une simulation. Commençons par l'exemple d'une simulation de rapports de flipping en l'absence de données expérimentales. Dans un tel cas, il n'y a besoin que du fichier PCR.

6.1 Simulations

Pour réaliser une simulation, l'utilisateur doit écrire **JOB=3** et **CRY=4**. Le programme génère alors les réflexions en fonction des valeurs données des angles $2\theta_{\min}$ et $2\theta_{\max}$. La longueur d'onde et les autres caractéristiques sont fournies à la fin du fichier PCR. La meilleure manière de comprendre comment marche une telle simulation est de regarder un exemple simple.

Dans l'exemple ci-dessous du Cadre 1, la longueur d'onde utilisée est 0.711 Å, et la variable `itypd=2` veut dire que le programme va calculer les rapports de flipping à partir du modèle décrit dans ce même fichier.

`Polarp` et `Polarm` sont les valeurs des polarisations pour les neutrons 'up' et 'down' respectivement, et `UBmat = 1` veut dire que le programme doit lire la matrice d'orientation juste en dessous de la ligne courante.

Le même type de fichier sert aussi à calculer des facteurs de structure, au lieu des rapports de flipping, pour un monocristal. Si `itypd=0, 1` le programme calcule ces facteurs de structure, et le fichier de sortie *.int contient respectivement leur carré (`itypd=0`) où simplement leur module (`itypd=1`).

6.2 Description des paramètres atomiques pour différents modèles de la distribution d'aimantation

L'option **JBT=10** est obligatoire pour calculer les rapports de flipping. En dehors de ce point, les atomes sont décrits de manière tout à fait similaire à n'importe quel autre calcul cristallographique. On considère qu'un atome a des électrons non appariés si le label donné à son facteur de diffusion a un nom particulier

et si l'atome est du type $n_t=4$ ou $n_t=5$. Ces deux dernières valeurs indiquent au programme que le facteur de forme de l'atome est de type spécial.

Cadre 1. Eléments importants pour une simulation de rapports de flipping.

L'entête d'un fichier PCR adapté à la simulation de monocristaux ressemble à :

```

COMM Simulation of Flipping ratios
! Files => DAT-file: flipr-sim, PCR-file: flipr-sim
!Job Npr Nph Nba Nex Nsc Nor Dum Iwg Ilo Ias Res Ste Nre Cry Uni Cor Opt Aut
   3  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
!
!Ipr PPl Ioc Mat Pcr Ls1 Ls2 Ls3 NLI Prf Ins Rpa Sym Hkl Fou Sho Ana
   0  0  1  0  0  0  0  0  0  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
!
!NCY Eps R_at R_an R_pr R_gl Thmin Step Thmax PSD Sent0
   1  0.01  1.00  1.00  1.00  1.00  10.0000  0.1000  89.9000  0.000  0.000
!
. . . . .
    
```

Les éléments importants pour réaliser une telle simulation sont en caractères gras. **Fou = 4** (dans le cas de rapports de flipping) donne l'instruction au programme de calculer une carte de densité, qui peut être visualisée en utilisant GFOURIER.

Puis vient la description de la phase cristallographique étudiée. Cette partie du fichier PCR est similaire à celle utilisée pour la diffraction de poudre, hormis le fait que l'on autorise des descriptions plus sophistiquées pour les facteurs de forme. C'est ce que nous verrons dans les prochaines sections.

La fin du fichier PCR est adaptée aux simulations pour les monocristaux. Là encore, les paramètres importants sont indiqués en gras.

```

. . . . .
! Scale Factors
! Sc1 Sc2 Sc3 Sc4 Sc5 Sc6
  1.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
   0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
! Extinction Parameters
!Ext1 Ext2 Ext3 Ext4 Ext5 Ext6 Ext7 Ext-Model
  42.0 42.0 74.0 0.000 0.000 0.000 0.000 4
  0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
! a b c alpha beta gamma #Cell Info
  6.197000 6.197000 7.013000 90.000000 90.000000 120.000000
  0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000
!x-Lambda/2 + Not yet used parameters
  0.03000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000
  0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
!Parameters for Single X-tal calculations
!Lambda itypd ipow Polarp Polarm UB_mat
  0.7110 2 0 0.89000 0.89000 1
!UB_matrix
  -0.017950 0.000610 0.188620
  -0.042370 -0.173200 -0.003470
  .127620 -0.031460 0.012250
    
```

La première ligne d'un atome ayant un facteur de forme spécial contient les éléments suivants :

```

Label ScattLab Mag Vek x y z Biso Occ n_t Spc
    
```

A la suite de cette ligne, on doit également donner une ligne contenant les codes pour l'affinement. Dans le cas de rapports de flipping, cette ligne doit être une liste de zéros. `Label` doit démarrer par le symbole chimique de l'atome suivi de l'état de valence. Le programme extrait à partir de ce label la longueur de diffusion pour calculer les facteurs de structure. La valence est requise dans le cas de facteurs de forme spéciaux disponibles dans le programme.

L'élément `ScattLab` est utilisé pour sélectionner les différents modes de distribution d'électrons non appariés. Ce point sera discuté en détail plus loin dans l'article.

Les éléments `Mag` et `Vek` ne sont pas utilisés dans le cas de calculs de rapports de flipping. Ce sont tous les deux des variables entières, et ils doivent être fixés à zéro. Les éléments `x`, `y`, `z`, `Biso` et `Occ` ont la même signification que dans les affinements classiques (coordonnées fractionnaires, facteur de température isotrope et facteur d'occupation).

L'élément `SpC` n'est pas utilisé pour ce type de calcul.

Les valeurs entières possibles pour le paramètre `n_t` dans le cas de rapports de flipping sont les suivantes :

- `n_t = 0` Atome ayant un facteur d'agitation thermique isotrope sans électrons non appariés, qui ne contribue qu'au facteur de structure nucléaire.
- `n_t = 2` Atome ayant un facteur d'agitation thermique anisotrope sans électrons non appariés, qui ne contribue qu'au facteur de structure nucléaire.
- `n_t = 4` Atome possédant des électrons non appariés, pour qui un facteur de forme spécial va être donné. Il contribue à la fois au facteur de structure nucléaire et magnétique. Cet atome a un facteur d'agitation thermique isotrope.
- `n_t = 5` Atome possédant des électrons non appariés, pour qui un facteur de forme spécial va être donné. Il contribue à la fois au facteur de structure nucléaire et magnétique. Dans ce cas, on autorise l'utilisation de facteurs de température anisotropes dans le calcul des rapports de flipping ou des facteurs de structure des objets complexes décrits par les différents types de facteurs de forme. Deux lignes supplémentaires (une avec β_{11} , β_{22} , β_{33} , β_{12} , β_{13} , β_{23} et l'autre avec les codes correspondants) sont lues pour l'atome après la lecture des coefficients du facteur de forme (voir ci-dessous).

Dans le Cadre 2, le lecteur trouvera des exemples des deux premières lignes caractérisant un atome.

Cadre 2. Exemples des premières lignes décrivant les atomes.

Exemple 1:

```
!Label ScattLab Mag Vek x y z Biso Occ n_t Spc
N1 N 0 0 0.69232 0.12932 0.73347 0.32982 1.00000 0 0
. . .
C1 MULT 0 0 0.69232 0.12932 0.73347 0.32982 1.00000 4 0
. . .
```

L'atome N1 ne contribue qu'au facteur de structure nucléaire. L'atome C1 est décrit par un développement multipolaire (dont les coefficients sont lus après ces deux premières lignes et décrits plus bas).

Exemple 2:

Un exemple d'atome anisotrope ne contribuant qu'au facteur de structure nucléaire est:

```
Sulf S 0 0 0.87879 0.00620 0.74224 0.00000 1.00000 2 0
. . .
0.01387 0.02232 0.00073 0.00064 0.00081 0.00039 <-Betas
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
```


Pour les rapports de flipping, la partie la plus importante est le modèle utilisé pour décrire le facteur de forme. Celui-ci est indiqué au programme par les noms spéciaux donnés à la variable `ScattLab` (désigné dans le fichier PCR par le nom `Type`). Décrivons en détails les différents cas traités par FULL-PROF.

1: `ScattLab = MPOL`

C'est le cas le plus simple correspondant à des atomes sphériques pour lesquels le facteur de forme est calculé sous forme des combinaisons linéaires décrites dans l'équation (8). Un tel exemple de l'option MPOL est donné dans le Cadre 3.

Cadre 3. Dans cet exemple, un ion d'uranium, U^{3+} , est traité pour des rapports de flipping avec un facteur de forme du type: $f(s) = W_0 \langle j_2(s) \rangle$. Les tables internes sont utilisées (voir équations 9) et les paramètres affinés W_0 et W_2 sont les deux premiers coefficients de la liste. On peut affiner jusqu'à 4 coefficients.

U3	MPOL	0	0	0.00000	0.00000	0.00000	0.09825	0.04167	4	0
	0.03596	0.06116	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	<-FormFactor	
	11.00	21.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000		
	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		

Dans ce Cadre 3, on voit tout de suite que l'atome est considéré comme isotrope du point de vue de l'agitation thermique (Debye-Waller). Dans ce cas, nous avons $B_{\text{iso}} \approx 0.098 \text{ \AA}^2$. Le facteur d'occupation est défini comme étant égal au quotient de la multiplicité du site par la multiplicité de la position générale du groupe d'espace. L'utilisateur peut utiliser un facteur multiplicatif pour avoir des nombres plus simples.

Il est important de réaliser que les coefficients W_l sont reliés au moment magnétique de l'atome et à sa contribution orbitale. En comparant les expressions du Cadre 3 à la notation plus commune de l'approximation dipolaire :

$$f(s) = \mu_T (\langle j_0(s) \rangle + C_2 \langle j_2(s) \rangle)$$

on peut facilement calculer la contribution du moment orbital en utilisant l'expression :

$$f(s) = \frac{(LJ) \left\{ \langle g_0(s) \rangle - \frac{1}{2} \langle g_2(s) \rangle \right\} + 2(SJ) \langle j_0(s) \rangle}{(LJ) + 2(SJ)};$$

with

$$2(LJ) = J(J+1) + L(L+1) - S(S+1); \quad 2(SJ) = J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)$$

où les fonctions $\langle g_L \rangle$ peuvent être trouvées dans la littérature (voir par exemple : Magnetic neutron scattering, par Yu. A. Izyumov et R.P. Oserov, Plenum Press N.Y. 1970, pages 386–389).

