



Comment décrire l'état cristallin ?

Cristallographie géométrique, symétries

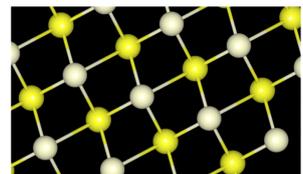
Delphine Cabaret, IMPMC

delphine.cabaret@sorbonne-universite.fr



Préambule : qu'est-ce qu'un cristal ?

Solide dont la structure microscopique est caractérisée par la **répétition périodique en 3 dimensions** d'un **motif** constitué d'atomes.



Depuis 1992 (IUCR) :

« A material is a crystal if it has **essentially a sharp diffraction pattern** »

→ tous les solides qui ont un ordre à grande distance (symétrie de translation dans des espaces de **dimension ≥ 3**)



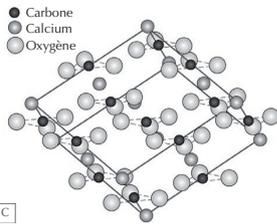
Nature Materials 10, 890–896 (2011)

cf. article de B. Toudic, Reflets de la Physique 2015, vol 44-45

Préambule : les cristaux périodiques

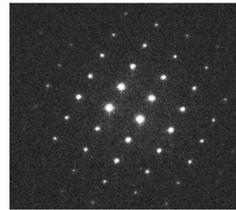
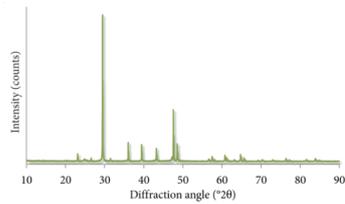
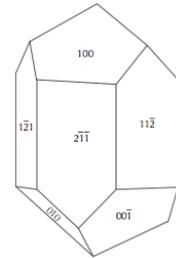
symétrie de translation

ex: CaCO_3 (calcite)



B. Toudic, Reflets de la Physique 2015, vol 44-45

loi des indices rationnels (1784)



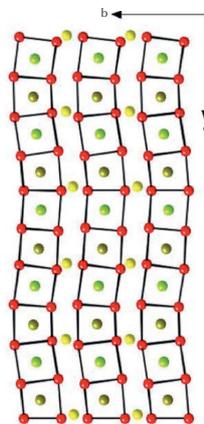
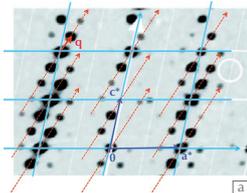
Nature Materials 10, 890-896 (2011)

Préambule: les cristaux aperiodiques

pas de symétrie de translation dans un espace à 3D

cristaux incommensurables, phases modulées

La périodicité (ordre à l'infini) ne peut pas être décrite dans un espace tridimensionnel.

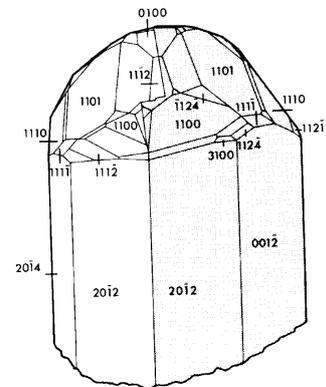


3. Structure incommensurable modulée du carbonate de sodium $\gamma\text{-Na}_2\text{CO}_3$.

(a) Plan de diffraction (a^* , c^*) du réseau réciproque de $\gamma\text{-Na}_2\text{CO}_3$. Il est constitué de pics de Bragg, preuve d'un ordre à grande distance, mais requiert pour son indexation complète un vecteur de base complémentaire, $\mathbf{q} = \alpha \mathbf{a}^* + \gamma \mathbf{c}^*$. On observe les pics de Bragg du réseau périodique moyen (aux sommets des parallélogrammes bleus), et les pics satellites alignés le long des flèches rouges (parallèles à \mathbf{q}).

(b) La solution structurale modulée, projetée selon \mathbf{a} (atomes d'oxygène en rouge, atomes de sodium en jaune et vert, les atomes de carbone sont omis). Une onde statique de déplacements transversaux (parallèles à \mathbf{b}) apparaît dans la direction \mathbf{c} . La longueur d'onde de la modulation est $2\pi/\mathbf{q}$.

B. Toudic, Reflets de la Physique 2015, vol 44-45



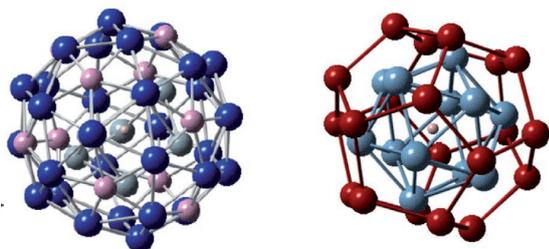
calaverite $\text{Au}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Te}$

Préambule: les cristaux aperiodiques

pas de symétrie de translation dans un espace à 3D

quasicristaux (1982, prix Nobel de chimie en 2011)

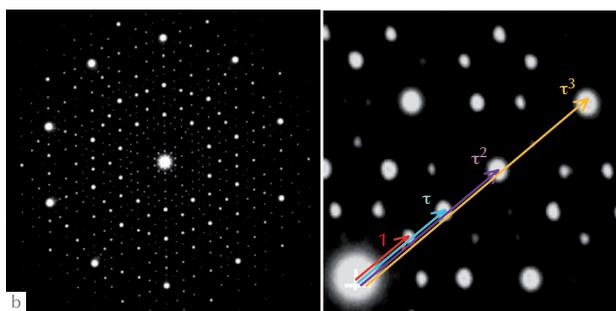
ex : alliage AlPdMn



9. Amas atomiques dont est constitué principalement un alliage quasicristallin de type AlMnPd. À gauche, amas de type Mackay (51 atomes) ; à droite, amas de type Bergman (33 atomes).

B. Toudic, Reflets de la Physique 2015, vol 44-45

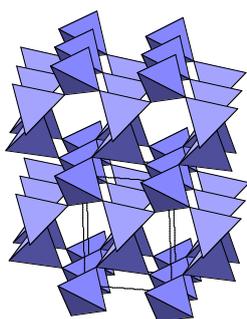
$$\tau = 2 \cos(2\pi/10)$$



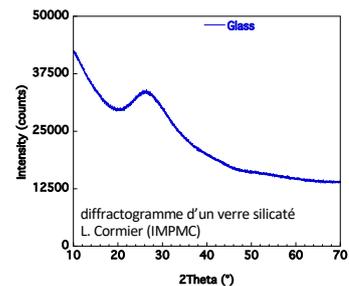
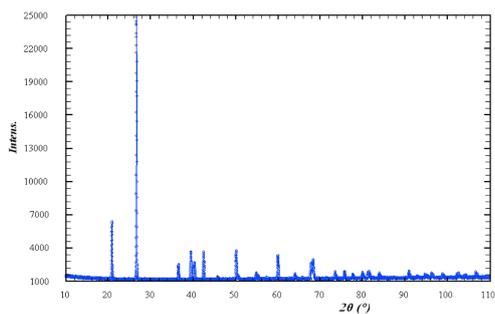
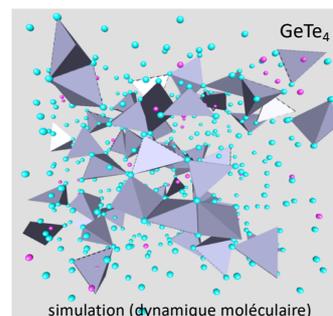
Préambule: qu'est-ce qu'un cristal ?



quartz



cristal \neq verre

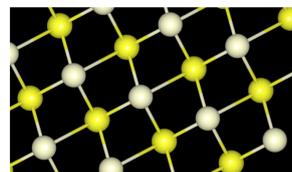


Préambule : qu'est-ce qu'un cristal ?

dans ce cours

Cristal périodique :

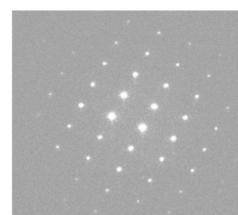
Solide dont la structure microscopique est caractérisée par la **répétition périodique en 3 dimensions** d'un **motif** constitué d'atomes.



Depuis 1992 (IUCR) :

« A material is a crystal if it has **essentially** a sharp diffraction pattern »

→ tous les solides qui ont un ordre à grande distance (symétrie de translation dans des espaces de **dimension ≥ 3**)



Nature Materials 10, 890–896 (2011)

cf. article de B. Toudic, Reflets de la Physique 2015, vol 44-45

CGE 2020- Delphine Cabaret

7

Objectifs : ce qu'il faudrait connaître à la fin du cours

exemple 1

Inorganic Chemistry Article
pubs.acs.org/IC

Crystal Structures of $\text{Li}_6\text{B}_4\text{O}_9$ and $\text{Li}_3\text{B}_{11}\text{O}_{18}$ and Application of the Dimensional Reduction Formalism to Lithium Borates

Gwenaëlle Rousse,^{*,†,‡} Benoît Baptiste,[†] and Gérald Lelong^{*,†}

[†]Institut de Minéralogie, de Physique des Matériaux, et de Cosmochimie (IMPMC), Sorbonne Universités-UPMC Univ Paris 06, UMR CNRS 7590, Muséum National d'Histoire Naturelle, IRD UMR 206, 4 Place Jussieu, F-75005 Paris, France
[‡]FRE 3677, Chimie du Solide et Energie, Collège de France, 11 Place Marcelin Berthelot, and Réseau sur le Stockage Electrochimique de l'Energie (RS2E), FR CNRS 3459, 75231 Paris Cedex 05, France

$\text{Li}_3\text{B}_{11}\text{O}_{18}$ crystallizes in the $P2_1/c$ space group with lattice parameters $a = 17.7607(8) \text{ \AA}$, $b = 7.7737(4) \text{ \AA}$, $c = 9.6731(4) \text{ \AA}$, and $\beta = 100.906(4)^\circ$. The lithium, boron, and oxygen atoms are distributed in the general $4e$ Wyckoff site (see Table 4 for the complete list of atomic positions). The

CGE 2020- Delphine Cabaret

8

Objectifs : ce qu'il faudrait connaître à la fin du cours

exemple 2

PHYSICAL REVIEW B 89, 064305 (2014)
Accuracy of generalized gradient approximation functionals for density-functional perturbation theory calculations
 Lianhua He,¹ Fang Liu,² Geoffroy Hautier,^{3,4} Micael J. T. Oliveira,^{3,5} Miguel A. L. Marques,^{3,6} Fernando D. Vila,⁷ J. J. Rehr,⁷ G.-M. Rignanese,^{3,4} and Aihui Zhou¹

The unit cell of α -quartz is trigonal (space group $P3_221$). It contains nine atoms: the Si atoms are located at $(u, 0, 0)$ on the $3a$ Wyckoff sites, while the O atoms are located at (x, y, z) on the $6c$ Wyckoff sites. Hence, four internal coordinates u, x, y, z are required, besides the two lattice constants a and c , in order to completely determine the structure. The theoretical value

α -quartz = α -SiO₂

Periclase = MgO

The space group of periclase is $Fm\bar{3}m$. The O atom occupies the $4a$ Wyckoff site $(0, 0, 0)$ and the Mg atom is located at $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ occupying the $4b$ Wyckoff sites. In Table II,

Objectifs : ce qu'il faudrait connaître à la fin du cours

exemple 3

PHYSICAL REVIEW B 78, 195103 (2008)
X-ray linear dichroism in cubic compounds: The case of Cr³⁺ in MgAl₂O₄
 Amélie Juhin,^{1,*} Christian Brouder,¹ Marie-Anne Arrio,¹ Delphine Cabaret,¹ Philippe Saintavirt,¹ Etienne Balan,^{1,2} Amélie Bordage,¹ Ari P. Seitsonen,¹ Georges Calas,¹ Sigrid G. Eeckhout,³ and Pieter Glatzel³

mechanical properties.¹³ In MgAl₂O₄ spinel ($Fd\bar{3}m$ space-group symmetry), Al³⁺ cations occur at octahedral sites, which exhibit D_{3d} (or $\bar{3}m$) symmetry and build chains aligned along the six twofold axis of the cubic structure.¹⁴

The number of equivalent octahedral sites in the unit cell is four, denoted hereafter as sites A, B, C, and D, depending on their direction of distortion, either $[\bar{1}11]$, $[11\bar{1}]$, $[111]$, or $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$, respectively (Fig. 1 and Table. I). During the Al to Cr

TABLE I. Coordinates of Cr atom and direction of site distortion for the four equivalent substitutional sites belonging to the rhombohedral unit cell. We also give the coordinates of the 12 other sites obtained from the previous by the three translations of the *fcc* lattice (see text and Fig. 1).

Site identification	Direction of site distortion	Cr coordinates in rhombohedral unit cell	Cr coordinates in cubic cell
A	$[\bar{1}11]$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$	$(\frac{1}{2}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}), (0, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}), (0, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$
B	$[11\bar{1}]$	$(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2})$	$(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{2}), (\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, 0), (\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, 0)$
C	$[111]$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, 0, \frac{1}{2}), (0, \frac{1}{2}, 0), (\frac{1}{2}, 0, 0)$
D	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	$(\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$	$(\frac{3}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}), (\frac{1}{4}, 0, \frac{3}{4}), (\frac{3}{4}, 0, \frac{1}{4})$

Objectifs : ce qu'il faudrait connaître à la fin du cours

exemple 3

Extrait de la table du groupe d'espace du spinelle

$Fd\bar{3}m$	O_h^7	$m\bar{3}m$	Cubic
No. 227	$F 4_1/d \bar{3} 2/m$		Patterson symmetry $Fm\bar{3}m$
ORIGIN CHOICE 2			

Positions	Coordinates	Reflection conditions
Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry	$(0,0,0)+ (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})+ (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})+ (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)+$	h,k,l permutable General: $hkl : h+k=2n$ and $h+l, k+l=2n$ $OkI : k+l=4n$ and $k,l=2n$ $hIl : h+l=2n$ $h00 : h=4n$
192 i 1	(1) x,y,z (2) $\bar{x}+\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}$ (3) $\bar{x}+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}, \bar{z}+\frac{1}{2}$ (4) $x+\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}, \bar{z}+\frac{1}{2}$ (5) z,x,y (6) $z+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}$ (7) $\bar{z}+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}$ (8) $\bar{z}+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}$ (9) y,z,x (10) $\bar{y}+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}$ (11) $y+\frac{1}{2}, \bar{z}+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}$ (12) $\bar{y}+\frac{1}{2}, \bar{z}+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}$ (13) $y+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}, \bar{z}+\frac{1}{2}$ (14) \bar{y}, x, \bar{z} (15) $y+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}$ (16) $\bar{y}+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}$ (17) $x+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}$ (18) $\bar{x}+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}$ (19) \bar{x}, z, y (20) $x+\frac{1}{2}, \bar{z}+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}$ (21) $z+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}$ (22) $z+\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}$ (23) $\bar{z}+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}$ (24) $\bar{z}, \bar{y}, \bar{x}$ (25) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$ (26) $x+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}, \bar{z}+\frac{1}{2}$ (27) $x+\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}$ (28) $\bar{x}+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}$ (29) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$ (30) $\bar{z}+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}$ (31) $z+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}$ (32) $z+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}$ (33) $\bar{y}, \bar{z}, \bar{x}$ (34) $y+\frac{1}{2}, \bar{z}+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}$ (35) $\bar{y}+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}$ (36) $y+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}$ (37) $\bar{y}+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}$ (38) y, x, z (39) $\bar{y}+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}$ (40) $y+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}$ (41) $\bar{x}+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}$ (42) $x+\frac{1}{2}, \bar{z}+\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}$ (43) x, z, y (44) $\bar{x}+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}$ (45) $z+\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}$ (46) $z+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}$ (47) $z+\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}$ (48) z, y, x	Special: as above, plus no extra conditions
96 h ..2	$0, y, \bar{y}$ $\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}$ $\bar{y}, 0, y$ $\bar{y}+\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}$ $y+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}$ $y+\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}$ $y, \bar{y}, 0$ $\bar{y}+\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}$ $y+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}$ $\bar{y}+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}$ $0, \bar{y}, y$ $\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}$ $y, 0, \bar{y}$ $y+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}$ $\bar{y}+\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}$ $\bar{y}+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}$ $y, y, 0$ $y+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}$ $\bar{y}+\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}$ $y+\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}$	no extra conditions
96 g ..m	x, x, z $\bar{x}+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}$ $\bar{x}+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}, \bar{z}+\frac{1}{2}$ $x+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}, \bar{z}+\frac{1}{2}$ z, x, x $z+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}$ $\bar{z}+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}$ $\bar{z}+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}$ x, z, x $\bar{x}+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}$ $x+\frac{1}{2}, \bar{z}+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}$ $\bar{x}+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}$ $x+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}, \bar{z}+\frac{1}{2}$ \bar{x}, x, \bar{z} $x+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}$ $\bar{x}+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}$ $\bar{x}+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}$ $\bar{x}+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}$ $\bar{x}, \bar{x}, \bar{x}$ $x+\frac{1}{2}, \bar{z}+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}$ $z+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}$ $z+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}$ $\bar{z}+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}$ $\bar{z}, \bar{x}, \bar{x}$	no extra conditions
48 f 2..mm	$x, \frac{1}{2}, \bar{x}$ $\bar{x}+\frac{1}{2}, \bar{x}$ $\frac{1}{2}, x, \frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}, \bar{x}$ $\frac{1}{2}, x, \frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}, \bar{x}$ $\frac{1}{2}, x, \frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}, \bar{x}, \frac{1}{2}$ $x+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}$ $\bar{x}+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}$ $\bar{x}+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}$	$hkl : h=2n+1$ or $h+k+l=4n$
32 e ..3m	x, x, x $\bar{x}+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}$ $\bar{x}+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}$ $x+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}$ $x+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}$ $\bar{x}, \bar{x}, \bar{x}$ $x+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}$ $\bar{x}+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}$	no extra conditions
16 d ..3m	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$ $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$hkl : h=2n+1$ or $h, k, l=4n+2$ or $h, k, l=4n$
16 c ..3m	$0, 0, 0$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$hkl : h=2n+1$ or $h+k+l=4n$
8 b ..3m	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	
8 a ..3m	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	

CGE 2020- Delphine Cabaret

11

Objectifs : ce qu'il faudrait connaître à la fin du cours

exemple 1

Table du groupe d'espace du borate de Li

$P2_1/c$	C_{2h}^5	$2/m$	Monoclinic
No. 14	$P12_1/c1$		Patterson symmetry $P12_1/m1$
UNIQUE AXIS b , CELL CHOICE 1			
Origin at 1	Asymmetric unit $0 \leq x \leq 1; 0 \leq y \leq \frac{1}{2}; 0 \leq z \leq 1$		
Symmetry operations			
(1) 1	(2) $2(0, \frac{1}{2}, 0)$	(3) $\bar{1}$	(4) c

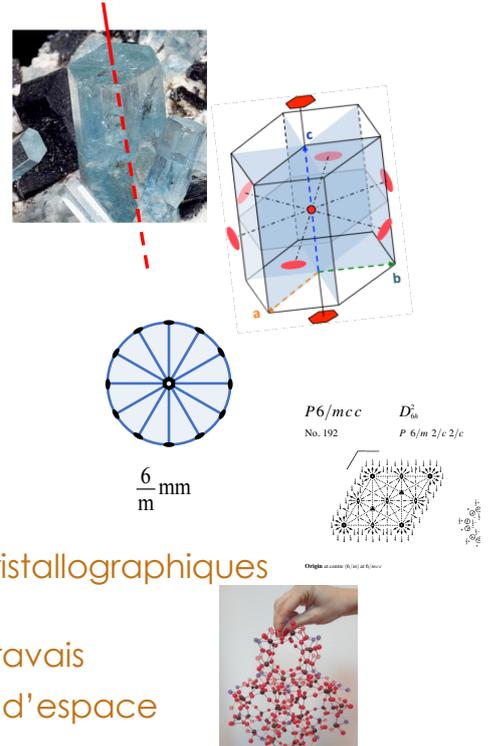
CONTINUED	No. 14	$P2_1/c$
Generators selected	(1); $r(1,0,0)$; $r(0,1,0)$; $r(0,0,1)$; (2); (3)	
Positions	Coordinates	Reflection conditions
Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry		General: $h0l : l=2n$ $0k0 : k=2n$ $00l : l=2n$
4 e 1	(1) x,y,z (2) $\bar{x}, y+\frac{1}{2}, \bar{z}+\frac{1}{2}$ (3) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$ (4) $x, \bar{y}+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}$	Special: as above, plus $hkl : k+l=2n$ $hkl : k+l=2n$ $hkl : k+l=2n$ $hkl : k+l=2n$
2 d $\bar{1}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$	
2 c $\bar{1}$	$0, 0, \frac{1}{2}$ $0, \frac{1}{2}, 0$	
2 b $\bar{1}$	$\frac{1}{2}, 0, 0$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	
2 a $\bar{1}$	$0, 0, 0$ $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	
Symmetry of special projections		
Along $[001] p2gg$	$a=b$ $b=c$	Along $[010] p2$
Origin at $0, 0, z$	Origin at $x, 0, 0$	Origin at $0, y, 0$
Maximal non-isomorphic subgroups		
I	[2] $P1c1$ (Pc , 7) 1; 4 [2] $P12_1$ ($P2_1$, 4) 1; 2 [2] $P1$ (C_2) 1; 3	
IIa	none	
IIb	none	
Maximal isomorphic subgroups of lowest index		
IIc	[2] $P12_1/c1$ ($a=2a$ or $a=2a, c=2a+c$)($P2_1/c$, 14); [3] $P12_1/c1$ ($b=3b$)($P2_1/c$, 14)	
Minimal non-isomorphic supergroups		
I	[2] $Pnna$ (52); [2] $Pmna$ (53); [2] $Pcna$ (54); [2] $Pbam$ (55); [2] $Pccn$ (56); [2] $Pbcm$ (57); [2] $Pnmm$ (58); [2] $Pbcn$ (60); [2] $Pbca$ (61); [2] $Pmna$ (62); [2] $Cmce$ (64)	
II	[2] $A12/m1$ ($C2/m$, 12); [2] $C12/c1$ ($C2/c$, 15); [2] $I12/c1$ ($C2/c$, 15); [2] $P12_1/m1$ ($c=4c$)($P2_1/m$, 11); [2] $P12/c1$ ($b'=4b$)($P2/c$, 13)	

CGE 2020- Delphine Cabaret

12

Plan du cours

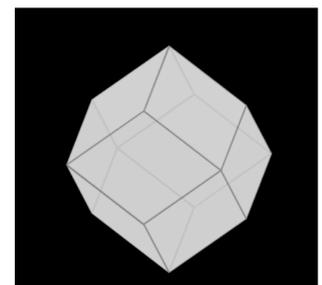
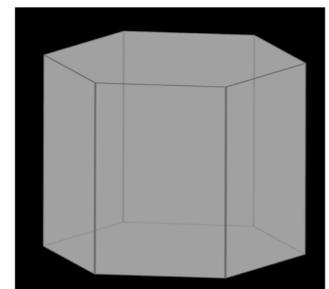
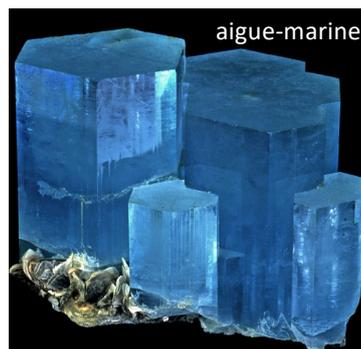
- 1- Observation des symétries des cristaux naturels
- 2- Cause interne de la forme des cristaux naturels
- 3 - Réseau, maille, motif
- 4 – Rangées et plans réticulaires
- 5 – Réseau réciproque
- 6 - Réseau et symétries
- 7 - Maille unitaire, maille conventionnelle
- 8 – Projection stéréographique
- 9 – Roto-inversions
- 10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques
- 11 – Les 7 systèmes cristallins
- 12 – Les 14 réseaux de Bravais
- 13 – Les 230 groupes d'espace



CGE 2020- Delphine Cabaret

13

1- Observation des symétries des cristaux naturels



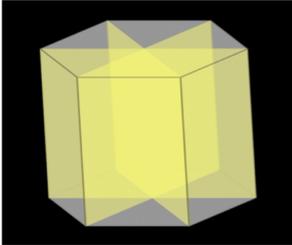
Crédits photos : Collection de Minéraux de Sorbonne Université

CGE 2020- Delphine Cabaret

14

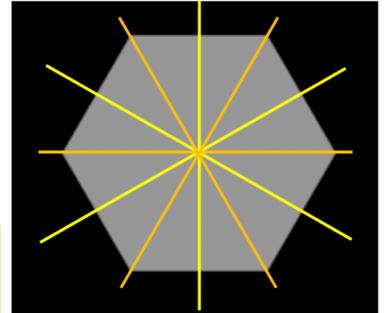
1- Observation des symétries des cristaux naturels

Mise en évidence de plans miroir



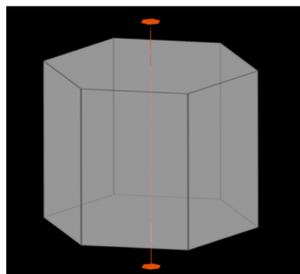
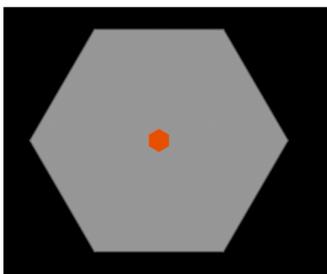
- **3 miroirs**
parallèles aux arêtes latérales
et coupant les arêtes
de la base hexagonale
en leurs milieux

- **3 miroirs**
parallèles aux arêtes latérales
et joignant deux sommets
opposés dans la base hexagonale



1- Observation des symétries des cristaux naturels

Mise en évidence d'un axe de rotation d'ordre 6



axe A_6 ou 6

$$\varphi = 60^\circ = \frac{2\pi}{6}$$

1- Observation des symétries des cristaux naturels

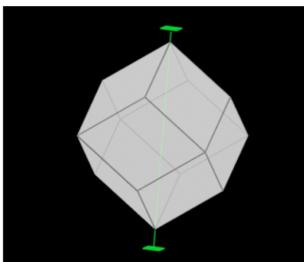
Mise en évidence d'axes de rotation d'ordres 4, 3 et 2



rhombododécaèdre
(polyèdre à 12 faces)

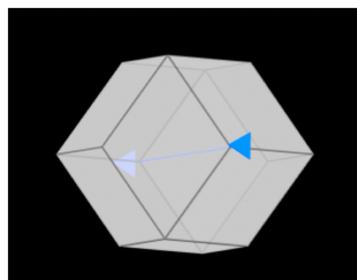
1- Observation des symétries des cristaux naturels

