Cristallographie et Grands Equipements

Ecole de cristallographie 2022

Comment décrire l'état cristallin ?

Cristallographie géométrique, symétries

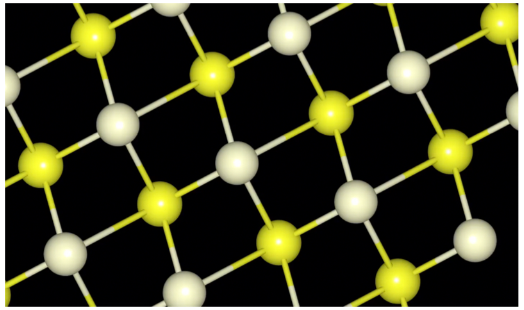
Delphine Cabaret, IMPMC

delphine.cabaret@sorbonne-universite.fr

SCIENCES SORBONNE UNIVERSITÉ

Préambule : qu'est-ce qu'un cristal ?

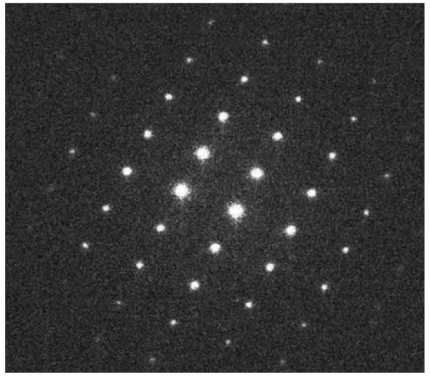
Solide dont la structure microscopique est caractérisée par la **répétition périodique en 3 dimensions** d'un **motif** constitué d'atomes.



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**)



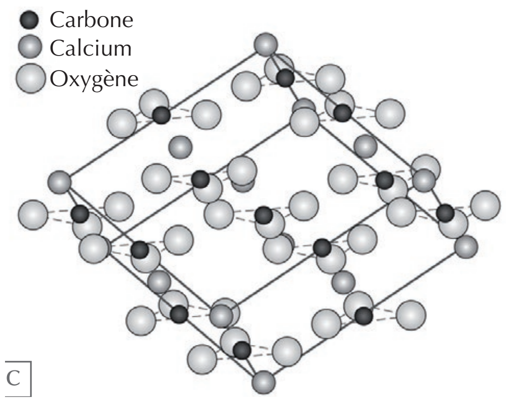
Nature Materials 10, 890–896 (2011)

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

Préambule : les cristaux périodiques

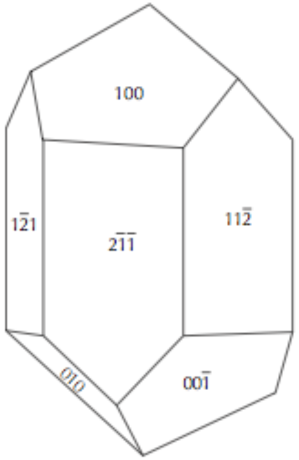
symétrie de translation

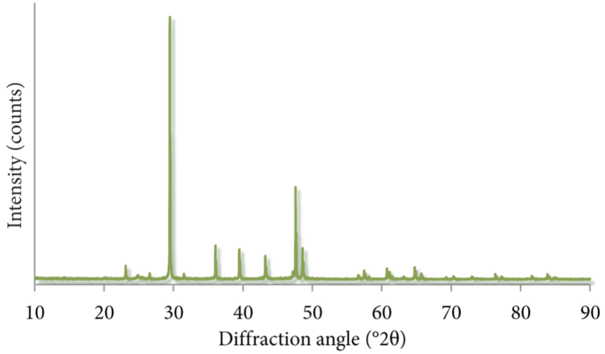
ex: $CaCO_3$ (calcite)

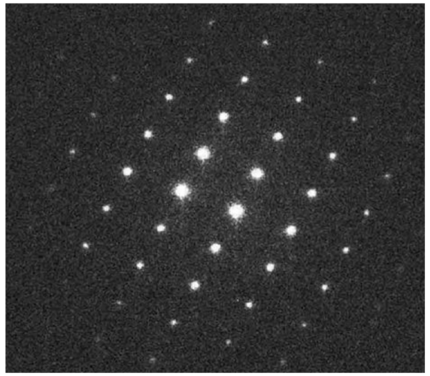


B. Toudic, Reflets de la Physique 2015, vol 44-45

loi des indices rationnels (1784)







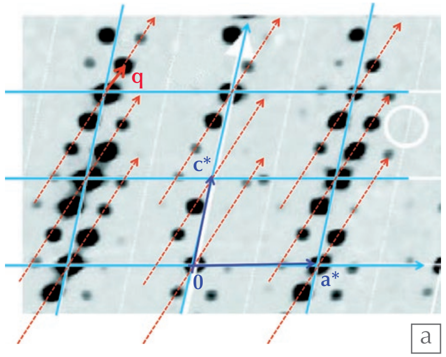
Nature Materials 10, 890–896 (2011)

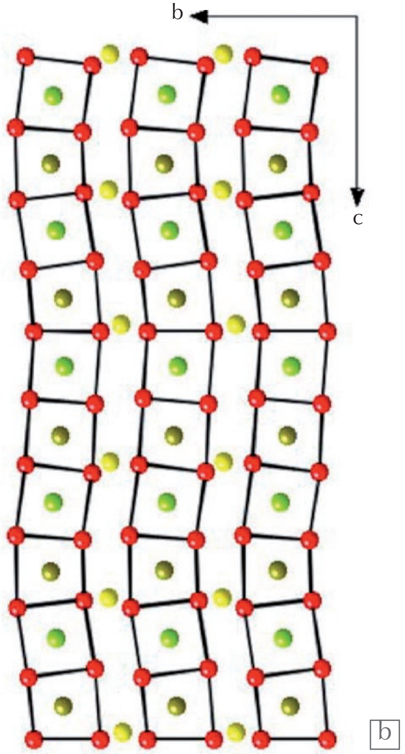
Préambule: les cristaux **a**périodiques

pas de symétrie de translation dans un **espace à 3D**

cristaux incommensurables, phases modulées

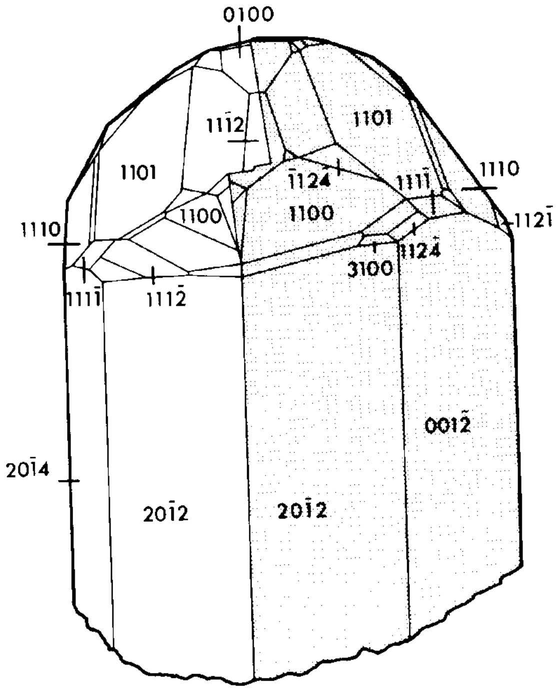
La périodicité (ordre à l'infini) ne peut pas être décrite dans un espace tridimensionnel.





3. Structure incommensurable modulée du carbonate de sodium γ-Na_2CO_3.
(a) Plan de diffraction (a^*, c^*) du réseau réciproque de γ-Na_2CO_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 **q**).
(b) La solution structurale modulée, projetée selon **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 **b**) apparaît dans la direction **c**. La longueur d'onde de la modulation est $2\pi/q$.

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



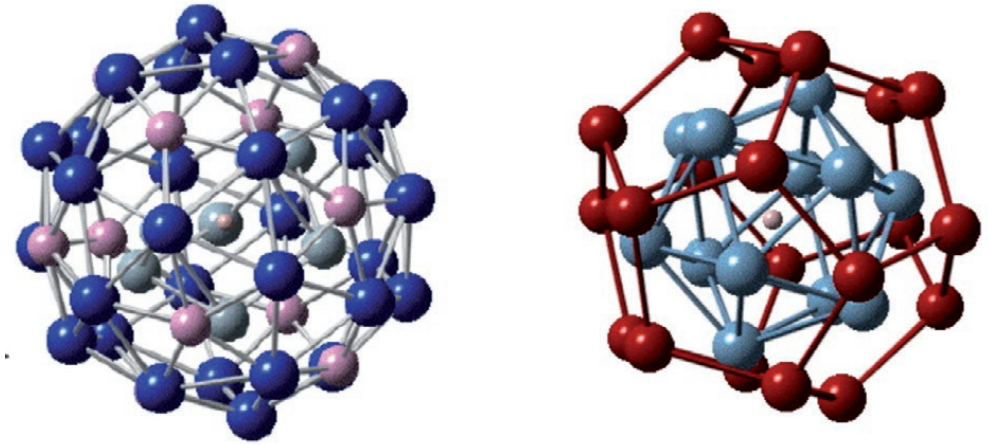
calavérite $Au_{1-x}Ag_xTe$

Préambule: les cristaux **a**périodiques

pas de symétrie de translation
dans un **espace à 3D**

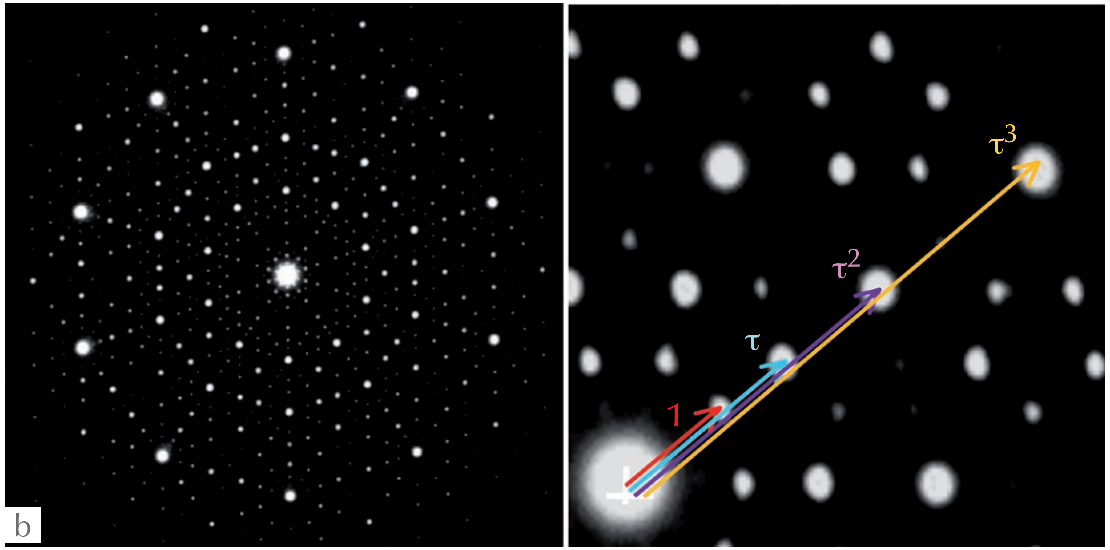
quasicristaux (1982, prix Nobel de chimie en 2011)

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).

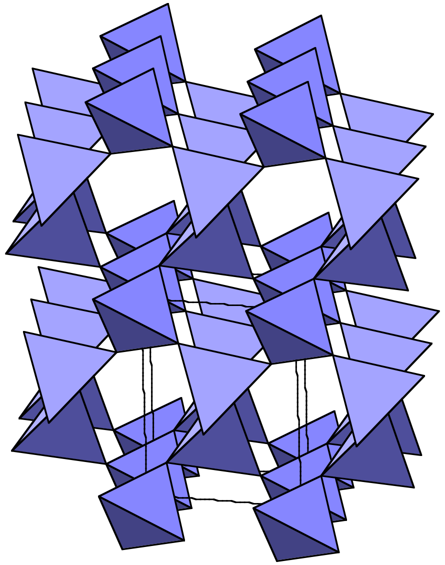
$$\tau = 2\cos(2\pi/10)$$

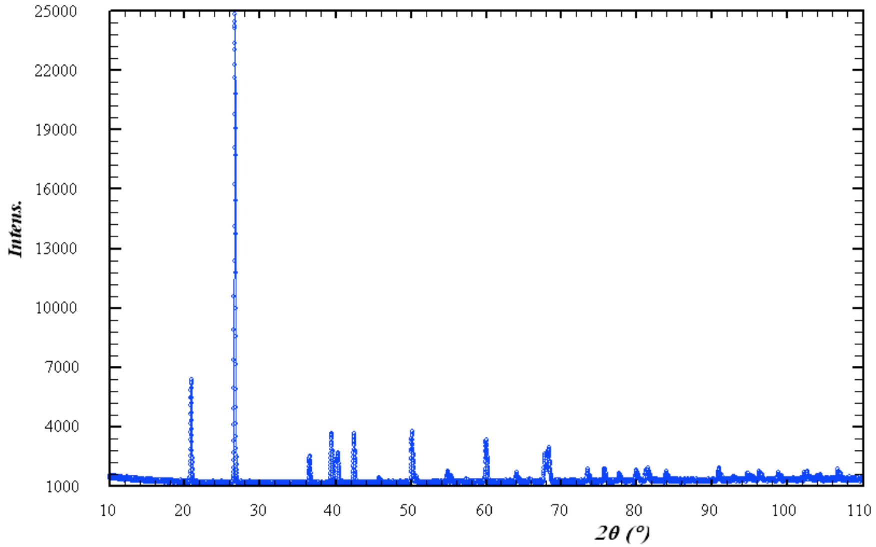


B. Toudic, Reflets de la Physique 2015, vol 44-45

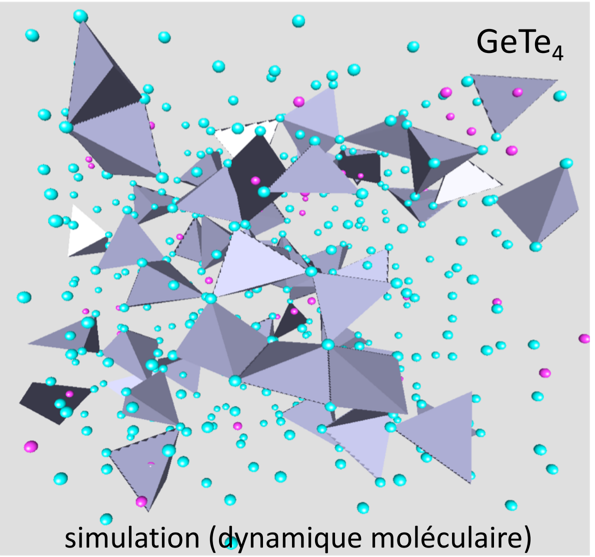
Préambule: qu'est-ce qu'un cristal ?