La contribution du moment orbital est donnée par : $\mu_L = \mu_T C_2 = W_2$, et la contribution de spin ($\mu_S = \mu_T - \mu_L$) n'est autre que : $\mu_S = W_0 - W_2$. Ces valeurs s'obtiennent très facilement à partir des valeurs W_l affinées.

2 : ScattLab = **MULT**

C'est le cas le plus général correspondant à un développement multipolaire de la distribution d'aimantation autour d'un atome. Le facteur de forme est calculé comme une combinaison linéaire de fonctions radiales et d'harmoniques sphériques réelles (équation 5.2). Un tel exemple pour cette option est décrit dans le Cadre 4.

Il faut noter que les coefficients correspondent à l'expression (10'), et nous avons utilisé dans le fichier PCR la notation $A_l^{m,p}$ à la place de $A(lmp)$ et ζ_l à la place de $Zed(l)$. Deux termes sphériques (s_1 et s_2) sont utilisés pour simuler une orbitale hybride $s-p$ en utilisant l'approche densité.

Dans le Cadre 4 on voit qu'après avoir donné l'ensemble des 32 paramètres libres possibles décrivant le développement multipolaire (13'), il y a une ligne pour sélectionner l'exposant des fonctions de Slater décrivant la partie radiale.

Après l'exposant des fonctions de Slater, vient une ligne qui contient les quatre éléments suivants : Rot_angle, Rot_Direction_x, Rot_Direction_y, Rot_Direction_z

où Rot_angle est l'angle de rotation en degré qu'il faut appliquer au repère Cartésien standard de FULLPROF (voir l'introduction), autour de la direction **n** dont les composantes sont **n**= (Rot_Direction_x, Rot_Direction_y, Rot_Direction_z). De façon interne au programme, le vecteur **n** est normalisé pour devenir un vecteur unitaire.

Cadre 4. Dans cet exemple on considère un atome de carbone C1 avec un facteur de forme multipolaire. Dans ce cas particulier, un seul coefficient sphérique est affiné. Notons que $n_t=5$, et ainsi les paramètres d'agitation thermique anisotropes sont lus après tous les paramètres caractérisant le facteur de forme multipolaire.

```

C1  MULT    0  0    0.80030  0.03509  0.68730  0.93435  1.00000  5  0
      0.01403  6.50743  0.00000  0.00000  0.00000  0.00000  0.00000  0.00000  <-Multipole
      11.00   0.00   0.00   0.00   0.00   0.00   0.00
!   Zed(1)  A(22-)  A(21-)  A(20+)  A(21+)  A(22+)  Zed(2)
      0.00000  0.00000  0.00000  0.00000  0.00000  0.00000  0.00000
      0.00   0.00   0.00   0.00   0.00   0.00   0.00
!   A(33-)  A(32-)  A(31-)  A(30+)  A(31+)  A(32+)  A(33+)
      0.00000  0.00000  0.00000  0.00000  0.00000  0.00000  0.00000
      0.00   0.00   0.00   0.00   0.00   0.00   0.00
!   Zed(3)  A(44-)  A(43-)  A(42-)  A(41-)  A(40+)  A(41+)
      0.00000  0.00000  0.00000  0.00000  0.00000  0.00000  0.00000
      0.00   0.00   0.00   0.00   0.00   0.00   0.00
!   A(42+)  A(43+)  A(44+)  Zed(4)
      0.00000  0.00000  0.00000  0.00000
      0.00   0.00   0.00   0.00

!Exponents of Slater Functions (nsl,ns2,n1,n2,n3,n4):
2  0  0  0  0  0
!Angle and axis of rotation matrix to local orthogonal frame
0.0  0.0000  0.0000  1.0000
! Anisotropic displacement parameters (bet11, bet22, bet33, bet12, bet13, bet23)
0.01007  0.00423  0.00510  -0.00020  -0.00017  0.00181 <-Betas
0.00   0.00   0.00   0.00   0.00   0.00

```

3 : ScattLab = **DIPO, QUAD, HXAP, DISP**

Ce sont les cas correspondants à une approche orbitale pour respectivement $l = 1(p)$, $l = 2(d)$ et $l = 3(f)$. L'expression utilisée pour les orbitales en interne dans FULLPROF est légèrement différente

de l'expression (15). Nous utilisons un facteur d'occupation O_l qui empêche certains des coefficients complexes $A_l^{m,p}$ d'être librement ajustables.

$$\phi_l(\mathbf{r}) = O_l R_l(r) \sum_{m,p} |A_l^{m,p}| \exp\{i\phi_l^{m,p}\} y_l^{m,p}(\mathbf{r}_0)$$

où l'on doit avoir

$$\left(\sum_{m,p} A_l^{m,p} y_l^{m,p}(\mathbf{r}_0) \right) \left(\sum_{m,p} A_l^{m,p} y_l^{m,p}(\mathbf{r}_0) \right)^* = \sum_{m,p} |A_l^{m,p}|^2 = 1$$

Un tel exemple est décrit dans le Cadre 5, pour les cas particuliers p et d .

Les données les plus générales pour une telle approche orbitale peuvent se résumer comme suit : après les deux premières lignes décrivant la position, le facteur d'agitation thermique et le facteur d'occupation de l'atome, on trouve un jeu de paires de lignes (la deuxième ligne correspond toujours aux codes pour l'affinement) avec sept paramètres par ligne dans l'ordre suivant :

$$O_l, A_l^{l+}, A_l^{l-}, \phi_l^{l-}, A_l^{(l-1)+}, \phi_l^{(l-1)+}, A_l^{(l-1)-}, \phi_l^{(l-1)-}, \dots, A_l^{0+}, \phi_l^{0+}, Z_{eff}(\text{or } \eta)$$

et ainsi il y a un maximum de $4l+2$ paramètres ajustables. Dans le cas d'une orbitale p on a donc besoin de deux jeux de paires de lignes (même s'ils ne sont pas tous utilisés) parce que le nombre minimum de paramètres de facteur de forme lu lorsque $n_t = 4, 5$ est 14. Dans le cas d'une orbitale hybride sp, le jeu de paramètres est celui donné pour C1 dans le Cadre 5.

Après les lignes contenant les coefficients ajustables, une nouvelle ligne contenant les éléments Exponent (valeur de n dans les expressions (19) ou (19')) et Radial_Model est lue par le programme. Lorsque la valeur de Radial_Model est $0 \leq \text{Radial_Model} < l + 1$, la première approche de traitement des fonctions radiales (coefficients tabulés pour calculer $\langle j_l \rangle$) est utilisée. Lorsque $\text{Radial_Model} > l + 1$, c'est la deuxième approche qui est choisie, et alors on utilise des fonctions radiales de type hydrogène avec $n = \text{Radial_Model}$. Lorsque $\text{Radial_Model} < 0$, c'est la troisième approche qui est mise en œuvre (fonction de type Slater de l'expression (19')).

La description des atomes se termine par une ligne décrivant la transformation du repère local cartésien comme dans le cas multipolaire approche densité. Bien sûr, si $n_t=5$, on trouve ensuite une ligne supplémentaire (ainsi que la ligne de codes d'affinements mis à zéro correspondante) contenant les paramètres d'agitation thermique anisotropes.

7 LE FICHIER EXPÉRIMENTAL DE RAPPORTS DE FLIPPING

(codfil.int) L'extension de ce fichier doit être *.int comme dans le cas d'intensités intégrées sur monocristaux. La lecture de ce fichier est activée par la clé IRF = 4 pour la phase correspondante. Le contenu de ce fichier est le suivant :

1 : Titre

2 : Format des données, en utilisant la syntaxe Fortran, sans apostrophes.

Exemple : (3i4,2f10.6,i4,5f8.5)

Notons que cinq nombres réels ('5f'), au moins, sont lus, même s'ils ne sont pas utilisés. De la sorte, le format doit toujours se terminer par une instruction 5f8.5 ou 5f10.4. Dans certains cas cela peut aller jusqu'à six nombres, et l'instruction doit être de la forme 6f8.5 ou un équivalent adéquat pour six nombres réels (voir la suite).

3: Lambda,itypdata, ipow, polarp, polarm, readub, ext_calc, read_strf
La ligne 3 contient ces éléments explicités ci-dessous.

Cadre 5: Dans cet exemple, un ion vanadium V^{3+} est traité avec un facteur de forme correspondant à une orbitale d, un oxygène avec une orbitale p et un carbone avec une orbitale hybride sp. Il faut noter la présence d'une paire de lignes (avec des zéros) nécessaires dans le cas d'orbitales p pour la compatibilité avec d'autres utilisations de FULLPROF lorsque $n_t = 4, 5$. Les valeurs des paramètres sont artificielles et n'ont aucune signification ; elles ne sont données qu'à titre d'exemple.

```
V3  QUAD      0 0      0.50000  0.00000  0.00000  0.38910  0.50000  4 0
!   Occ      A(22+)  A(22-)  Phi(22-)  A(21+)  Phi(21+)  A(21-)
0.01959  0.17991  0.10000  0.00000  -0.00636  0.00000  0.00557  <-d-orbital
11.00    0.00    0.00    0.00    21.00    0.00    0.00
!   Phi(21-)  A(20+)  Phi(20+)  Zeff
0.00000  0.10000  0.00000  5.17957
0.00    0.00    0.00    0.00

! Exponent (n) & Radial Model :
3  0
! Angle and axis of rotation matrix to local orthogonal frame
45.0000  0.0000  0.0000  1.0000

O1  DIPO      0 0      0.94539  0.35284  0.68806  0.83457  1.00000  4 0
!   Occ      A(11+)  A(11-)  Phi(11-)  A(10+)  Phi(10+)  Zeff
0.03130  0.06429  0.42415  146.77235  0.31569  -8.48253  3.99334  <-p-orbital
141.00   211.00  0.00    221.00    0.00    0.00    0.00
0.00000  0.00000  0.00000  0.00000  0.00000  0.00000  0.00000
0.00    0.00    0.00    0.00    0.00    0.00    0.00

! Exponent (n) & Radial Model :
2  -1
! Angle and axis of rotation matrix to local orthogonal frame
24.3291  0.0000  0.0514  0.0249

C1  DISP      0 0      0.34539  0.15284  0.28806  0.73488  1.00000  4 0
!   Occ      A(11+)  A(11-)  Phi(11-)  A(10+)  Phi(10+)  A(00+)
0.02140  0.01429  0.22318  49.43221  0.31569  -1.28277  0.19131  <-sp-orbital
141.00   0.00   0.00    0.00    0.00    0.00    0.00
!   Phi(00+)  Zeff(p)  Zeff(s)
0.00000  3.34000  3.10000  0.00000  0.00000  0.00000  0.00000
0.00    0.00    0.00    0.00    0.00    0.00    0.00

! Exponents (np, ns) & Radial Model :
3  2  -1
! Angle and axis of rotation matrix to local orthogonal frame
0.0000  0.0000  0.0000  1.0000
```