Mise en évidence d'axes de rotation d'ordres 4, 3 et 2



axe A_4 ou 4

$$\varphi = 90^\circ = \frac{2\pi}{4}$$

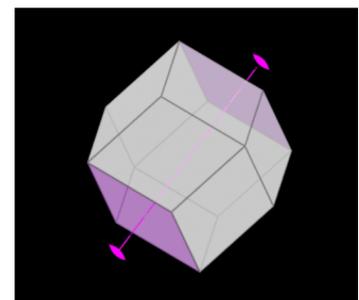


axe A_3 ou 3

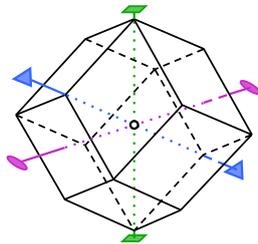
$$\varphi = 120^\circ = \frac{2\pi}{3}$$

axe A_2 ou 2

$$\varphi = 180^\circ = \frac{2\pi}{2}$$

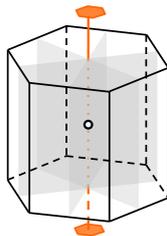


1- Observation des symétries des cristaux naturels



axes de rotation

A_2 A_3 A_4 A_6



miroir

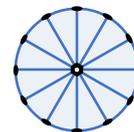
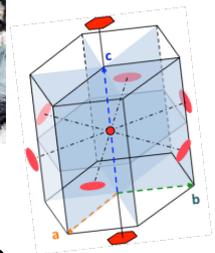
M

centre de symétrie

C

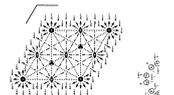
Plan du cours

- 1- Observation des symétries des cristaux naturels
- 2- Cause interne de la forme des cristaux naturels
- 3 - Réseau, maille, motif
- 4 – Rangées et plans réticulaires
- 5 – Réseau réciproque
- 6 - Réseau et symétries
- 7 - Maille unitaire, maille conventionnelle
- 8 – Projection stéréographique
- 9 – Roto-inversions
- 10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques
- 11 – Les 7 systèmes cristallins
- 12 – Les 14 réseaux de Bravais
- 13 – Les 230 groupes d'espace



$\frac{6}{m}$

$P6/mcc$ D_{6h}
No. 192 $P 6/m 2/c 2/c$



Origine au centre (0, 0, 0) et 6 axes



2- Cause interne de la forme des cristaux naturels

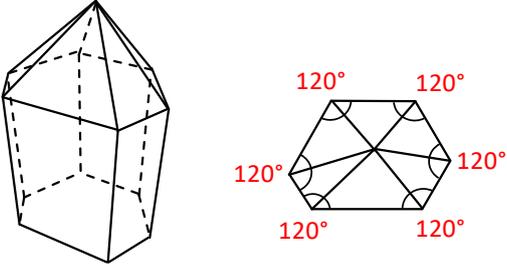
René Just Haüy
(1784)




Jean-Baptiste Romé de l'Isle



Loi de constance des angles



cristal de quartz

21

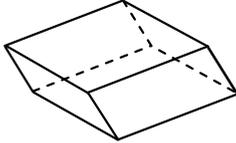
Torbern Bergman



Clivage de la calcite



Rhomboèdre



2- Cause interne de la forme des cristaux naturels

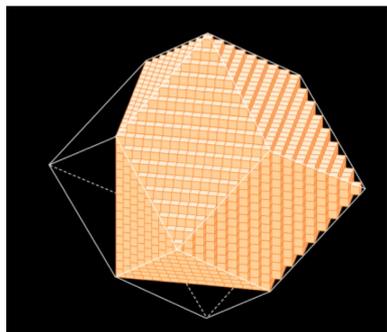
René Just Haüy
(1784)




molécule intégrante

↓

loi des indices rationnels



2- Cause interne de la forme des cristaux naturels

René Just Haüy (1784)




molécule intégrante

↓

loi des indices rationnels

Gabriel Delafosse



maille

réseau

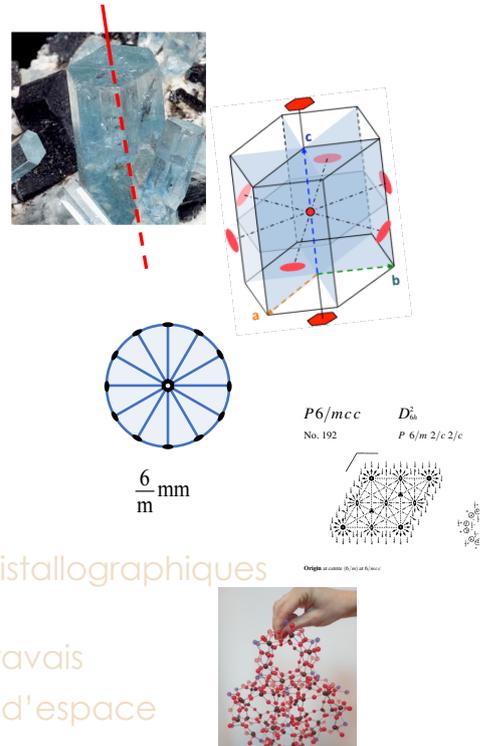
motif



Auguste Bravais (1848)

Plan du cours

- 1- Observation des symétries des cristaux naturels
- 2- Cause interne de la forme des cristaux naturels
- 3 - Réseau, maille, motif
- 4 – Rangées et plans réticulaires
- 5 – Réseau réciproque
- 6 - Réseau et symétries
- 7 - Maille unitaire, maille conventionnelle
- 8 – Projection stéréographique
- 9 – Roto-inversions
- 10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques
- 11 – Les 7 systèmes cristallins
- 12 – Les 14 réseaux de Bravais
- 13 – Les 230 groupes d'espace



3 - Réseau, maille, motif



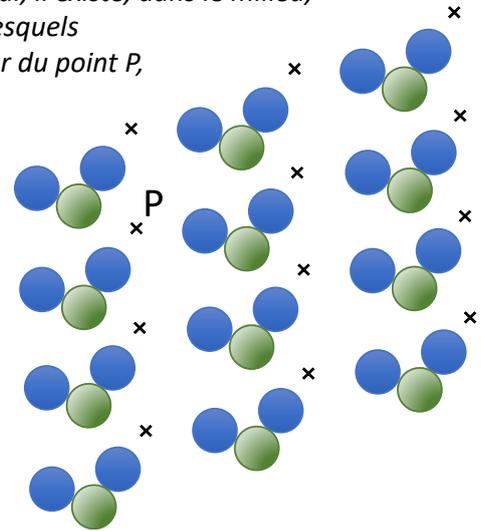
le postulat de Bravais

« Etant donné un point P quelconque dans un cristal, il existe, dans le milieu, une **infinité discrète, illimitée, de points** autour desquels l'arrangement de la matière est le même qu'autour du point P , et ce, avec la même orientation. »

Les points obéissant au postulat de Bravais sont appelés **nœuds**.

NB : Les **nœuds** ne correspondent à aucune entité physique et ne doivent pas être confondus avec les atomes.

L'ensemble des **nœuds** constitue le **réseau**.



3 - Réseau, maille, motif

réseau \rightarrow vecteurs de base

Le réseau est défini, à 3D, par **3 vecteurs de base** notés \vec{a} , \vec{b} et \vec{c} et non colinéaires.

Tous les nœuds du réseau sont obtenus par la **combinaison linéaire** :

$$\vec{t} = u \vec{a} + v \vec{b} + w \vec{c}$$

u, v, w : entiers relatifs

translation de réseau

3 - Réseau, maille, motif

réseau → comment repérer les nœuds

$$\vec{t} = \vec{a} + \vec{b} + \vec{c}$$

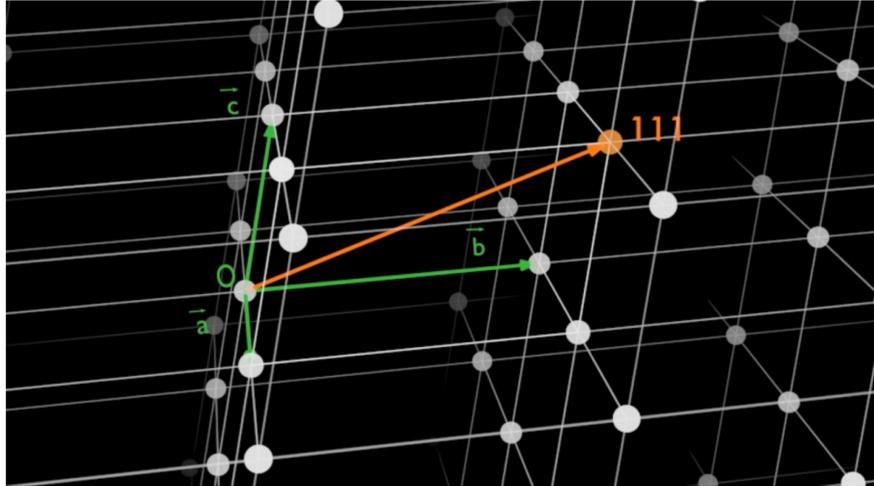
→ nœud 111

$$\vec{t} = -\vec{a} + 2\vec{b}$$

→ nœud $\bar{1}11$

$$\vec{t} = \vec{a} - \vec{b} + 2\vec{c}$$

→ nœud $1\bar{1}2$



3 - Réseau, maille, motif

vecteurs de base → maille

3 vecteurs de base : \vec{a} , \vec{b} et \vec{c}

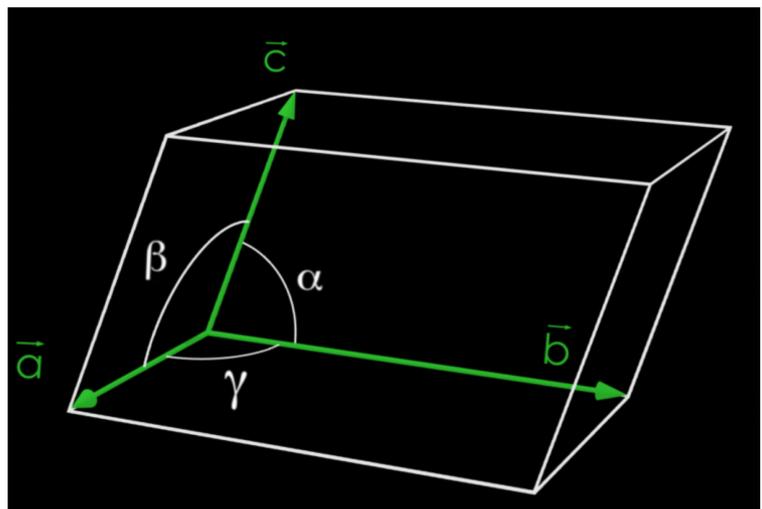


6 paramètres :

- les 3 longueurs a , b , c
- les 3 angles α , β et γ

volume :

$$V = (\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}) = \vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})$$



3 - Réseau, maille, motif

maille à 2D

2 vecteurs de base : \vec{a} et \vec{b}

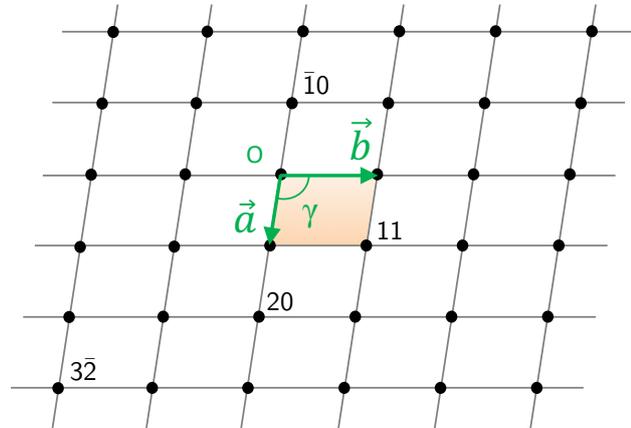


3 paramètres :

- les 2 longueurs a, b
- l'angle $\gamma \geq 90^\circ$

surface :

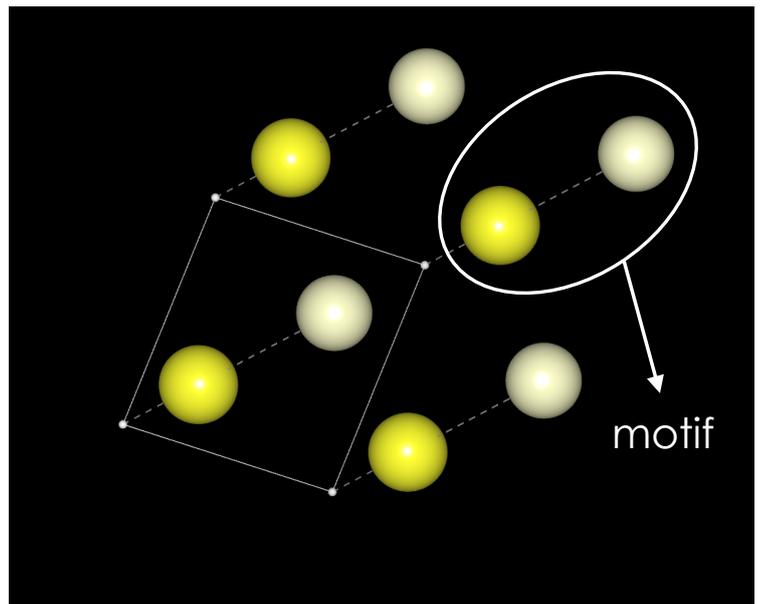
$$S = |\vec{a} \times \vec{b}|$$



3 - Réseau, maille, motif

motif

contenu de la maille élémentaire

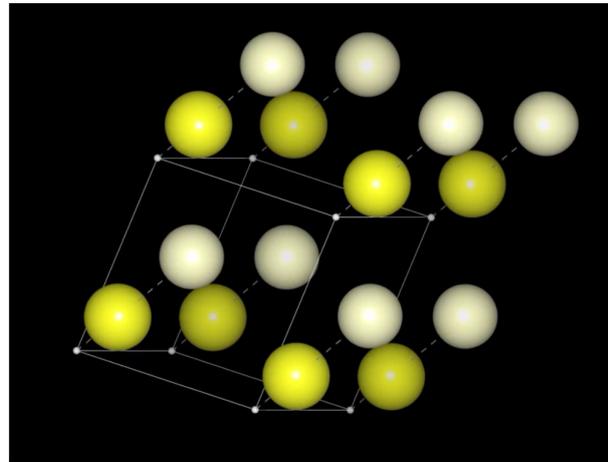


3 - Réseau, maille, motif

motif

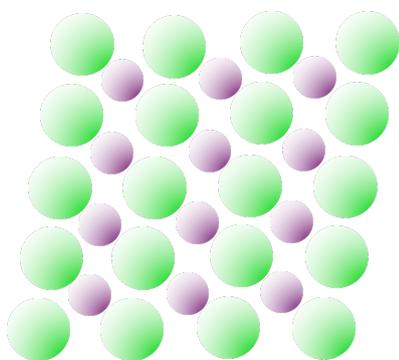
contenu de la maille élémentaire

un atome
ou un ensemble d'atomes
attaché à chaque nœud du réseau



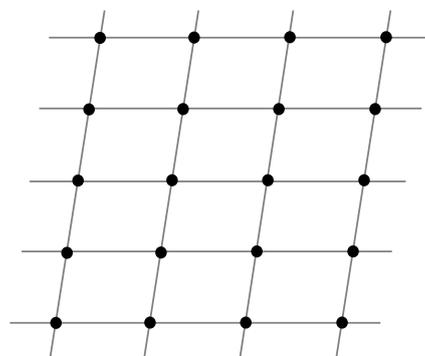
3 - Réseau, maille, motif

cristal



cristal

=



réseau

⊗

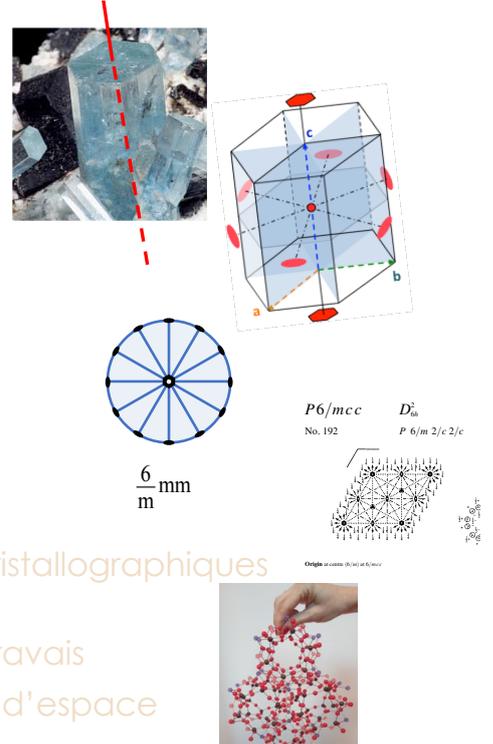


⊗

motif

Plan du cours

- 1- Observation des symétries des cristaux naturels
- 2- Cause interne de la forme des cristaux naturels
- 3 - Réseau, maille, motif
- 4 – Rangées et plans réticulaires
- 5 – Réseau réciproque
- 6 - Réseau et symétries
- 7 - Maille unitaire, maille conventionnelle
- 8 – Projection stéréographique
- 9 – Roto-inversions
- 10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques
- 11 – Les 7 systèmes cristallins
- 12 – Les 14 réseaux de Bravais
- 13 – Les 230 groupes d'espace



CGE 2020- Delphine Cabaret

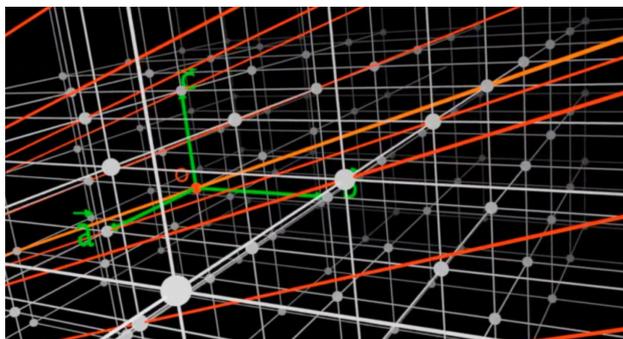
33

4 – Rangées et plans réticulaires

famille de rangées

rangée : toute droite passant par deux nœuds → une rangée contient une infinité de nœuds

Toute rangée est parallèle à une **rangée particulière** passant par l'origine (qui est un nœud) et par un nœud de coordonnées (u, v, w) → famille de rangées **[uvw]**



famille de rangées [021]

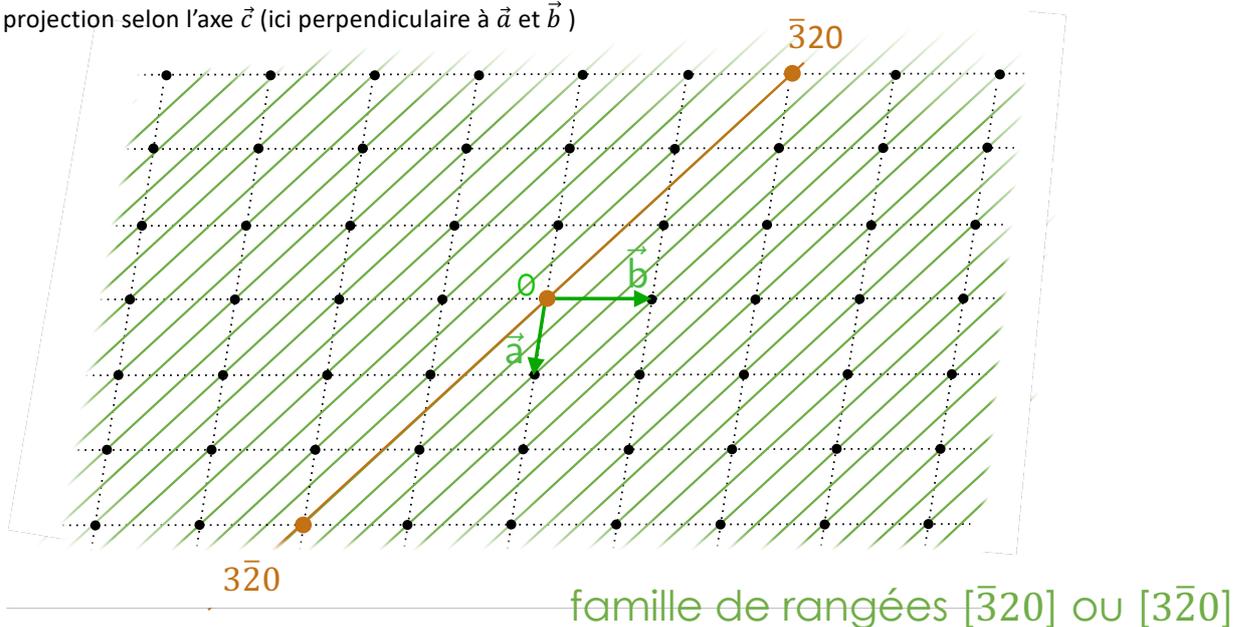
CGE 2020- Delphine Cabaret

34

4 – Rangées et plans réticulaires

famille de rangées

en projection selon l'axe \vec{c} (ici perpendiculaire à \vec{a} et \vec{b})



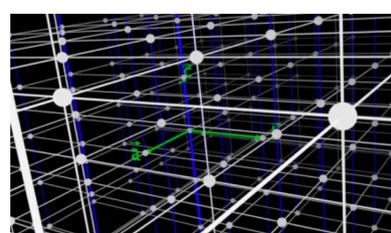
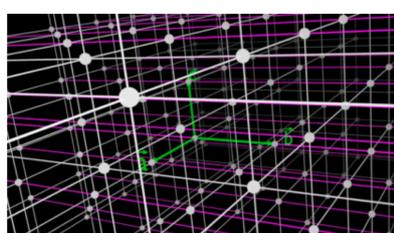
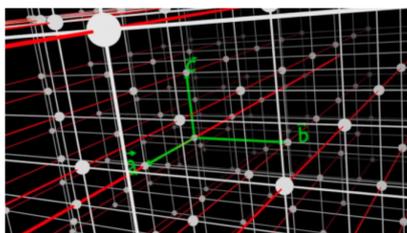
4 – Rangées et plans réticulaires

famille de rangées

$[100]$

$[010]$

$[001]$

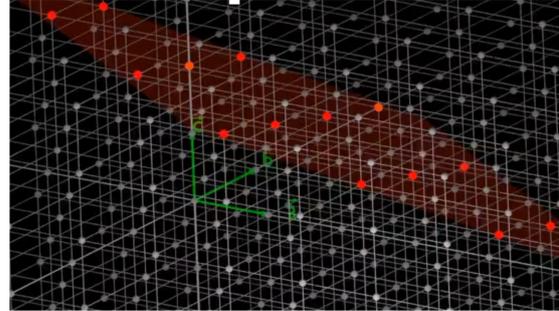
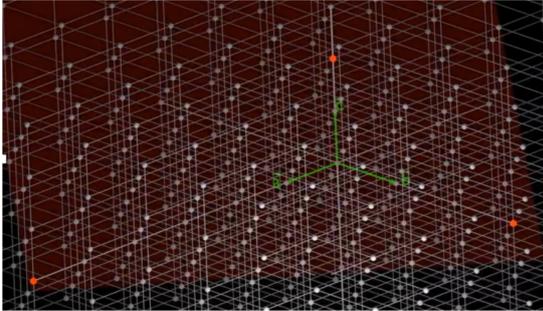


4 – Rangées et plans réticulaires

famille de plans réticulaires

plan réticulaire : plan passant par 3 nœuds non colinéaires

→ Un plan réticulaire contient une infinité de nœuds et forme un réseau 2D.

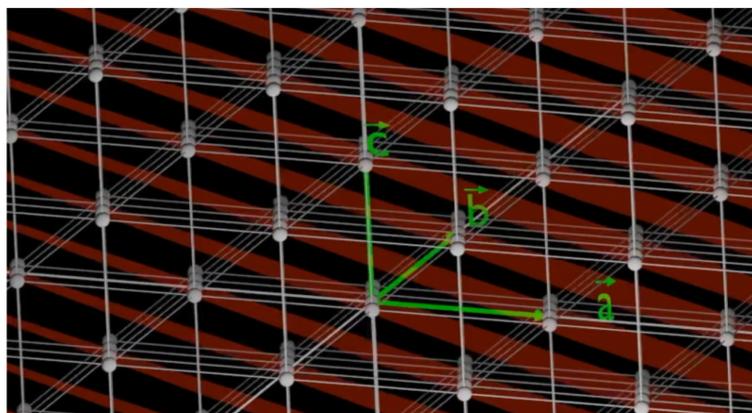


4 – Rangées et plans réticulaires

famille de plans réticulaires

famille de plans réticulaires : infinité de plans réticulaires équidistants entre eux et parallèles à un plan réticulaire donné.

→ Une famille de plans réticulaires contient l'ensemble des nœuds du réseau 3D.

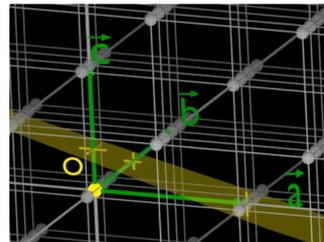
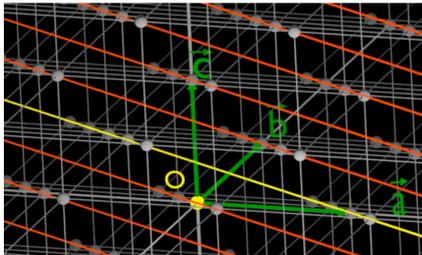


4 – Rangées et plans réticulaires

famille de plans réticulaires

Une **famille de plans réticulaires** est noté (hkl)

h , k et l sont les indices de Miller, ce sont des **entiers premiers entre eux**.



axe $[001]$ coupé en $a/1$
axe $[010]$ coupé en $b/2$
axe $[001]$ coupé en $c/3$

→ famille de plans (123)

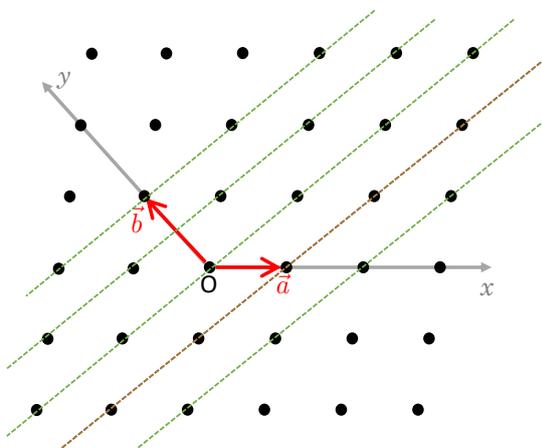
4 – Rangées et plans réticulaires

famille de plans réticulaires

Une **famille de plans réticulaires** est noté (hkl)

projection dans le plan (a,b)

h , k et l sont des **entiers premiers entre eux**.



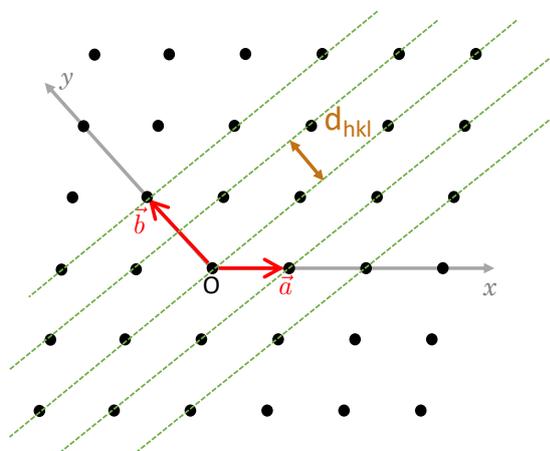
(hkl) désigne la famille de plans réticulaires telle que le plan de la famille, le plus proche du nœud d'origine, coupe l'axe Ox en a/h , l'axe Oy en b/k et l'axe Oz en c/l .