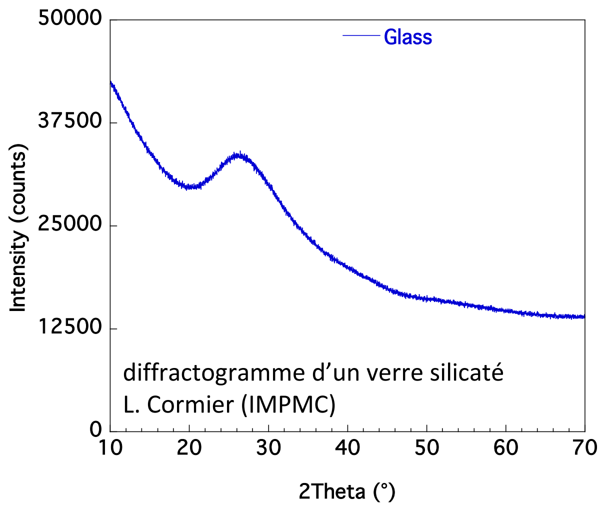
quartz





cristal ≠ verre

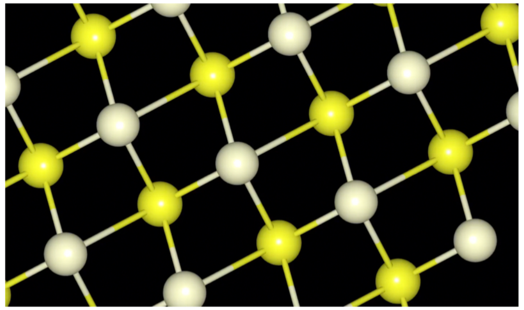




Préambule : qu'est-ce qu'un cristal ?

dans ce cours

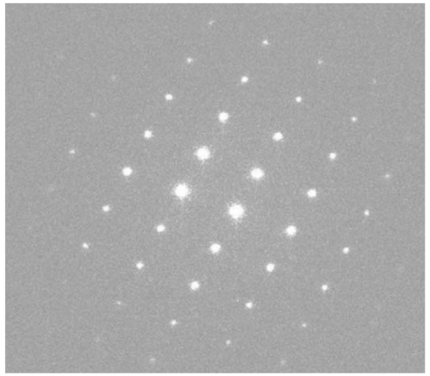
Cristal périodique :
Solide dont la structure microscopique est caractérisée par la **répétition périodique en 3 dimensions** d'un **motif** constitué d'atomes.



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

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

exemple 1

Inorganic Chemistry

Article

pubs.acs.org/IC

Crystal Structures of $Li_6B_4O_9$ and $Li_3B_{11}O_{18}$ 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

?

$Li_3B_{11}O_{18}$ crystallizes in the $P2_1/c$ space group with lattice parameters a = 17.7607(8) Å, b = 7.7737(4) Å, c = 9.6731(4) Å, and β = 100.906(4)°. 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

?

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 Zhou[1]

? ? ? ?

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-SiO_2

? ?

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 Cr^{3+} in $MgAl_2O_4$

Amélie Juhin,[1,*] Christian Brouder,[1] Marie-Anne Arrio,[1] Delphine Cabaret,[1] Philippe Sainctavit,[1] Etienne Balan,[1,2]
Amélie Bordage,[1] Ari P. Seitsonen,[1] Georges Calas,[1] Sigrid G. Eeckhout,[3] and Pieter Glatzel[3]

?

mechanical properties.[13] In $MgAl_2O_4$ spinel ($Fd\bar{3}m$ space-group symmetry), Al^{3+} 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 $[1\bar{1}1]$, 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	$[1\bar{1}1]$	$(\frac{1}{4},\frac{1}{2},\frac{1}{4})$	$(\frac{3}{4},\frac{1}{2},\frac{3}{4})$, $(\frac{1}{4},0,\frac{3}{4})$, $(\frac{3}{4},0,\frac{1}{4})$

?

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

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

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

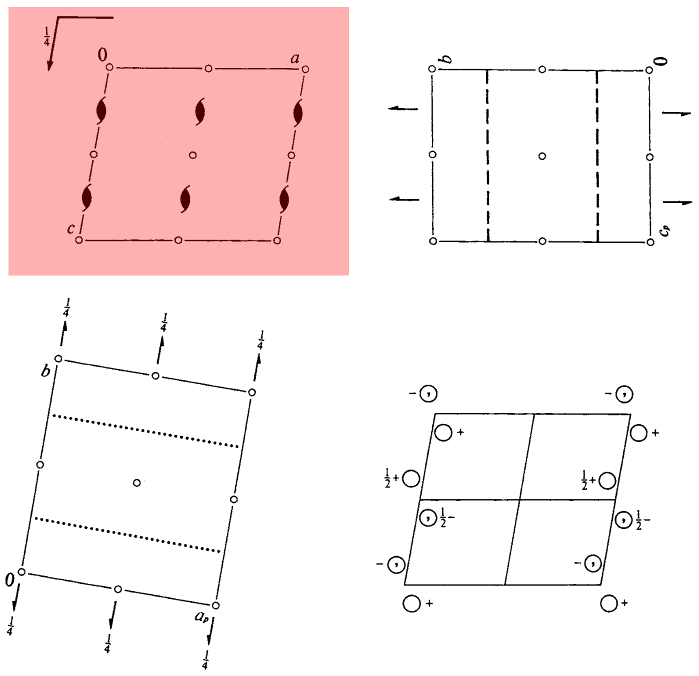
exemple 1

Table du groupe d'espace du borate de Li

$P2_1/c$	C_{2h}^5	$2/m$	Monoclinic

No. 14 $\quad P12_1/c1 \quad$ Patterson symmetry $P12/m1$

UNIQUE AXIS b, CELL CHOICE 1



Origin at $\bar{1}$

Asymmetric unit $\quad 0 \le x \le 1; \quad 0 \le y \le \frac{1}{4}; \quad 0 \le z \le 1$

Symmetry operations

(1) 1 $\quad$ (2) $2(0,\frac{1}{2},0)\ \ 0,y,\frac{1}{4}$ $\quad$ (3) $\bar{1}\ \ 0,0,0$ $\quad$ (4) $c\ \ x,\frac{1}{4},z$

CONTINUED $\quad$ No. 14 $\quad$ $P2_1/c$

Generators selected $\quad$ (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; (2); (3)

Positions

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry			Coordinates				Reflection conditions
							General:
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) $x,\bar{y}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$	$h0l$: $l=2n$ $0k0$: $k=2n$ $00l$: $l=2n$
							Special: as above, plus
2	d	$\bar{1}$	$\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2},\frac{1}{2},0$			hkl : $k+l=2n$
2	c	$\bar{1}$	$0,0,\frac{1}{2}$	$0,\frac{1}{2},0$			hkl : $k+l=2n$
2	b	$\bar{1}$	$\frac{1}{2},0,0$	$\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}$			hkl : $k+l=2n$
2	a	$\bar{1}$	$0,0,0$	$0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}$			hkl : $k+l=2n$

Symmetry of special projections

Along [001] $p2gm$ $\quad$ $\mathbf{a}'=\mathbf{a}_p$ $\quad$ $\mathbf{b}'=\mathbf{b}$ $\quad$ Origin at $0,0,z$

Along [100] $p2gg$ $\quad$ $\mathbf{a}'=\mathbf{b}$ $\quad$ $\mathbf{b}'=\mathbf{c}_p$ $\quad$ Origin at $x,0,0$

Along [010] $p2$ $\quad$ $\mathbf{a}'=\frac{1}{2}\mathbf{c}$ $\quad$ $\mathbf{b}'=\mathbf{a}$ $\quad$ Origin at $0,y,0$

Maximal non-isomorphic subgroups

I $\quad$ [2] $P1c1$ (Pc, 7) $\quad$ 1; 4
[2] $P12_11$ ($P2_1$, 4) $\quad$ 1; 2
[2] $P\bar{1}$ (2) $\quad$ 1; 3

IIa $\quad$ none

IIb $\quad$ none

Maximal isomorphic subgroups of lowest index

IIc $\quad$ [2] $P12_1/c1$ ($\mathbf{a}'=2\mathbf{a}$ or $\mathbf{a}'=2\mathbf{a},\mathbf{c}'=2\mathbf{a}+\mathbf{c}$) ($P2_1/c$, 14); [3] $P12_1/c1$ ($\mathbf{b}'=3\mathbf{b}$) ($P2_1/c$, 14)

Minimal non-isomorphic supergroups

I $\quad$ [2] $Pnna$ (52); [2] $Pmna$ (53); [2] $Pcca$ (54); [2] $Pbam$ (55); [2] $Pccn$ (56); [2] $Pbcm$ (57); [2] $Pnnm$ (58); [2] $Pbcn$ (60); [2] $Pbca$ (61); [2] $Pnma$ (62); [2] $Cmce$ (64)

II $\quad$ [2] $A12/m1$ ($C2/m$, 12); [2] $C12/c1$ ($C2/c$, 15); [2] $I12/c1$ ($C2/c$, 15); [2] $P12_1/m1$ ($\mathbf{c}'=\frac{1}{2}\mathbf{c}$) ($P2_1/m$, 11); [2] $P12/c1$ ($\mathbf{b}'=\frac{1}{2}\mathbf{b}$) ($P2/c$, 13)

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 conventionnelle

8 – Projection stéréographique

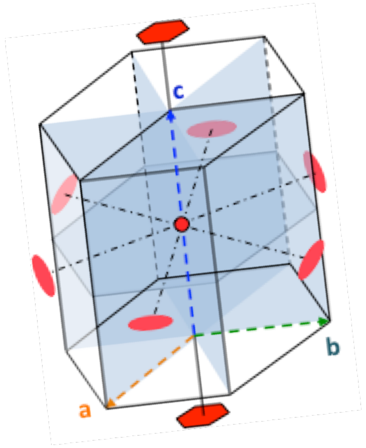
9 – Roto-inversions

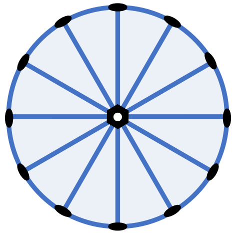
10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques

11 – Les 7 systèmes cristallins

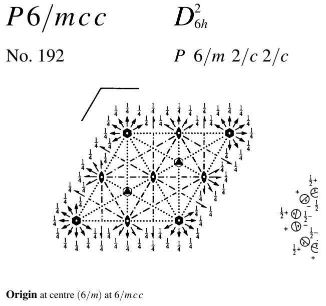
12 – Les 14 réseaux de Bravais

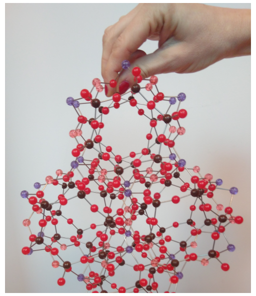
13 – Les 230 groupes d'espace



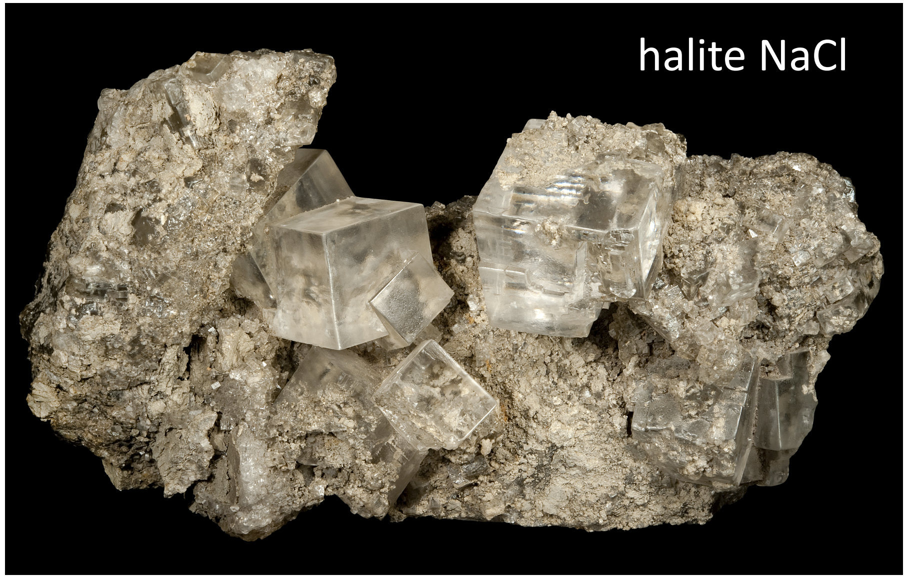


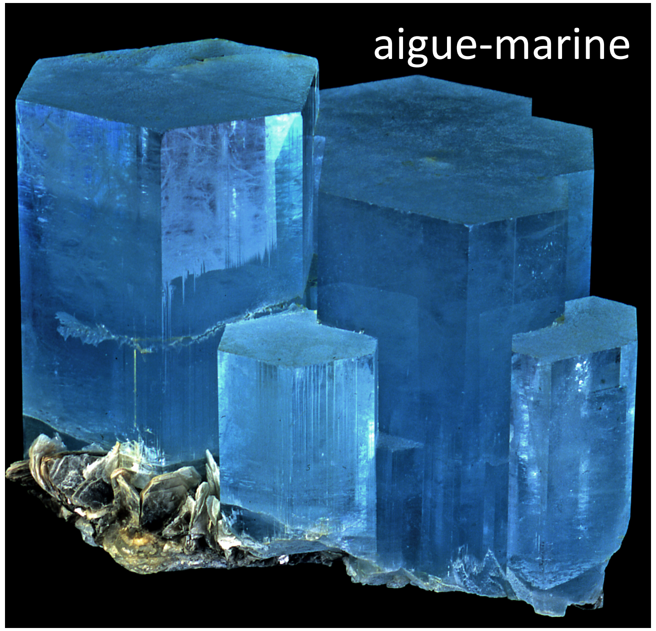
$\frac{6}{m}mm$

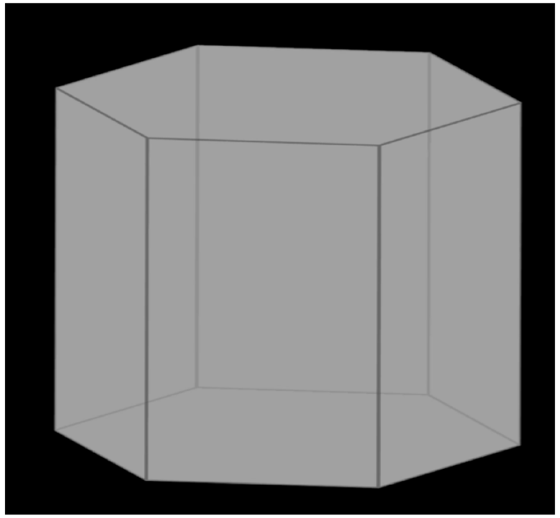


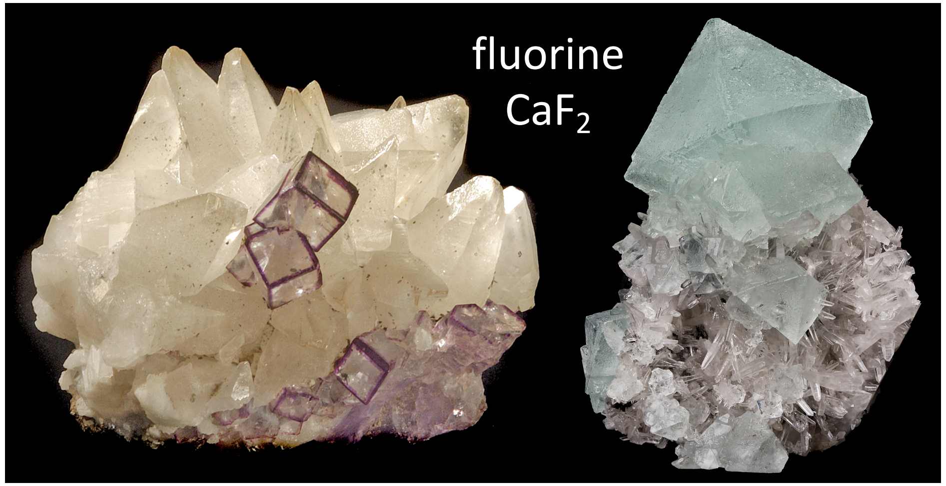


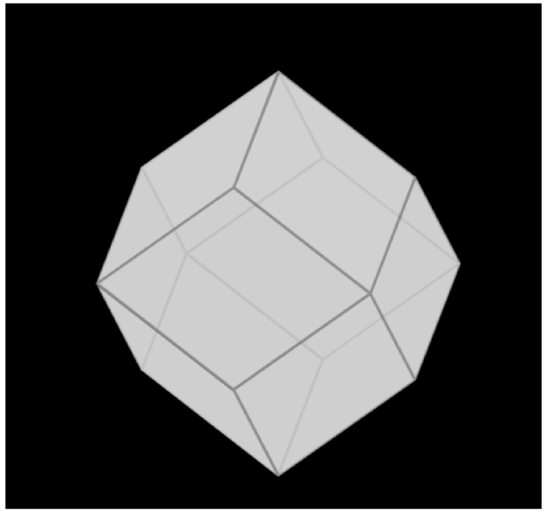
1- Observation des symétries des cristaux naturels







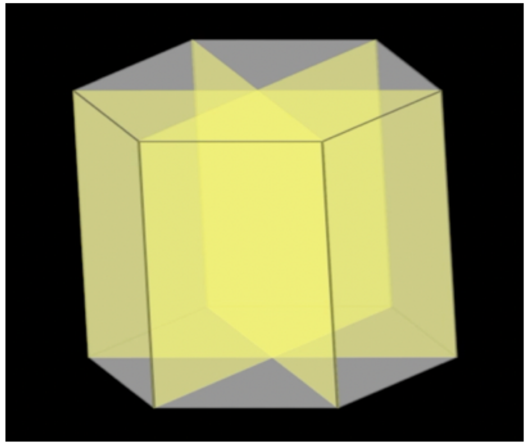




Crédits photos : Collection de Minéraux de Sorbonne Université

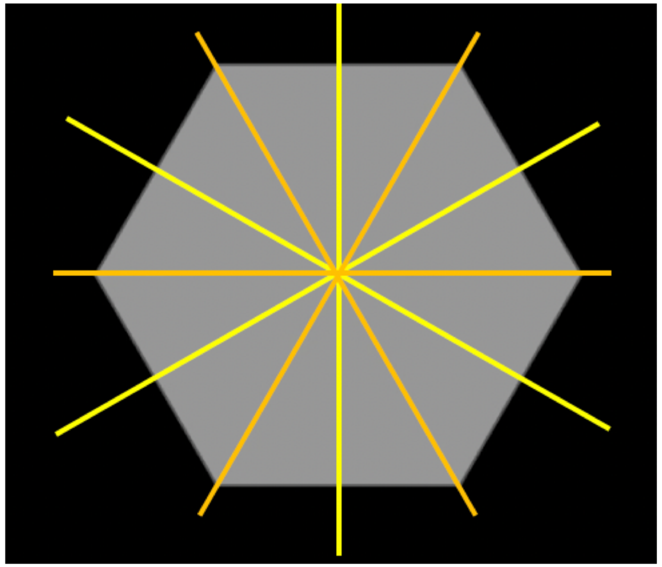
1- Observation des symétries des cristaux naturels

Mise en évidence de plans miroir



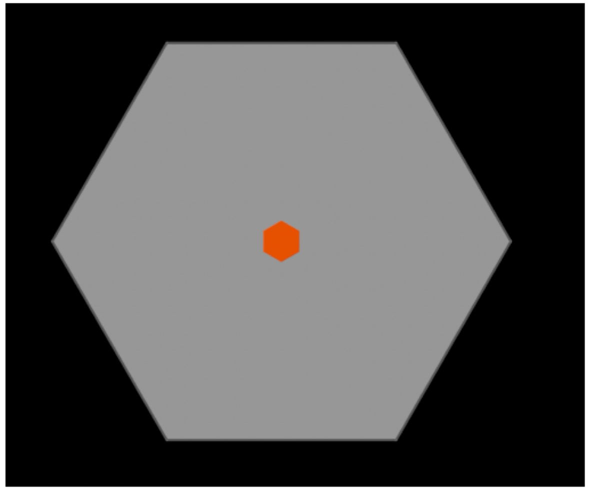
- **3 miroirs**
  parallèles aux arêtes latérales
  et coupant les arêtes
  de la base hexagonale
  en leurs milieux

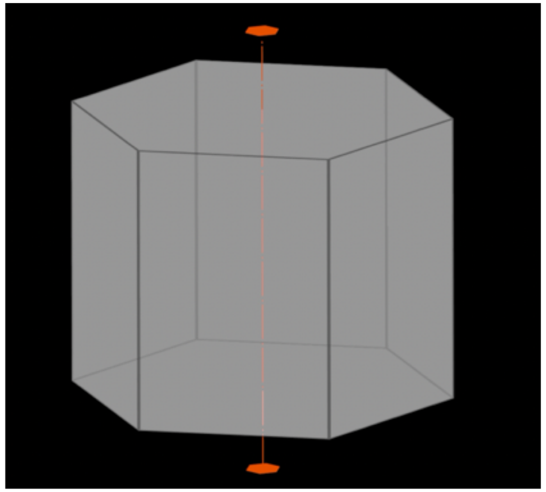
- **3 miroirs**
  parallèles aux arêtes latérales
  et joignant deux sommets
  opposés dans la base hexagonale



1- Observation des symétries des cristaux naturels

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





axe A_6 ou 6

$$\varphi = 60° = \frac{2\pi}{6}$$

1- Observation des symétries des cristaux naturels

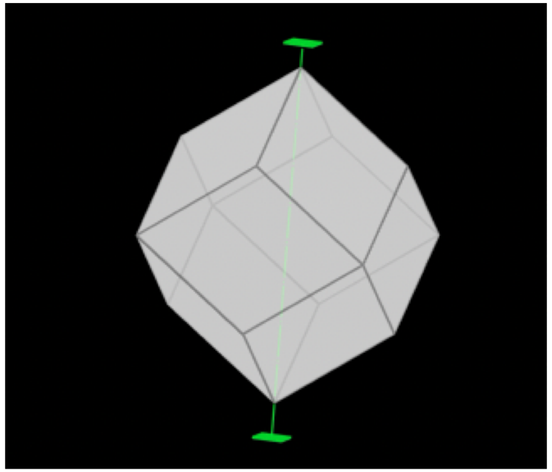
Mise en évidence d’axes de rotation d’ordres 4, 3 et 2

rhombododécaèdre

(polyèdre à 12 faces)

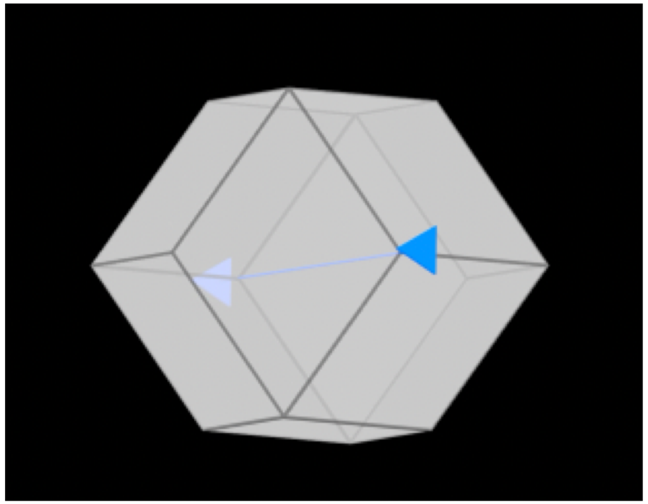
1- Observation des symétries des cristaux naturels