Lambda : longueur d'onde en Angstroms (nombre réel)

Itypdata : doit être égal à 2 pour des rapports de flipping (nombre entier)

ipow : doit être égal à 0 pour des rapports de flipping (nombre entier)

polarp : polarisation des neutrons 'up' (max = 1.0, nombre réel)

polarm : polarisation des neutrons 'down' (max = 1.0, nombre réel)

readub : si ce paramètre est égal à 1, la matrice UB est lue dans les lignes suivantes

ext_calc : correction d'extinction de type Becker-Coppens

`ext_calc = 0`, les coefficients `c1`, `c2`, `c3` de la correction d'extinction sont lus pour chaque réflexion

`c1 = Tbar*1000*λ3/(V2 sin 2θ)`
`c2 = A(θ)` coefficients de Becker-Coppens
`c3 = B(θ)`

`ext_calc = 1` les coefficients `c2`, `c3` de la correction d'extinction sont calculés pour le modèle gaussien de la correction Becker-Coppens

`ext_calc = 2` les coefficients `c2`, `c3` de la correction d'extinction sont calculés pour le modèle lorentzien de la correction Becker-Coppens

Si `ext_calc = -1, -2` le coefficient `c1` est calculé à partir de la valeur de `Tbar` (calculé) pour chaque réflexion (ceci n'est pas encore implémenté, pour l'instant une valeur constante de `Tbar` est prise en compte). Dans ce cas il faut donner la matrice `UB` de la même manière que lorsque `readub=1`.

La véritable utilisation de la correction d'extinction dépend de façon ultime de la valeur de la clé `iextinc(iph)` dans le fichier PCR. Les coefficients `c1`, `c2`, `c3` ne sont utilisés pour corriger les facteurs de structure qu'uniquement lorsque `iextinc(iph)=2, 3`. Cette partie est encore en phase de tests. Des modèles phénoménologiques de correction d'extinction `iextinc(iph)=1` (modèle isotrope de type Shelx) et `iextinc(iph)=4` (anisotrope Shelx) sont pour le moment beaucoup plus stables dans les affinements.

`read_strf`: si ce paramètre est différent de zéro, les parties réelles et imaginaires des facteurs de structure nucléaires sont lues dans le fichier des rapports de flipping.

Si `readub=1` ou `ext_calc < 0`, vient alors la ligne suivante :

4: `ub11, ub12, ub13, ub21, ub22, ub23, ub31, ub32, ub33`

Exemple d'entête d'un fichier `*.int` :

```
Single crystal data of My_Crystal: Flipping ratios at 220K
(3i4,2f10.6,i4,4f8.5)
0.711 2 0 0.9998 0.9997 1 0
0.0051992 -0.1439303 -0.0781113 -0.0020301 -0.1044526 0.1072490 -0.1893921
-0.0027108 -0.0034442
```

Les lignes suivantes contiennent les indices des réflexions, les valeurs des rapports de flipping avec leurs barres d'erreur, un code, et des éléments supplémentaires dépendant de la valeur de la variable `readub` déjà définie. Le format de ces éléments est celui donné par l'utilisateur à la ligne 2.

Si `readub=0` les éléments sont :

Si `read_strf=0`

```
h k l flipr sigma code q2 c1 c2 c3
```

Si `read_strf ≠ 0`

```
h k l flipr sigma code q2 Nreal Nimag c1 c2 c3
```

Si `readub=1` les éléments sont :

Si `read_strf=0`

```
h k l flipr sigma code c1 c2 c3
```

Si `read_strf ≠ 0`

```
h k l flipr sigma code Nreal Nimag c1 c2 c3
```

`q2` est la valeur de $\sin^2 \alpha$, avec α l'angle entre le vecteur de diffusion et le champ magnétique appliqué qui définit la direction de la polarisation (axe vertical). Lorsque l'on donne la matrice `UB`, il n'est pas nécessaire de donner `q2`, qui est alors calculé à partir des indices des réflexions et de la matrice. Les coefficients `c1`, `c2`, `c3` ne sont utilisés que lorsqu'une correction d'extinction de type Becker-Coppens est appliquée.

8 UN EXEMPLE SIMPLE : LE CAS DE UNi_2Al_3

Nous allons présenter brièvement un cas simple qui a déjà été publié [6]. Le composé UNi_2Al_3 est un fermion lourd supraconducteur et la physique reliée à ces systèmes est présentée dans l'article [6] et les références que l'on peut y trouver. Ici, nous nous contenterons de présenter les résultats de l'analyse des données issues des expériences de diffraction neutronique. Dans un premier temps, nous décrirons la structure cristallographique ainsi que le fichier permettant de traiter les données de diffusion nucléaire, dans le but d'extraire les caractéristiques du cristal, en particulier les coefficients d'extinction que l'on devra utiliser pour traiter les rapports de flipping.

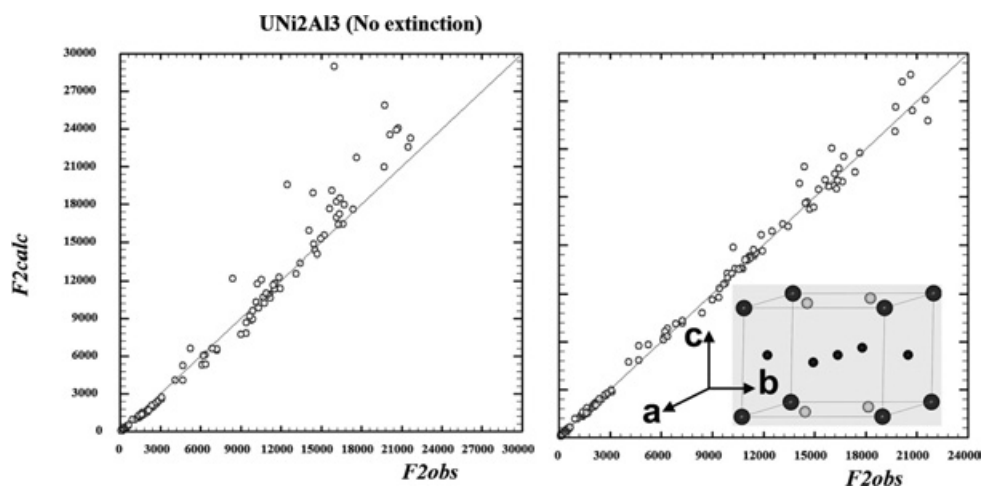


Figure 1. Comparaison de $F^2(\text{calc})$ et $F^2(\text{obs})$ si l'on ne tient pas compte de la correction d'extinction (à gauche) et avec des paramètres d'extinction anisotropes (à droite), ainsi que la vue schématique de la maille élémentaire. Les couleurs sont : U(rouge), Ni(jaune) et Al(bleu).

Le fichier contenant les carrés des facteurs de structure, qui s'appelle `unial_nuc.int` est donné dans l'appendice III et le fichier PCR correspondant pour affiner la structure dans l'appendice IV. En exécutant le programme à partir de WinPLOTR [7], on obtient un bon accord observé / calculé, comme on peut le voir sur la Figure 1, où une vue de la structure cristallographique est également présentée ainsi qu'une comparaison des résultats obtenus avec et sans correction d'extinction.

L'effet de ne pas corriger l'extinction se voit aisément sur la partie gauche de la Figure 1 : beaucoup de réflexions intenses ont une valeur calculée beaucoup plus forte que la valeur observée, ce qui se traduit sur le graphe par des points au dessus de la ligne droite $F^2(\text{calc}) = F^2(\text{obs})$. Les coefficients obtenus dans l'affinement des intensités intégrées doivent être recopiés et fixés dans le fichier qui va servir à traiter les rapports de flipping.

La liste complète des rapports de flipping mesurés à 100 K est donnée dans l'appendice V. Deux modèles d'affinements de ces rapports de flipping ont été mis en oeuvre (i) modèle simple sphérique, correspondant aux expressions (8) et (9), et (ii) modèle multipolaire, d'après l'expression (10). Les fichiers PCR correspondants sont dans l'appendice VI et VII, respectivement. Les résultats de l'affinement des rapports de flipping par le modèle (i) sont présentés sur la Figure 2. La définition des 'R-factors' concernant les rapports de flipping dans FULLPROF est la suivante :

$$R_{Flip} = 100 \times \frac{\sum_{\mathbf{h}} |R_{\mathbf{h}}(obs) - R_{\mathbf{h}}(calc)|}{\sum_{\mathbf{h}} |R_{\mathbf{h}}(obs) - 1|}; \quad wR_{Flip} = 100 \times \sqrt{\frac{\sum_{\mathbf{h}} w_{\mathbf{h}} |R_{\mathbf{h}}(obs) - R_{\mathbf{h}}(calc)|^2}{\sum_{\mathbf{h}} w_{\mathbf{h}} |R_{\mathbf{h}}(obs) - 1|^2}}$$

$$\chi_v^2 = \frac{\sum_{\mathbf{h}} w_{\mathbf{h}} |R_{\mathbf{h}}(obs) - R_{\mathbf{h}}(calc)|^2}{N_{\mathbf{h}} - n_{free}}$$