Ici $h = 1$, $k = -2$ et $l = 0$ → famille de plans $(1\bar{2}0)$

4 – Rangées et plans réticulaires

famille de plans réticulaires

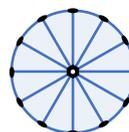
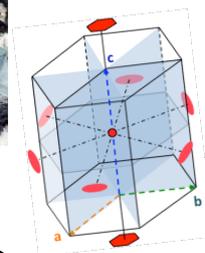
projection dans le plan (a, b)



distance interréticulaire :
distance entre deux plans consécutifs
d'une même famille de plans (hkl),
notée d_{hkl} .

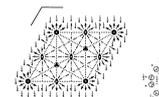
Plan du cours

- 1- Observation des symétries des cristaux naturels
- 2- Cause interne de la forme des cristaux naturels
- 3 - Réseau, maille, motif
- 4 – Rangées et plans réticulaires
- 5 – Réseau réciproque
- 6 - Réseau et symétries
- 7 - Maille unitaire, maille conventionnelle
- 8 – Projection stéréographique
- 9 – Roto-inversions
- 10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques
- 11 – Les 7 systèmes cristallins
- 12 – Les 14 réseaux de Bravais
- 13 – Les 230 groupes d'espace



$\frac{6}{m}$

$P6/mcc$ D_{6h}
No. 192 $P 6/m 2/c 2/c$



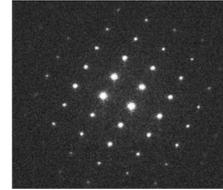
Origine au centre (0, 0) et à 60°



5 – Réseau réciproque

Il permet de :

- simplifier un bon nombre de calculs cristallographiques
- formuler simplement la théorie de la diffraction des rayonnements (X, neutrons, électrons)



Nature Materials 10, 890–896 (2011)

Définition

Soit un réseau direct de vecteurs de base \vec{a} , \vec{b} et \vec{c} . Le **réseau réciproque** associé est caractérisé par \vec{a}^* , \vec{b}^* et \vec{c}^* tels que :

$$\begin{array}{lll} \vec{a} \cdot \vec{a}^* = \sigma & \vec{a} \cdot \vec{b}^* = 0 & \vec{a} \cdot \vec{c}^* = 0 \\ \vec{b} \cdot \vec{a}^* = 0 & \vec{b} \cdot \vec{b}^* = \sigma & \vec{b} \cdot \vec{c}^* = 0 \\ \vec{c} \cdot \vec{a}^* = 0 & \vec{c} \cdot \vec{b}^* = 0 & \vec{c} \cdot \vec{c}^* = \sigma \end{array}$$

En cristallographie : $\sigma = 1$

En physique des solides : $\sigma = 2\pi$

5 – Réseau réciproque

$$\vec{b} \cdot \vec{a}^* = 0 \implies \vec{a}^* \perp \vec{b}$$

$$\vec{c} \cdot \vec{a}^* = 0 \implies \vec{a}^* \perp \vec{c}$$

donc $\vec{a}^* = \alpha' \vec{b} \times \vec{c}$ où α' est une constante

$$\text{d'où } \vec{a} \cdot \vec{a}^* = \alpha' \underbrace{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}_V$$

$$\text{or } \vec{a} \cdot \vec{a}^* = 1$$

$$\text{donc } \alpha' = \frac{1}{V}$$

De même :

$$\text{Par conséquent } \boxed{\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{V}} \quad \boxed{\vec{b}^* = \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{V}} \quad \boxed{\vec{c}^* = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{V}}$$

Unité de longueur : \AA^{-1} ou nm^{-1}

5 – Réseau réciproque (RR)

relations avec le réseau direct

- On peut montrer¹ : $V V^* = 1$

¹ Pour cela on exprime V en fonction de a , b et c , puis on utilise la relation suivante du produit vectoriel de trois vecteurs : $\mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{C})\mathbf{B} - (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})\mathbf{C}$

- On peut montrer :

A tout plan du réseau direct appartenant à la famille (hkl) correspond une rangée du RR de mêmes indices qui lui est perpendiculaire.

$$[hkl]^* \perp (hkl)$$

5 – Réseau réciproque (RR)

relations avec le réseau direct

$$[hkl]^* \perp (hkl)$$

exemples

Espace réciproque

Espace direct

$$\vec{a}^* // [100]^* \quad \perp \quad (\vec{b}, \vec{c}) = (100)$$

$$\vec{b}^* // [010]^* \quad \perp \quad (\vec{c}, \vec{a}) = (010)$$

$$\vec{c}^* // [001]^* \quad \perp \quad (\vec{a}, \vec{b}) = (001)$$

5 – Réseau réciproque (RR)

relations avec le réseau direct

- Calcul d'une distance interréticulaire :

$$d_{hkl} \parallel \vec{t}_{hkl}^* \parallel = 1$$

$$\text{où } \vec{t}_{hkl}^* \parallel [hkl]^* \quad \text{et} \quad \vec{t}_{hkl}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

$$\text{Dans le cas d'un réseau cubique :} \quad d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

5 – Réseau réciproque (RR)

relations avec le réseau direct

- Condition pour que (hkl) soit **parallèle** à [uvw] :

$$\vec{t}_{hkl}^* \perp \vec{t}_{uvw} \rightarrow \text{produit scalaire nul}$$

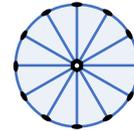
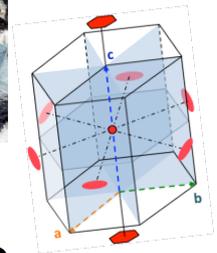
$$\text{avec } \vec{t}_{hkl}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

$$\text{et } \vec{t}_{uvw} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

$$\text{donc } hu + kv + lw = 0$$

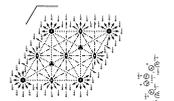
Plan du cours

- 1- Observation des symétries des cristaux naturels
- 2- Cause interne de la forme des cristaux naturels
- 3 - Réseau, maille, motif
- 4 – Rangées et plans réticulaires
- 5 – Réseau réciproque
- 6 - Réseau et symétries
- 7 - Maille unitaire, maille conventionnelle
- 8 – Projection stéréographique
- 9 – Roto-inversions
- 10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques
- 11 – Les 7 systèmes cristallins
- 12 – Les 14 réseaux de Bravais
- 13 – Les 230 groupes d'espace

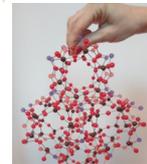


$\frac{6}{m}$

$P6/mcc$ D_{6h}^{14}
No. 192 $P6/m2/c2/c$



Origine au centre (0,0,0) et 6 axes

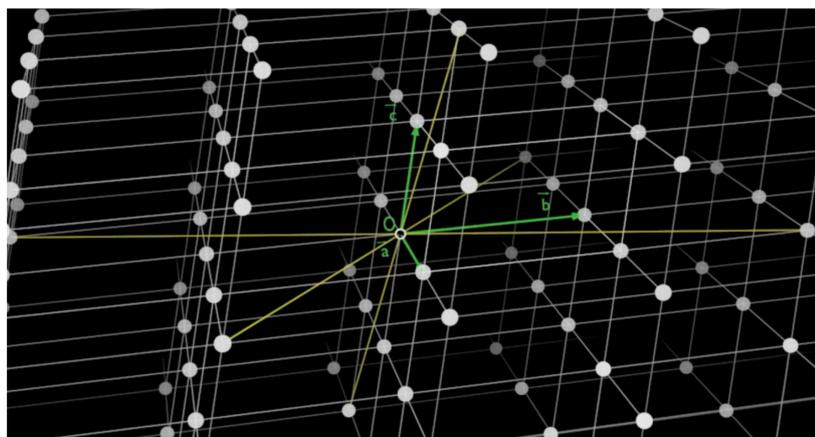


6 - Réseau et symétries

centrosymétrie

Tout réseau est **centrosymétrique** avec des centres :

- en chaque nœud
- au milieu de chaque arête
- au milieu de chaque face
- au centre de chaque maille

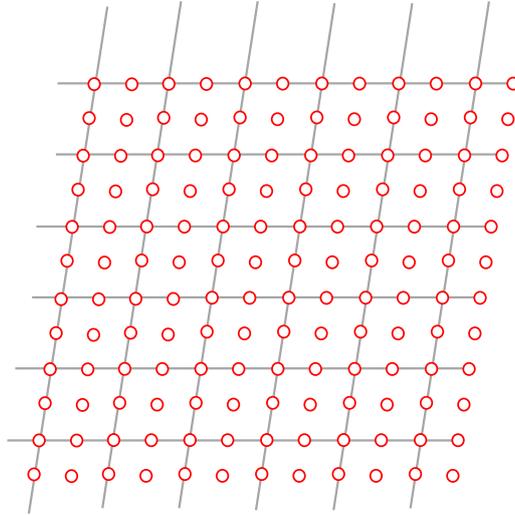


6 - Réseau et symétries

centrosymétrie

Tout réseau est
centrosymétrique
avec des centres :

- en chaque nœud
- au milieu de chaque arête
- au centre de chaque face
- au centre de chaque maille



6 - Réseau et symétries

Les axes de rotation compatibles avec le réseau cristallin

axes de rotation A_n d'angle $\varphi = \frac{2\pi}{n}$

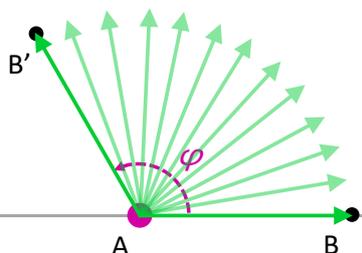


D'autres valeurs de n sont-elles possibles ?

6 - Réseau et symétries

Les axes de rotation compatibles avec le réseau cristallin

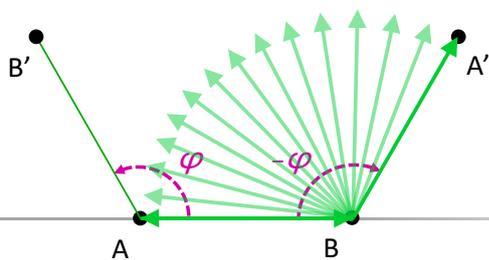
axe A_n d'angle φ en A



6 - Réseau et symétries

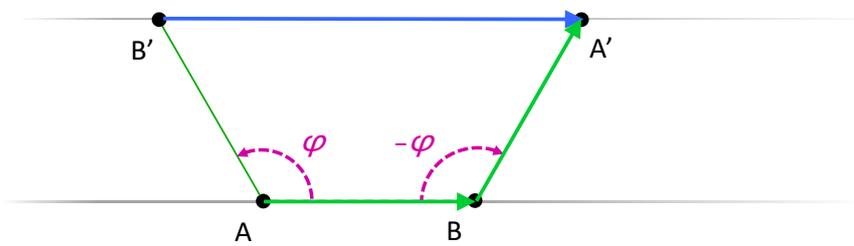
Les axes de rotation compatibles avec le réseau cristallin

axe A_n d'angle φ en A en B



Quelles sont les valeurs de φ possibles ?

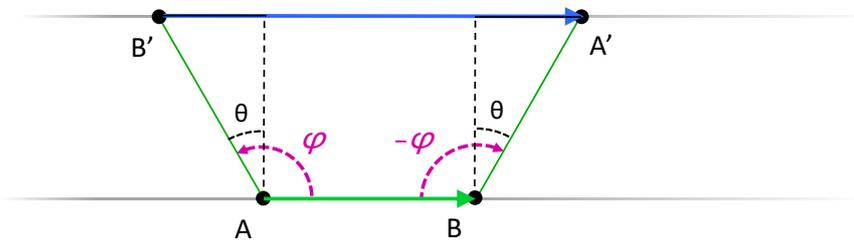
$$\varphi = \frac{2\pi}{n} ?$$



$$B'A' = k AB \quad \text{avec } k \text{ entier}$$

Quelles sont les valeurs de φ possibles ?

$$\varphi = \frac{2\pi}{n} ?$$



$$B'A' = k AB \quad \text{avec } k \text{ entier}$$

$$B'A' = AB + 2 AB' \sin\theta \quad \text{où } \theta = \varphi - \pi/2$$

$$= AB (1 - 2 \cos \varphi)$$

6 - Réseau et symétries

Les axes de rotation compatibles avec le réseau cristallin

Quelles sont les valeurs de φ possibles ?

$$\varphi = \frac{2\pi}{n} ?$$

$B'A' = k AB$ $B'A' = (1 - 2 \cos \varphi) AB$
↑ identification ↑

$$\cos \varphi = \frac{1 - k}{2}$$

avec $-1 \leq \cos \varphi \leq +1$

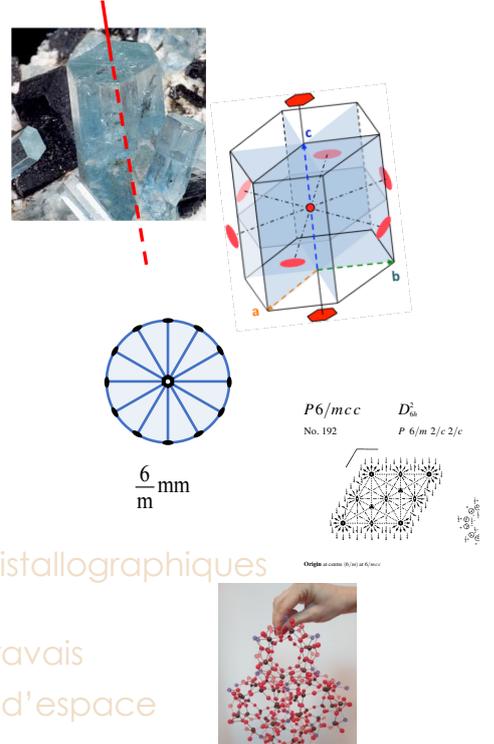
6 - Réseau et symétries

Les axes de rotation compatibles avec le réseau cristallin

k	0	1	2	3	4	-1
$\cos \varphi = \frac{1 - k}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$-\frac{1}{2}$	-1	impossible !	1
$\varphi = \frac{2\pi}{n}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{2\pi}{3}$	π		0
n	6	4	3	2		1
						identité

Plan du cours

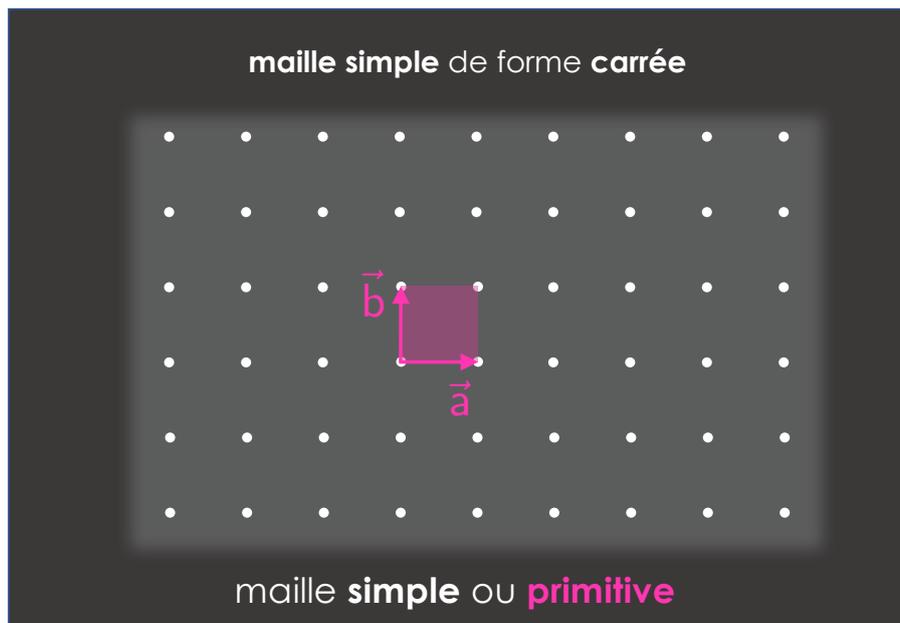
- 1- Observation des symétries des cristaux naturels
- 2- Cause interne de la forme des cristaux naturels
- 3 - Réseau, maille, motif
- 4 – Rangées et plans réticulaires
- 5 – Réseau réciproque
- 6 - Réseau et symétries
- 7 - Maille unitaire, maille conventionnelle
- 8 – Projection stéréographique
- 9 – Roto-inversions
- 10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques
- 11 – Les 7 systèmes cristallins
- 12 – Les 14 réseaux de Bravais
- 13 – Les 230 groupes d'espace



CGE 2020- Delphine Cabaret

59

7 - Maille unitaire, maille conventionnelle

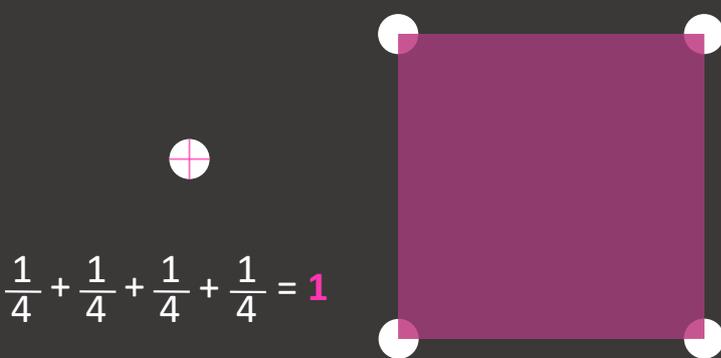


CGE 2020- Delphine Cabaret

60

7 - Maille unitaire, maille conventionnelle

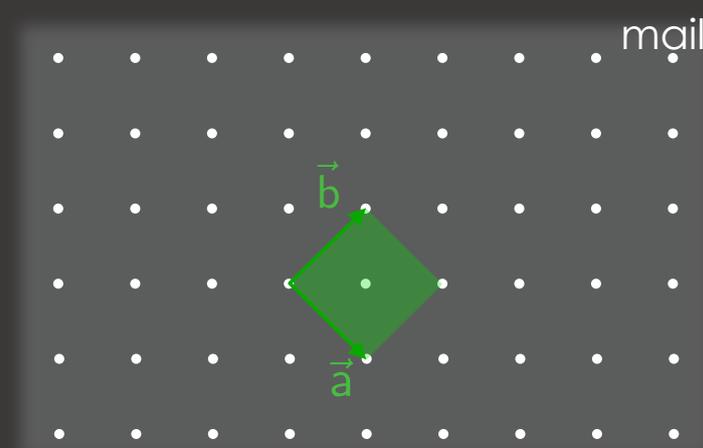
un seul nœud
par maille


$$\frac{1}{4} + \frac{1}{4} + \frac{1}{4} + \frac{1}{4} = 1$$

maille **simple** ou **primitive**

7 - Maille unitaire, maille conventionnelle

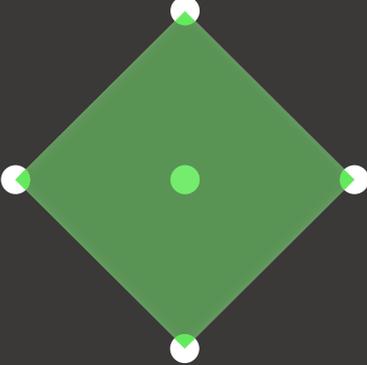
maille double de forme **carrée**



maille **double**

7 - Maille unitaire, maille conventionnelle

maille double de forme carrée



maille double

$$\frac{1}{4} + \frac{1}{4} + \frac{1}{4} + \frac{1}{4} + 1 = 2$$

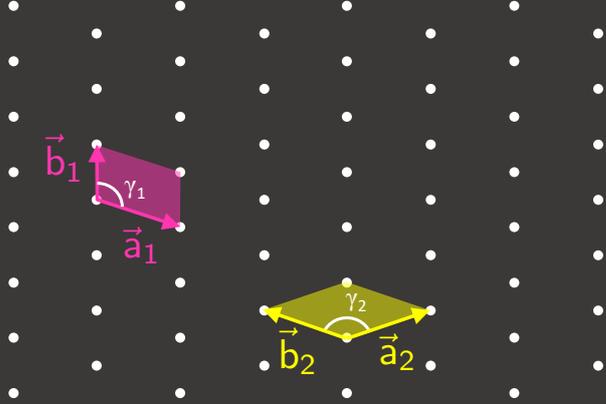
deux nœuds par maille

7 - Maille unitaire, maille conventionnelle

Visualiser deux mailles simples de forme différentes

maille 1
 $a_1 \neq b_1, \gamma_1 \neq 90^\circ$

maille 2
 $a_2 = b_2, \gamma_2 \neq 90^\circ$



7 - Maille unitaire, maille conventionnelle

Visualiser une **maille double centrée**

maille 1
 $a_1 \neq b_1, \gamma_1 \neq 90^\circ$

maille 2
 $a_2 = b_2, \gamma_2 \neq 90^\circ$

maille 3
 $a_3 \neq b_3, \gamma_3 = 90^\circ$

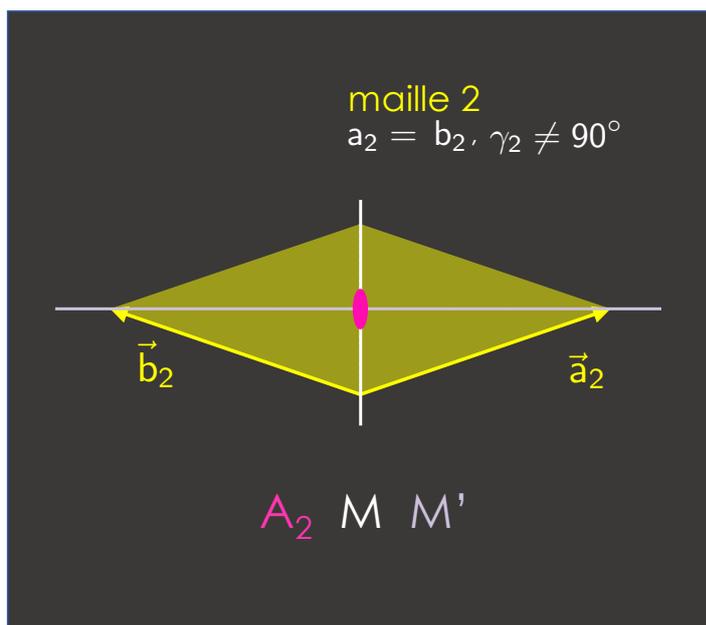
maille conventionnelle ?

7 - Maille unitaire, maille conventionnelle

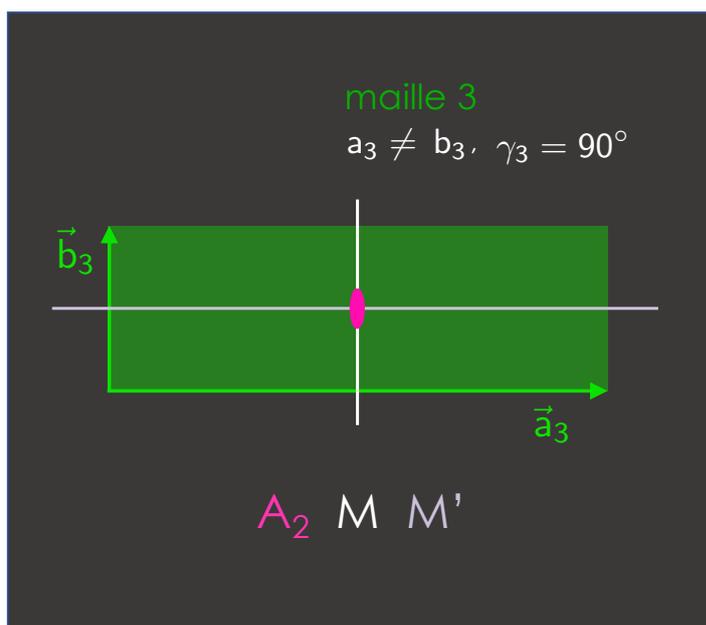
maille 1
 $a_1 \neq b_1, \gamma_1 \neq 90^\circ$

A_2

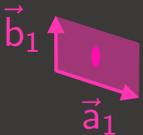
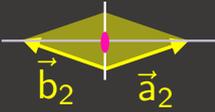
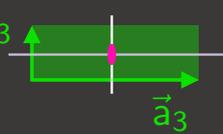
7 - Maille unitaire, maille conventionnelle



7 - Maille unitaire, maille conventionnelle

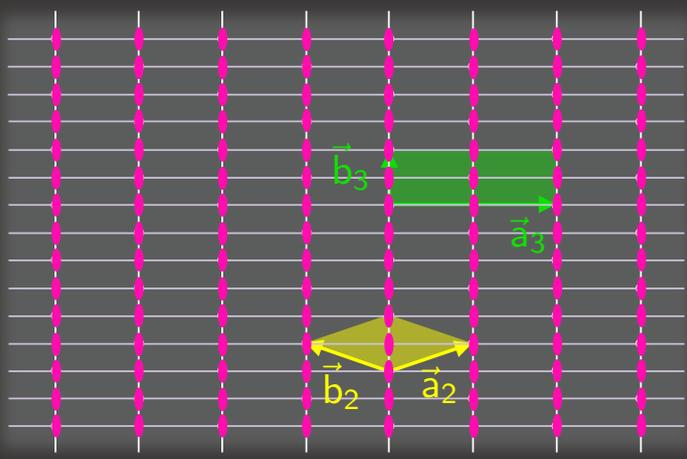


7 - Maille unitaire, maille conventionnelle

<p>maille 1 : simple $a_1 \neq b_1, \gamma_1 \neq 90^\circ$</p>		A_2
<p>maille 2 : simple $a_2 = b_2, \gamma_2 \neq 90^\circ$</p>		$A_2 \quad M \quad M'$
<p>maille 3 : double $a_3 \neq b_3, \gamma_3 = 90^\circ$</p>		$A_2 \quad M \quad M'$

7 - Maille unitaire, maille conventionnelle

symétrie du réseau



7 - Maille unitaire, maille conventionnelle

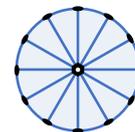
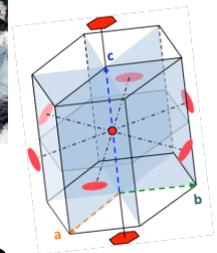
maille conventionnelle

- elle possède la symétrie du réseau
- ses axes sont parallèles aux directions de symétrie du réseau
- elle n'est pas forcément primitive



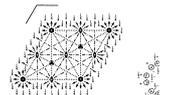
Plan du cours

- 1- Observation des symétries des cristaux naturels
- 2- Cause interne de la forme des cristaux naturels
- 3 - Réseau, maille, motif
- 4 – Rangées et plans réticulaires
- 5 – Réseau réciproque
- 6 - Réseau et symétries
- 7 - Maille unitaire, maille conventionnelle
- 8 – Projection stéréographique
- 9 – Roto-inversions
- 10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques
- 11 – Les 7 systèmes cristallins
- 12 – Les 14 réseaux de Bravais
- 13 – Les 230 groupes d'espace



$\frac{6}{m}$

$P6/mcc$ D_{6h}
No. 192 $P 6/m 2/c 2/c$

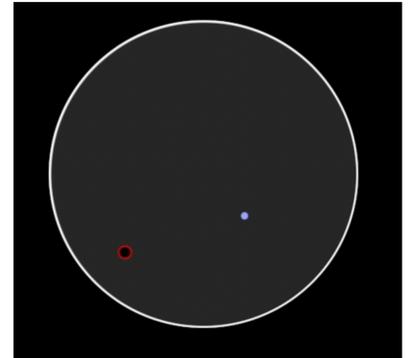
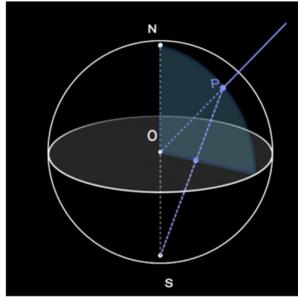


Origine au centre (0,0) et à 6 mm

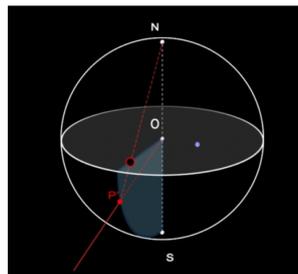


8 – Projection stéréographique

- Soit une **demi-droite** OP dans l'hémisphère nord issue de O et coupant la sphère en un point P .
- La projection stéréographique de OP est obtenue en reliant P au pôle Sud.
- On la représente par un point \bullet .