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



axe A_4 ou 4

$$\varphi = 90\,° = \frac{2\pi}{4}$$

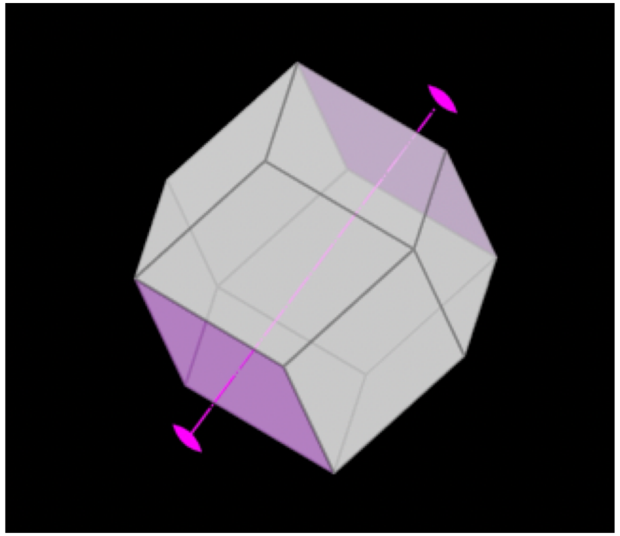


axe A_3 ou 3

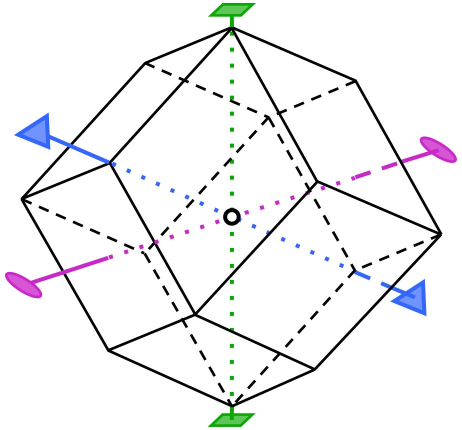
$$\varphi = 120\,° = \frac{2\pi}{3}$$

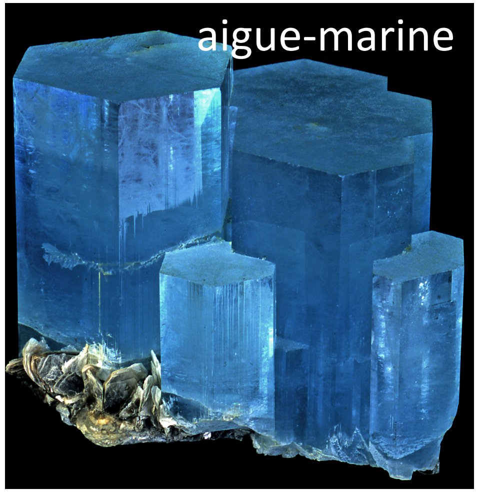
axe A_2 ou 2

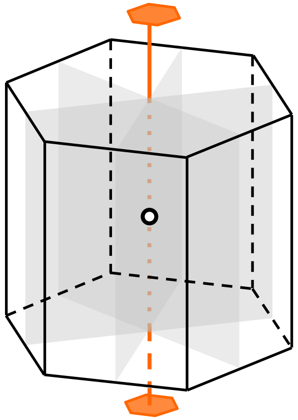
$$\varphi = 180\,° = \frac{2\pi}{2}$$



1- Observation des symétries des cristaux naturels







axes de rotation

A_2 A_3 A_4 A_6

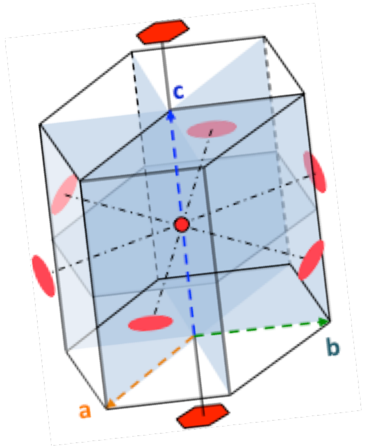
miroir

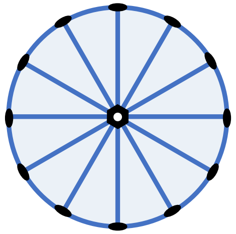
M

centre de symétrie

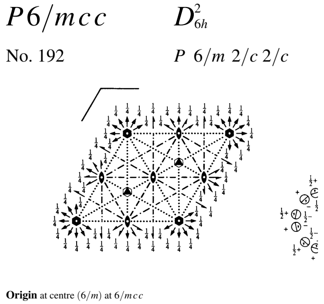
C

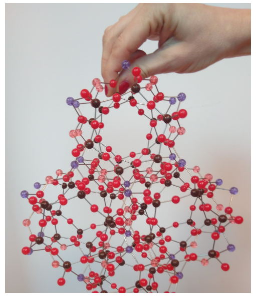
Plan du cours





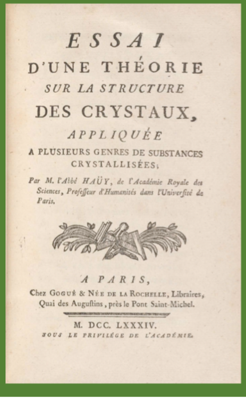
$\frac{6}{m}mm$





2- Cause interne de la forme des cristaux naturels

René Just Haüy
(1784)



ESSAI
D'UNE THÉORIE
SUR LA STRUCTURE
DES CRYSTAUX,
APPLIQUÉE
A PLUSIEURS GENRES DE SUBSTANCES
CRYSTALLISÉES;

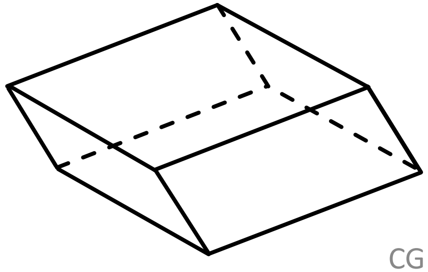
Par M. l'Abbé HAÜY, de l'Académie Royale des Sciences, Professeur d'Humanités dans l'Université de Paris.

A PARIS,
Chez Gogué & Née de la Rochelle, Libraires, Quai des Augustins, près le Pont Saint-Michel.

M. DCC. LXXXIV.
SOUS LE PRIVILÉGE DE L'ACADÉMIE.

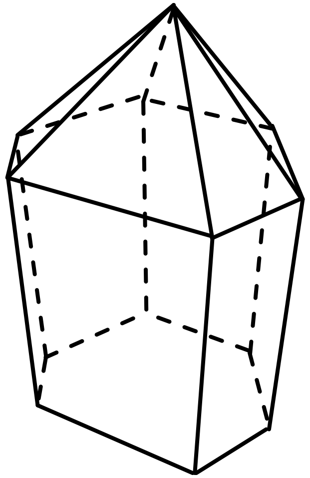
Torbern Bergman

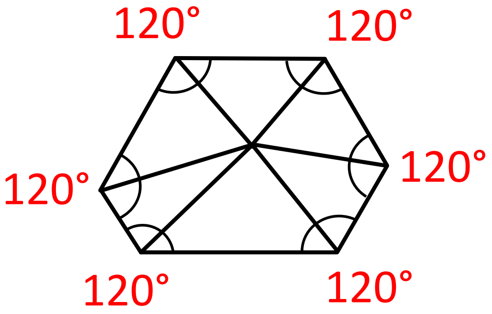
Rhomboèdre



Jean-Baptiste
Romé de l'Isle

Loi de constance des angles

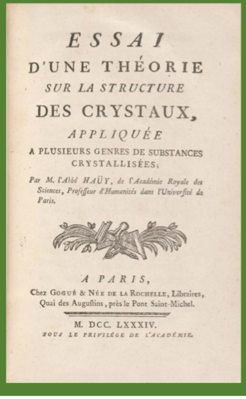




cristal de quartz

2- Cause interne de la forme des cristaux naturels

René Just Haüy
(1784)


ESSAI
D'UNE THÉORIE
SUR LA STRUCTURE
DES CRYSTAUX,
APPLIQUÉE
A PLUSIEURS GENRES DE SUBSTANCES CRYSTALLISÉES;

Par M. l'Abbé HAÜY, de l'Académie Royale des Sciences, Professeur d'Humanités dans l'Université de Paris.

A PARIS,
Chez Gogué & Née de la Rochelle, Libraires, Quai des Augustins, près le Pont Saint-Michel.

M. DCC. LXXXIV.
Sous le privilége de l'Académie.

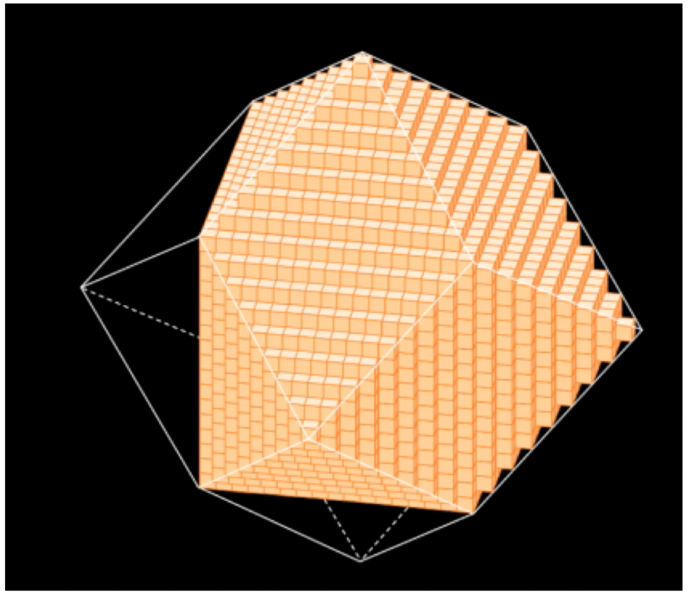
solide primitif

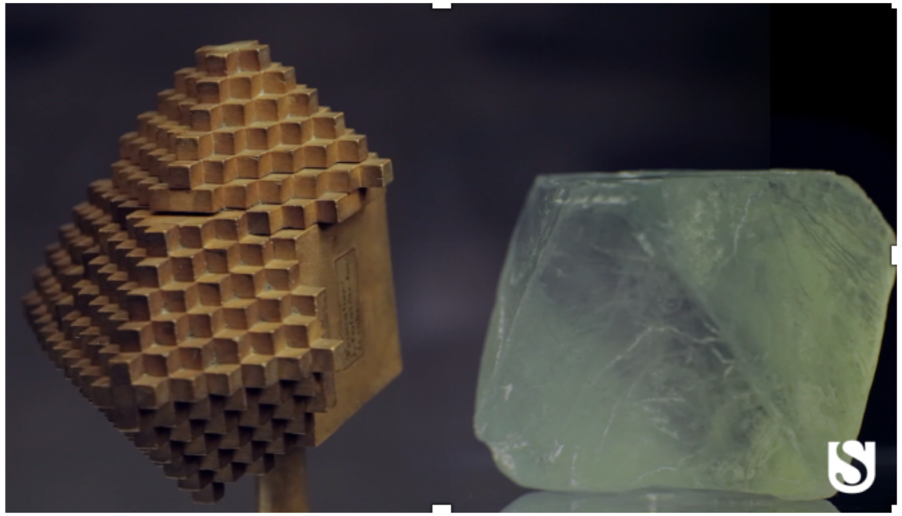
↓

molécule intégrante

↓

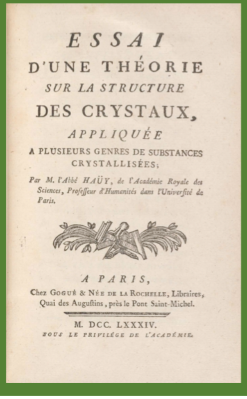
loi des décroissements rationnels





2- Cause interne de la forme des cristaux naturels

René Just Haüy
(1784)



ESSAI
D'UNE THÉORIE
SUR LA STRUCTURE
DES CRYSTAUX,
APPLIQUÉE
A PLUSIEURS GENRES DE SUBSTANCES
CRYSTALLISÉES;
Par M. l'Abbé HAÜY, de l'Académie Royale des Sciences, Professeur d'Humanités dans l'Université de Paris.