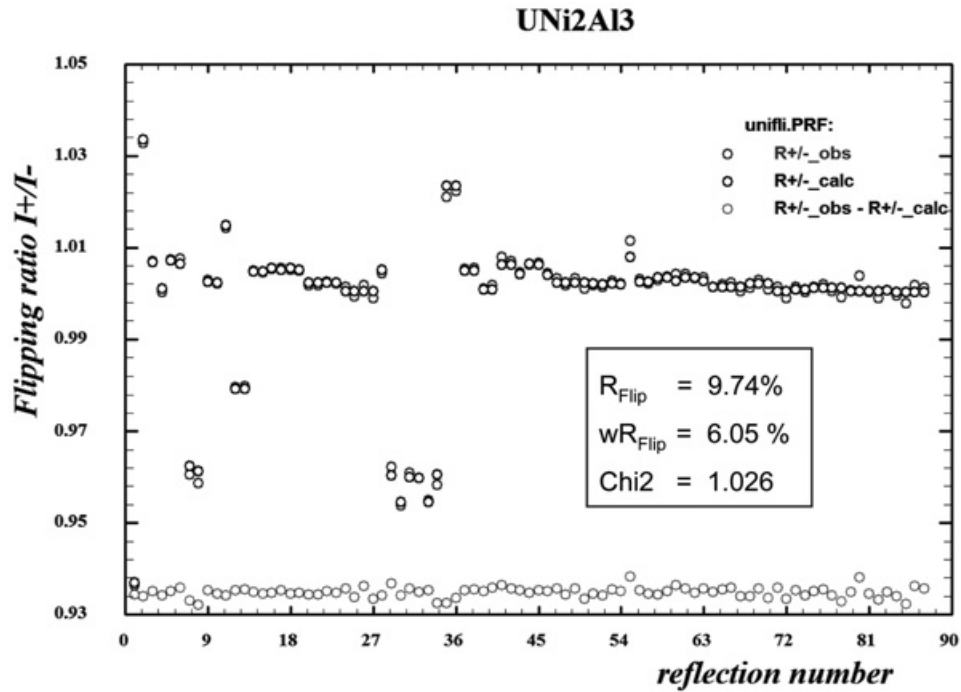


Figure 2. Représentation des rapports de flipping observés (rouge) et calculés (noir) pour le modèle simple sphérique dans UNi₂Al₃. La courbe des différences est en bleu au bas de l'image.

où la somme est étendue à toutes les réflexions observées \mathbf{h} et les facteurs de pondération $w_{\mathbf{h}}$ sont les inverses des variances ($\sigma_{\mathbf{h}}^2$) des observations. Le χ^2 réduit est la fonction à minimiser, expression (6), divisée par le nombre de degrés de liberté du problème (nombre d'observations moins le nombre de paramètres libres).

Les résultats obtenus par le modèle multipolaire (*ii*) ne sont que très légèrement meilleurs à ceux de l'affinement sphérique, comme on peut le voir sur la Figure 3.

9 REMARQUES FINALES

Ces notes ont été écrites de manière à pouvoir être utilisées en tant que manuel de FULLPROF pour l'affinement des rapports de flipping. C'est une partie du programme qui est en cours de tests approfondis, et ainsi il peut y avoir de légers changements dans le futur. Pour suivre les évolutions de cette

partie du programme, le lecteur est invité à consulter le fichier `fp2k.inf` inclus dans le dossier de documentation de la suite FULLPROF.

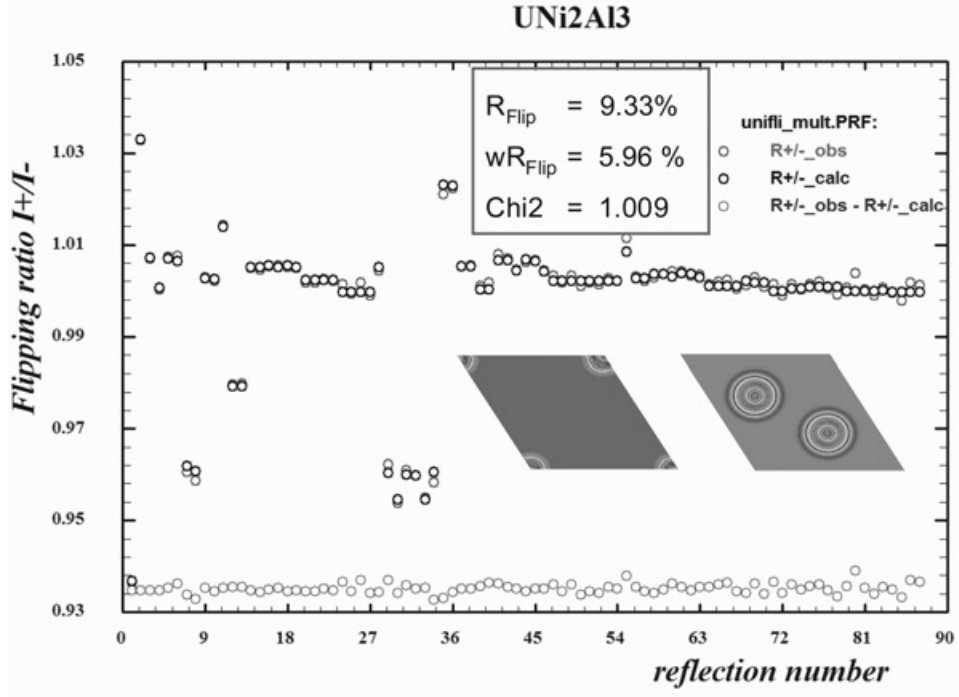


Figure 3. Représentation des rapports de flipping observés (rouge) et calculés (noir) pour le modèle multipolaire de la distribution d'aimantation dans UNi_2Al_3 . La section à droite correspond à des valeurs négatives (beaucoup plus petites que les valeurs positives) autour des atomes de Nickel. L'écart par rapport au modèle aphérique est négligeable.

10 APPENDICE I : EXPRESSION DES RAPPORTS DE FLIPPING EN TENANT COMPTE DE L'EXTINCTION

Dans cet appendice, nous allons développer les expressions du rapport de flipping en cas de correction d'extinction. Pour cela, nous allons décomposer les expressions (4) et (5) pour rendre explicite la dont se fait cette correction dans FULLPROF.

Appelons A_N et B_N les parties réelles et imaginaires manière du facteur de structure nucléaire ; en ce qui concerne le facteur de structure magnétique, les notations sont A_M et B_M . Si l'on note y_p , y_m et y_{pm} les facteurs de correction de l'extinction pour les différents processus de diffusion $\uparrow\uparrow$, $\downarrow\downarrow$, et $\uparrow\downarrow$, les expressions de I^+ et I^- lorsque l'on applique cette correction sont :

$$\begin{aligned} p_p^+ &= \frac{1}{2} ((1 + p^+)y_p + (1 - p^+)y_m); & p_m^+ &= \frac{1}{2} ((1 + p^+)y_p - (1 - p^+)y_m) \\ p_p^- &= \frac{1}{2} ((1 + p^-)y_p + (1 - p^-)y_m); & p_m^- &= \frac{1}{2} ((1 + p^-)y_p - (1 - p^-)y_m) \\ I^+ &= (NN^* + MM^* \sin^2 \alpha) p_p^+ + 2(A_N A_M + B_N B_M) p_m^+ \sin^2 \alpha + MM^* y_{pm} \sin^2 \alpha \cos^2 \alpha \\ I^- &= (NN^* + MM^* \sin^2 \alpha) p_p^- + 2(A_N A_M + B_N B_M) p_m^- \sin^2 \alpha + MM^* y_{pm} \sin^2 \alpha \cos^2 \alpha \end{aligned}$$

Les valeurs de polarisation du faisceau ‘up’ (p^+) et ‘down’ (p^-) doivent être fournies par l'utilisateur et sont normalement proches de 1. Le calcul des facteurs d'extinction y_p , y_m et y_{pm} dépend du modèle choisi par l'utilisateur. Nous allons décrire la correction anisotrope de type Shelx (`iextinc(ip)` = 4). Dans ce cas, les coefficients sont les 6 paramètres (e_i , $i = 1$ to 6) de l'expression $r = e_1h^2 + e_2k^2 + e_3l^2 + e_4hk + e_5hl + e_6kl$. La correction, y , a toujours la même forme dans tous les cas, qui est la suivante :

$$y = \left\{ 1 + \frac{cF^2\lambda^3}{4d^2 \sin 2\theta} (e_1h^2 + e_2k^2 + e_3l^2 + e_4hk + e_5hl + e_6kl) \right\}^{-1/2}$$

La constante c est égale à 10^{-3} dans FULLPROF. Pour les différents indices p , m et pm , la seule chose qui change est l'expression de F^2 et ainsi :

$$\begin{aligned} y_p &\rightarrow F^2 = NN^* + 2(A_N A_M + B_N B_M) \sin^2 \alpha + MM^* \sin^2 \alpha \\ y_m &\rightarrow F^2 = NN^* - 2(A_N A_M + B_N B_M) \sin^2 \alpha + MM^* \sin^2 \alpha \\ y_{pm} &\rightarrow F^2 = MM^* \sin^2 \alpha \cos^2 \alpha \end{aligned}$$

11 APPENDICE II : DÉVELOPPEMENT MULTIPOLAIRE DE L'APPROCHE ORBITALE

Dans cet appendice se trouvent les expressions du développement général de la distribution d'aimantation lorsque l'on utilise une approche orbitale, et ce dans les différents cas.

A. Orbitale p (DIPO)

Une orbitale p générale s'exprime sous la forme :

$$\phi_p(\mathbf{r}) = R_p(r) [a y_1^{1+}(\mathbf{r}_0) + b e^{iph_1} y_1^{1-}(\mathbf{r}_0) + c e^{iph_2} y_1^{0+}(\mathbf{r}_0)] \quad (\text{A-1})$$

et la distribution d'aimantation est donnée par :

$$|\phi_p(\mathbf{r})|^2 = R_p^2(r) \left[\sum_{m,p} Dpl2(p,m) y_2^{m,p}(\mathbf{r}_0) + Dpl0(0) y_0^{0+}(\mathbf{r}_0) \right] \quad (\text{A-2})$$

Le code Fortran suivant résume les valeurs des coefficients $Dp12$ et $Dp10$ en fonction des paramètres a , b , c , ph_1 et ph_2 de l'expression A-1.

```
real, PARAMETER :: &
    a01= 0.2185097040, a02= -0.2185097040, a03= -0.1261566430, &
    a04= 0.2523132860, a05= 0.2820947770
Dp12( 2) = a01 *a*a +a02 *b*b
Dp12( 1) = a01 *2.0*a*c*cos(ph2)
Dp12( 0) = a03 *a*a +a03 *b*b +a04 *c*c
Dp12(-1) = a01 *2.0*b*c*cos(ph1-ph2)
Dp12(-2) = a01 *2.0*a*b*cos(ph1)
Dp10( 0) = a05 *(a*a + b*b + c*c)
```