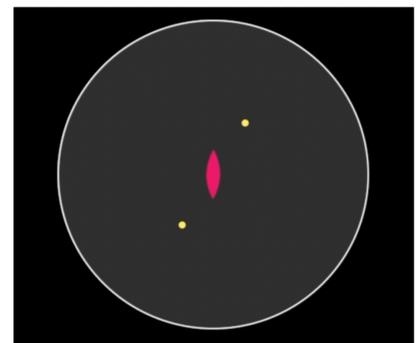
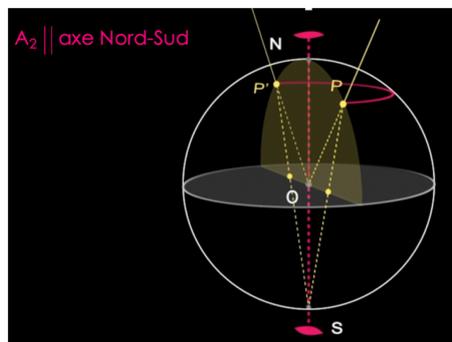
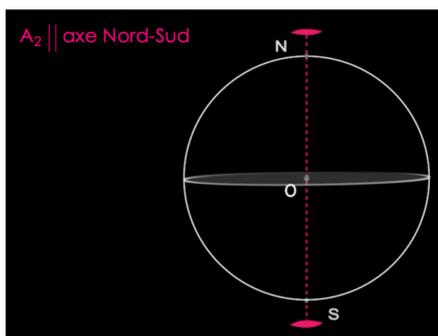
- Soit une **demi-droite** OP' dans l'hémisphère sud issue de O et coupant la sphère en un point P' .
- La projection stéréographique de OP' est obtenue en reliant P' au pôle Nord.
- On la représente par un rond : \circ .



CGE 2020- Delphine Cabaret

73

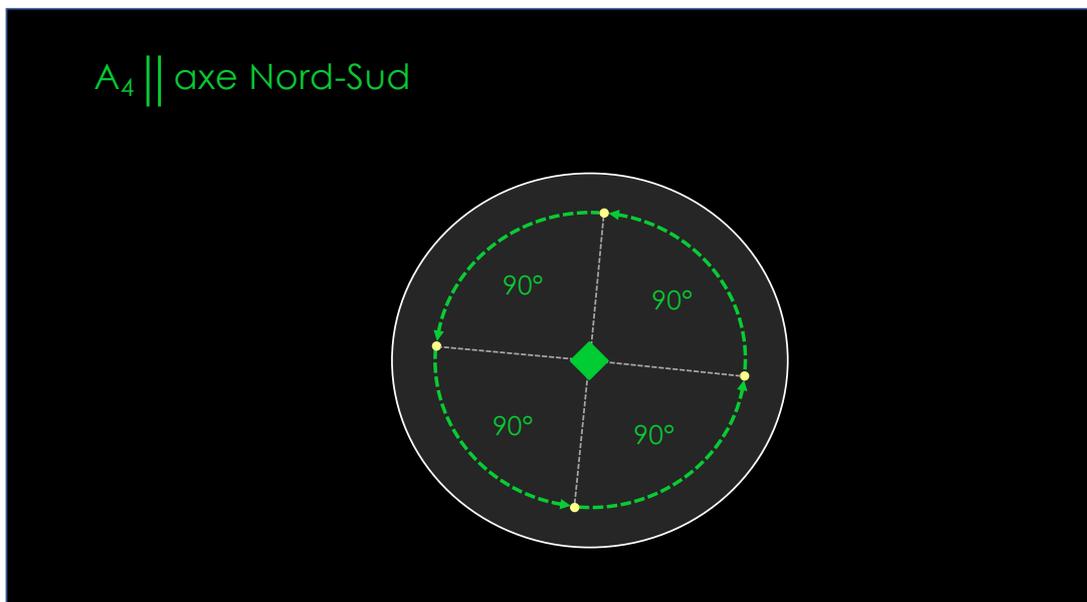
8 – Projection stéréographique



CGE 2020- Delphine Cabaret

74

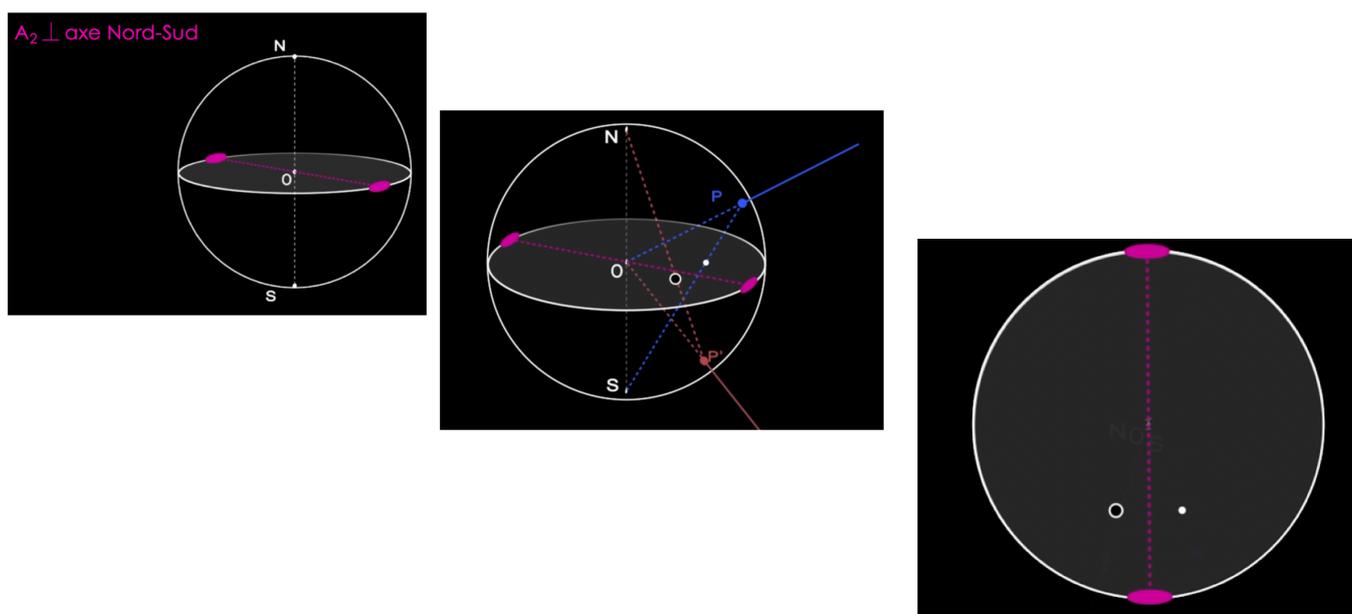
8 – Projection stéréographique



CGE 2020- Delphine Cabaret

75

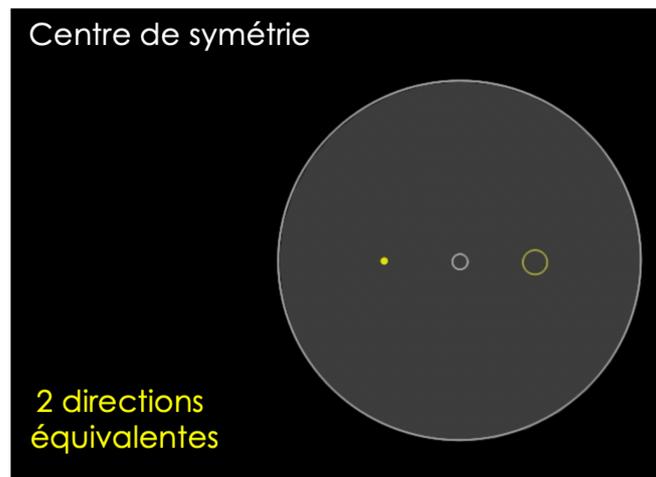
8 – Projection stéréographique



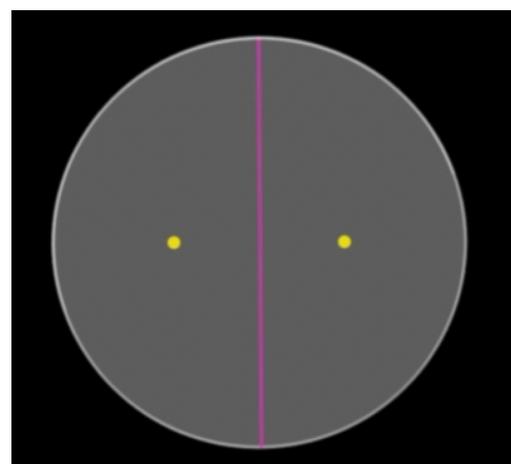
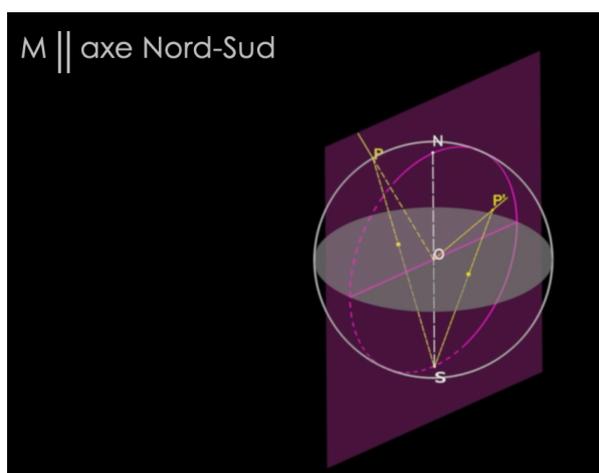
CGE 2020- Delphine Cabaret

76

8 – Projection stéréographique

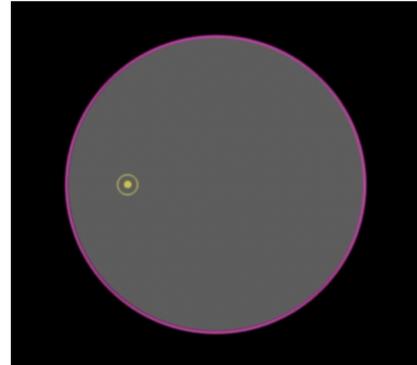
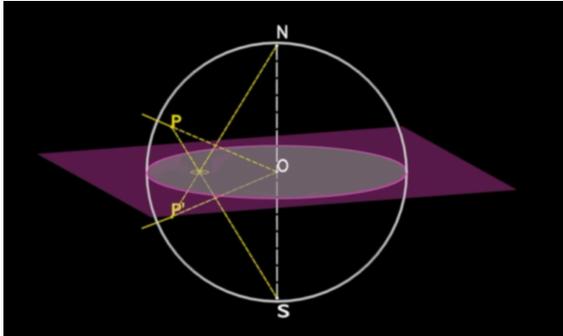


8 – Projection stéréographique



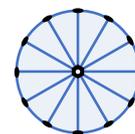
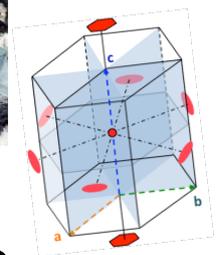
8 – Projection stéréographique

$M \perp$ axe Nord-Sud



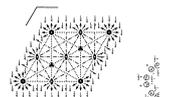
Plan du cours

- 1- Observation des symétries des cristaux naturels
- 2- Cause interne de la forme des cristaux naturels
- 3 - Réseau, maille, motif
- 4 – Rangées et plans réticulaires
- 5 – Réseau réciproque
- 6 - Réseau et symétries
- 7 - Maille unitaire, maille conventionnelle
- 8 – Projection stéréographique
- 9 – Roto-inversions
- 10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques
- 11 – Les 7 systèmes cristallins
- 12 – Les 14 réseaux de Bravais
- 13 – Les 230 groupes d'espace



$\frac{6}{m}$

$P6/mcc$ D_{6h}^{14}
No. 192 $P 6/m 2/c 2/c$



Origine au centre (0,0,0) et 6 axes

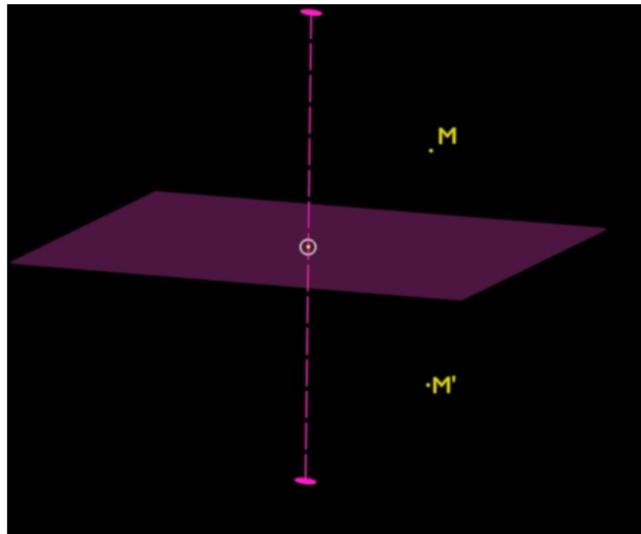


9 – Roto-inversions

$$M = A_2 \times C$$

$$M \equiv \bar{A}_2$$

roto-inversion d'ordre 2

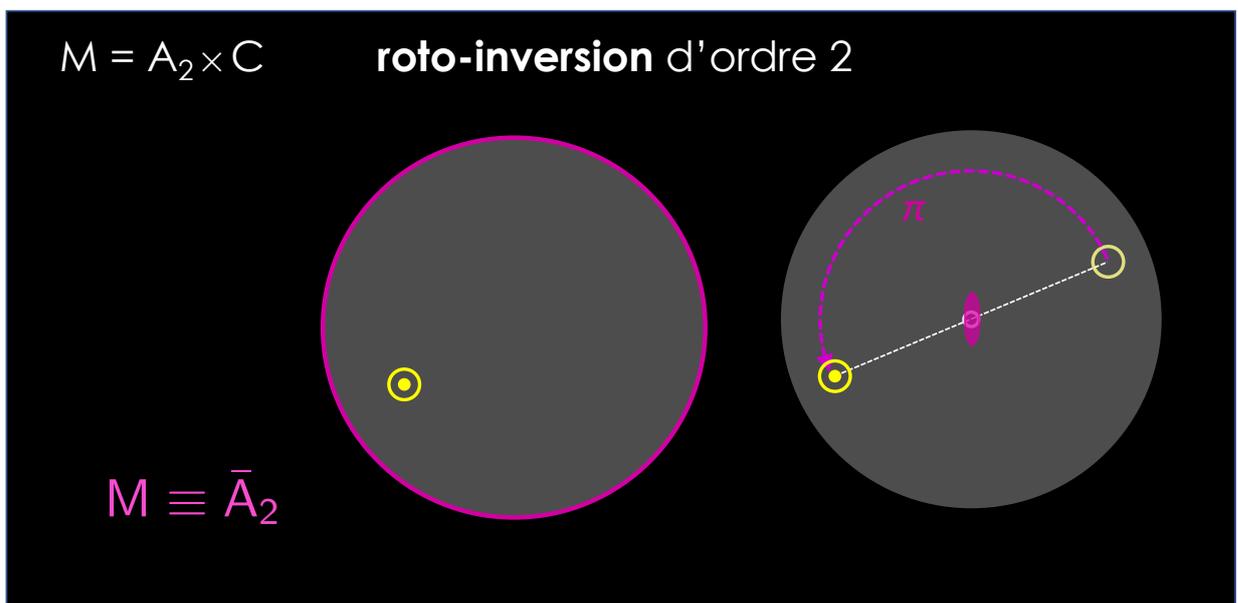


9 – Roto-inversions

$$M = A_2 \times C$$

$$M \equiv \bar{A}_2$$

roto-inversion d'ordre 2



9 – Roto-inversions

A_1	A_2	A_3	A_4	A_6	
identité					
1	2	3	4	6	← notation de Hermann-Mauguin

rotoinversion \bar{n} = rotation $\frac{2\pi}{n}$ × inversion

$C \equiv \bar{A}_1$	$M \equiv \bar{A}_2$	\bar{A}_3	\bar{A}_4	\bar{A}_6	
centre					
$\bar{1}$	m	$\bar{3}$	$\bar{4}$	$\bar{6}$	↙

9 – Roto-inversions

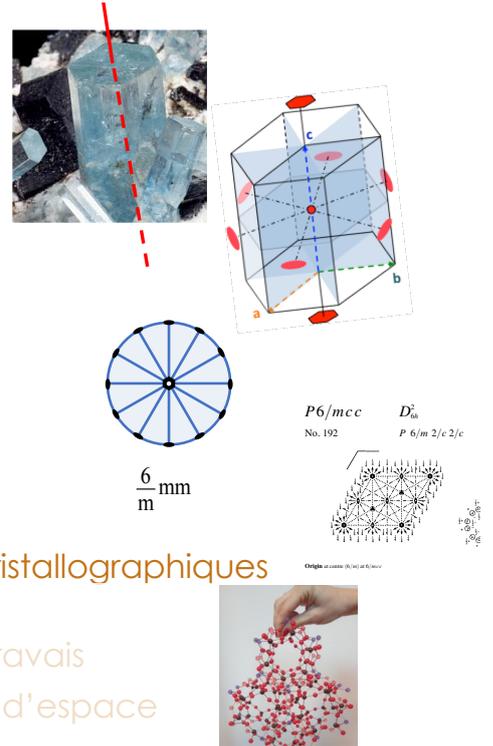
$\bar{4}$

axe $\bar{4}$

1 ↔ 3 }
2 ↔ 4 } }

Plan du cours

- 1- Observation des symétries des cristaux naturels
- 2- Cause interne de la forme des cristaux naturels
- 3 - Réseau, maille, motif
- 4 – Rangées et plans réticulaires
- 5 – Réseau réciproque
- 6 - Réseau et symétries
- 7 - Maille unitaire, maille conventionnelle
- 8 – Projection stéréographique
- 9 – Roto-inversions
- 10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques
- 11 – Les 7 systèmes cristallins
- 12 – Les 14 réseaux de Bravais
- 13 – Les 230 groupes d'espace



CGE 2020- Delphine Cabaret

85

10 – Groupes ponctuels cristallographiques

Les « combinaisons » possibles des 10 rotations et des 10 roto-inversions forment les **32 groupes ponctuels cristallographiques**, appelés aussi les **32 classes de symétrie d'orientation**.

groupe ponctuel : ensemble des éléments de symétrie passant par un point fixe

La symétrie des **propriétés physiques** macroscopiques d'un cristal découle de son groupe ponctuel cristallographique.

- ➔ propriétés physiques sensibles aux symétries des directions (qui sont invariantes sous l'action des translations)
- ➔ importance de connaître, pour un groupe ponctuel donné, les directions équivalentes à une direction par les opérations de symétrie qui définissent le groupe.

CGE 2020- Delphine Cabaret

86

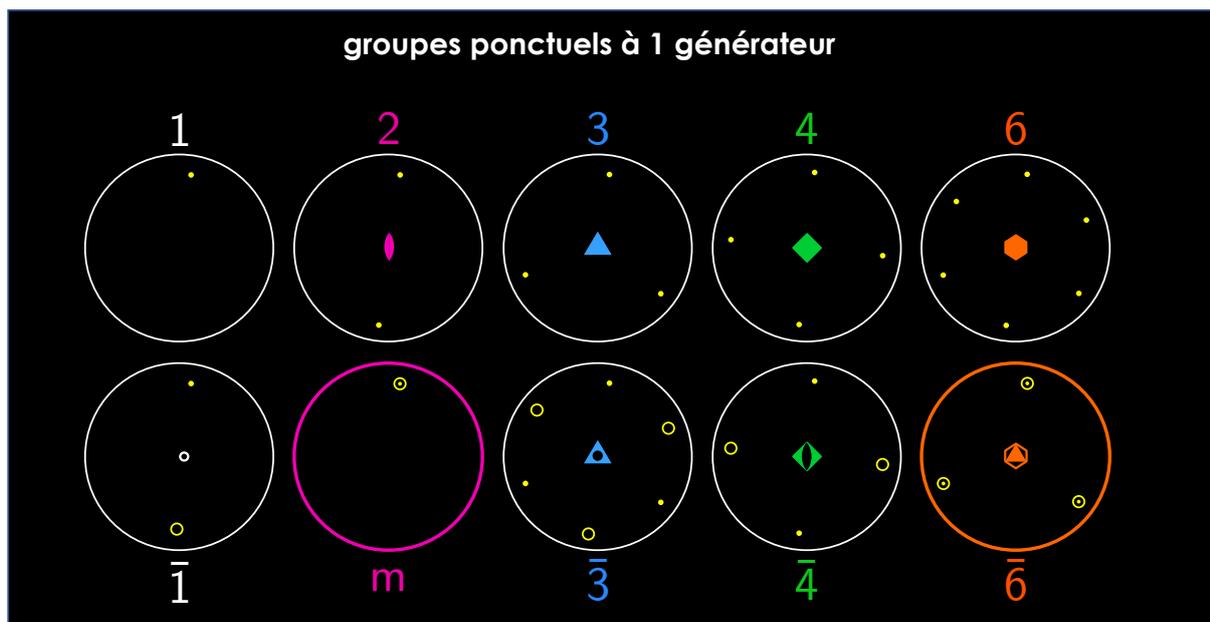
10 – Groupes ponctuels cristallographiques

2 CATEGORIES :

- Les groupes contenant PLUS d'un axe A_n avec $n > 2$
→ les 5 groupes cubiques
- Les autres groupes
→ les 27 groupes non cubiques

- On en connaît déjà 10 ! → groupes à 1 seul générateur
- Groupes à 2 ou 3 générateurs

10 – Groupes ponctuels cristallographiques



10 – Groupes ponctuels cristallographiques

groupes ponctuels à 2 générateurs

générateur 1	générateur 2
C	C
A_2 M	M
A_3 \bar{A}_3	A_2
A_4 \bar{A}_4	\perp ou \parallel à A_n et \bar{A}_n
A_6 \bar{A}_6	

14 groupes non-cubiques à 2 générateurs

A_2 et C

1 → 2 : ?

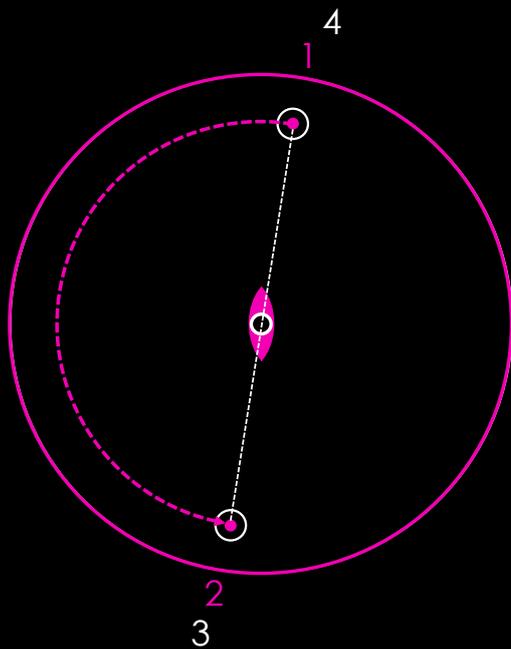
1 → 3 : ?

1 → 4 : ?