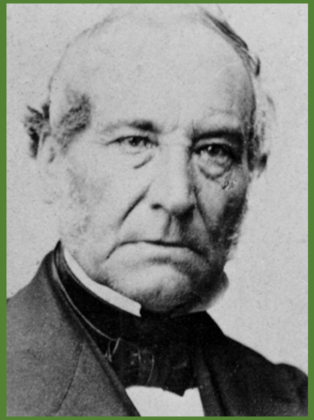
A PARIS,
Chez Gogué & Née de la Rochelle, Libraires, Quai des Augustins, près le Pont Saint-Michel.
M. DCC. LXXXIV.
SOUS LE PRIVILÈGE DE L'ACADÉMIE.

solide primitif

molécule intégrante

loi des décroissements 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 conventionnelle

8 – Projection stéréographique

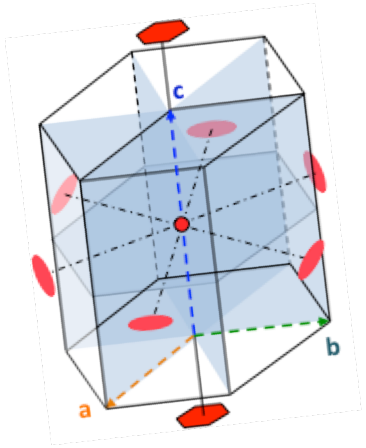
9 – Roto-inversions

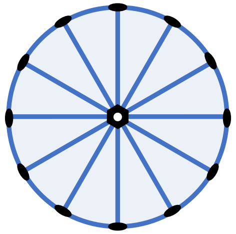
10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques

11 – Les 7 systèmes cristallins

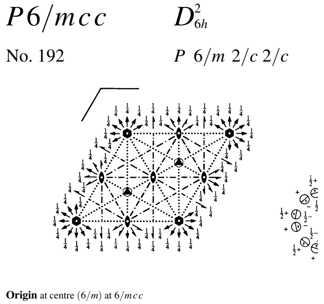
12 – Les 14 réseaux de Bravais

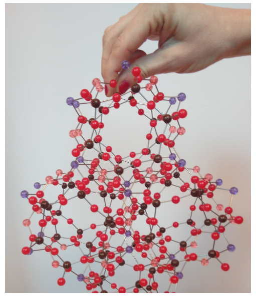
13 – Les 230 groupes d’espace





$\frac{6}{m}mm$





3 - Réseau, maille, motif

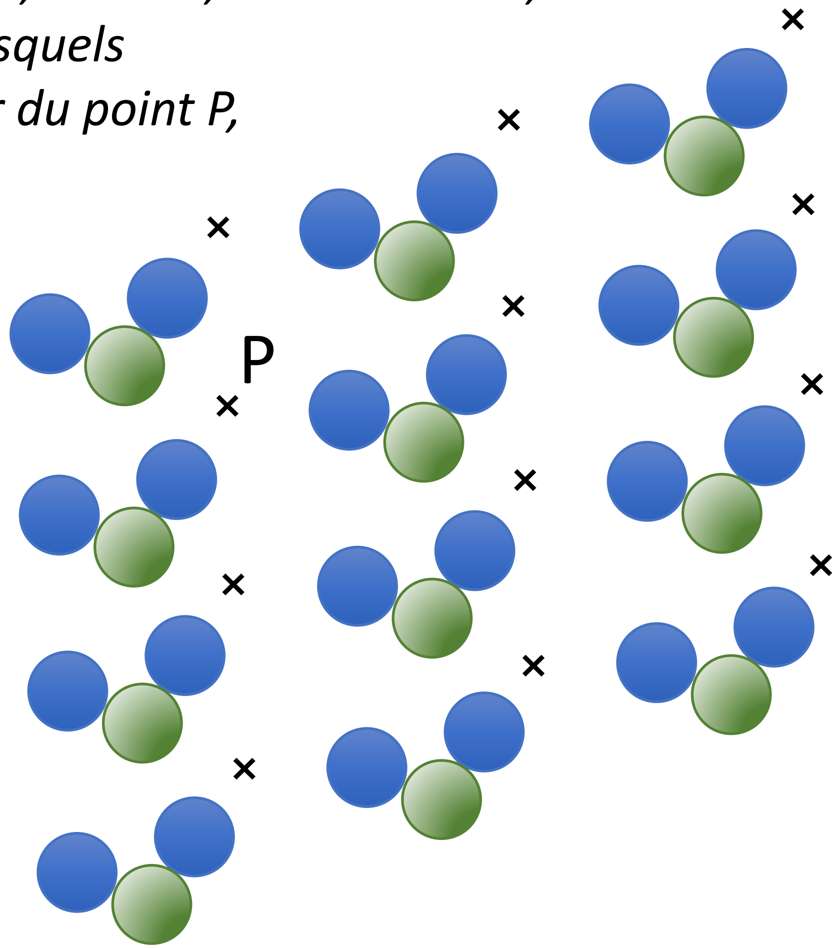
le postulat de Bravais

*« 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 → 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 :

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

u, v , w : entiers relatifs

translation de réseau

3 - Réseau, maille, motif

réseau ➔ comment repérer les nœuds

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

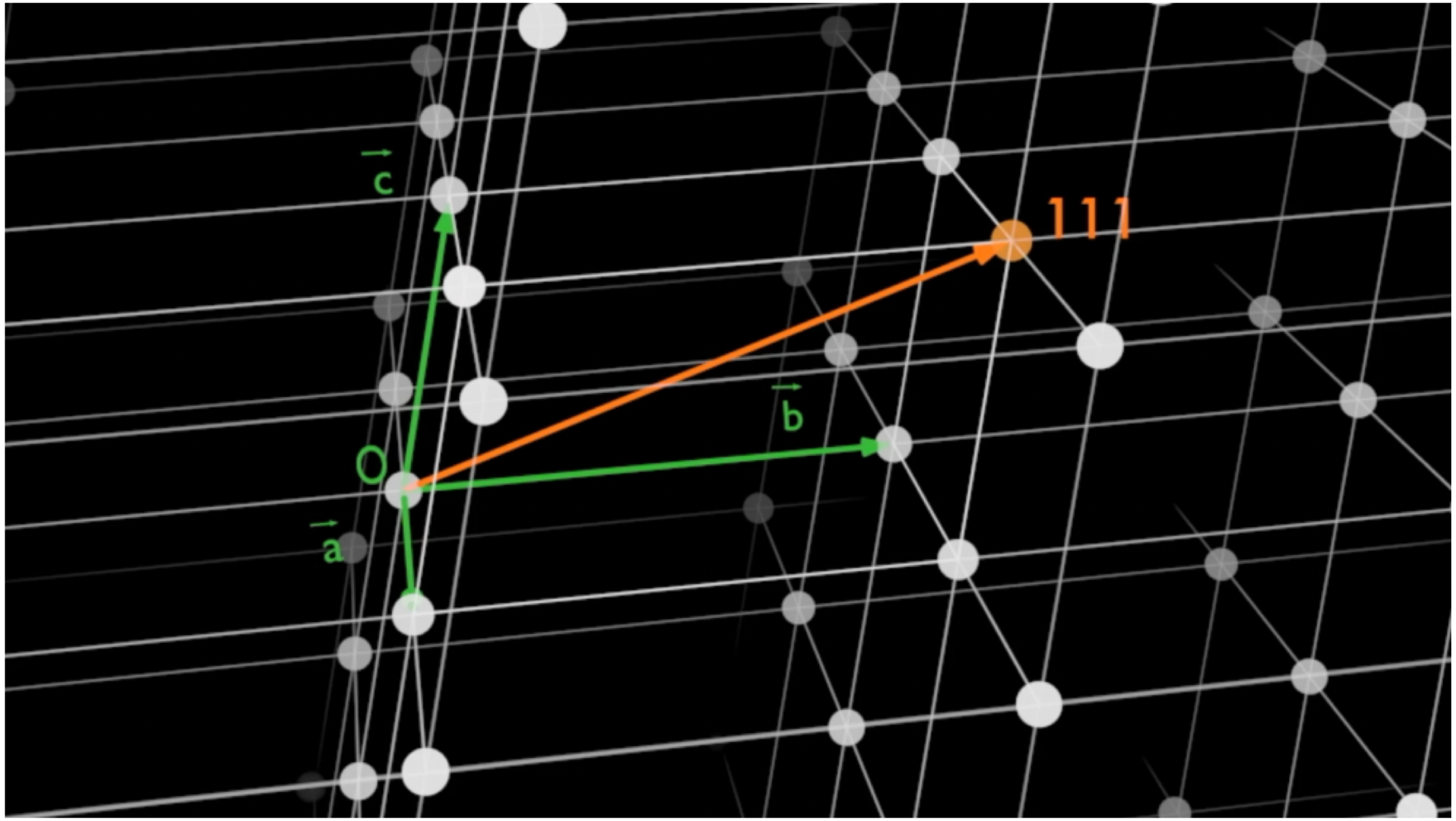
➔ nœud 111

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

➔ nœud $\bar{1}20$

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

➔ nœud $1\bar{1}2$



3 - Réseau, maille, motif

vecteurs de base → maille

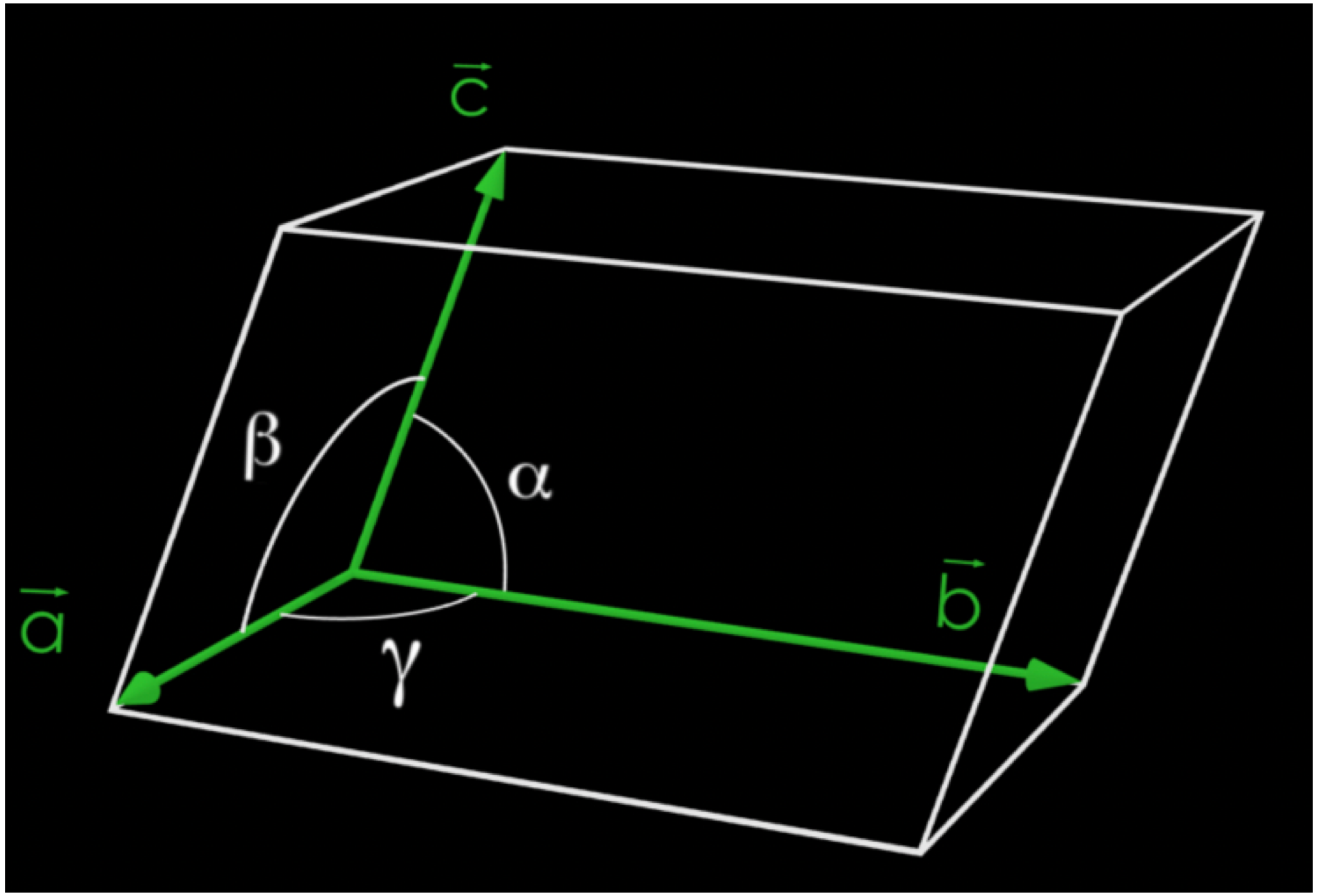
3 vecteurs de base : $\vec{a}$, $\vec{b}$ et $\vec{c}$

6 paramètres :

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

volume :

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



maille à 2D

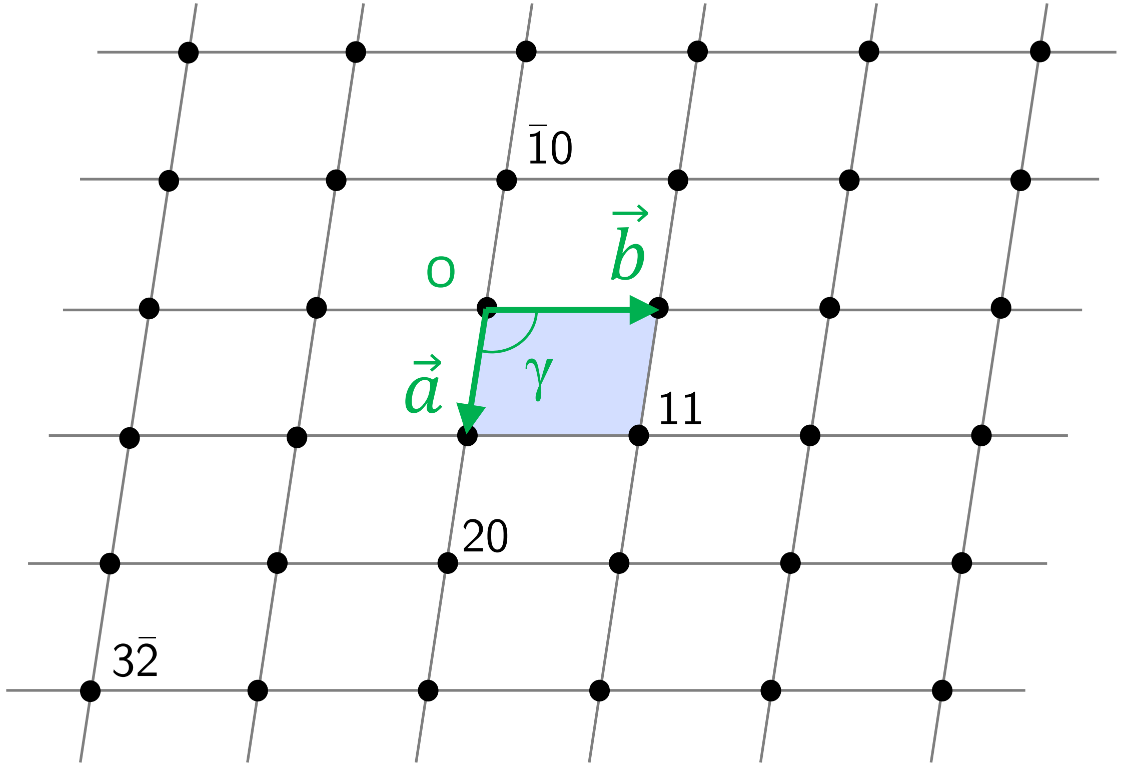
2 vecteurs de base : $\vec{a}$ et $\vec{b}$