B. Orbitale hybride $s - p$ (DISP)

Une orbitale $s-p$ générale s'exprime sous la forme :

$$\phi_{sp}(\mathbf{r}) = R_p(\mathbf{r}) [a y_1^{1+}(\mathbf{r}_0) + b e^{iph_1} y_1^{1-}(\mathbf{r}_0) + c e^{iph_2} y_1^{0+}(\mathbf{r}_0)] + R_s(r) d e^{iph_3} y_0^{0+}(\mathbf{r}_0) \quad (\text{B-1})$$

et la distribution d'aimantation est donnée par :

$$\begin{aligned} |\phi_{sp}(\mathbf{r})|^2 &= R_p^2(r) \left[\sum_{m,p} Dpl2(p,m) y_2^{m,p}(\mathbf{r}_0) + Dpl0(0) y_0^{0+}(\mathbf{r}_0) \right] + \\ &+ R_s(r) R_p(r) \left[\sum_{m,p} Dspl1(p,m) y_1^{m,p}(\mathbf{r}_0) \right] + R_s^2(r) Dsl0(0) y_0^{0+}(\mathbf{r}_0) \end{aligned} \quad (\text{B-2})$$

Le code Fortran suivant résume les valeurs des coefficients D_{sp11} , D_{p12} , D_{p10} et D_{s10} en fonction des paramètres a , b , c , d , ph_1 , ph_2 et ph_3 de l'expression B-1.

```
real, PARAMETER ::
    a01= 0.2185097040, a02= -0.2185097040, a03= -0.1261566430, &
    a04= 0.2523132860, a05= 0.2820947770

    Dp12( 2)= a01 *a*a +a02 *b*b
    Dp12( 1)= a01 *2.0*a*c*cos(ph2)
    Dp12( 0)= a03 (a*a + b*b) +a04 *c*c
    Dp12(-1)= a01 *2.0*b*c*cos(ph1-ph2)
    Dp12(-2)= a01 *2.0*a*b*cos(ph1)
    Dp10( 0)= a05 * (a*a + b*b + c*c)
    Dsp11( 1)= a05 *2.0*a*d*cos(ph3)
    Dsp11( 0)= a05 *2.0*c*d*cos(ph2-ph3)
    Dsp11(-1)= a05 *2.0*b*d*cos(ph1-ph3)
    Ds10( 0)= a05 *d*d
```

C. Orbitale d (QUAD)

Une orbitale d générale s'exprime sous la forme :

$$\phi_d(\mathbf{r}) = R_d(r) [a y_2^{2+}(\mathbf{r}_0) + b e^{iph_1} y_2^{2-}(\mathbf{r}_0) + c e^{iph_2} y_2^{1+}(\mathbf{r}_0) + d e^{iph_3} y_2^{1-}(\mathbf{r}_0) + e e^{iph_4} y_2^{0+}(\mathbf{r}_0)] \quad (C-1)$$

et la distribution d'aimantation est donnée par :

$$|\phi_d(\mathbf{r})|^2 = R_d^2(r) \left[\sum_{m,p} Ddl4(p,m) y_4^{m,p}(\mathbf{r}_0) + \sum_{m,p} Ddl2(p,m) y_2^{m,p}(\mathbf{r}_0) + Ddl0(0) y_0^{0+}(\mathbf{r}_0) \right] \quad (C-2)$$

Le code Fortran suivant résume les valeurs des coefficients $Dd14$, $Dd12$, et $Dd10$ en fonction des paramètres a , b , c , d , e , ph_1 , ph_2 , ph_3 et ph_4 de l'expression C-1.

```
real, PARAMETER ::
    a01= 0.2384136320, a02= -0.2384136320, a03= 0.1685838850, &
    a04= -0.1685838850, a05= 0.1802237630, a06= -0.1802237630, &
    a07= 0.1560783540, a08= -0.0637187213, a09= 0.2207281290, &
    a10= 0.0402992591, a11= -0.1611970370, a12= 0.2417955550, &
    a13= 0.0637187213, a14= -0.1560783540, a15= 0.0901118815, &
    a16= 0.2820947770

    Dd14( 4)= a01 *a*a +a02 *b*b
    Dd14( 3)= a03 *2.0*a*c*cos(ph2) +a04 *2.0*b*d*cos(ph1-ph3)
    Dd14( 2)= a05 *c*c +a06 *d*d +a07 *2.0*a*e*cos(ph4)
    Dd14( 1)= a08 *2.0*a*c*cos(ph2) +a08 *2.0*b*d*cos(ph1-ph3) +a09 *2.0*c*e*cos(ph2-ph4)
    Dd14( 0)= a10 *a*a +a10 *b*b +a11 *c*c +a11 *d*d +a12 *e*e
    Dd14(-1)= a13 *2.0*a*d*cos(ph3) +a08 *2.0*b*c*cos(ph1-ph2) +a09 *2.0*d*e*cos(ph3-ph4)
    Dd14(-2)= a07 *2.0*b*e*cos(ph1-ph4) +a05 *2.0*c*d*cos(ph2-ph3)
    Dd14(-3)= a03 *2.0*a*d*cos(ph3) +a03 *2.0*b*c*cos(ph1-ph2)
    Dd14(-4)= a01 *2.0*a*b*cos(ph1)
    Dd12( 2)= a07 *c*c +a14 *d*d +a06 *2.0*a*e*cos(ph4)
    Dd12( 1)= a07 *2.0*a*c*cos(ph2) +a07 *2.0*b*d*cos(ph1-ph3) +a15 *2.0*c*e*cos(ph2-ph4)
    Dd12( 0)= a06 *a*a +a06 *b*b +a15 *c*c +a15 *d*d +a05 *e*e
    Dd12(-1)= a14 *2.0*a*d*cos(ph3) +a07 *2.0*b*c*cos(ph1-ph2) +a15 *2.0*d*e*cos(ph3-ph4)
    Dd12(-2)= a06 *2.0*b*e*cos(ph1-ph4) +a07 *2.0*c*d*cos(ph2-ph3)
    Dd10( 0)= a16 *( a*a + b*b + c*c + d*d + e*e )
```

D. Orbitale f (HXAP)

Une orbitale f générale s'exprime sous la forme :

$$\phi_f(\mathbf{r}) = R_f(r) \left[a y_3^{3+}(\mathbf{r}_0) + b e^{iph_1} y_3^{3-}(\mathbf{r}_0) + c e^{iph_2} y_3^{2+}(\mathbf{r}_0) + d e^{iph_3} y_3^{2-}(\mathbf{r}_0) \right. \\ \left. + e e^{iph_4} y_3^{1+}(\mathbf{r}_0) + f e^{iph_5} y_3^{1-}(\mathbf{r}_0) + g e^{iph_6} y_3^{0+}(\mathbf{r}_0) \right] \quad (D-1)$$

et la distribution d'aimantation est donnée par :

$$|\phi_f(\mathbf{r})|^2 = R_f^2(r) \left[\begin{array}{l} \sum_{m,p} Dfl6(p,m)y_6^{m,p}(\mathbf{r}_0) + \sum_{m,p} Dfl4(p,m)y_4^{m,p}(\mathbf{r}_0) \\ + \sum_{m,p} Dfl2(p,m)y_2^{m,p}(\mathbf{r}_0) + Dfl0(0)y_0^{0+}(\mathbf{r}_0) \end{array} \right] \quad (D-2)$$

Le code Fortran suivant résume les valeurs des coefficients Dd14, Dd12, et Dd10 en fonction des paramètres $a, b, c, d, e, ph_1, ph_2, ph_3$ et ph_4 de l'expression C-1.

```

real, PARAMETER ::
a01= 0.2548005880, a02= -0.2548005880, a03= 0.1801712210, &
a04= -0.1801712210, a05= 0.1881827120, a06= -0.1881827120, &
a07= 0.1214714200, a08= -0.1214714200, a09= 0.1086473390, &
a10= 0.1629710050, a11= -0.1629710050, a12= 0.1717865170, &
a13= -0.1717865170, a14= -0.0443550907, a15= 0.1774203480, &
a16= 0.0221775454, a17= -0.0858932585, a18= 0.2217754420, &
a19= -0.0118543962, a20= 0.0711263791, a21= -0.1778159290, &
a22= 0.2370879200, a23= -0.0221775454, a24= 0.0858932585, &
a25= 0.0443550907, a26= 0.1517177520, a27= -0.1517177520, &
a28= -0.1175200640, a29= 0.1175200640, a30= -0.2035507110, &
a31= 0.0678502396, a32= -0.0678502396, a33= 0.1146878450, &
a34= -0.1146878450, a35= 0.1332552280, a36= -0.0444184095, &
a37= -0.0993225873, a38= 0.1025799290, a39= 0.0993225798, &
a40= 0.0769349411, a41= -0.1795148700, a42= 0.0256449804, &
a43= 0.1538698820, a44= -0.1025799290, a45= -0.1332552280, &
a46= 0.1456731260, a47= -0.1456731260, a48= -0.0940315947, &
a49= -0.1880631890, a50= 0.1486770060, a51= 0.1151647120, &
a52= 0.0594708063, a53= -0.2102610470, a54= 0.1261566130, &
a55= 0.1682088380, a56= -0.1486770060, a57= -0.1151647120, &
a58= 0.0940315947, a59= 0.2820948060

Dfl6( 6)=a01 *a*a +a02 *b*b
Dfl6( 5)=a03 *2.0*a*c*cos(ph2) +a04 *2.0*b*d*cos(ph1-ph3)
Dfl6( 4)=a05 *c*c +a06 *d*d +a07 *2.0*a*e*cos(ph4) +a08 *2.0*b*f*cos(ph1-ph5)
Dfl6( 3)=a09 *2.0*a*g*cos(ph6) +a10 *2.0*c*e*cos(ph2-ph4) +a11 *2.0*d*f*cos(ph3-ph5)
Dfl6( 2)=a12 *e*e +a13 *f*f +a14 *2.0*a*e*cos(ph4) +a14 *2.0*b*f*cos(ph1-ph5) + &
a15 *2.0*c*g*cos(ph2-ph6)
Dfl6( 1)=a16 *2.0*a*c*cos(ph2) +a16 *2.0*b*d*cos(ph1-ph3) +a17*2.0*c*e*cos(ph2-ph4) +&
a17 *2.0*d*f*cos(ph3-ph5) +a18 *2.0*e*g*cos(ph4-ph6)
Dfl6( 0)=a19 *a*a +a19 *b*b +a20 *c*c +a20 *d*d +a21 *e*e +a21 *f*f +a22 *g*g
Dfl6(-1)=a23 *2.0*a*d*cos(ph3) +a16 *2.0*b*c*cos(ph1-ph2) +a24 *2.0*c*f*cos(ph2-ph5) +&
a17 *2.0*d*e*cos(ph3-ph4) +a18 *2.0*f*g*cos(ph5-ph6)
Dfl6(-2)=a25 *2.0*a*f*cos(ph5) +a14 *2.0*b*e*cos(ph1-ph4) +a15 *2.0*d*g*cos(ph3-ph6) +&
a12 *2.0*e*f*cos(ph4-ph5)
Dfl6(-3)=a09 *2.0*b*g*cos(ph1-ph6) +a10 *2.0*c*f*cos(ph2-ph5) +a10 *2.0*d*e*cos(ph3-ph4)
Dfl6(-4)=a07 *2.0*a*f*cos(ph5) +a07 *2.0*b*e*cos(ph1-ph4) +a05 *2.0*c*d*cos(ph2-ph3)
Dfl6(-5)=a03 *2.0*a*d*cos(ph3) +a03 *2.0*b*c*cos(ph1-ph2)
Dfl6(-6)=a01 *2.0*a*b*cos(ph1)
Dfl4( 4)=a26 *c*c +a27 *d*d +a28 *2.0*a*e*cos(ph4) +a29 *2.0*b*f*cos(ph1-ph5)
Dfl4( 3)=a30 *2.0*a*g*cos(ph6) +a31 *2.0*c*e*cos(ph2-ph4) +a32 *2.0*d*f*cos(ph3-ph5)
Dfl4( 2)=a33 *e*e +a34 *f*f +a35 *2.0*a*e*cos(ph4) +a35 *2.0*b*f*cos(ph1-ph5) + &
a36 *2.0*c*g*cos(ph2-ph6)
Dfl4( 1)=a37 *2.0*a*c*cos(ph2) +a37 *2.0*b*d*cos(ph1-ph3) +a38 *2.0*c*e*cos(ph2-ph4) +&
a38 *2.0*d*f*cos(ph3-ph5) +a39 *2.0*e*g*cos(ph4-ph6)
Dfl4( 0)=a40 *a*a +a40 *b*b +a41 *c*c +a41 *d*d +a42 *e*e +a42 *f*f +a43 *g*g
Dfl4(-1)=a39 *2.0*a*d*cos(ph3) +a37 *2.0*b*c*cos(ph1-ph2) +a44 *2.0*c*f*cos(ph2-ph5) +&
a38 *2.0*d*e*cos(ph3-ph4) +a39 *2.0*f*g*cos(ph5-ph6)
Dfl4(-2)=a45 *2.0*a*f*cos(ph5) +a35 *2.0*b*e*cos(ph1-ph4) +a36 *2.0*d*g*cos(ph3-ph6) +&
a33 *2.0*e*f*cos(ph4-ph5)