1 → 3

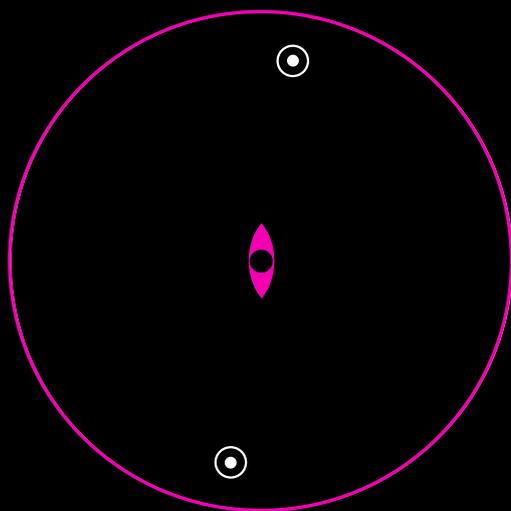
2 → 4

A_2 et C



- 1 \longrightarrow 2 : 
- 1 \longrightarrow 3 : 
- 1 \longrightarrow 4 : M

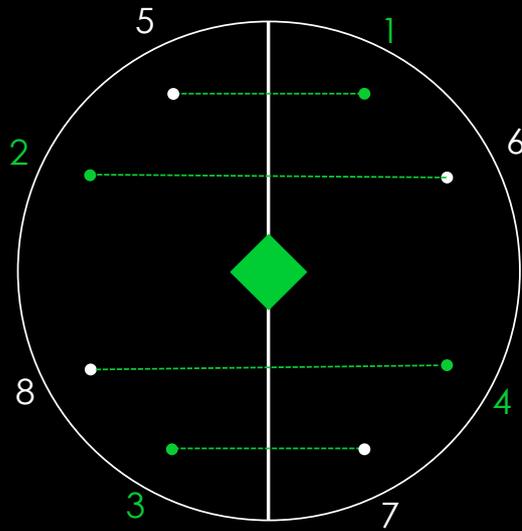
A_2 et C



$\frac{A_2}{M} C$

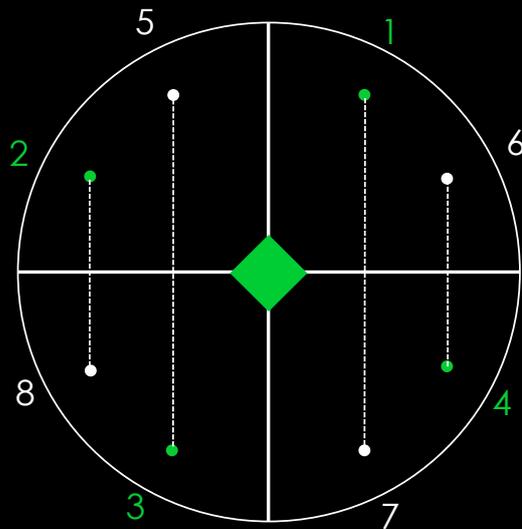
2
—
m

A_4 et $M \parallel$



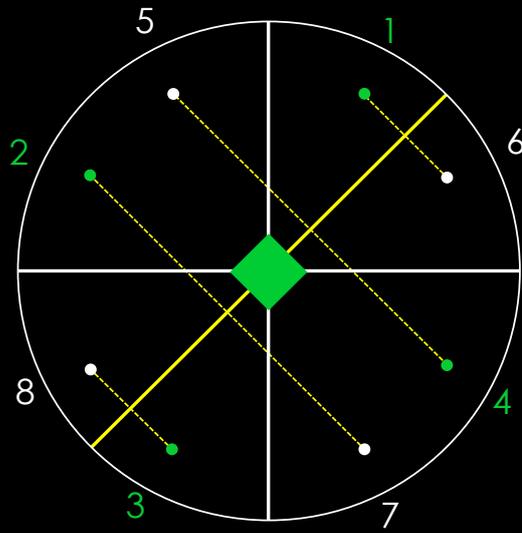
8 directions
équivalentes

A_4 et $M \parallel$



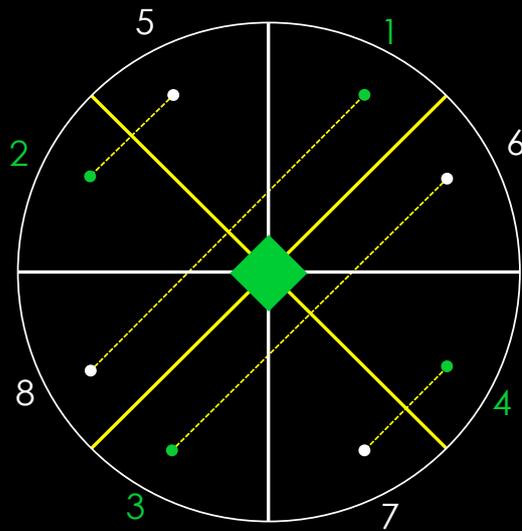
$\left. \begin{array}{l} 1 \rightarrow 7 \\ 2 \rightarrow 8 \\ 3 \rightarrow 5 \\ 4 \rightarrow 6 \end{array} \right\} M -$

A_4 et $M \parallel$



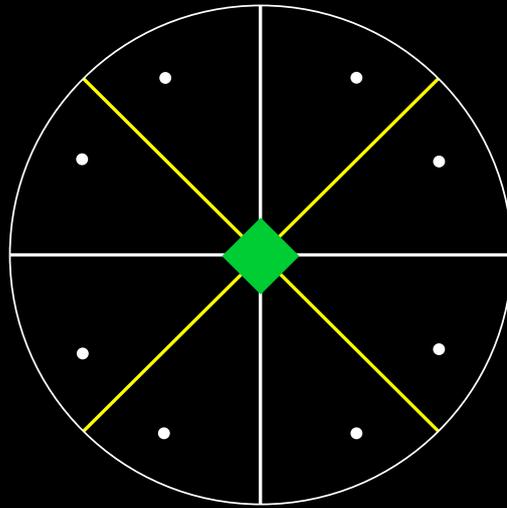
- 1 → 6
 - 2 → 7
 - 3 → 8
 - 4 → 5
- } $M' \parallel$

A_4 et $M \parallel$



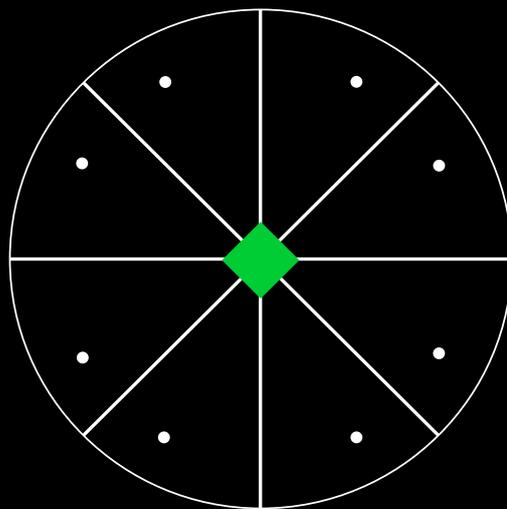
- 1 → 8
 - 2 → 5
 - 3 → 6
 - 4 → 7
- } $M' \parallel$

A_4 et $M \parallel$



A_4 2M 2M'

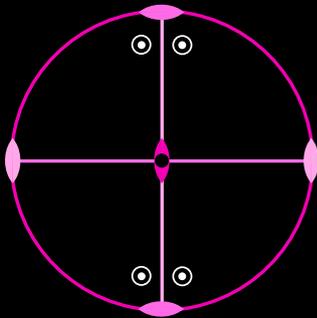
A_4 et $M \parallel$



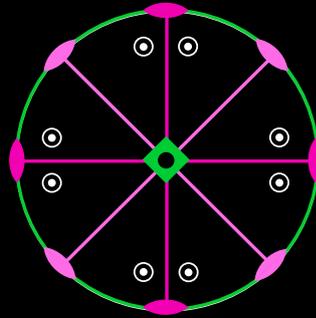
A_4 2M 2M'

4 m m

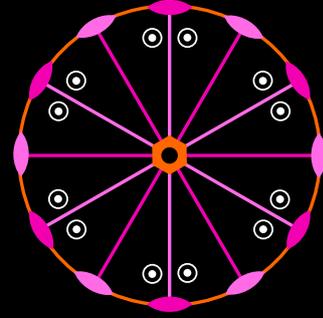
$m m m$



$\frac{4}{m} m m$



$\frac{6}{m} m m$



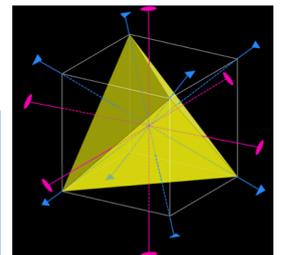
3 groupes ponctuels non-cubiques à 3 générateurs

10 – Groupes ponctuels cristallographiques

Les 5 groupes ponctuels cubiques

- Ils contiennent **au minimum** 4 A_3 (orientés selon les directions $\langle 111 \rangle$) et 3 A_2 (orientés selon les directions $\langle 100 \rangle$)

$3 A_2 \ 4 A_3$	$2 \ 3$	T	groupe des rotations du tétraèdre régulier
$\frac{3 A_2}{3 M} \ 4 \bar{A}_3 \ C$	$m \ \bar{3}$	T_h	obtenu en ajoutant un centre à 2 3
$3 \bar{A}_4 \ 4 A_3 \ 6 M'$	$\bar{4} \ 3 \ m$	T_d	obtenu à partir de 2 3 en remplaçant les A_2 par des \bar{A}_4 groupe de symétrie du tétraèdre régulier
$3 A_4 \ 4 A_3 \ 6 A'_2$	$4 \ 3 \ 2$	O	obtenu à partir de 2 3 en remplaçant les A_2 par des A_4 groupe des rotations de l'octaèdre régulier
$\frac{3 A_4}{3 M} \ 4 \bar{A}_3 \ \frac{6 A'_2}{6 M'} \ C$	$m \ \bar{3} \ m$	O_h	obtenu en ajoutant un centre à 4 3 2 groupe de symétrie de l'octaèdre régulier



10 – Groupes ponctuels cristallographiques

Les 5 groupes ponctuels cubiques

T	$3 A_2$	$4 A_3$		$2 3$
T _h	$\frac{3 A_2}{3 M}$	$4 \bar{A}_3$	C	$m \bar{3}$
T _d	$3 \bar{A}_4$	$4 A_3$	$6 M'$	$\bar{4} 3 m$
O	$3 A_4$	$4 A_3$	$6 A'_2$	$4 3 2$
O _h	$\frac{3 A_4}{3 M}$	$4 \bar{A}_3$	$\frac{6 A'_2}{6 M'}$	C $m \bar{3} m$

↙ directions $\langle 001 \rangle$ ↗

10 – Groupes ponctuels cristallographiques

Les 5 groupes ponctuels cubiques

T	$3 A_2$	$4 A_3$		$2 3$
T _h	$\frac{3 A_2}{3 M}$	$4 \bar{A}_3$	C	$m \bar{3}$
T _d	$3 \bar{A}_4$	$4 A_3$	$6 M'$	$\bar{4} 3 m$
O	$3 A_4$	$4 A_3$	$6 A'_2$	$4 3 2$
O _h	$\frac{3 A_4}{3 M}$	$4 \bar{A}_3$	$\frac{6 A'_2}{6 M'}$	C $m \bar{3} m$

↙ directions $\langle 111 \rangle$ ↗

10 – Groupes ponctuels cristallographiques

Les 5 groupes ponctuels cubiques

T	$3 A_2$	$4 A_3$		$2 3$
T _h	$\frac{3 A_2}{3 M}$	$4 \bar{A}_3$	C	$m \bar{3}$
T _d	$3 \bar{A}_4$	$4 A_3$	$6 M'$	$\bar{4} 3 m$
O	$3 A_4$	$4 A_3$	$6 A'_2$	$4 3 2$
O _h	$\frac{3 A_4}{3 M}$	$4 \bar{A}_3$	$\frac{6 A'_2}{6 M'}$	C $m \bar{3} m$

directions $\langle 011 \rangle$

10 – Groupes ponctuels cristallographiques

Les 5 groupes ponctuels cubiques

T	$3 A_2$	$4 A_3$		$2 3$
T _h	$\frac{3 A_2}{3 M}$	$4 A_3$	C	$m \bar{3}$
T _d	$3 \bar{A}_4$	$4 A_3$	$6 M'$	$\bar{4} 3 m$
O	$3 A_4$	$4 A_3$	$6 A'_2$	$4 3 2$
O _h	$\frac{3 A_4}{3 M}$	$4 A_3$	$\frac{6 A'_2}{6 M'}$	C $m \bar{3} m$

10 – Groupes ponctuels cristallographiques

Les 5 groupes ponctuels cubiques

T	$3 A_2$	$4 A_3$	$2 3$
T_h	$\frac{3 A_2}{3 M}$	$4 \bar{A}_3$	$C \quad m \bar{3}$
T_d	$3 \bar{A}_4$	$4 A_3$	$6 M'$
O	$3 A_4$	$4 A_3$	$6 A'_2$
O_h	$\frac{3 A_4}{3 M}$	$4 \bar{A}_3$	$\frac{6 A'_2}{6 M'} \quad C \quad m \bar{3} m$

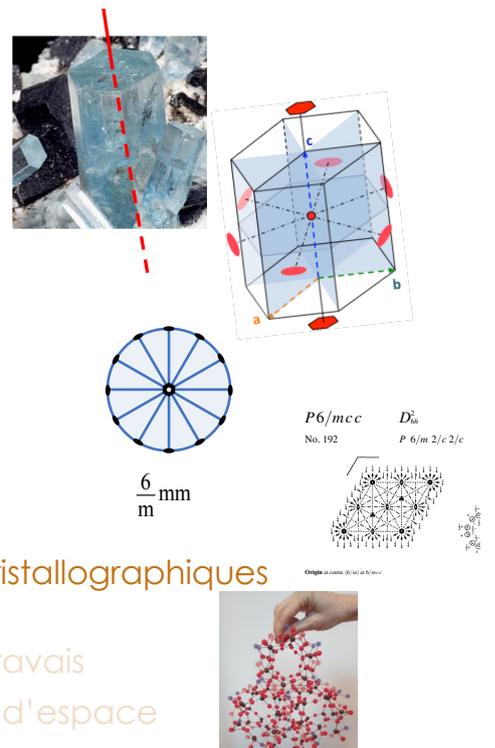
holoédrie

CGE 2020- Delphine Cabaret

105

Plan du cours

- 1- Observation des symétries des cristaux naturels
- 2- Cause interne de la forme des cristaux naturels
- 3 - Réseau, maille, motif
- 4 – Rangées et plans réticulaires
- 5 – Réseau réciproque
- 6 - Réseau et symétries
- 7 - Maille unitaire, maille conventionnelle
- 8 – Projection stéréographique
- 9 – Roto-inversions
- 10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques
- 11 – Les 7 systèmes cristallins
- 12 – Les 14 réseaux de Bravais
- 13 – Les 230 groupes d'espace



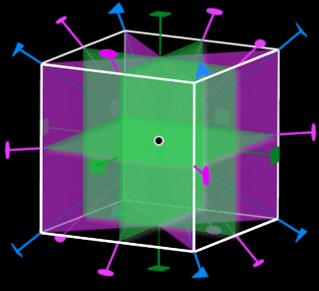
CGE 2020- Delphine Cabaret

106

11 – Systèmes cristallins

On peut classer les **32 groupes ponctuels cristallographiques** en **7 systèmes cristallins**.

systeme cubique



23
 $m\bar{3}$
 $\bar{4}3m$
 432
 $m\bar{3}m$ ← holoédrie

$a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

CGE 2020- Delphine Cabaret

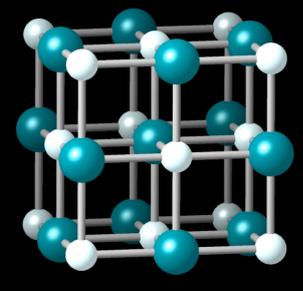
107

11 – Systèmes cristallins

On peut classer les **32 groupes ponctuels cristallographiques** en **7 systèmes cristallins**.

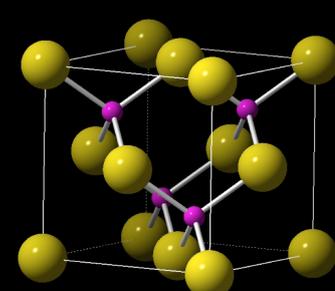
symétrie du cristal \leq symétrie du réseau

NaCl



$m\bar{3}m$

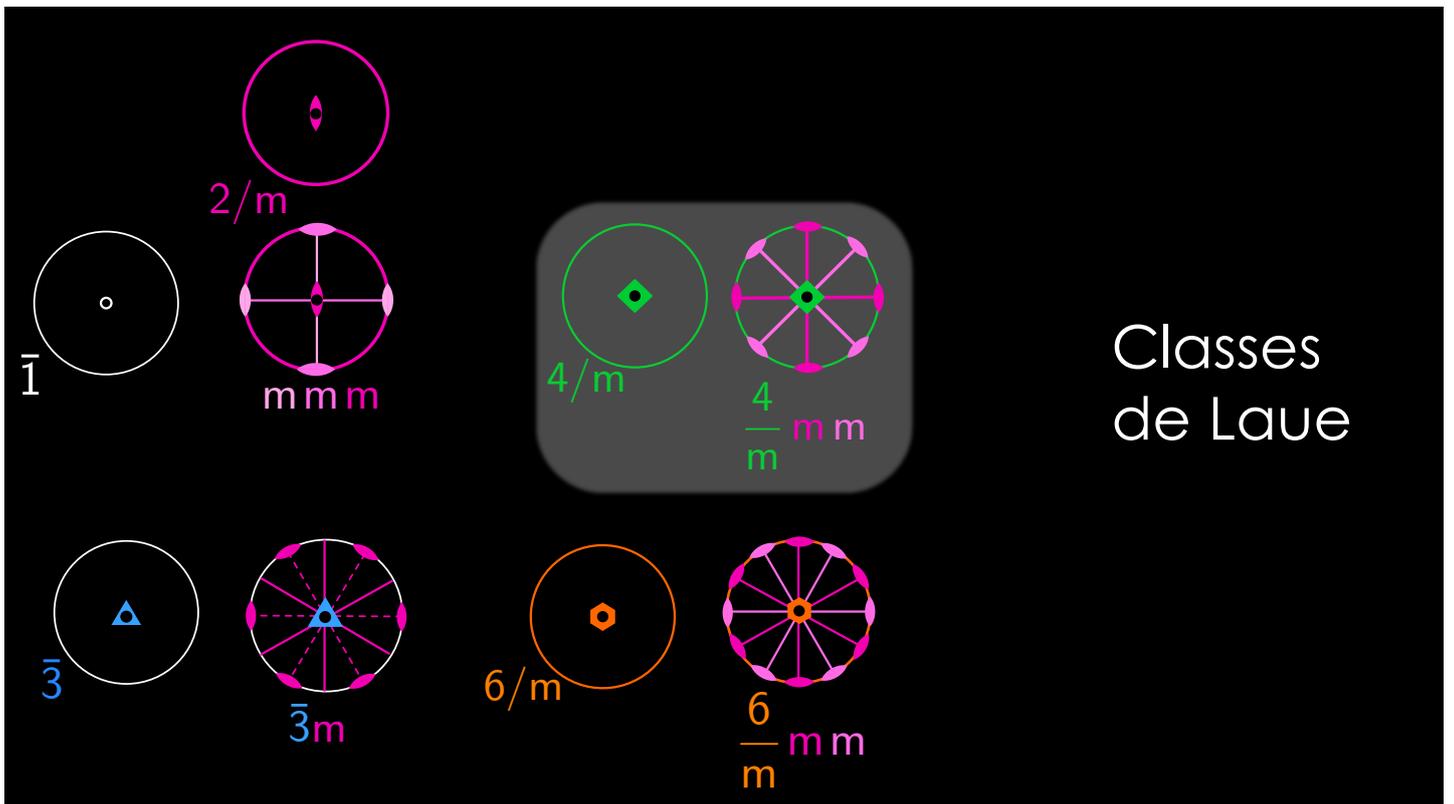
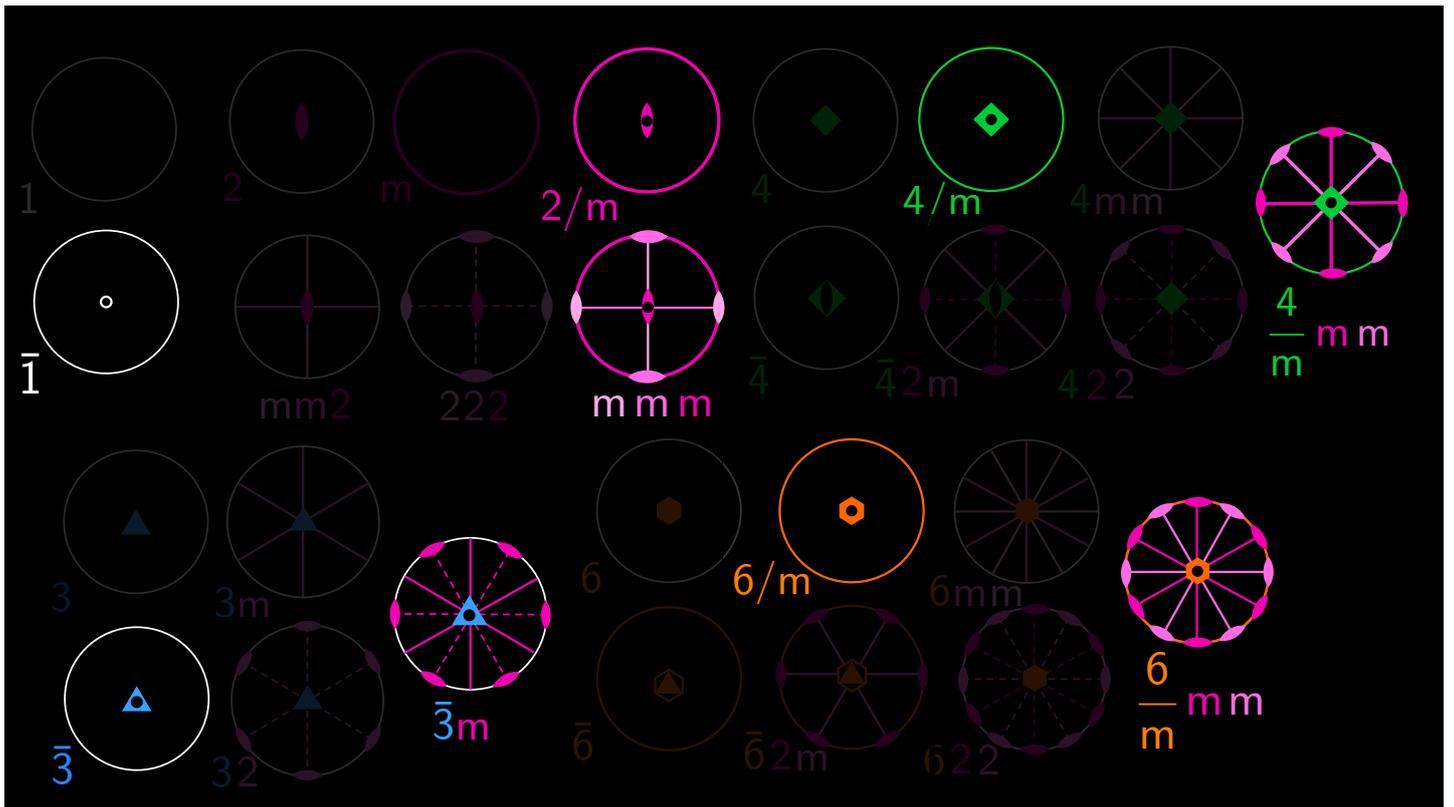
ZnS - blende



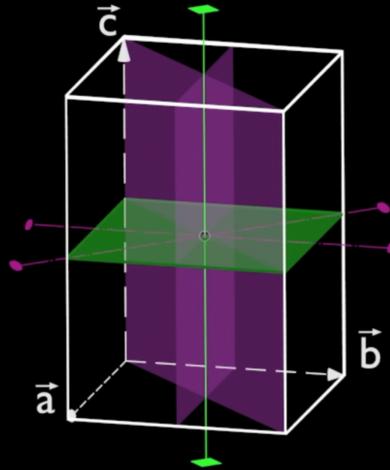
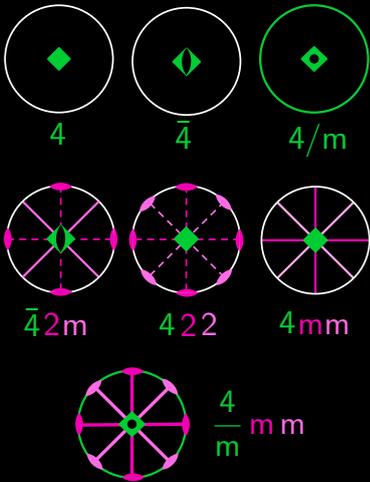
$\bar{4}3m$

CGE 2020- Delphine Cabaret

108

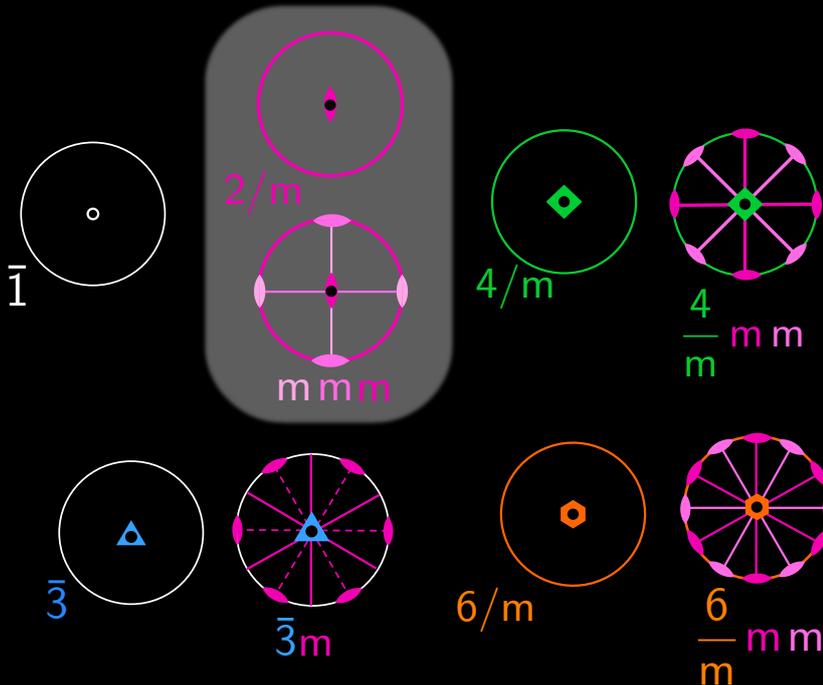


systeme quadratique



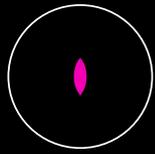
$a = b$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

direction $[001]$
 directions $[100]$ et $[010]$
 directions $[110]$ et $[\bar{1}10]$



Classes de Laue

système monoclinique



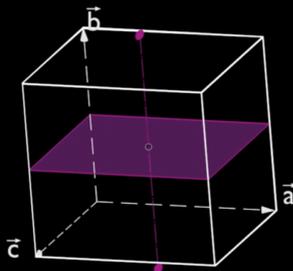
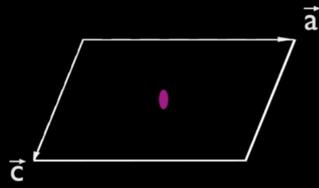
2



m

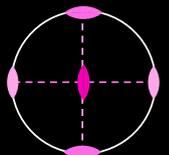


2/m



$$\alpha = \gamma = 90^\circ$$

système orthorhombique



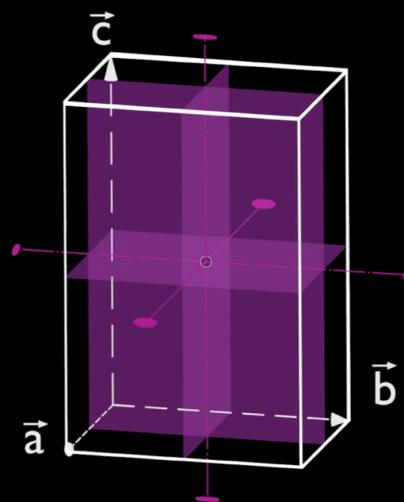
2 2 2



m m 2



m m m



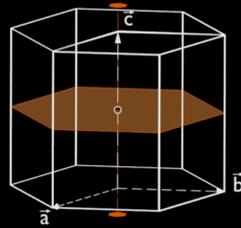
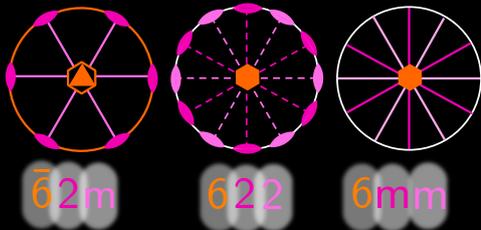
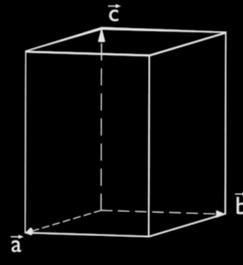
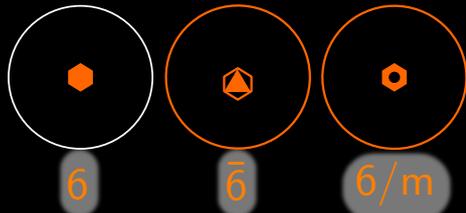
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

direction [100]

direction [010]

direction [001]

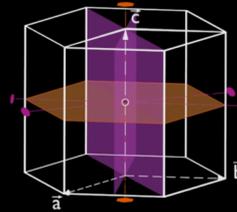
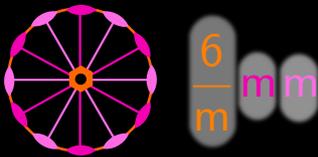
système hexagonal



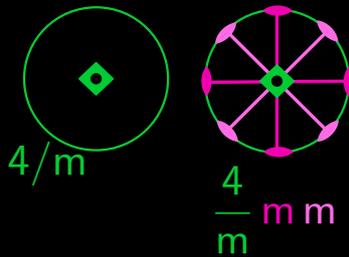
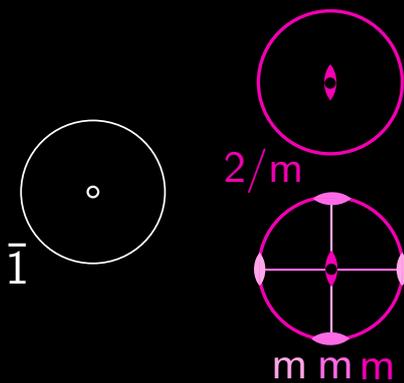
$a = b$
 $\gamma = 120^\circ$
 $\alpha = \beta = 90^\circ$

direction [001]

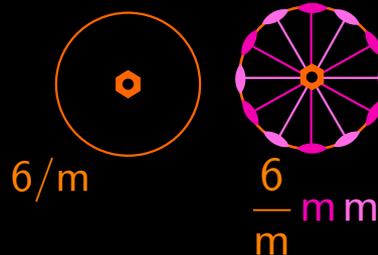
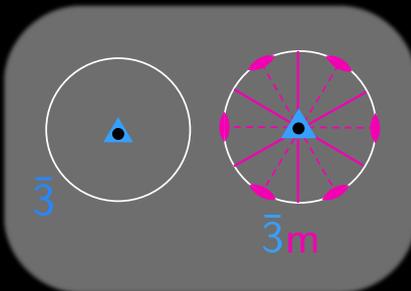
directions
 $[100]$, $[010]$, $[\bar{1}\bar{1}0]$



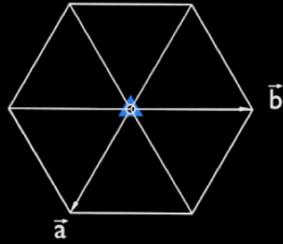
directions
 $[1\bar{1}0]$, $[120]$, $[\bar{2}\bar{1}0]$



Classes de Laue



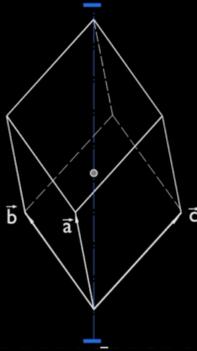
systeme trigonal



maille rhomboédrique

$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma$$



systeme trigonal



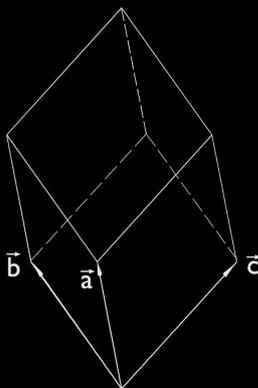
32

3m

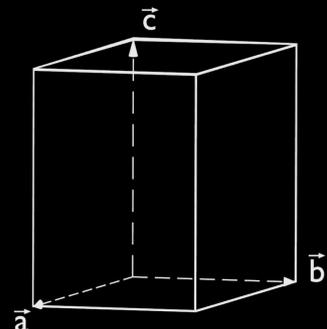


3m

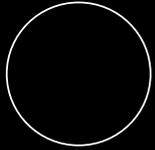
systeme d'axes rhomboédriques



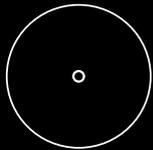
systeme d'axes hexagonaux



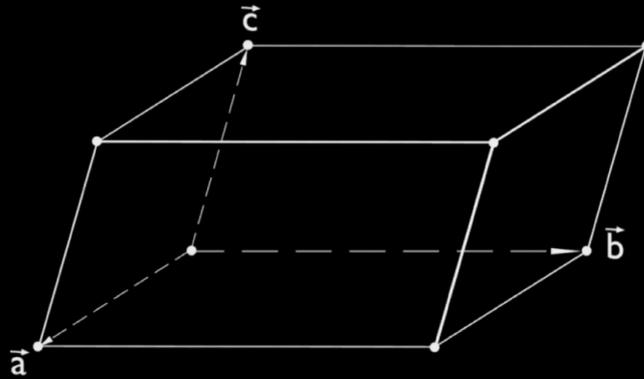
système triclinique



1



$\bar{1}$



11 – Systèmes cristallins

Classement des 32 groupes ponctuels

symétrie du cristal \leq symétrie du réseau

On a classé les 32 groupes ponctuels en se basant sur la triple périodicité, donc sur la symétrie du réseau, ce qui définit deux critères :

1. tout réseau est centrosymétrique.
2. tout réseau qui possède un axe de symétrie d'ordre $n > 2$ présente n miroirs parallèles à cet axe.