3 paramètres :

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

surface :

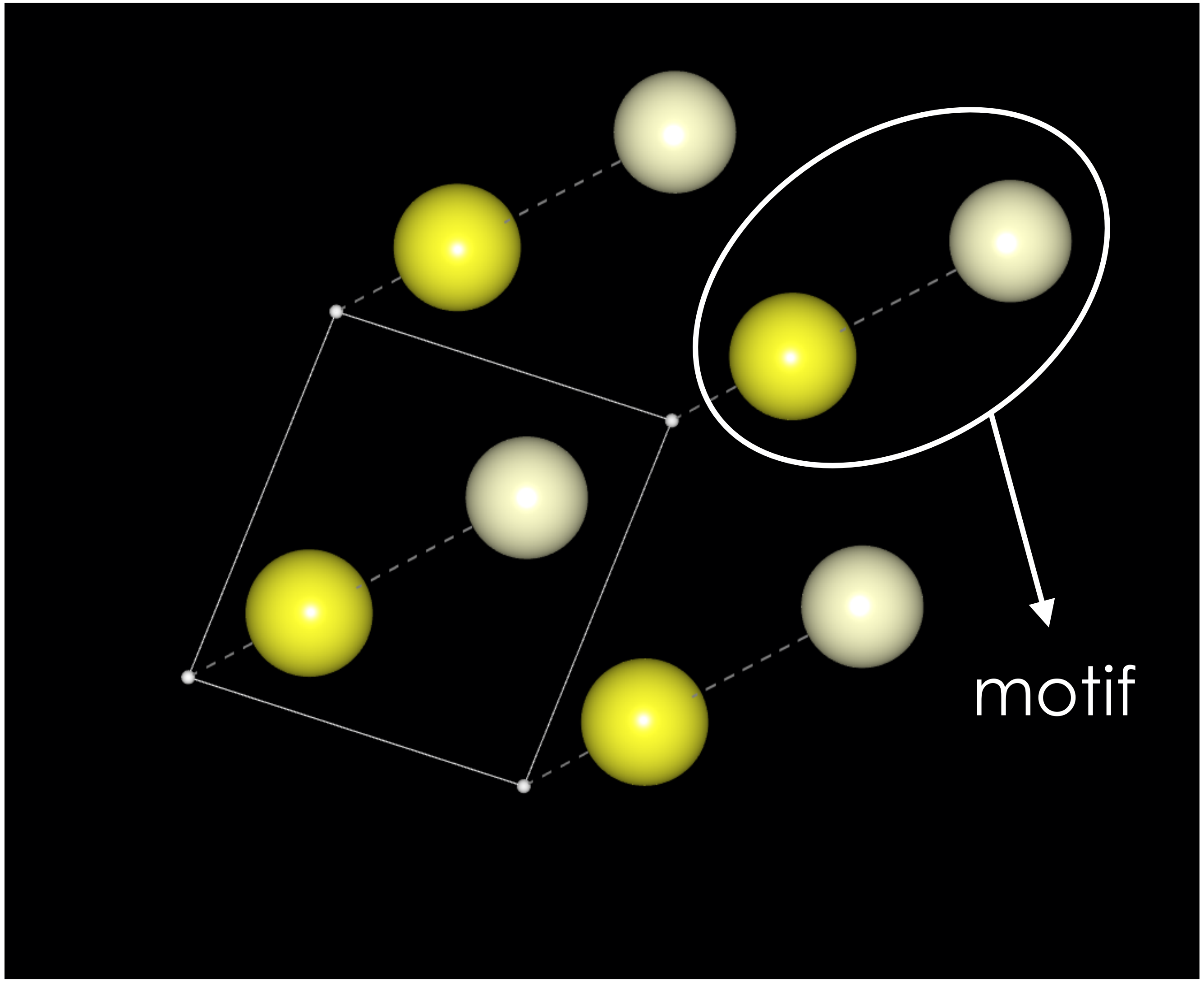
$$S = |\vec{a} \times \vec{b}|$$



3 - Réseau, maille, motif

motif

contenu de la maille élémentaire

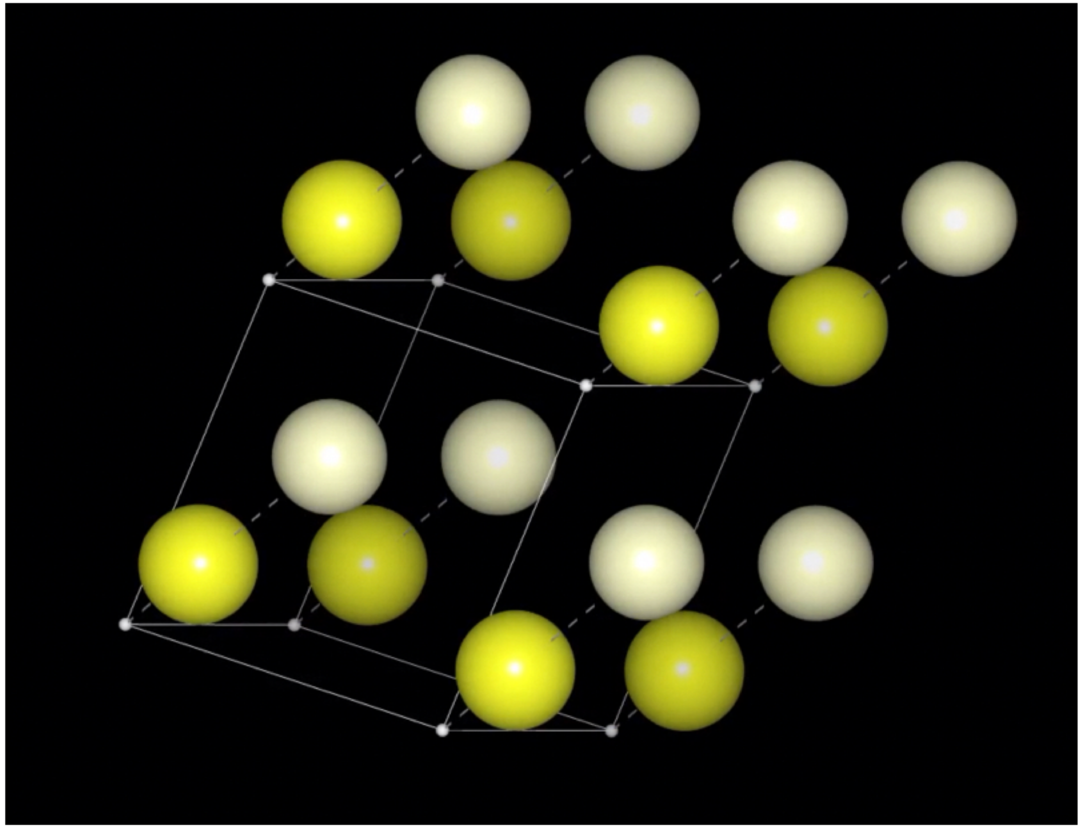


3 - Réseau, maille, motif

motif

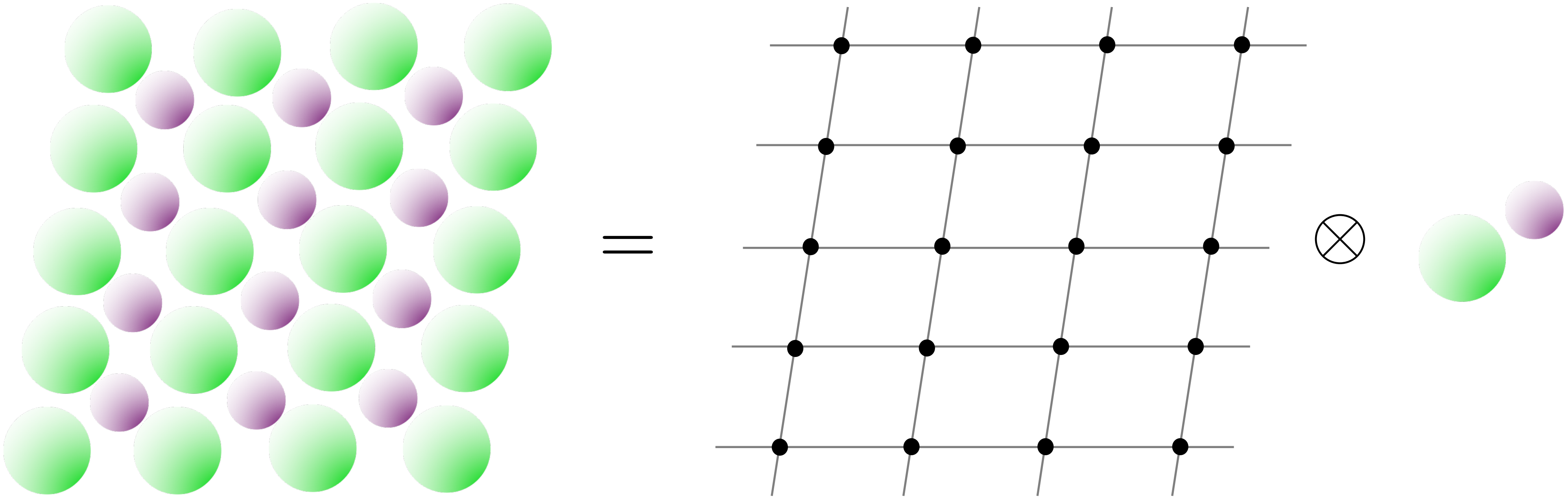
contenu de la maille élémentaire

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 conventionnelle

8 – Projection stéréographique

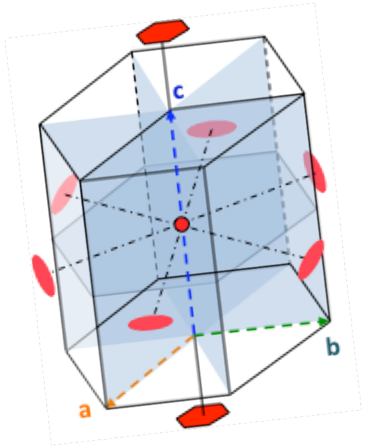
9 – Roto-inversions

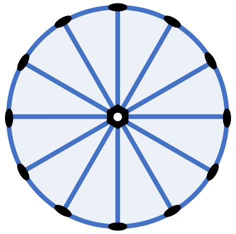
10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques

11 – Les 7 systèmes cristallins

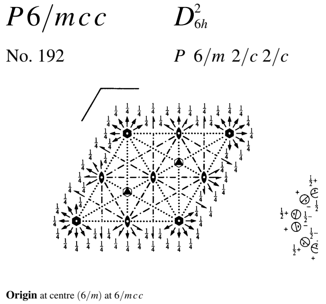
12 – Les 14 réseaux de Bravais

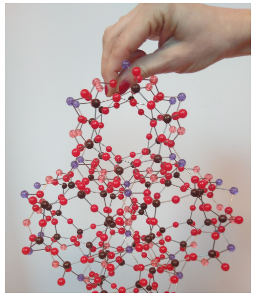
13 – Les 230 groupes d’espace





$\frac{6}{m}mm$

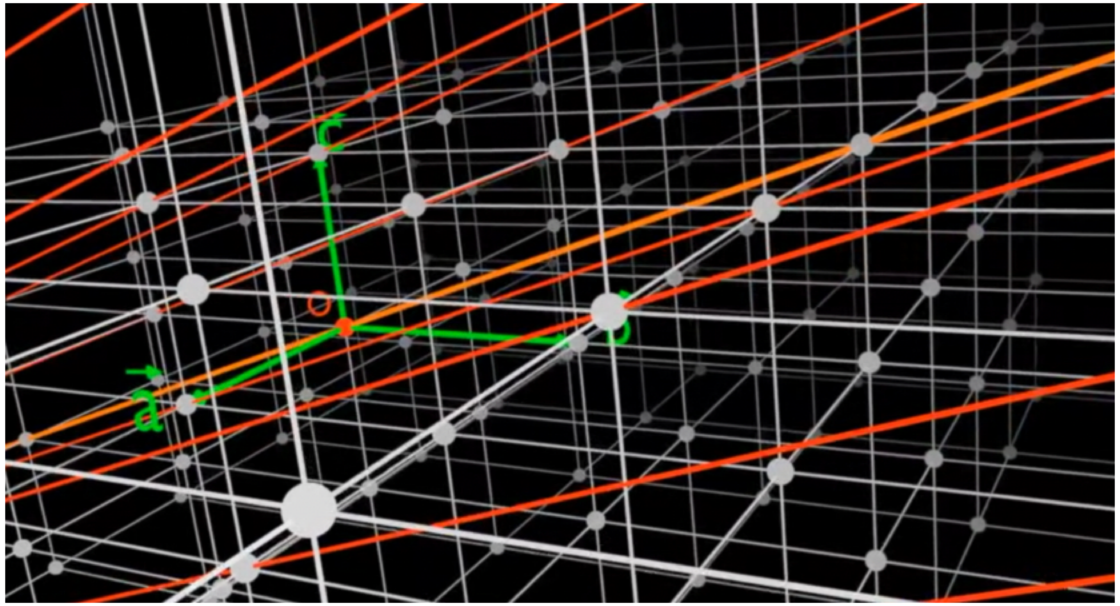




famille de rangées

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

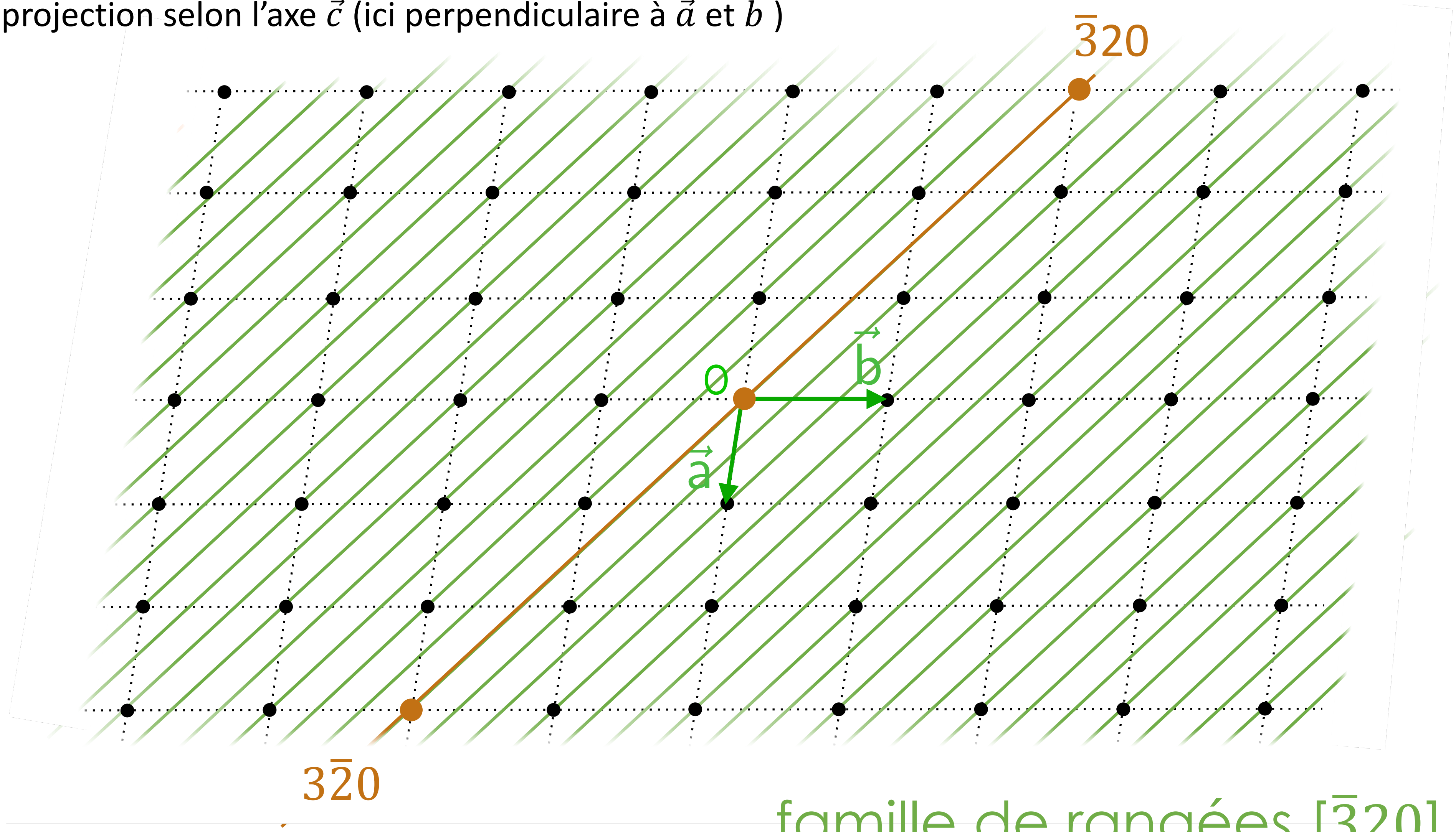
Toute rangée est parallèle à une **rangée particulière passant par l'origine** (qui est un nœud) et **par un nœud de coordonnées (u, v, w)** ➔ **famille de rangées [uvw]**



famille de rangées [021]

famille de rangées

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

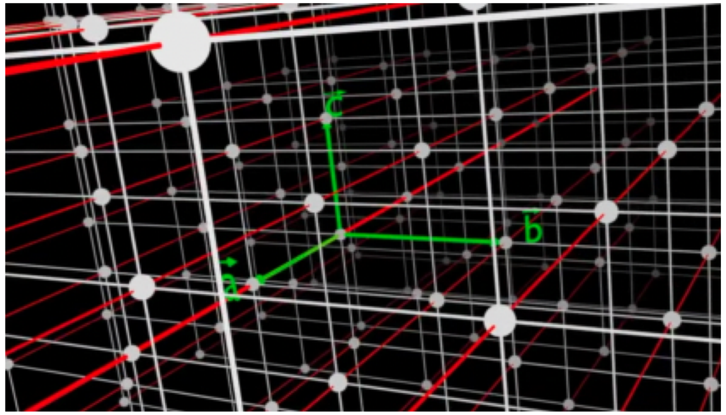


famille de rangées $[\bar{3}20]$ ou $[3\bar{2}0]$

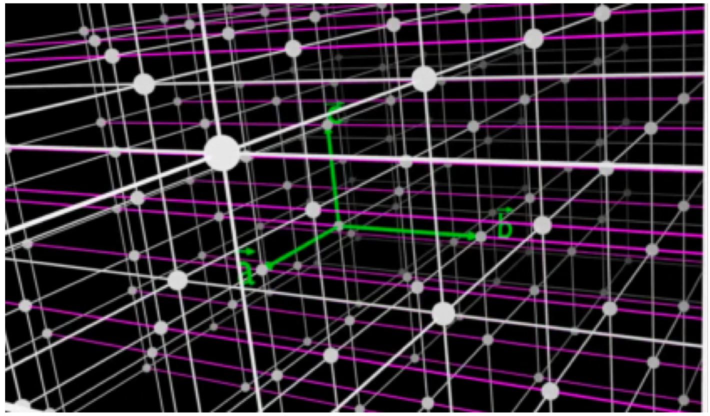
4 – Rangées et plans réticulaires

famille de rangées

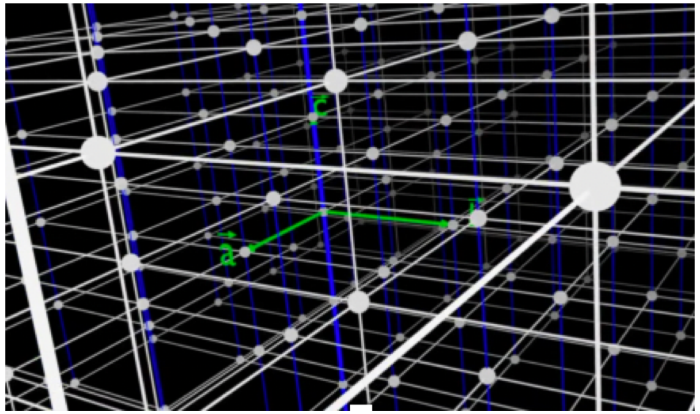
[100]



[010]



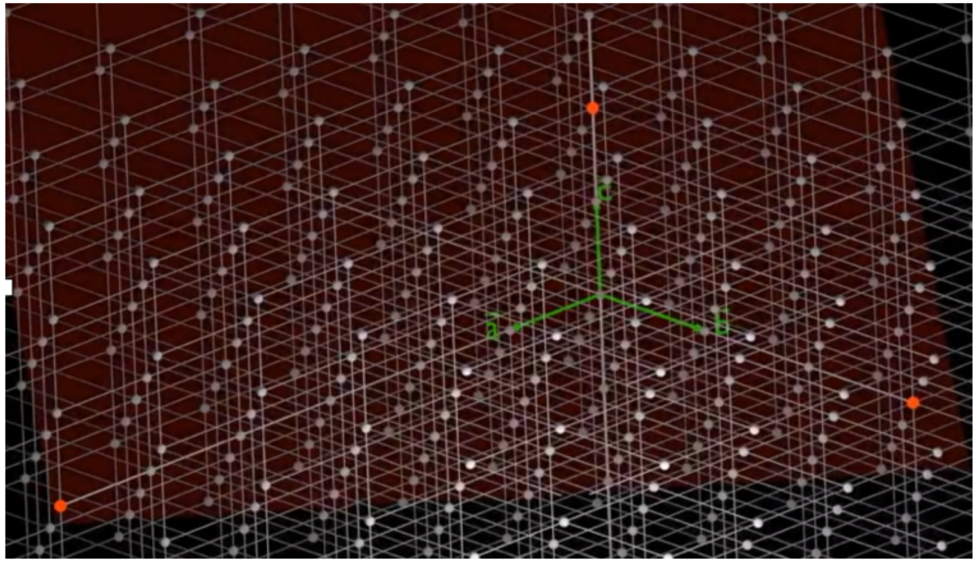
[001]

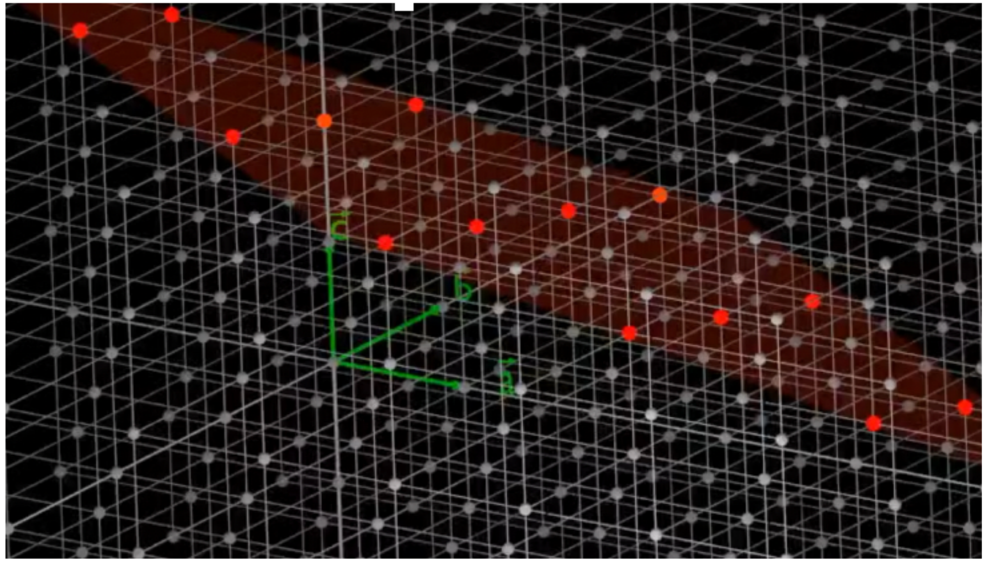


famille de plans réticulaires

plan réticulaire : plan passant par 3 nœuds non colinéaires

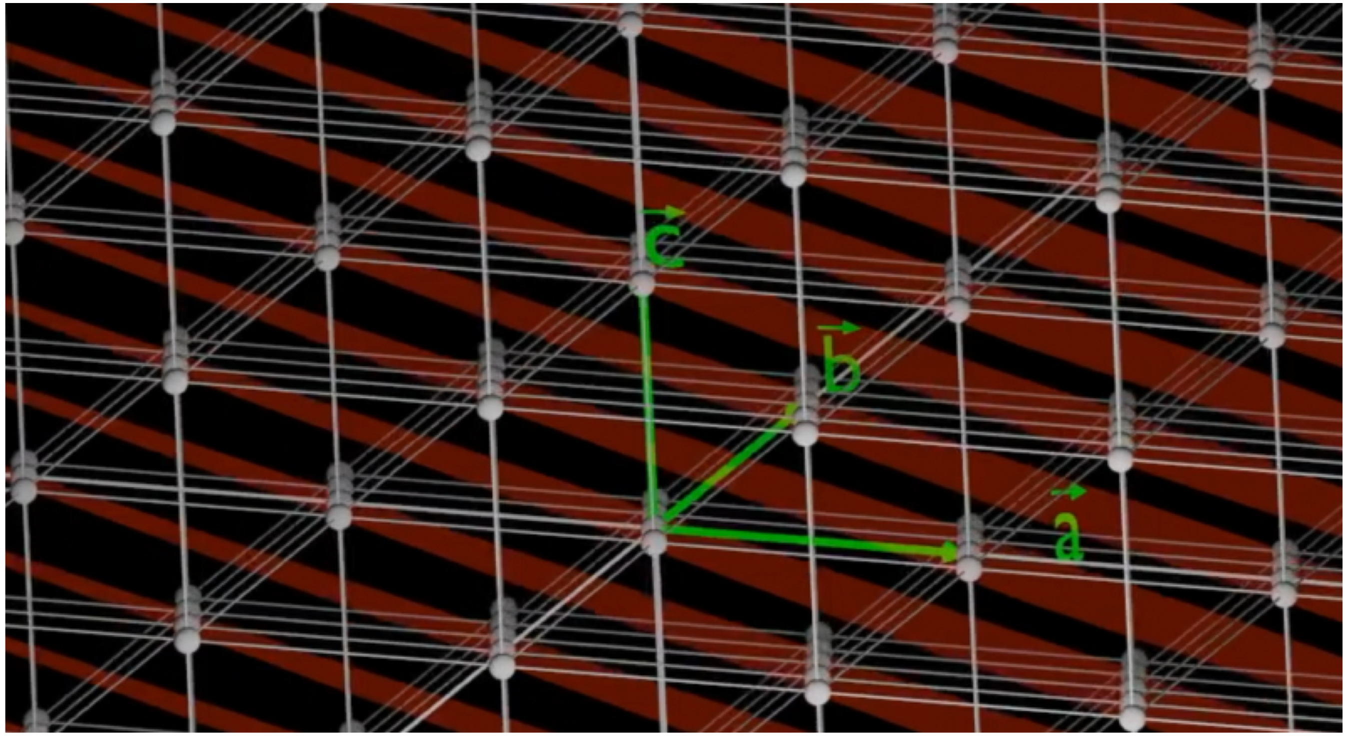
→ Un plan réticulaire contient une infinité de nœuds et forme un réseau 2D.