```

```

Df14(-3)=a30 *2.0*b*g*cos(ph1-ph6)+a31*2.0*c*f*cos(ph2-ph5)+ a31 *2.0*d*e*cos(ph3-ph4)
Df14(-4)=a28 *2.0*a*f*cos(ph5) +a28 *2.0*b*e*cos(ph1-ph4) +a26 *2.0*c*d*cos(ph2-ph3)
Df12( 2)=a46 *e*e +a47 *f*f +a48 *2.0*a*e*cos(ph4) +a48 *2.0*b*f*cos(ph1-ph5) + &
a49 *2.0*c*g*cos(ph2-ph6)
Df12( 1)=a50 *2.0*a*c*cos(ph2) +a50 *2.0*b*d*cos(ph1-ph3) +a51 *2.0*c*e*cos(ph2-ph4)+&
a51 *2.0*d*f*cos(ph3-ph5) +a52 *2.0*e*g*cos(ph4-ph6)
Df12( 0)=a53 *a*a +a53 *b*b +a54 *e*e +a54 *f*f +a55 *g*g
Df12(-1)=a56 *2.0*a*d*cos(ph3) +a50 *2.0*b*c*cos(ph1-ph2) +a57 *2.0*c*f*cos(ph2-ph5)+&
a51 *2.0*d*e*cos(ph3-ph4) +a52 *2.0*f*g*cos(ph5-ph6)
Df12(-2)=a58 *2.0*a*f*cos(ph5) +a48 *2.0*b*e*cos(ph1-ph4) +a49 *2.0*d*g*cos(ph3-ph6)+&
a46 *2.0*e*f*cos(ph4-ph5)
Df10( 0)=a59 *( a*a + b*b + c*c + d*d + e*e + f*f + g*g )

```

12 APPENDICE III : FICHER CONTENANT LE CARRÉ DES FACTEURS DE STRUCTURE NUCLÉAIRE POUR UN₂ AL₃

TITLE Data of UNi2Al3 from D15 at 100K

(3i4,2F12.3,i5,4f8.2)

```

0.85340 0 0
-2 -2 -6 20744.641 472.420 1 0.21 0.59 0.02 0.00
-2 -1 -6 480.872 67.747 1 0.21 0.61 0.02 0.00
-2 -5 -4 9880.360 230.610 1 0.21 0.61 0.02 0.00
-2 -6 -2 1516.320 31.150 1 0.21 0.59 0.02 0.00
-2 -3 -5 162.310 10.700 1 0.21 0.63 0.02 0.00
-2 -4 -5 2179.960 42.020 1 0.21 0.61 0.02 0.00
-2 -6 -1 2093.060 39.350 1 0.21 0.60 0.02 0.00
-2 -5 -3 15257.189 348.330 1 0.21 0.63 0.02 0.00
-1 4 6 497.293 23.236 1 0.21 0.60 0.02 0.00
-1 7 3 159.702 61.181 1 0.21 0.59 0.02 0.00
-2 -6 -3 2007.940 38.540 1 0.21 0.65 0.02 0.00
-2 -6 0 1513.990 30.350 1 0.21 0.61 0.02 0.00
-1 8 1 14557.835 186.356 1 0.21 0.60 0.02 0.00
-2 -3 -6 370.560 14.630 1 0.21 0.66 0.02 0.00
-1 -4 -5 16635.020 130.764 1 0.21 0.61 0.02 0.00
-1 6 4 438.017 118.195 1 0.21 0.62 0.02 0.00
-2 -4 -4 1427.330 30.220 1 0.21 0.65 0.02 0.00
-1 7 4 371.665 115.026 1 0.22 0.65 0.02 0.00
-1 8 2 9765.035 122.216 1 0.22 0.64 0.02 0.00
-1 6 5 127.098 94.647 1 0.22 0.64 0.02 0.00
-2 0 -7 2351.942 96.946 1 0.22 0.67 0.02 0.00
-1 2 6 11497.498 132.219 1 0.22 0.65 0.02 0.00
-1 1 7 91.605 102.350 1 0.22 0.64 0.02 0.00
-1 -7 0 9904.230 169.180 1 0.22 0.59 0.02 0.00
-1 2 7 16142.495 387.039 1 0.22 0.66 0.02 0.00
-1 7 2 416.787 148.031 1 0.22 0.65 0.02 0.00
-1 5 6 10775.963 294.159 1 0.22 0.68 0.02 0.00
-2 -7 0 256.000 13.120 1 0.22 0.69 0.01 0.00
-2 -2 -5 6371.230 105.360 1 0.22 0.70 0.01 0.00
0 -3 -6 11160.247 284.080 1 0.22 0.59 0.02 0.00
0 -6 -4 21512.787 204.772 1 0.22 0.58 0.02 0.00
-2 -1 -7 102.347 76.142 1 0.22 0.71 0.01 0.00
-1 1 6 540.677 69.747 1 0.22 0.67 0.02 0.00
-2 -5 -2 10353.060 168.910 1 0.22 0.69 0.01 0.00
0 5 5 148.026 25.047 1 0.22 0.59 0.02 0.00
0 4 6 1279.396 32.191 1 0.22 0.63 0.02 0.00
-2 -7 -1 169.277 21.264 1 0.22 0.70 0.01 0.00
-1 4 5 121.711 42.018 1 0.22 0.69 0.01 0.00
0 7 2 332.340 22.461 1 0.22 0.59 0.02 0.00

```

0	-7	-3	123.637	43.214	1	0.22	0.62	0.02	0.00
-1	8	3	14727.566	152.855	1	0.22	0.70	0.01	0.00
0	0	7	7247.120	170.260	1	0.22	0.63	0.02	0.00
0	2	6	1395.228	39.377	1	0.22	0.64	0.02	0.00
-2	-5	-5	14460.060	300.630	1	0.22	0.72	0.01	0.00
-1	7	-1	146.117	75.190	1	0.22	0.69	0.01	0.00
0	-7	-1	108.733	33.878	1	0.22	0.63	0.02	0.00
0	-4	-5	2525.958	51.480	1	0.22	0.66	0.02	0.00
-1	6	3	146.083	73.978	1	0.22	0.71	0.01	0.00
0	-6	-3	6159.140	143.128	1	0.22	0.66	0.02	0.00
0	-8	0	1630.540	33.110	1	0.22	0.66	0.02	0.00
0	-7	0	332.700	14.230	1	0.22	0.64	0.02	0.00
-1	-6	0	441.840	22.280	1	0.22	0.70	0.01	0.00
0	-8	-1	2053.419	42.278	1	0.22	0.67	0.02	0.00
-2	-7	-2	239.019	127.948	1	0.22	0.74	0.01	0.00
-1	-4	-4	11194.676	202.892	1	0.22	0.72	0.01	0.00
-2	-6	-4	1392.040	29.850	1	0.22	0.74	0.01	0.00
0	6	5	6125.799	119.106	1	0.22	0.69	0.01	0.00
-2	-5	-1	14115.819	318.410	1	0.22	0.73	0.01	0.00
0	5	4	451.215	21.555	1	0.22	0.68	0.02	0.00
-2	-3	-4	476.110	15.270	1	0.22	0.74	0.01	0.00
-2	-2	-7	6231.520	127.880	1	0.22	0.76	0.01	0.00
-2	-4	-3	2376.560	43.880	1	0.22	0.74	0.01	0.00
0	7	4	307.197	31.152	1	0.22	0.71	0.01	0.00
-2	-4	-6	1297.440	28.100	1	0.22	0.76	0.01	0.00
0	8	2	1565.851	34.260	1	0.22	0.71	0.01	0.00
-1	9	0	265.158	174.209	1	0.22	0.75	0.01	0.00
0	-3	-7	16309.316	367.280	1	0.22	0.73	0.01	0.00
-1	3	5	88.793	104.713	1	0.23	0.75	0.01	0.00
0	5	6	385.944	24.468	1	0.23	0.72	0.01	0.00
-1	7	5	153.369	194.889	1	0.23	0.77	0.01	0.00
-1	4	7	114.433	219.330	1	0.23	0.77	0.01	0.00
0	-3	-5	17390.678	525.793	1	0.23	0.73	0.01	0.00
-1	9	1	166.949	150.178	1	0.23	0.77	0.01	0.00
0	-6	-2	20145.637	1665.268	1	0.23	0.72	0.01	0.00
-1	6	6	387.018	19.058	1	0.23	0.79	0.01	0.00
-1	6	2	483.592	24.430	1	0.23	0.78	0.01	0.00
-1	8	4	9427.649	207.431	1	0.23	0.80	0.01	0.00
-2	-7	-3	108.580	13.130	1	0.23	0.82	0.01	0.00
0	8	3	1867.009	149.829	1	0.23	0.78	0.01	0.00
-1	-1	5	16181.688	382.563	1	0.23	0.80	0.01	0.00
0	-4	4	1563.985	51.583	1	0.23	0.78	0.01	0.00
-1	9	2	278.417	87.814	1	0.23	0.81	0.01	0.00
0	-6	1	6387.797	257.720	1	0.23	0.76	0.01	0.00
0	-2	5	2764.679	95.415	1	0.23	0.79	0.01	0.00
-2	-4	-2	1456.190	33.580	1	0.23	0.81	0.01	0.00
0	5	-3	118.309	15.803	1	0.23	0.78	0.01	0.00
0	-6	0	20641.070	465.490	1	0.23	0.78	0.01	0.00
-1	4	4	546.935	21.680	1	0.23	0.81	0.01	0.00
-2	-2	-4	19745.869	309.140	1	0.24	0.83	0.01	0.00
0	-4	-7	2157.997	79.866	1	0.24	0.81	0.01	0.00
-1	1	5	97.472	104.012	1	0.24	0.82	0.01	0.00
-1	5	3	16373.813	314.628	1	0.24	0.82	0.01	0.00
-2	-3	-7	124.320	12.270	1	0.24	0.84	0.01	0.00
-1	6	-1	157.834	21.725	1	0.24	0.82	0.01	0.00
-2	-3	-3	99.000	10.550	1	0.24	0.85	0.01	0.00
-1	6	0	489.552	31.780	1	0.24	0.84	0.01	0.00
-1	1	8	427.545	158.910	1	0.24	0.86	0.01	0.00
0	-7	-5	129.472	198.106	1	0.24	0.84	0.01	0.00
0	0	-5	7243.368	335.360	1	0.24	0.83	0.01	0.00
0	0	-8	21668.650	950.950	1	0.24	0.84	0.01	0.00
-1	5	7	14975.543	246.862	1	0.24	0.87	0.01	0.00
0	-9	0	9406.687	415.060	1	0.24	0.85	0.01	0.00