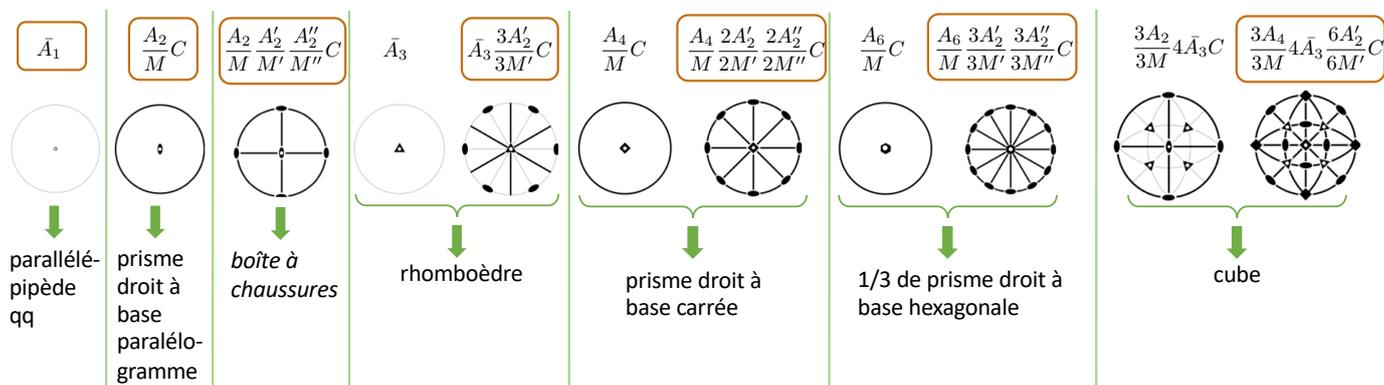
→ Les 11 classes de Laue (critère 1) conduisent à 7 holoédries (critère 2), qui sont chacune associées à un système cristallin (avec des restrictions sur les paramètres de maille).

→ Les 25 autres groupes sont de symétrie inférieure. Pour retrouver la symétrie de leur réseau, il suffit d'ajouter aux éléments de symétrie du groupe ceux qui sont nécessaires pour satisfaire les critères 1 et 2.

11 – Systèmes cristallins

Les 11 classes de Laue ne définissent pas 11 réseaux différents (11 mailles différentes), mais seulement 7.

En utilisant le critère 2 sur la symétrie des réseaux, on définit **7 holoédries**, conduisant aux **7 systèmes cristallins**.



11 – Systèmes cristallins

Système cristallin	étendue	Notations		Ordre du groupe
		Hermann-Mauguin	Schoenflies	
triclinique	A_1	1	C_1	1
	C	$\bar{1}$	$C_i \equiv S_2$	2
monoclinique	A_2	2	C_2	2
	$M \equiv \bar{A}_2$	m	$C_{1h} \equiv C_s$	2
	$\frac{A_2}{M} C$	$2/m$	C_{2h}	4
orthorhombique	$A_2 M' M''$	$m m 2$	C_{2v}	4
	$A_2 A'_2 A''_2$	$2 2 2$	D_2	4
	$\frac{A_2}{M} \frac{A'_2}{M'} \frac{A''_2}{M''} C$	$m m m$	D_{2h}	8
quadratique	A_4	4	C_4	4
	\bar{A}_4	4	S_4	4
	$A_4 2M' 2M''$	$4 m m$	C_{4v}	8
	$\frac{A_4}{M} C$	$4/m$	C_{4h}	8
	$\bar{A}_4 2A'_2 2M''$	$\bar{4} 2 m$	D_{2d}	8
	$A_4 2A'_2 2A''_2$	$4 2 2$	D_4	8
	$\frac{A_4}{M} \frac{2A'_2}{2M'} \frac{2A''_2}{2M''} C$	$4/m m m$	D_{4h}	16

11 – Systèmes cristallins

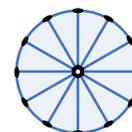
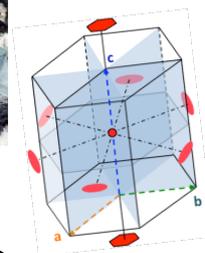
trigonal	A_3	3	C_3	3
	\bar{A}_3	$\bar{3}$	$C_{3i} \equiv S_6$	6
	$A_3 3M'$	3 m	C_{3v}	6
	$A_3 3A'_2$	3 2	D_3	6
	$\bar{A}_3 \frac{3A'_2}{3M'} C$	$\bar{3} m$	D_{3d}	12
hexagonal	A_6	6	C_6	6
	\bar{A}_6	$\bar{6}$	$C_{3h} \equiv S_3$	6
	$A_6 3M' 3M''$	6 $m m$	C_{6v}	12
	$\frac{A_6}{M} C$	6/ m	C_{6h}	12
	$\bar{A}_6 3A'_2 3M''$	$\bar{6} 2 m$	D_{3h}	12
	$A_6 3A'_2 3A''_2$	6 2 2	D_6	12
	$\frac{A_6}{M} \frac{3A'_2}{3M'} \frac{3A''_2}{3M''} C$	6/ $m m m$	D_{6h}	24
cubique	$3A_2 4A_3$	2 3	T	12
	$\frac{3A_2}{3M} 4\bar{A}_3 C$	$m \bar{3}$	T_h	24
	$3\bar{A}_4 4A_3 6M'$	$\bar{4} 3 m$	T_d	24
	$3A_4 4A_3 6A'_2$	4 3 2	O	24
	$\frac{3A_4}{3M} 4\bar{A}_3 \frac{6A'_2}{6M'} C$	$m \bar{3} m$	O_h	48

CGE 2020- Delphine Cabaret

125

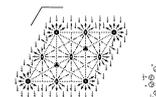
Plan du cours

- 1- Observation des symétries des cristaux naturels
- 2- Cause interne de la forme des cristaux naturels
- 3 - Réseau, maille, motif
- 4 – Rangées et plans réticulaires
- 5 – Réseau réciproque
- 6 - Réseau et symétries
- 7 - Maille unitaire, maille conventionnelle
- 8 – Projection stéréographique
- 9 – Roto-inversions
- 10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques
- 11 – Les 7 systèmes cristallins
- 12 – Les 14 réseaux de Bravais
- 13 – Les 230 groupes d'espace

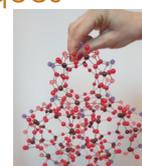


$\frac{6}{m}$ mm

$P6/mcc$ D_{6h}
No. 192 $P 6/m 2/c 2/c$



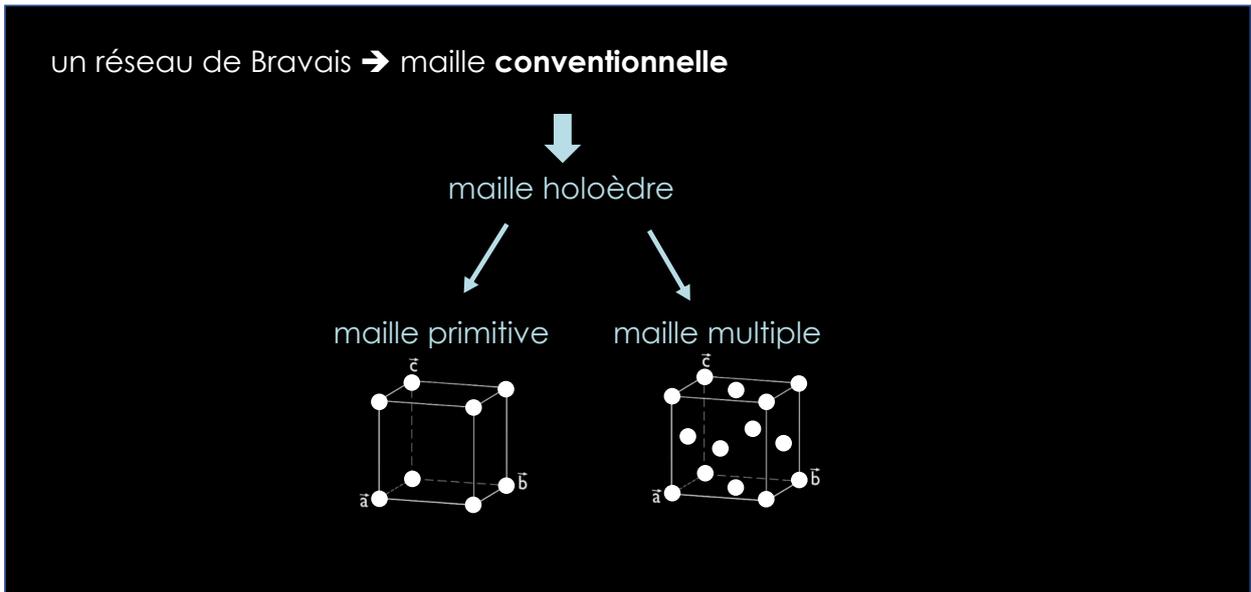
Origine au centre (0,0,0) et 6 axes



CGE 2020- Delphine Cabaret

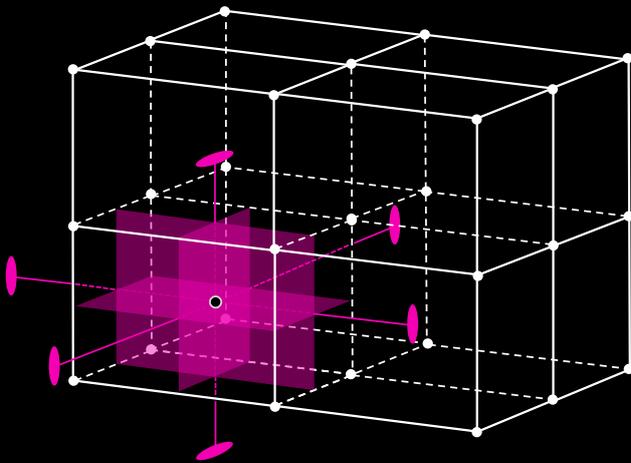
126

12 – Les 14 réseaux de Bravais



Est-il possible d'**ajouter des nœuds** en respectant la **symétrie du réseau** ?

Si oui, à **quelles positions** dans le réseau ?



- centre de la maille
- centre des faces
- milieu des arêtes

12 – Les 14 réseaux de Bravais

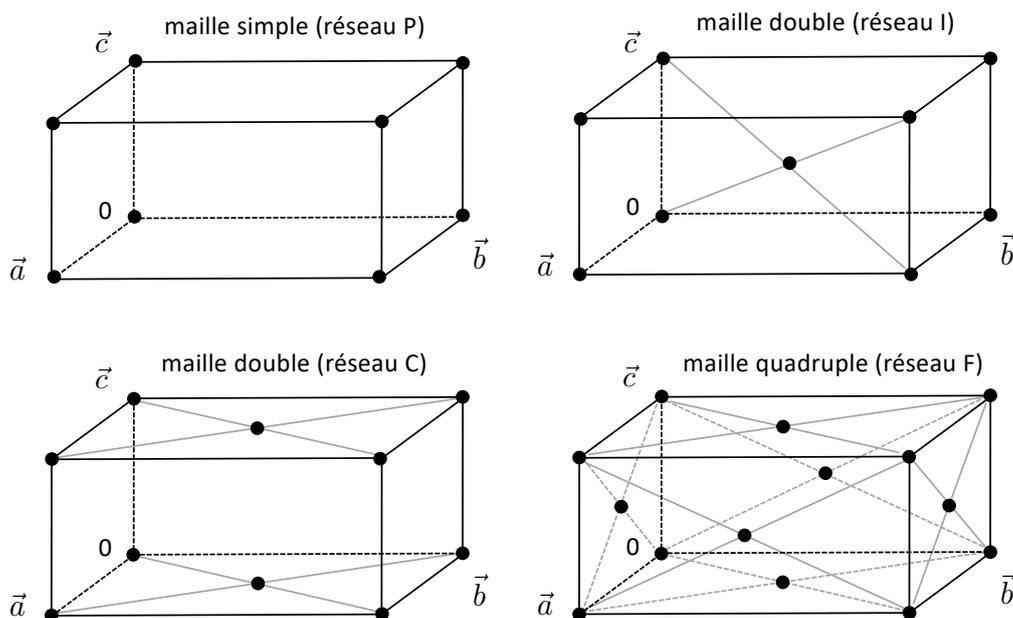
mailles multiples à 3D

Translations	Maille	Réseau	Multiplicité
$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$	simple ou primitive	P	1
$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}, \frac{\vec{b}+\vec{c}}{2}$	centrée sur face (\vec{b}, \vec{c})	A	2
$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}, \frac{\vec{a}+\vec{c}}{2}$	centrée sur face (\vec{a}, \vec{c})	B	
$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}, \frac{\vec{a}+\vec{b}}{2}$	centrée sur face (\vec{a}, \vec{b})	C	
$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}, \frac{\vec{a}+\vec{b}}{2}, \frac{\vec{b}+\vec{c}}{2}, \frac{\vec{a}+\vec{c}}{2}$	faces centrées	F	4
$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}, \frac{\vec{a}+\vec{b}+\vec{c}}{2}$	centrée	I	2

→ 4 modes de réseau (i.e. 4 groupes de translations)

12 – Les 14 réseaux de Bravais

mailles multiples à 3D

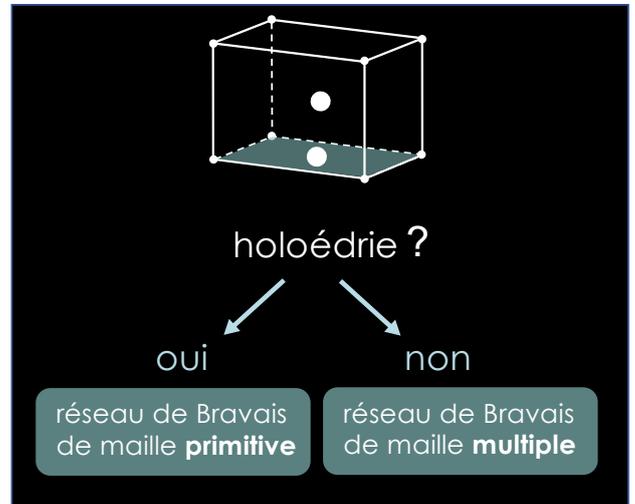


12 – Les 14 réseaux de Bravais

réseau de Bravais : associe un système cristallin à un mode de réseau

7 systèmes cristallins } 28 possibilités ?
4 modes de réseau

→ seulement 14 réseaux de Bravais

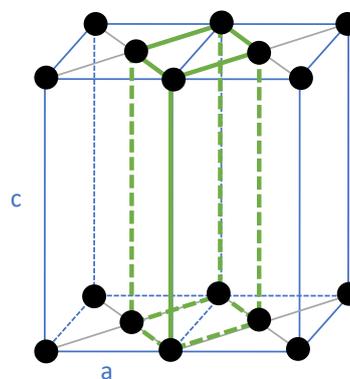


12 – Les 14 réseaux de Bravais

→ quadratique P (tP)
→ quadratique I (tI)

« tetragonal »

Pourquoi le réseau quadratique C n'existe-t-il pas ?



On peut définir
une maille quadratique plus petite
de paramètres
 $a' = a / \sqrt{2}$
 $c' = c$

→ se ramène à un réseau de Bravais **quadratique P**

12 – Les 14 réseaux de Bravais

→ cubique P (cP)

→ cubique I (cI)

→ cubique F (cF)

→ orthorhombique P (oP)

→ orthorhombique I (oI)

→ orthorhombique
à base centrée (oS)

oA oB oC

→ orthorhombique F (oF)

12 – Les 14 réseaux de Bravais

→ triclinique P (aP)

« anortique »

→ monoclinique P (mP)

→ monoclinique
de maille double (mS)

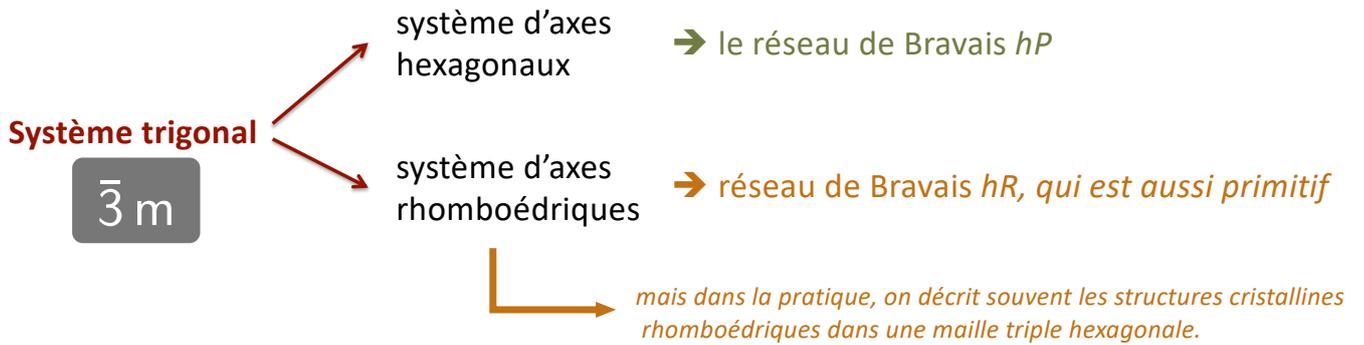
axe unique \vec{b}

mC mA mI

Il en reste 2...

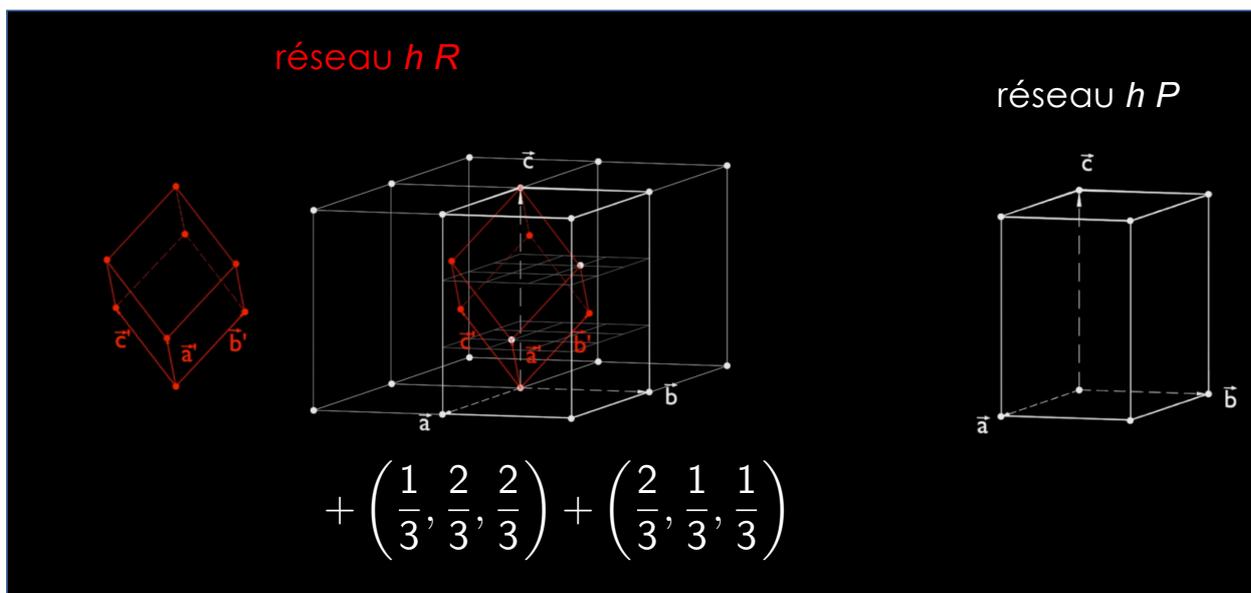
12 – Les 14 réseaux de Bravais

Système hexagonal → un seul réseau de Bravais *hP*



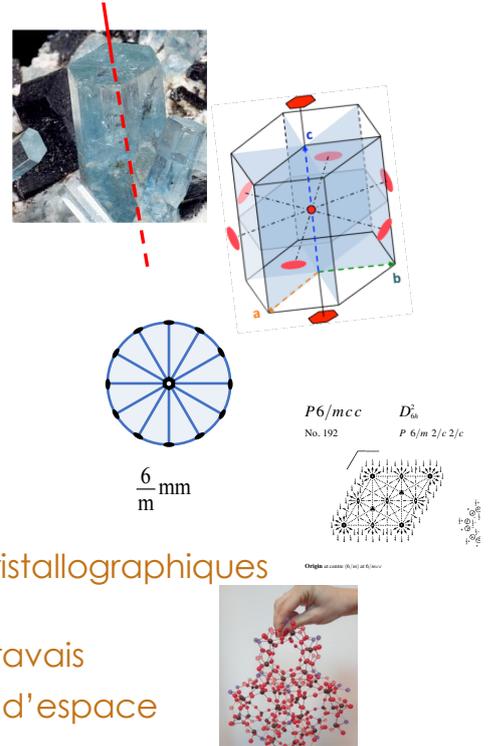
12 – Les 14 réseaux de Bravais

cas particulier du réseau *hR*



Plan du cours

- 1- Observation des symétries des cristaux naturels
- 2- Cause interne de la forme des cristaux naturels
- 3 - Réseau, maille, motif
- 4 – Rangées et plans réticulaires
- 5 – Réseau réciproque
- 6 - Réseau et symétries
- 7 - Maille unitaire, maille conventionnelle
- 8 – Projection stéréographique
- 9 – Roto-inversions
- 10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques
- 11 – Les 7 systèmes cristallins
- 12 – Les 14 réseaux de Bravais
- 13 – Les 230 groupes d'espace



CGE 2020- Delphine Cabaret

137

13 – Groupes d'espace

Symétrie d'orientation → les 32 groupes ponctuels
ensemble des opérations de symétrie qui laissent invariantes
la morphologie d'un cristal et ses propriétés physiques



7 systèmes cristallins



+ 4 modes de réseau
(groupes de translations)

14 réseaux de Bravais



Symétrie de position → les 230 groupes d'espace

ensemble des opérations de symétrie qui laissent invariante la structure atomique invariante

Tables Internationales de Cristallographie volume A

CGE 2020- Delphine Cabaret

138

13 – Groupes d'espace

Les groupes symorphiques (73)

Association des éléments de symétrie des groupes ponctuels avec les translations des réseaux de Bravais (les générateurs **ne sont pas** des axes hélicoïdaux où des miroirs avec glissement)

Notation Hermann-Mauguin : Lettre du mode réseau (P, A, B, C, I, F) suivie du nom du groupe ponctuel en Hermann-Mauguin

ex : $P m m m$, $F m m m$, $P 4 m m$, $I 4 m m$

Les groupes non-symorphiques (157)

Groupes d'espace dont des éléments générateurs sont des éléments de symétrie translatoires (axes hélicoïdaux, miroirs avec glissement)

ex : $I b a 2$, $P 4_1$, $P 4_2 c m$

139

13 – Groupes d'espace

Éléments de symétrie de position

- Les éléments de symétrie des groupes ponctuels
- Des éléments de symétrie *translatoires* : miroirs avec glissement et axes hélicoïdaux
 - Mise en évidence par les produits $A_n \times \vec{t}$ et $m \times \vec{t}$

13 – Groupes d'espace

Symétrie de position : miroir × translation de réseau

miroir m

×

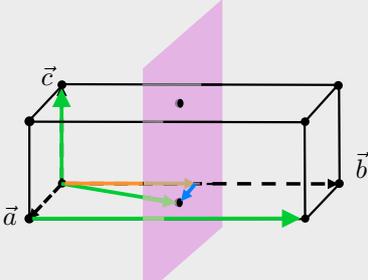
\vec{t}

cas n°1 : $\vec{t} \parallel$ miroir $\vec{t} = \vec{c}$

cas n°2 : $\vec{t} \perp$ miroir $\vec{t} = \vec{b}$

cas n°3 : \vec{t} oblique / miroir $\vec{t} = \frac{\vec{a} + \vec{b}}{2}$ $\vec{t} = \vec{t}_{\perp} + \vec{t}_{\parallel}$

\vec{t}_{\perp} et \vec{t}_{\parallel} ne sont pas
des translations de réseau

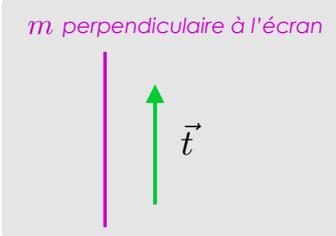


13 – Groupes d'espace

Symétrie de position : miroir × translation de réseau

cas n°1 : $m \times \vec{t}$ avec $\vec{t} \parallel m$

m perpendiculaire à l'écran

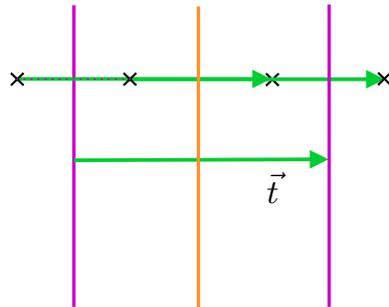


tout miroir m est un plan infini

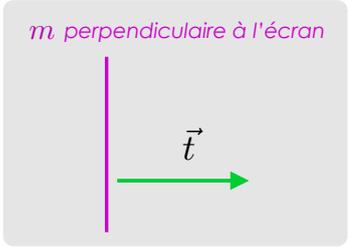


toute translation $\vec{t} \parallel m$
n'a aucun effet sur lui

cas n°2 : $m \times \vec{t}$ avec $\vec{t} \perp m$

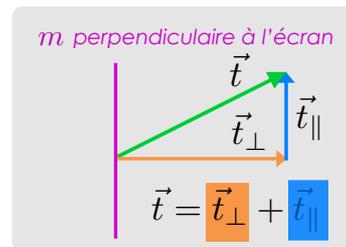
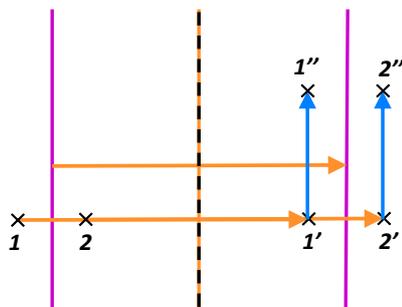


→ nouveau miroir m à $\frac{\vec{t}}{2}$ du premier



cas n°3 : $m \times \vec{t}$ avec \vec{t} oblique / m

On décompose $\vec{t} = \vec{t}_\perp + \vec{t}_\parallel$
 où \vec{t}_\perp et \vec{t}_\parallel sont les composantes \perp et \parallel à m .