0	-6	-6	19720.246	378.060	1	0.24	0.85	0.01	0.00
-2	-6	-5	1708.170	32.240	1	0.24	0.88	0.01	0.00
-1	2	8	10673.814	345.560	1	0.25	0.88	0.01	0.00
-2	-5	-6	9656.989	214.230	1	0.25	0.89	0.01	0.00
0	5	-2	467.725	140.035	1	0.25	0.85	0.01	0.00
-2	0	-8	1102.137	115.311	1	0.25	0.89	0.01	0.00
0	-9	-1	13133.950	289.608	1	0.25	0.86	0.01	0.00
-1	9	3	181.429	173.337	1	0.25	0.89	0.01	0.00
0	-3	4	11960.524	254.057	1	0.25	0.86	0.01	0.00
-2	-8	-1	4700.906	183.920	1	0.25	0.90	0.01	0.00
-1	3	4	550.877	26.976	1	0.25	0.89	0.01	0.00
0	-8	-4	1424.752	40.010	1	0.25	0.89	0.01	0.00
0	4	-3	2699.297	89.850	1	0.25	0.89	0.01	0.00
-1	5	2	11028.522	256.497	1	0.26	0.90	0.01	0.00
-2	-7	-4	201.640	25.840	1	0.26	0.93	0.01	0.00
-2	-1	-8	389.630	49.823	1	0.26	0.93	0.01	0.00
0	9	2	9018.370	106.954	1	0.26	0.91	0.01	0.00
0	5	-1	122.686	27.240	1	0.26	0.90	0.01	0.00
-1	4	3	141.214	18.078	1	0.26	0.93	0.01	0.00
0	-5	-7	91.934	30.790	1	0.26	0.92	0.01	0.00
-1	7	6	316.634	50.732	1	0.26	0.94	0.01	0.00
-1	8	5	13464.896	161.648	1	0.26	0.95	0.01	0.00
0	-5	0	505.412	34.690	1	0.26	0.92	0.01	0.00
-2	-8	-2	16721.592	444.013	1	0.26	0.95	0.00	0.00
-1	-1	4	11554.578	177.946	1	0.26	0.94	0.01	0.00
0	2	-4	1558.504	57.750	1	0.26	0.93	0.01	0.00
-2	-4	-7	1658.930	30.950	1	0.27	0.96	0.00	0.00
-1	5	-1	15631.660	550.405	1	0.27	0.95	0.00	0.00
0	-3	-8	10161.170	164.270	1	0.27	0.96	0.00	0.00
-1	0	4	611.211	62.409	1	0.27	0.97	0.00	0.00
-1	10	0	254.013	125.723	1	0.28	0.98	0.00	0.00
-1	5	0	10918.129	342.730	1	0.28	0.97	0.00	0.00
0	4	-2	1624.193	63.757	1	0.28	0.97	0.00	0.00
-1	10	1	192.630	204.173	1	0.28	1.00	0.00	0.00

13 APPENDICE IV : FICHIER PCR POUR AFFINER LA STRUCTURE NUCLÉAIRE DE UNi2Al3

```

COMM UNi2Al3
! Current global Chi2 (Bragg contrib.) =      3.834
! Files => DAT-file: unial_nuc, PCR-file: unial_nuc
!Job Npr Nph Nba Nex Nsc Nor Dum Iwg Ilo Ias Res Ste Nre Cry Uni Cor Opt Aut
  1  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1  0  0  0  1
!
!Ipr Ppl Ioc Mat Pcr Ls1 Ls2 Ls3 NLI Prf Ins Rpa Sym Hkl Fou Sho Ana
  0  0  1  1  1  0  0  0  0  1  0  -1  0  0  4  0  0
!
!NCY Eps R_at R_an R_pr R_gl Thmin Step Thmax PSD Sent0
 10 0.10 1.00 1.00 1.00 1.00 10.0000 0.100000 89.9000 0.000 0.000
!
!
      11      !Number of refined parameters
!-----
! Data for PHASE number:  1  ==> Current R_Bragg for Pattern#  1:      4.24
!-----
UNi2Al3
!
Nat Dis Ang Pr1 Pr2 Pr3 Jbt Irf Isy Str Furth      ATZ Nvk Npr More
  3  0  0 0.0 0.0 1.0  0  4  0  0  0      436.423  0  0  0
!
P 6/m m m      <--Space group symbol

```

```

!Atom Typ      X      Y      Z      Biso      Occ  In Fin N_t Spc /Codes
!  beta11  beta22  beta33  beta12  beta13  beta23  /Codes
U  U          0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.04167 0 0 2 0 # color red
      0.00    0.00    0.00    0.00    0.00    0.00
      0.00103 0.00103 0.00053 0.00051 0.00000 0.00000
      51.00   51.00   61.00   50.50   0.00    0.00
Ni  NI        0.33333 0.66667 0.00000 0.00000 0.08333 0 0 2 0 # color yellow
      0.00    0.00    0.00    0.00    0.00    0.00
      0.00323 0.00323 0.00139 0.00162 0.00000 0.00000
      71.00   71.00   81.00   70.50   0.00    0.00
Al  AL        0.50000 0.00000 0.50000 0.00000 0.12500 0 0 2 0 # color blue
      0.00    0.00    0.00    0.00    0.00    0.00
      0.00241 0.00241 0.00285 0.00120 0.00000 0.00000
      91.00   91.00  101.00  90.50   0.00    0.00
!-----> Scale, Extinction and Cell Parameters for Pattern # 1
! Scale Factors
! Sc1      Sc2      Sc3      Sc4      Sc5      Sc6
! 2195.    0.000    0.000    0.000    0.000    0.000
      11.00    0.00    0.00    0.00    0.00    0.00
! Extinction Parameters
! Ext1      Ext2      Ext3      Ext4      Ext5      Ext6      Ext7      Ext-Model
! 20.41     3.624     7.544     0.000     0.000     0.000     0.000     4
      21.00     31.00     41.00     0.00     0.00     0.00     0.00
! a          b          c          alpha      beta      gamma      #Cell Info
! 5.197000  5.197000  4.013000  90.000000  90.000000  120.000000
      0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
! x-Lambda/2 + Not yet used parameters
      0.02742   0.00000   0.00000   0.00000   0.00000
      111.00   0.00     0.00     0.00     0.00

```

14 APPENDICE V : FICHER DES RAPPORTS DE FLIPPING EXPÉRIMENTAUX POUR UNi₂Al

Single crystal data of UNi₂Al₃ Flipping ratios
(3i4,2f11.6,i5,4f11.5)

```

0.711 2 0 0.9244 0.9595 0 4 0
! H, K, L, R, DR, Code Q**2=sin(alpha)^2
0 1 0 0.936402 0.000592 1 0.9996
0 2 0 1.032731 0.000694 1 0.9996
0 3 0 1.006896 0.000548 1 0.9996
0 6 0 1.000249 0.000854 1 0.9996
1 1 0 1.007219 0.000365 1 0.7670
1 -2 0 1.007456 0.000666 1 0.7326
1 -3 0 0.960528 0.003021 1 0.8803
1 2 0 0.958568 0.002594 1 0.9049
2 2 0 1.002875 0.000538 1 0.7670
2 -4 0 1.001982 0.000846 1 0.7326
0 0 1 1.014153 0.000437 1 0.9999
0 2 1 0.979703 0.000575 1 0.9998
0 -2 1 0.979843 0.000575 1 0.9995
0 3 1 1.004838 0.000599 1 0.9998
0 -3 1 1.004524 0.000491 1 0.9995
1 1 1 1.005273 0.000343 1 0.8314
-1 2 1 1.005429 0.000376 1 0.8159
-1 -1 1 1.005087 0.000359 1 0.8399
1 -2 1 1.004810 0.000379 1 0.8068
1 4 1 1.001716 0.000860 1 0.9722
-1 -4 1 1.001762 0.000787 1 0.9737
-1 5 1 1.002367 0.001136 1 0.9599
1 -5 1 1.001998 0.000826 1 0.9581
1 7 1 1.001240 0.001447 1 0.9909