L'ajout de \vec{t}_\parallel change la nature du **miroir** obtenu par la prise en compte de \vec{t}_\perp , si \vec{t}_\parallel n'est pas une translation de réseau.

miroir avec glissement



13 – Groupes d'espace

Symétrie de position : miroir × translation de réseau

- Miroir m combiné à une translation \vec{t}_{\parallel} parallèle à m
(\vec{t}_{\parallel} **n'est pas** une translation de réseau)
- Élément de symétrie d'ordre 2 ; opération associée notée (m, \vec{t}_{\parallel})

$$(m, \vec{t}_{\parallel})^2 = (2m, 2\vec{t}_{\parallel}) = \text{identité} \quad \text{donc} \quad 2\vec{t}_{\parallel} = p\vec{t} \quad \text{avec} \quad p = 0 \text{ ou } 1$$

Miroirs avec glissement axial

translation de réseau	glissement	notation
$\vec{t} = \vec{a}$	$\vec{t}_{\parallel} = \frac{\vec{a}}{2}$	a
$\vec{t} = \vec{b}$	$\vec{t}_{\parallel} = \frac{\vec{b}}{2}$	b
$\vec{t} = \vec{c}$	$\vec{t}_{\parallel} = \frac{\vec{c}}{2}$	c

13 – Groupes d'espace

Symétrie de position : miroir × translation de réseau

Type de plan	Notation	Translation	Symbole	
			normal au plan de la figure	parallèle au plan de la figure
miroir	m	0		
miroir avec glissement axial	a ou b c	$\vec{a}/2$ ou $\vec{b}/2$ $\vec{c}/2$		
miroir avec glissement diagonal	n	$(\vec{a} \pm \vec{b})/2$ $(\vec{a} \pm \vec{c})/2$ $(\vec{b} \pm \vec{c})/2$		
miroir avec glissement de type diamant	d	$(\vec{a} \pm \vec{b})/4$ $(\vec{a} \pm \vec{c})/4$ $(\vec{b} \pm \vec{c})/4$		

13 – Groupes d'espace

International Tables for Crystallography (2006), Vol. A, Space group 45, pp. 258–259.

glide planes as space group generators

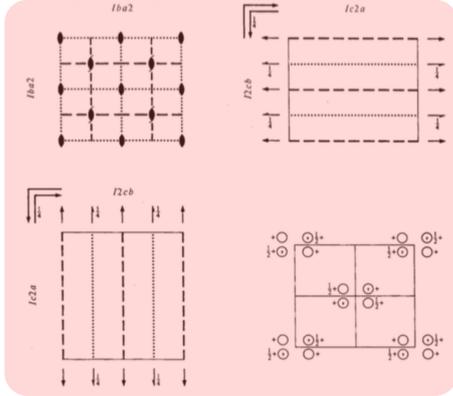
Iba2
No. 45

C_{2v}^{21}
Iba2

mm2

Orthorhombic

Patterson symmetry Immm



Origin on $ce2$

Asymmetric unit $0 \leq x \leq \frac{1}{2}; 0 \leq y \leq \frac{1}{2}; 0 \leq z \leq \frac{1}{2}$

Symmetry operations

For $(0,0,0)+$ set

(1) 1

(2) $2\ 0,0,z$

(3) $a\ x,1,z$

(4) $b\ \frac{1}{2},x,z$

For $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})+$ set

(1) $t(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$

(2) $2(0,0,\frac{1}{2})\ \frac{1}{2},\frac{1}{2},z$

(3) $c\ x,0,z$

(4) $c\ 0,y,z$

Le nom du groupe comprend deux types de miroirs avec glissement axial, que l'on retrouve sur les schémas.

Des miroirs de type n (glissement diagonal) sont engendrés par la translation de réseau I (dont une des composantes parallèles aux miroirs b et a) n'est pas une translation de réseau.

147

13 – Groupes d'espace

Symétrie de position : $A_n \times$ translation de réseau

axe A_n

\times

\vec{t}

cas n°1 : $\vec{t} \parallel$ axe

$$\vec{t} = \vec{c}$$

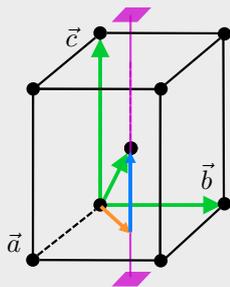
cas n°2 : $\vec{t} \perp$ axe

$$\vec{t} = \vec{b}$$

cas n°3 : \vec{t} oblique / axe

$$\vec{t} = \frac{\vec{a} + \vec{b} + \vec{c}}{2} \quad \vec{t} = \vec{t}_{\perp} + \vec{t}_{\parallel}$$

\vec{t}_{\perp} et \vec{t}_{\parallel} ne sont pas des translations de réseau



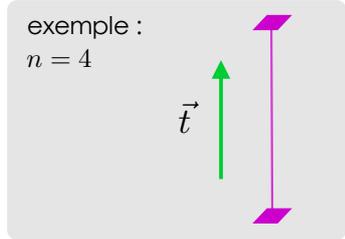
cas n°1 : $A_n \times \vec{t}$ avec $\vec{t} \parallel A_n$

tout axe A_n est de longueur infinie

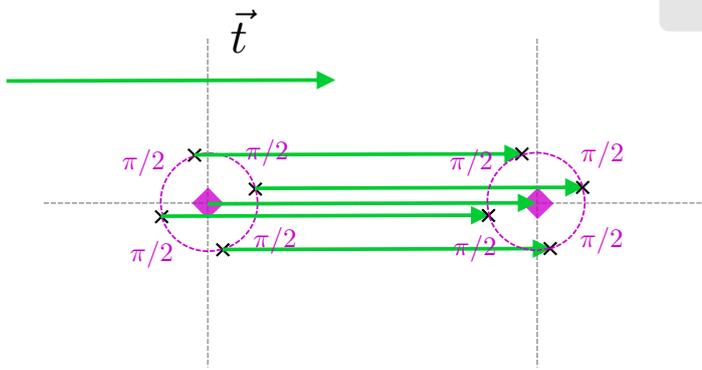
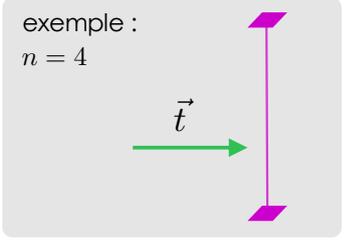


\vec{t} n'a aucun effet sur lui

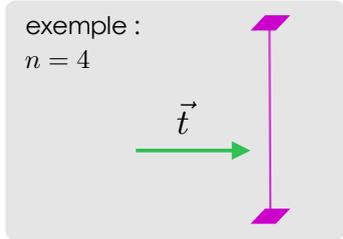
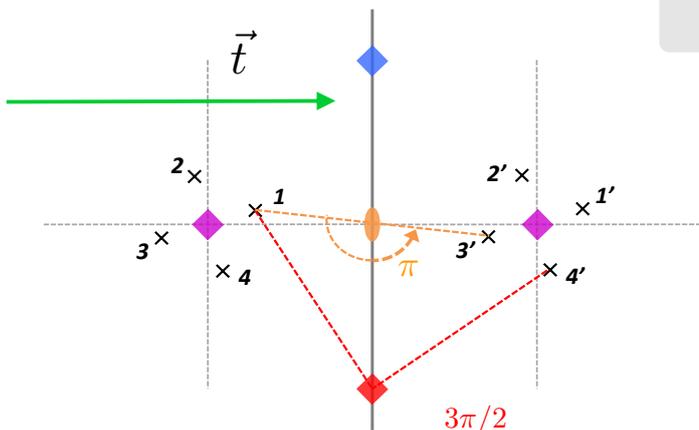
que \vec{t} soit une translation de réseau ou pas



cas n°2 : $A_n \times \vec{t}$ avec $\vec{t} \perp A_n$

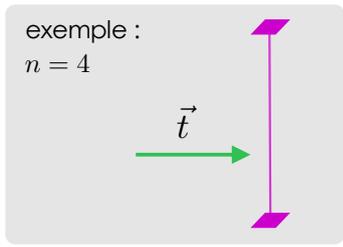
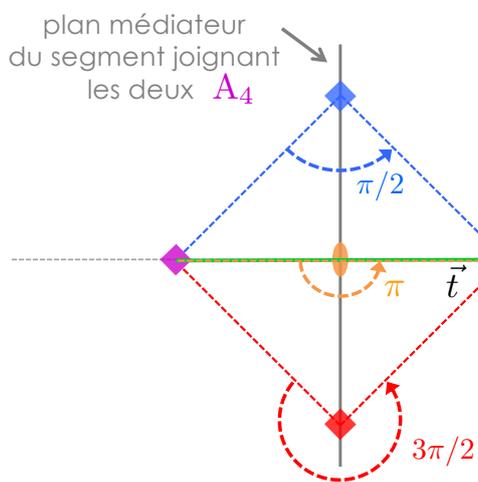


cas n°2 : $A_n \times \vec{t}$ avec $\vec{t} \perp A_n$



- $1 \rightarrow 1' : \vec{t}$
- $1 \rightarrow 2' : A_4$
- $1 \rightarrow 3' : A_2$
- $1 \rightarrow 4' : A_4$

cas n°2 : $A_n \times \vec{t}$ avec $\vec{t} \perp A_n$



A_4 = représentation
du groupe cyclique
 $C_4 = (a, a^2, a^3, e)$

cas n°2 : $A_n \times \vec{t}$ avec $\vec{t} \perp A_n$

Dans le plan médiateur du segment qui joint l'axe A_n et son image par application de la translation \vec{t} , apparaissent de **nouveaux axes de rotation** correspondant aux opérations

$$a^m = \left(m \frac{2\pi}{n} \mid \vec{0} \right)$$

avec $m = 1, \dots, n - 1$

Projetés dans un plan perpendiculaire à A_n , ces nouveaux axes de rotation sont situés en des points du plan médiateur d'où la translation est vue sous un angle $m \frac{2\pi}{n}$

A_n est une représentation du groupe cyclique

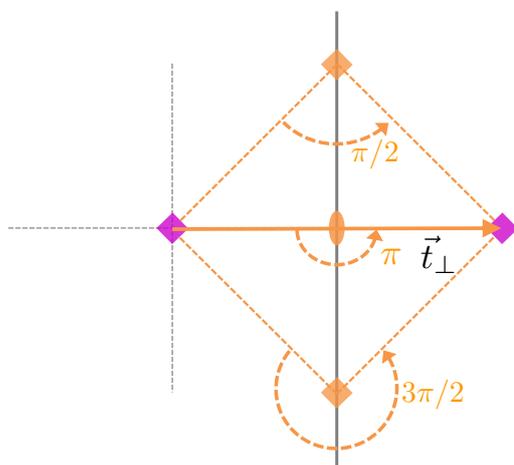
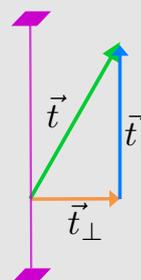
$C_n = (a, a^2, \dots, a^{n-1}, e)$
tel que $a^n = e$

cas n°3 : $A_n \times \vec{t}$ avec \vec{t} oblique / A_n

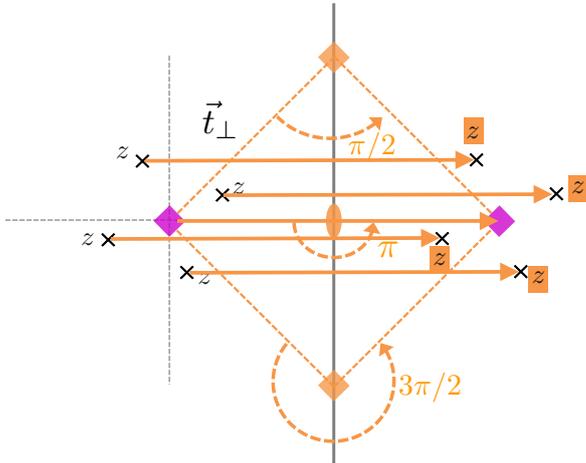
On décompose $\vec{t} = \vec{t}_\perp + \vec{t}_\parallel$
où \vec{t}_\perp et \vec{t}_\parallel sont les composantes \perp et \parallel à A_n .

exemple :
 $n = 4$

$$\vec{t} = \vec{t}_\perp + \vec{t}_\parallel$$



cas n°3 : $A_n \times \vec{t}$ avec \vec{t} oblique / A_n

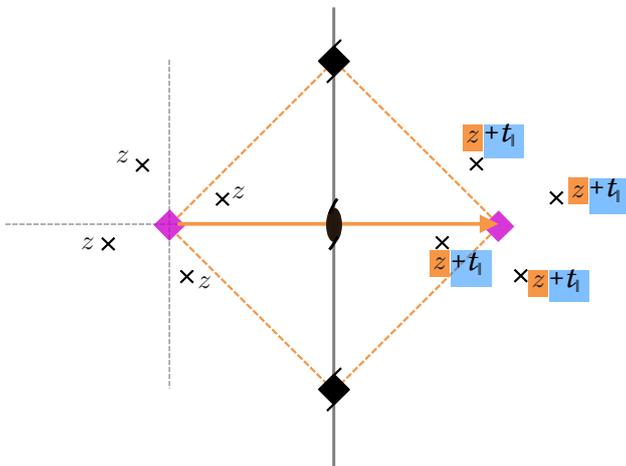


exemple :
 $n = 4$

$$\vec{t} = \vec{t}_\perp + \vec{t}_\parallel$$

cas n°3 : $A_n \times \vec{t}$ avec \vec{t} oblique / A_n

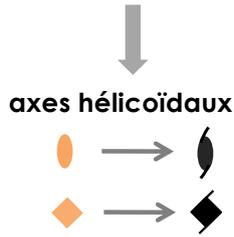
Prise en compte de \vec{t}_\parallel
 → ajout d'une composante t_1 à z



exemple :
 $n = 4$

$$\vec{t} = \vec{t}_\perp + \vec{t}_\parallel$$

L'ajout de \vec{t}_\parallel change la nature des axes A_4 et A_2 obtenus par la prise en compte de \vec{t}_\perp , si \vec{t}_\parallel n'est pas une translation de réseau.



13 – Groupes d'espace

Symétrie de position : axe hélicoïdal

- Axe de rotation A_n d'ordre n combiné à une translation \vec{t}_{\parallel} parallèle à A_n (\vec{t}_{\parallel} n'est pas une translation de réseau)
- Opération associée notée $\left(\frac{2\pi}{n}, \vec{t}_{\parallel}\right)$

➔ **Question :** si on se place dans un réseau cristallin tel que $A_n \parallel \vec{c}$ et qu'on suppose que A_n est parallèle à \vec{c} , quels sont les vecteurs \vec{t}_{\parallel} possibles ?

$$\left(\frac{2\pi}{n}, \vec{t}_{\parallel}\right)^n = (2\pi, n\vec{t}_{\parallel}) = \text{identité}$$

donc $n\vec{t}_{\parallel} = p\vec{c}$ avec p entier

soit $\vec{t}_{\parallel} = \frac{p\vec{c}}{n}$ où $p = 0, \dots, n-1$

$p = 0 \Rightarrow \vec{t}_{\parallel} = \vec{0}$

$p = 1 \Rightarrow \vec{t}_{\parallel} = \frac{\vec{c}}{n}$

$p = 2 \Rightarrow \vec{t}_{\parallel} = \frac{2\vec{c}}{n}$

$p = 3 \Rightarrow \vec{t}_{\parallel} = \frac{3\vec{c}}{n}$

...

$p = n-1 \Rightarrow \vec{t}_{\parallel} = \frac{(n-1)\vec{c}}{n}$

13 – Groupes d'espace

Symétrie de position : axe hélicoïdal

- Axe de rotation A_n d'ordre n combiné à une translation \vec{t}_{\parallel} parallèle à A_n (\vec{t}_{\parallel} n'est pas une translation de réseau)
- Opération associée notée $\left(\frac{2\pi}{n}, \vec{t}_{\parallel}\right)$

➔ **Question :** si on se place dans un réseau cristallin tel que $A_n \parallel \vec{c}$ et qu'on suppose que A_n est parallèle à \vec{c} , quels sont les vecteurs \vec{t}_{\parallel} possibles ?

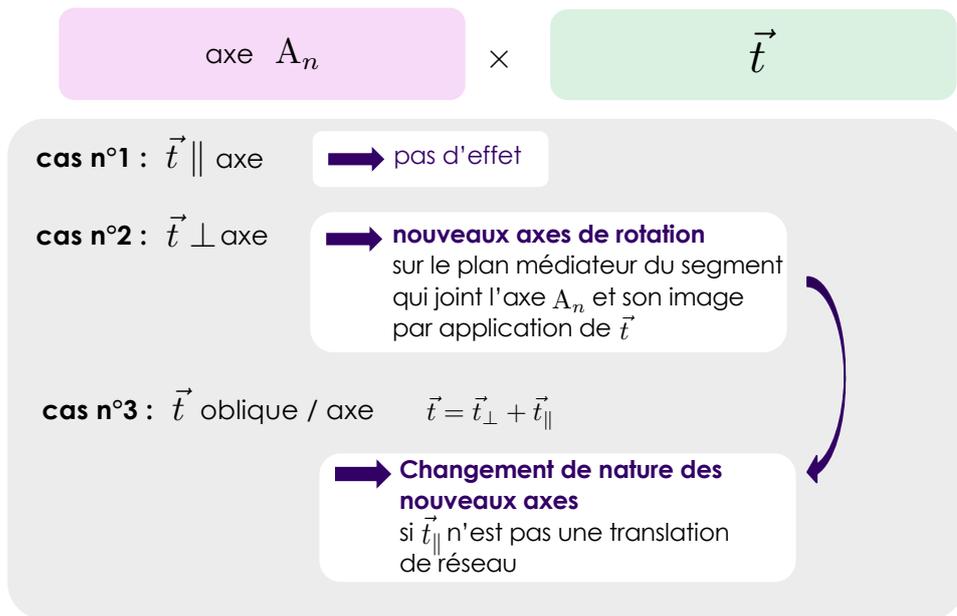
$$\left(\frac{2\pi}{n}, \vec{t}_{\parallel}\right)^n = (2\pi, n\vec{t}_{\parallel}) = \text{identité}$$

donc $n\vec{t}_{\parallel} = p\vec{c}$ avec p entier

Ordre de l'axe	1	2	3	4	6
Translation	0	0 $\frac{\vec{c}}{2}$	0 $\frac{\vec{c}}{3}$ $\frac{2\vec{c}}{3}$	0 $\frac{\vec{c}}{4}$ $\frac{2\vec{c}}{4}$ $\frac{3\vec{c}}{4}$	0 $\frac{\vec{c}}{6}$ $\frac{2\vec{c}}{6}$ $\frac{3\vec{c}}{6}$ $\frac{4\vec{c}}{6}$ $\frac{5\vec{c}}{6}$
Notation	1	2 2 ₁	3 3 ₁ 3 ₂	4 4 ₁ 4 ₂ 4 ₃	6 6 ₁ 6 ₂ 6 ₃ 6 ₄ 6 ₅
Symbole					

13 – Groupes d'espace

Symétrie de position : axe hélicoïdal

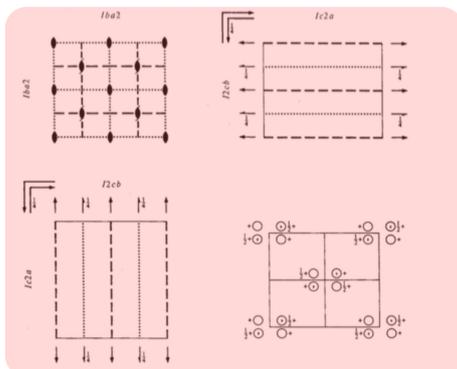


13 – Groupes d'espace

Symétrie de position : axe hélicoïdal

International Tables for Crystallography (2006). Vol. A, Space group 45, pp. 258–259.

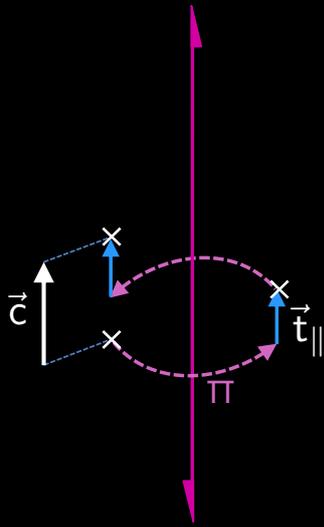
Iba2 C_{2v}^{21} **mm2** Orthorhombic
 No. 45 **Iba2** Patterson symmetry **Immm**



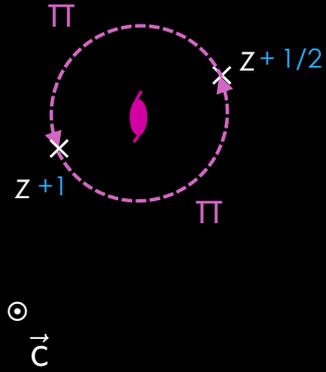
Origin on c_2
 Asymmetric unit $0 \leq x \leq \frac{1}{2}; 0 \leq y \leq \frac{1}{2}; 0 \leq z \leq \frac{1}{2}$
 Symmetry operations
 For $\{0,0,0\}^+$ set
 (3) 1 (2) 2 $0,0,z$ (3) a $x, \frac{1}{2}, z$ (4) b $\frac{1}{2}, y, z$
 For $\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\}^+$ set
 (1) $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ (2) $2(0,0, \frac{1}{2})$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z$ (3) c $x, 0, z$ (4) e $0, y, z$

Des axes hélicoïdaux 2_1 sont engendrés par la translation de réseau I (dont une des composantes parallèles aux miroirs b et a) n'est pas une translation de réseau.

Axe hélicoïdal $2_1 \parallel \vec{c}$

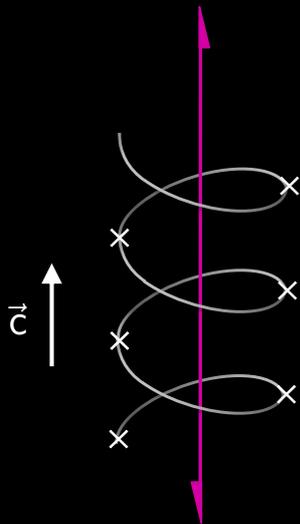


dans le plan de l'écran



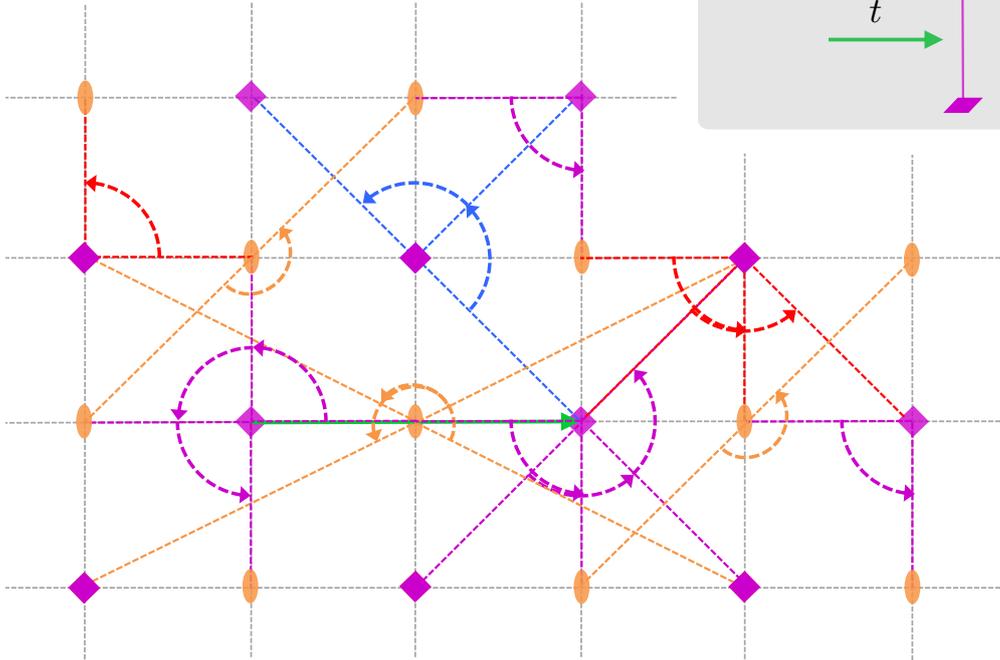
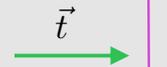
normal au plan de l'écran

Axe hélicoïdal $2_1 \parallel \vec{c}$



cas n°2 : $A_n \times \vec{t}$ avec $\vec{t} \perp A_n$

exemple :
 $n = 4$



13 – Groupes d'espace

exemples de groupe d'espace à 1 générateur

1st space group of point group C_4

International Tables for Crystallography (2006). Vol. A, Space group 75, p. 332.