```

-1	-7	1	0.999256	0.001955	1	0.9914
-1	8	1	1.001692	0.001886	1	0.9827
1	-8	1	0.998887	0.001850	1	0.9819
0	0	2	1.004366	0.000304	1	0.9999
1	0	2	0.962214	0.002858	1	0.8719
0	1	2	0.953771	0.001615	1	1.0000
-1	1	2	0.960862	0.002617	1	0.8786
-1	0	2	0.959852	0.001978	1	0.8842
0	-1	2	0.954875	0.001683	1	0.9997
1	-1	2	0.958287	0.002120	1	0.8660
0	2	2	1.021036	0.002562	1	1.0000
0	-2	2	1.022287	0.001561	1	0.9996
0	3	2	1.005257	0.000871	1	0.9999
0	-3	2	1.005390	0.000864	1	0.9995
0	6	2	1.000894	0.000695	1	0.9998
0	-6	2	1.001608	0.000707	1	0.9995
1	1	2	1.007805	0.000586	1	0.9082
-1	2	2	1.007024	0.001962	1	0.9046
-2	1	2	1.004485	0.000844	1	0.6350
-1	-1	2	1.006255	0.000588	1	0.9172
1	-2	2	1.006526	0.000592	1	0.8950
2	-1	2	1.004226	0.000875	1	0.6163
1	4	2	1.003202	0.001025	1	0.9755
-1	-4	2	1.001749	0.001029	1	0.9781
-1	5	2	1.003156	0.001073	1	0.9665
1	-5	2	1.000904	0.001051	1	0.9633
2	2	2	1.001714	0.000575	1	0.8314
-2	4	2	1.001240	0.000610	1	0.8159
-2	-2	2	1.002674	0.000769	1	0.8399
2	-4	2	1.002026	0.000901	1	0.8068
0	0	3	1.011397	0.001046	1	0.9999
0	3	3	1.003057	0.000541	1	1.0000
0	-3	3	1.002136	0.000585	1	0.9996
1	1	3	1.002810	0.000745	1	0.9472
-1	2	3	1.003558	0.000883	1	0.9478
-2	1	3	1.004199	0.000862	1	0.7977
-1	-1	3	1.004146	0.000754	1	0.9548
1	-2	3	1.003246	0.000863	1	0.9397
2	-1	3	1.003439	0.000796	1	0.7820
1	4	3	1.001377	0.001037	1	0.9797
-1	-4	3	1.001927	0.000921	1	0.9829
-1	5	3	1.002285	0.000980	1	0.9736
1	-5	3	1.000463	0.001137	1	0.9698
0	0	4	1.001185	0.000557	1	0.9999
0	3	4	1.002873	0.000667	1	1.0000
0	-3	4	1.000687	0.000812	1	0.9996
0	6	4	1.001369	0.002635	1	0.9999
0	-6	4	0.998924	0.000856	1	0.9995
0	3	5	1.001349	0.000805	1	1.0000
0	-3	5	1.000182	0.000776	1	0.9997
1	1	5	1.001393	0.000929	1	0.9769
-1	2	5	1.001819	0.000851	1	0.9794
-1	-1	5	1.000395	0.001088	1	0.9822
1	-2	5	0.999164	0.001034	1	0.9737
1	4	5	1.000581	0.001742	1	0.9868
-1	-4	5	1.003780	0.001359	1	0.9900
-1	5	5	1.000172	0.002464	1	0.9845
1	-5	5	0.998893	0.001387	1	0.9805
0	0	6	1.000523	0.000741	1	0.9999
1	1	7	0.999484	0.001284	1	0.9871
-1	2	7	0.997805	0.002161	1	0.9896
-1	-1	7	1.001686	0.001747	1	0.9910
1	-2	7	1.001173	0.001496	1	0.9853

16 APPENDICE VII : FICHER PCR 'RAPPORT DE FLIPPING' POUR AFFINER LA DISTRIBUTION D'AIMANTATION DANS UN₂AL₃

Modèle multipolaire utilisant les harmoniques sphériques réelles et des fonctions radiales de Slater comme décrit dans l'expression (10). Quatre paramètres ajustables sont affinés dans ce cas.

```

COMM UNi2Al3
! Current global Chi2 (Bragg contrib.) = 1.009
! Files => DAT-file: unifli, PCR-file: unifli_mult
!Job Npr Nph Nba Nex Nsc Nor Dum Iwg Ilo Ias Res Ste Nre Cry Uni Cor Opt Aut
  1  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1  0  0  0  1
!
! Ipr Ppl Ioc Mat Pcr Ls1 Ls2 Ls3 NLI Prf Ins Rpa Sym Hkl Fou Sho Ana
  0  0  1  1  1  0  0  0  0  1  0  0  0  0  0  4  0  0
!
!NCY Eps R_at R_an R_pr R_gl Thmin Step Thmax PSD Sent0
  5  0.01 1.00 1.00 1.00 1.00 10.0000 0.100000 89.9000 0.000 0.000
!
!
  4 !Number of refined parameters
-----
! Data for PHASE number: 1 ==> Current R_Bragg for Pattern# 1: 9.33
-----
UNi2Al3
!
!Nat Dis Ang Pr1 Pr2 Pr3 Jbt Irf Isy Str Furth ATZ Nvk Npr More
  3  0  0  0.0 0.0 1.0 10  4  0  0  0  436.423  0  0  0
!
P 6/m m m <--Space group symbol
!Atom Typ Mag Vek X Y Z Biso Occ N_type Spc/Fftype
/Line below:Codes
! Rx Ry Rz Ix Iy Iz MagPh /Line below:Codes
! beta11 beta22 beta33 beta12 beta13 beta23 / Line below:Codes
U3 MULT 0 0 0.00000 0.00000 0.00000 0.09825 0.04167 5 1
! A(00+) Zed(s1) B(00+) Zed(s2) A(11-) A(10+) A(11+)
0.00971 16.55075 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 <-Multipole
11.00 31.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
! Zed(1) A(22-) A(21-) A(20+) A(21+) A(22+) Zed(2)
0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
! A(33-) A(32-) A(31-) A(30+) A(31+) A(32+) A(33+)
0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
! Zed(3) A(44-) A(43-) A(42-) A(41-) A(40+) A(41+)
0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
! A(42+) A(43+) A(44+) Zed(4)
0.00000 0.00000 0.00000 0.00000
0.00 0.00 0.00 0.00
! Exponents of Slater Functions (ns1,ns2,n1,n2,n3,n4):
4 0 0 0 0 0
! Angle and axis of rotation matrix to local orthogonal frame
0.0000 0.0000 0.0000 1.0000
! Anisotropic displacement parameters (bet11, bet22, bet33, bet12, bet13, bet23)
0.00071 0.00071 0.00022 0.00035 0.00000 0.00000 <-Betas
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
NI2 MULT 0 0 0.33333 0.66667 0.00000 0.21110 0.08333 5 2
! A(00+) Zed(s1) B(00+) Zed(s2) A(11-) A(10+) A(11+)
-0.00073 8.62984 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 <-Multipole
21.00 41.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00

```

```

! Zed(1) A(22-) A(21-) A(20+) A(21+) A(22+) Zed(2)
0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
! A(33-) A(32-) A(31-) A(30+) A(31+) A(32+) A(33+)
0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
! Zed(3) A(44-) A(43-) A(42-) A(41-) A(40+) A(41+)
0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
! A(42+) A(43+) A(44+) Zed(4)
0.00000 0.00000 0.00000 0.00000
0.00 0.00 0.00 0.00
! Exponents of Slater Functions (ns1,ns2,n1,n2,n3,n4):
4 0 0 0 0 0
! Angle and axis of rotation matrix to local orthogonal frame
0.0000 0.0000 0.0000 1.0000
! Anisotropic displacement parameters (bet11, bet22, bet33, bet12, bet13, bet23)
0.00292 0.00292 0.00112 0.00146 0.00000 0.00000 <-Betas
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
Al AL 0 0 0.50000 0.00000 0.50000 0.22964 0.12500 2 0
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
0.00216 0.00216 0.00268 0.00108 0.00000 0.00000 <-Betas
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
!-----> Scale, Extinction and Cell Parameters for Pattern # 1
! Scale Factors
! Sc1 Sc2 Sc3 Sc4 Sc5 Sc6
1.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
! Extinction Parameters
! Ext1 Ext2 Ext3 Ext4 Ext5 Ext6 Ext7 Ext-Model
20.41 3.624 7.544 0.000 0.000 0.000 0.000 4
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
! a b c alpha beta gamma #Cell Info
5.197000 5.197000 4.013000 90.000000 90.000000 120.000000
0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000
! x-Lambda/2 + Not yet used parameters
0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00

```

Références

- [1] Rodríguez-Carvajal, J., **Physica B** **192** (1993) 55. Les programmes de la *Suite FullProf* ainsi que la documentation correspondante peuvent s'obtenir à l'adresse <http://www.ill.fr/dif/Soft/fp/>. Voir aussi : J. Rodríguez-Carvajal, 'Recent Developments of the Program FULLPROF', in *Commission on Powder Diffraction (IUCr). Newsletter* 26, 12–19, (2001), disponible à l'adresse <http://journals.iucr.org/iucr-top/comm/cpd/Newsletters/>.
- [2] Blume, M., **Phys. Rev.** **130**, 1670 (1963) Maleyev, S.V., Bar'yachtar, V.G., et Suris, P.A., *Sov. Phys. Solid State* **4**, 3461 (1963).
- [3] Coppens, P., et Becker dans, P.J., "International Tables of Crystallography, Vol. C : Mathematical Physical and Chemical Tables", Chap. 8.7, Edité par Wilson, A.J.C., The international Union of Crystallography, Kluwer Academic Publishers, London 1996.
- [4] Brown dans, P.J., "International Tables of Crystallography, Vol. C : Mathematical Physical and Chemical Tables", Chap. 4.4, Edité par Wilson, A.J.C., The international Union of Crystallography, Kluwer Academic Publishers, London 1996
- [5] Kara, M., et Kurki-Suonio, K., **Acta Cryst.** A37, 201 (1981).

- [6] Kernavanois, N., Boucherle, J.-X., Dalmas de Réotier, P., Givord, F., Lelièvre-Berna, E., Ressouche, E., Rogalev, A., Sanchez, J.-P., Sato, N., et Yaouanc, *J. Phys. : Condens. Matter* **12**, 7857–7867 (2000).
- [7] Roisnel, T., et Rodríguez-Carvajal, **J.**, *Materials Science Forum* **378–3**, 118 (2001).