$P4$

No. 75

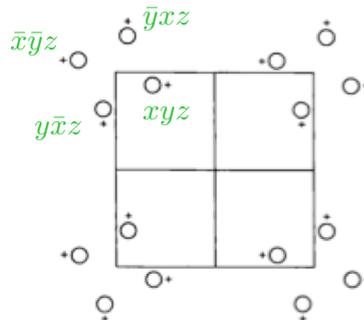
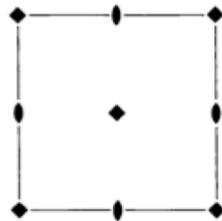
C_4^1

$P4$

4

Tetragonal

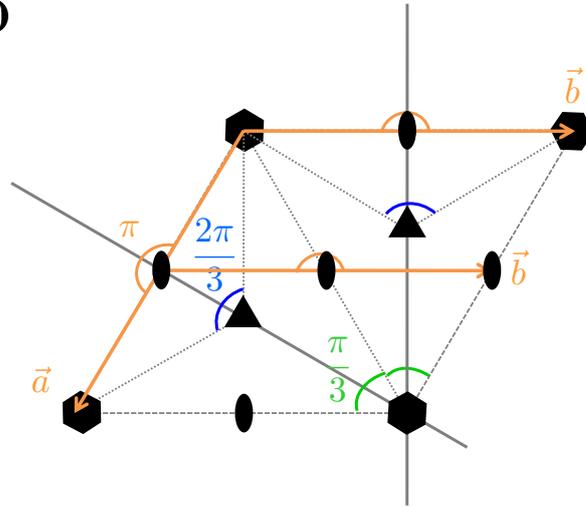
Patterson symmetry $P4/m$



13 – Groupes d'espace

exemples de groupe d'espace à 1 générateur

P 6



13 – Groupes d'espace

International Tables for Crystallography (2006), Vol. A, Space group 75, p. 332.

P4 C_4^1 4 Tetragonal

nom et n° du groupe →

nom du groupe (notation Schoenflies) →

groupe ponctuel correspondant →

système cristallin →

choix d'origine →

Asymmetric unit $0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1, 0 \leq z \leq 1$

Symmetry operations
 (1) 1 (2) $z, 0, 0, z$ (3) $x, 0, 0, z$ (4) $x, z, 0, z$

Generators selected (1); $(1, 0, 0, 0)$; $(0, 1, 0, 0)$; $(0, 0, 1, 0)$; (2); (3)

Positions
 Multiplicity: 4
 Wyckoff letter: 4c
 Site symmetry: $4 - d$

Coordinates
 (1) x, y, z (2) x, y, z (3) x, x, z (4) x, x, z

Symmetry of special projections
 Along [001] $p4$ $a = b, b = a$ $a = -b, b = -a$ $a = b, b = -a$ $a = -b, b = a$
 Origin at $0, 0, z$ $Origin at x, 0, 0$ $Origin at x, x, 0$

Maximal non-isomorphic subgroups
 I [2] $P2(3)$ 1; 2
 II none
 III $[2]P4, (c - 2c)(77); [2]P4 (a - 2a, b = 2b, c = 2c)(14, 79)$

Maximal isomorphic subgroups of lowest index
 III $[2]P4 (c - 2c)(75); [2]C4 (a - 2a, b = 2b)(P4, 75)$

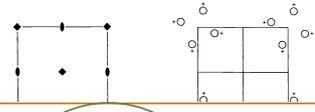
Minimal non-isomorphic supergroups
 I $[2]P4m(103); [2]P4/n(105); [2]P422(89); [2]P42, 2(90); [2]P4mm(99); [2]P4bm(100); [2]P4cc(102); [2]P4c(104)$
 II $[2]F4(79)$

Reflection conditions
 General: no conditions
 Special: $hkl: h + k = 2n$
 no extra conditions
 no extra conditions

13 – Groupes d'espace

International Tables for Crystallography (2006), Vol. A, Space group 75, p. 332.

P4 C_4^1 4 Tetragonal
 No. 75 **P4** Patterson symmetry $P4/m$



Positions		Coordinates				
Multiplicity,	Wyckoff letter,					
Site symmetry						
4	<i>d</i>	1	(1) x, y, z	(2) \bar{x}, \bar{y}, z	(3) \bar{y}, x, z	(4) y, \bar{x}, z
2	<i>c</i>	2..	$0, \frac{1}{2}, z$	$\frac{1}{2}, 0, z$		
1	<i>b</i>	4..	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z$			
1	<i>a</i>	4..	$0, 0, z$			

Reflection conditions

General:
no conditions

Special:
 $hkl : h + k = 2n$
no extra conditions
no extra conditions

cf. cours
diffraction

multiplicité du site cristallographique (nombre de positions équivalentes à l'intérieur de la maille conventionnelle pour un site atomique donné)

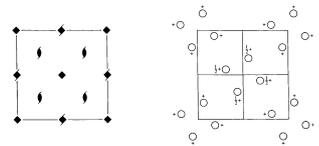
lettre de Wyckoff identifiant les sites cristallographiques, par ordre alphabétique du site, du plus symétrique au moins symétrique (i.e., sans symétrie = position quelconque)

groupe ponctuel du site cristallographique (sous-groupe du groupe ponctuel du cristal)

13 – Groupes d'espace

International Tables for Crystallography (2006), Vol. A, Space group 79, pp. 336-337.

I4 C_4^5 4 Tetragonal
 No. 79 **I4** Patterson symmetry $I4/m$



Origin on 4
 Asymmetric unit $0 \leq x \leq \frac{1}{2}$
 Symmetry operations
 Four $(0, 0, 0) + \text{set}$
 (1) 1
 Four $(\pm, \pm, \pm) + \text{set}$
 (1) (\pm, \pm, \pm)
 (2) $(2, 0, 0, 4)$

Positions		Coordinates				
Multiplicity,	Wyckoff letter,					
Site symmetry						
8	<i>c</i>	1	(1) x, y, z	(2) \bar{x}, \bar{y}, z	(3) \bar{y}, x, z	(4) y, \bar{x}, z
4	<i>b</i>	2..	$0, \frac{1}{2}, z$	$\frac{1}{2}, 0, z$		
2	<i>a</i>	4..	$0, 0, z$			

CONTINUED No. 79 14

Positions		Coordinates				
Multiplicity,	Wyckoff letter,					
Site symmetry						
8	<i>c</i>	1	(1) x, y, z	(2) \bar{x}, \bar{y}, z	(3) \bar{y}, x, z	(4) y, \bar{x}, z
4	<i>b</i>	2..	$0, \frac{1}{2}, z$	$\frac{1}{2}, 0, z$		
2	<i>a</i>	4..	$0, 0, z$			

Generators selected (1); $r(1, 0, 0)$; $r(0, 1, 0)$; $r(0, 0, 1)$; $r(\pm, \pm, \pm)$; (2); (3)

Symmetry of special projections
 Along $[100] p \pm$
 Along $[100] c \pm 1$
 $a = b$ $b = c$
 Origin at $x, 0, 0$
 Along $[110] p \pm 1$
 $a = -x$ $b = -a + b$
 Origin at $x, x, 0$ $b = -x$

Reflection conditions
 General:
 $hkl : h + k + l = 2n$
 $hkl : h + k = 2n$
 $hkl : k + l = 2n$
 $hkl : l = 2n$
 $hkl : l = 2n$
 $hkl : h = 2n$
 Special: as above, plus
 $hkl : l = 2n$
 no extra conditions

West index
 $-2h, b' = -2a + b$ or $a = -2h, b' = 2a + b$ (79)
 a
 mm (107); (2) $I4/m$ (108)

groupe ponctuel cristallographique 3

système d'axes rhomboédriques
→ réseau R



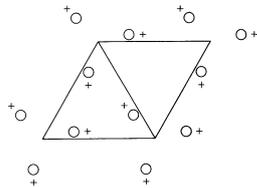
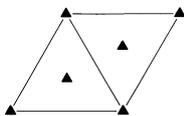
groupe d'espace : $R3$ (n° 146)

système d'axes hexagonaux
→ réseau P



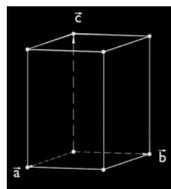
groupe d'espace : $P3$ (n° 143)

$P3$ C_3^1 3 Trigonal
No. 143 $P3$ Patterson symmetry $P\bar{3}$



Origin on 3
Asymmetric unit $0 \leq x \leq \frac{2}{3}; 0 \leq y \leq \frac{2}{3}; 0 \leq z \leq 1; x \leq (1+y)/2; y \leq \min(1-x, (1+x)/2)$
Vertices $0,0,0; \frac{2}{3},0,0; \frac{1}{3},\frac{2}{3},0; 0,\frac{2}{3},0; 0,0,1; \frac{2}{3},0,1; \frac{1}{3},\frac{2}{3},1; 0,\frac{2}{3},1$

Symmetry operations
(1) 1 (2) 3^- 0,0,z (3) 3^+ 0,0,z



CONTINUED

No. 143

$P3$

Generators selected (1); $r(1,0,0)$; $r(0,1,0)$; $r(0,0,1)$; (2)

Positions
Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry
Coordinates
3 d 1 (1) x,y,z (2) $\bar{y},x-y,z$ (3) $\bar{x}+y,\bar{x},z$
1 c 3.. $\frac{2}{3},\frac{2}{3},z$
1 b 3.. $\frac{1}{3},\frac{2}{3},z$
1 a 3.. 0,0,z

Reflection conditions
General:
no conditions
Special: no extra conditions

Symmetry of special projections
Along [001] $P3$ $a' = a$ $b' = b$ $c' = c$
Along [100] $P1$ $a' = \frac{2}{3}(a+2b)$ $b' = c$ $c' = c$
Origin at 0,0,z
Origin at x,0,0
Origin at $x,\frac{2}{3},0$

Maximal non-isomorphic subgroups
I [3] $P1(1)$ 1
IIa none
IIb [3] $P3$ ($c' = 3c$) (145); [3] $P3$ ($c' = 3c$) (144); [3] $R3$ ($a' = a - b, b' = a + 2b, c' = 3c$) (146); [3] $R3$ ($a' = 2a + b, b' = -a + b, c' = 3c$) (146)

Maximal isomorphic subgroups of lowest index
IIc [2] $P3$ ($c' = 2c$) (143); [3] $H3$ ($a' = 3a, b' = 3b$) ($P3, 143$)

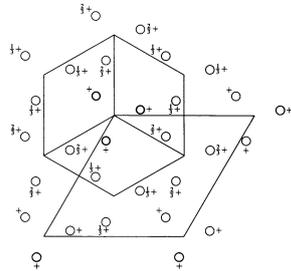
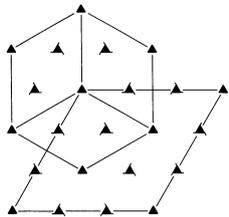
Minimal non-isomorphic supergroups
I [2] $P3$ (147); [2] $P312$ (149); [2] $P321$ (150); [2] $P3m1$ (156); [2] $P31m$ (157); [2] $P3c1$ (158); [2] $P31c$ (159); [2] $P6$ (168); [2] $P6$ (173); [2] $P6$ (174)
II [3] $R3$ (obverse) (146); [3] $R3$ (reverse) (146)

13 – Groupes d'espace

comparaison entre les groupes $P3$ et $R3$

$R3$ **C_3^4** **3** **Trigonal**
 No. 146 **$R3$** **Patterson symmetry $R\bar{3}$**

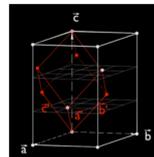
HEXAGONAL AXES



Origin on 3
Asymmetric unit $0 \leq x \leq \frac{1}{2}, 0 \leq y \leq \frac{1}{2}, 0 \leq z \leq \frac{1}{2}, x \leq (1+y)/2, y \leq \min(1-x, (1+x)/2)$
Vertices $0,0,0; \frac{1}{2},\frac{1}{2},0; \frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}; 0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}$
 $0,0,\frac{1}{2}; \frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}; \frac{1}{2},\frac{1}{2},0; 0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}$

Symmetry operations
 For $(0,0,0)$ set
 (1) 1 (2) $3^+ 0,0,z$ (3) $3^- 0,0,z$
 For $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$ set
 (1) $1(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$ (2) $3^+(0,0,\frac{1}{2}) \frac{1}{2},\frac{1}{2},z$ (3) $3^-(0,0,\frac{1}{2}) \frac{1}{2},\frac{1}{2},z$

conventional setting



CONTINUED No. 146 **$R3$**

Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; $t(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$; (2)

Positions
 Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry
 (0,0,0)+ $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$ $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$ +
 9 b 1 (1) x,y,z (2) $\bar{y},x-y,z$ (3) $\bar{x}+y,\bar{x},z$

Reflection conditions

General:
 $hkl : -h+k+l = 3n$
 $hk0 : -h+k = 3n$
 $h\bar{h}0 : l = 3n$
 $h\bar{h}l : h+l = 3n$
 $00l : l = 3n$
 $h\bar{h}00 : h = 3n$
 Special: no extra conditions

Symmetry of special projections
 Along $[001] p3$
 $a' = \frac{1}{2}(2a+b)$ $b' = \frac{1}{2}(-a+b)$
 Origin at $0,0,z$
 Along $[100] p1$
 $a' = \frac{1}{2}(a+2b)$ $b' = \frac{1}{2}(-a-2b+c)$
 Origin at $x,0,0$
 Along $[210] p1$
 $a' = \frac{1}{2}b$ $b' = \frac{1}{2}c$
 Origin at $x,x,0$

Maximal non-isomorphic subgroups

I $[3]R1(P1,1) 1+$
IIa $[3]P3(145) 1; 2 + (\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}); 3 + (\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$
 $[3]P3(144) 1; 2 + (\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}); 3 + (\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$
 $[3]P3(143) 1; 2; 3$

IIb none

Maximal isomorphic subgroups of lowest index

IIc $[2]R3(a' = -a, b' = -b, c' = 2c)(146); [4]R3(a' = -2a, b' = -2b)(146)$

Minimal non-isomorphic supergroups

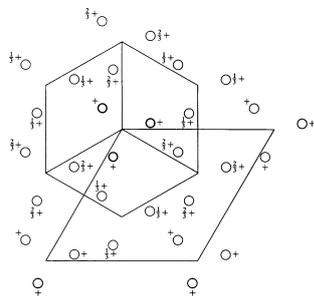
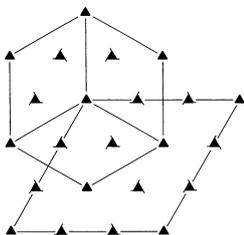
I $[2]R3(148); [2]R32(155); [2]R3m(160); [2]R3c(161); [4]P23(195); [4]F23(196); [4]I23(197); [4]P2_3(198); [4]I2_3(199)$
II $[3]P3(a' = \frac{1}{2}(2a+b), b' = \frac{1}{2}(-a+b), c' = \frac{1}{2}c)(143)$

13 – Groupes d'espace

comparaison entre les groupes $P3$ et $R3$

$R3$ **C_3^4** **3** **Trigonal**
 No. 146 **$R3$** **Patterson symmetry $R\bar{3}$**

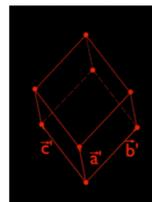
RHOMBOHEDRAL AXES



Heights refer to hexagonal axes

Origin on 3
Asymmetric unit $0 \leq x \leq 1; 0 \leq y \leq 1; 0 \leq z \leq 1; z \leq \min(x,y)$
Vertices $0,0,0; 1,0,0; 1,1,0; 0,1,0; 1,1,1$

Symmetry operations
 (1) 1 (2) $3^+ x,x,x$ (3) $3^- x,x,x$



CONTINUED No. 146 **$R3$**

Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; (2)

Positions
 Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry
 3 b 1 (1) x,y,z (2) z,x,y (3) y,z,x

Reflection conditions

General:
 no conditions
 Special: no extra conditions

1 a 3. x,x,x

Symmetry of special projections

Along $[111] p3$
 $a' = \frac{1}{2}(2a-b-c)$ $b' = \frac{1}{2}(-a+2b-c)$
 Origin at x,x,x
 Along $[1\bar{1}0] p1$
 $a' = \frac{1}{2}(a+b-2c)$ $b' = c$
 Origin at $x,0,0$
 Along $[2\bar{1}1] p1$
 $a' = \frac{1}{2}(b-c)$ $b' = \frac{1}{2}(a+b+c)$
 Origin at $2x,\bar{x},x$

Maximal non-isomorphic subgroups

I $[3]R1(P1,1) 1$
IIa none
IIb $[3]P3(a' = a-b, b' = b-c, c' = a+b+c)(145); [3]P3(a' = a-b, b' = b-c, c' = a+b+c)(144); [3]P3(a' = a-b, b' = b-c, c' = a+b+c)(143)$

Maximal isomorphic subgroups of lowest index

IIc $[2]R3(a' = -b+c, b' = a+c, c' = a+b)(146); [4]R3(a' = -a+b+c, b' = a-b+c, c' = a+b-c)(146)$

Minimal non-isomorphic supergroups

I $[2]R3(148); [2]R32(155); [2]R3m(160); [2]R3c(161); [4]P23(195); [4]F23(196); [4]I23(197); [4]P2_3(198); [4]I2_3(199)$
II $[3]P3(a' = \frac{1}{2}(2a-b-c), b' = \frac{1}{2}(-a+2b-c), c' = \frac{1}{2}(a+b+c)(143)$

13 – Groupes d'espace

retour sur l'exemple 3 des "Objectifs"

PHYSICAL REVIEW B 78, 195103 (2008)
X-ray linear dichroism in cubic compounds: The case of Cr³⁺ in MgAl₂O₄
 Amélie Juhin,^{1,*} Christian Brouder,¹ Marie-Anne Arrio,¹ Delphine Cabaret,¹ Philippe Saintavit,¹ Etienne Balan,^{1,2}
 Amélie Bordage,¹ Ari P. Seitsonen,¹ Georges Calas,¹ Sigrid G. Eeckhout,¹ and Pieter Glazze¹

mechanical properties.¹³ In MgAl₂O₄ spinel (*Fd* $\bar{3}$ *m* space-group symmetry), Al³⁺ cations occur at octahedral sites, which exhibit *D*_{3d} (or $\bar{3}m$) symmetry and build chains aligned along the six twofold axis of the cubic structure.¹⁴

?

Extrait de la table du groupe d'espace du spinelle

<i>Fd</i> $\bar{3}$ <i>m</i>	<i>O</i> _h ⁷	<i>m</i> $\bar{3}$ <i>m</i>	Cubic
No. 227	<i>F</i> 4 ₁ / <i>d</i> $\bar{3}$ 2/ <i>m</i>	Patterson symmetry <i>Fm</i> $\bar{3}$ <i>m</i>	
ORIGIN CHOICE 2			

2 choix d'origine possibles : le 2^e, quand il existe, correspond toujours à la position du centre de symétrie

CGE 2020- Delphine Cabaret

Positions	Coordinates	Reflection conditions
Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry	(0,0,0)+ (0, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$)+ ($\frac{1}{2}$,0, $\frac{1}{2}$)+ ($\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$,0)+	<i>h,k,l</i> permutable General:
192 <i>i</i> 1	(1) <i>x,y,z</i> (2) $\bar{x}+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$ (3) $\bar{x}+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2},\bar{z}+\frac{1}{2}$ (4) $x+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2},\bar{z}+\frac{1}{2}$ (5) <i>z,x,y</i> (6) $z+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2}$ (7) $\bar{z}+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2}$ (8) $\bar{z}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2}$ (9) <i>y,z,x</i> (10) $\bar{y}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$ (11) $y+\frac{1}{2},\bar{z}+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$ (12) $\bar{y}+\frac{1}{2},\bar{z}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2}$ (13) $y+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},\bar{z}+\frac{1}{2}$ (14) \bar{y},x,\bar{z} (15) $y+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$ (16) $\bar{y}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$ (17) $x+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2}$ (18) $\bar{x}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2}$ (19) \bar{x},z,\bar{y} (20) $x+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2}$ (21) $z+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$ (22) $z+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2}$ (23) $z+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2}$ (24) \bar{x},\bar{y},\bar{z} (25) \bar{x},\bar{y},\bar{z} (26) $x+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2},\bar{z}+\frac{1}{2}$ (27) $x+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$ (28) $\bar{x}+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$ (29) \bar{x},\bar{y},\bar{z} (30) $\bar{z}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2}$ (31) $z+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2}$ (32) $z+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2}$ (33) \bar{y},\bar{z},\bar{x} (34) $y+\frac{1}{2},\bar{z}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2}$ (35) $\bar{y}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$ (36) $y+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$ (37) $\bar{y}+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$ (38) <i>y,x,z</i> (39) $\bar{y}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$ (40) $y+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$ (41) $\bar{x}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2}$ (42) $x+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2}$ (43) x,z,\bar{y} (44) $\bar{x}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2}$ (45) $\bar{z}+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2}$ (46) $z+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$ (47) $z+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$ (48) <i>z,y,x</i>	<i>hkl</i> : <i>h</i> + <i>k</i> = 2 <i>n</i> and <i>h</i> + <i>l</i> , <i>k</i> + <i>l</i> = 2 <i>n</i> <i>OkI</i> : <i>k</i> + <i>l</i> = 4 <i>n</i> and <i>k</i> , <i>l</i> = 2 <i>n</i> <i>hIl</i> : <i>h</i> + <i>l</i> = 2 <i>n</i> <i>h00</i> : <i>h</i> = 4 <i>n</i>
96 <i>h</i> ..2	0, <i>y</i> , \bar{y} $\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2},y+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2}$ $\bar{y},0,y$ $\bar{y}+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2}$ $y+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2}$ $y+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2}$ <i>y</i> , $\bar{y},0$ $\bar{y}+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2}$ $y+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2}$ $\bar{y}+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2}$ 0, \bar{y},y $\bar{y}+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2},y+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2}$ <i>y</i> ,0, \bar{y} $y+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2}$ $\bar{y}+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2}$ $\bar{y}+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2}$ $\bar{y},y,0$ $y+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2}$ $\bar{y}+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2}$ $y+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2}$	Special: as above, plus no extra conditions
96 <i>g</i> .. <i>m</i>	<i>x,x,z</i> $\bar{x}+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$ $\bar{x}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},\bar{z}+\frac{1}{2}$ $x+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},\bar{z}+\frac{1}{2}$ <i>z,x,x</i> $z+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$ $\bar{z}+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2}$ $\bar{z}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$ <i>x,z,x</i> $\bar{x}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$ $x+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},\bar{z}+\frac{1}{2}$ $\bar{x}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2}$ $x+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$ \bar{x},x,\bar{z} $x+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$ $\bar{x}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$ $\bar{x}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$ $\bar{x}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2}$ \bar{x},\bar{x},\bar{z} $x+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2}$ $z+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$ $z+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2}$ $\bar{z}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2}$ \bar{z},\bar{x},\bar{x}	no extra conditions
48 <i>f</i> 2.. <i>mm</i>	<i>x</i> , $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$ $\bar{x}+\frac{1}{2},\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$, <i>x</i> , $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$, $\bar{x}+\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, <i>x</i> $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, $\bar{x}+\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$, <i>x</i> , $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$, $\bar{x}+\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, <i>x</i> $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, $\bar{x}+\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, $\bar{x}+\frac{1}{2}$	<i>hkl</i> : <i>h</i> = 2 <i>n</i> + 1 or <i>h</i> + <i>k</i> + <i>l</i> = 4 <i>n</i>
32 <i>e</i> ..3 <i>m</i>	<i>x,x,x</i> $\bar{x}+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2}$ $\bar{x}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$ $x+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$ $\bar{x}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$ $x+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$ $\bar{x}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$ $x+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$ $\bar{x}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$ \bar{x},\bar{x},\bar{x} $\bar{x}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$ $\bar{x}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$ $\bar{x}+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2}$ $\bar{x}+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2}$ $\bar{x}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$ $\bar{x}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2}$	no extra conditions
16 <i>d</i> .. $\bar{3}m$	$\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2},\frac{1}{2},0$ $\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}$ $0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	<i>hkl</i> : <i>h</i> = 2 <i>n</i> + 1 or <i>h</i> , <i>k</i> , <i>l</i> = 4 <i>n</i> + 2 or <i>h</i> , <i>k</i> , <i>l</i> = 4 <i>n</i>
16 <i>c</i> ..3 <i>m</i>	0,0,0 $\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	<i>hkl</i> : <i>h</i> = 2 <i>n</i> + 1 or <i>h</i> + <i>k</i> + <i>l</i> = 4 <i>n</i>
8 <i>b</i> .. $\bar{3}3m$	$\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	
8 <i>a</i> .. $\bar{3}3m$	$\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	

Pour reprendre toutes ces notions à tête reposée ...

Pour reprendre toutes ces notions à tête reposée ...

The screenshot shows the website of the Association Française de Cristallographie (AFC). The header includes the AFC logo (A, F, C in hexagons) and the text 'Association Française de Cristallographie'. A search bar is in the top right. The main navigation menu includes 'Accueil', 'Association', 'Adhésion', 'Bourses et Parrainages', 'Les prix de l'AFC', 'Axes transverses' (highlighted), 'Ressources', 'Connexion', and 'English'. The 'Les cours en ligne' section lists several educational resources:

- Les capsules éducatives de Michel Evain** (Université de Nantes): Développées en trois thèmes (cristallographie géométrique, solide cristallin et diffraction), ces capsules vidéo de 3 à 19 minutes chacune constitue une ressource visuelle, didactique, complète et idéale pour comprendre l'organisation de la matière cristalline et des notions élémentaires de cristallographie.
- Les capsules éducatives de Frank Hoffmann** (Université d'Hambourg): Développées en sept chapitres, ces capsules vidéo de 7 à 14 minutes chacune constitue une ressource visuelle, didactique, complète et idéale pour comprendre l'organisation de la matière cristalline et des notions élémentaires de cristallographie. Le commentaire de ces vidéos est en anglais.
- Autres vidéos courtes**: Ces capsules vidéos ont été conçues de manière isolée, notamment à l'occasion de l'année internationale de la cristallographie en 2014. Elles ne font donc pas partie d'un cours complet décliné en un succession de vidéos courtes.
- MOOC (Massive Open Online Courses)**: Cours séquencés, ouverts à tous, qui demandent un travail régulier sur plusieurs semaines.
- Cours en ligne sur la solidification**: Mis au point par Marie Danielle Dupouy, Thierry Duffar et Kader Zaidat, avec l'aide de plusieurs générations d'étudiants de Grenoble INP. Le site web propose cours et exercices en français et en anglais.
- Cours écrits**

The right sidebar contains a 'Navigation' section with user roles: étudiant-e de licence et master, doctorant-e, ingénieur-e, chercheur-e, enseignant-e du supérieur, élève ou enseignant-e du secondaire, and curieux de découvrir le monde des cristaux et la cristallographie. Below it is a 'Les sponsors cristal de l'AFC' section featuring the 'crystals' logo (an Open Access Journal by MDPI).

175

Pour reprendre toutes ces notions à tête reposée ...



Ensemble de 18 vidéos (pour l'instant) sur YouTube en accès restreint : liens sur demande

176