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

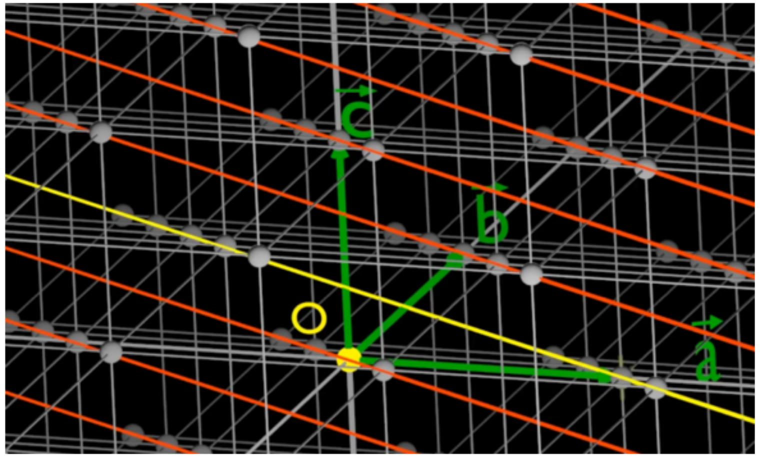
→ Une famille de plans réticulaires contient l'ensemble des nœuds du réseau 3D.

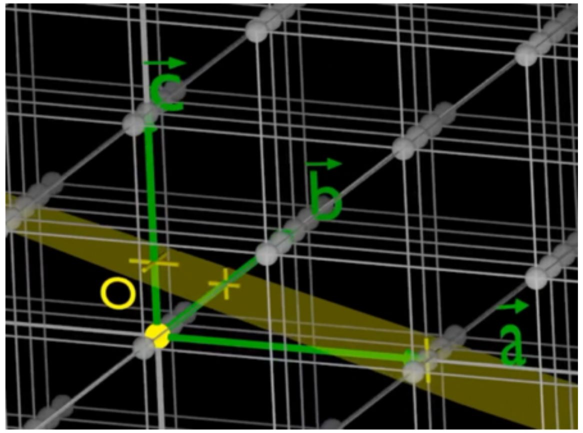


famille de plans réticulaires

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

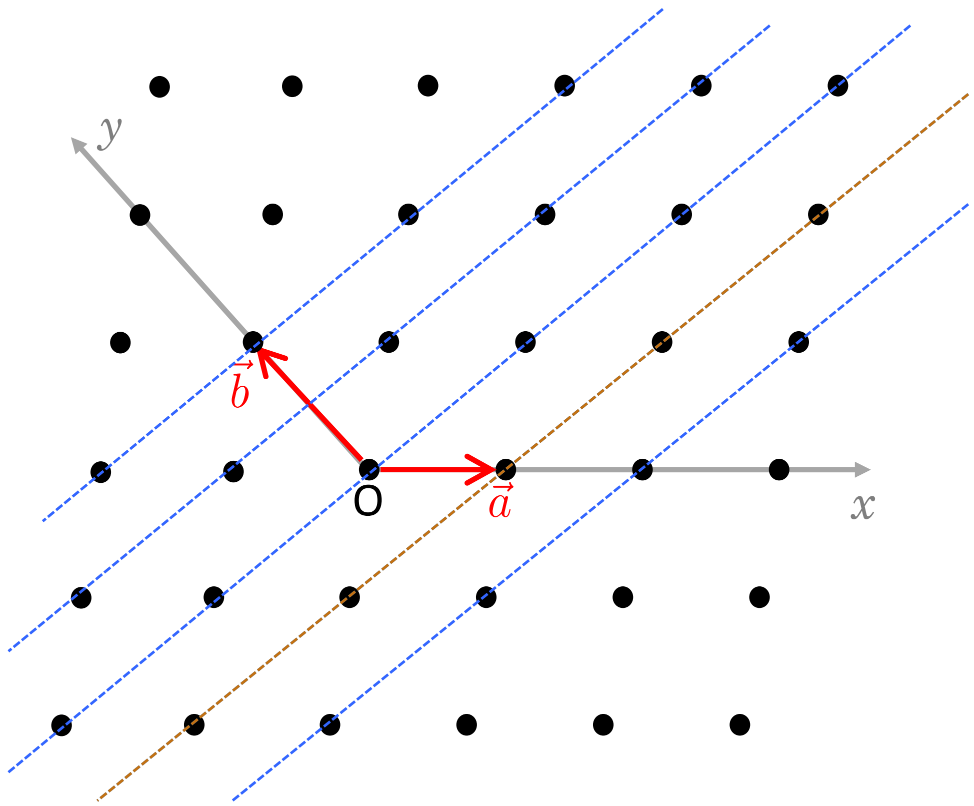
➔ famille de plans (123)

famille de plans réticulaires

Une **famille de plans réticulaires** est noté $(\boldsymbol{hkl})$

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

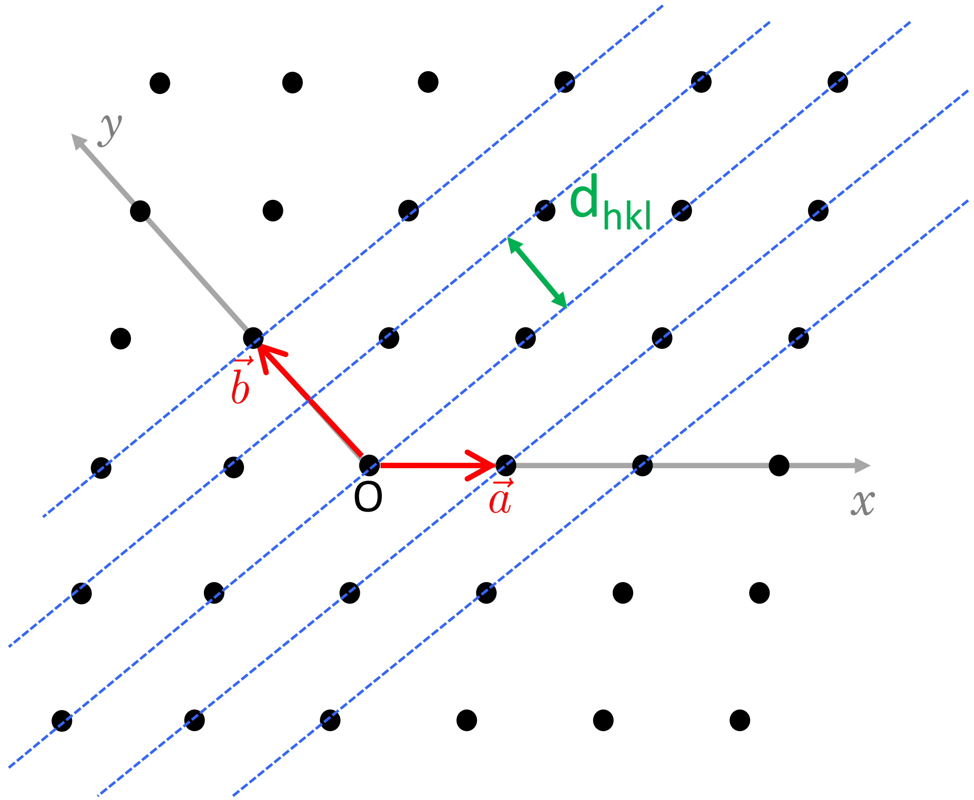
projection dans le plan (***a***,***b***)



$(\boldsymbol{hkl})$ 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 $(1\bar{2}0)$

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 conventionnelle

8 – Projection stéréographique

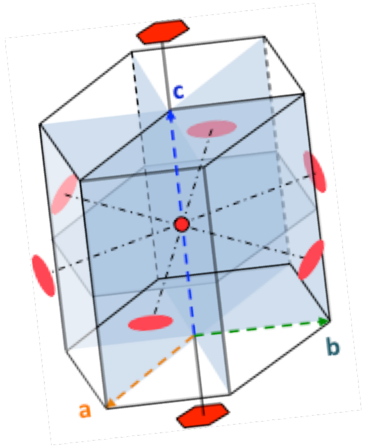
9 – Roto-inversions

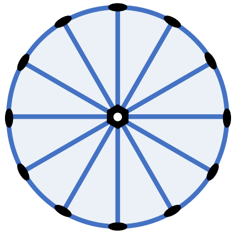
10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques

11 – Les 7 systèmes cristallins

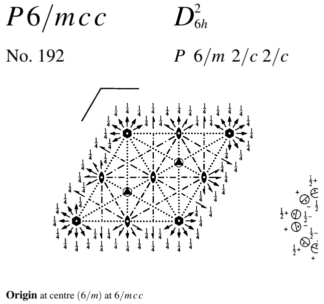
12 – Les 14 réseaux de Bravais

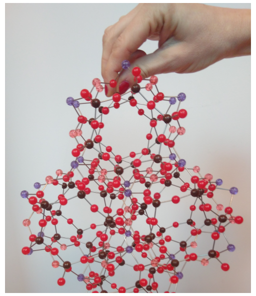
13 – Les 230 groupes d'espace





$\frac{6}{m}mm$

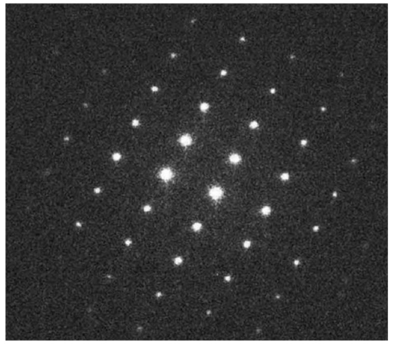




5 – Réseau réciproque

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 $\vec{a}^\star$, $\vec{b}^\star$ et $\vec{c}^\star$ tels que :

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

En cristallographie : $\boxed{\sigma = 1}$

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

5 – Réseau réciproque

$$\vec{b} \cdot \vec{a}^\star = 0 \quad \Longrightarrow \vec{a}^\star \perp \vec{b}$$

$$\vec{c} \cdot \vec{a}^\star = 0 \quad \Longrightarrow \vec{a}^\star \perp \vec{c}$$

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

d'où $\vec{a} \cdot \vec{a}^\star = \alpha' \; \underbrace{\vec{a} \cdot \left(\vec{b} \times \vec{c}\right)}_{V}$

or $\vec{a} \cdot \vec{a}^\star = 1$

donc $\alpha' = \dfrac{1}{V}$

De même :

Par conséquent $\boxed{\vec{a}^\star = \dfrac{\vec{b} \times \vec{c}}{V}}$ $\boxed{\vec{b}^\star = \dfrac{\vec{c} \times \vec{a}}{V}}$ $\boxed{\vec{c}^\star = \dfrac{\vec{a} \times \vec{b}}{V}}$

Unité de longueur : $Å^{-1}$ ou nm^{-1}

5 – Réseau réciproque (RR)

relations avec le réseau direct

- On peut montrer[1] : $\boxed{V\,V^\star = 1}$

[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 :* ***A****×(****B****×****C****)=(****A****.****C****)****B****-(****A****.****B****)****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.

$$\boxed{[hkl]^\star \perp (hkl)}$$

relations avec le réseau direct

$$\boxed{[hkl]^\star \perp (hkl)}$$

exemples

Espace réciproque			Espace direct	
$\vec{a}^\star$	// $[100]^\star$	$\perp$	$(\vec{b}, \vec{c})$	$= (100)$
$\vec{b}^\star$	// $[010]^\star$	$\perp$	$(\vec{c}, \vec{a})$	$= (010)$
$\vec{c}^\star$	// $[001]^\star$	$\perp$	$(\vec{a}, \vec{b})$	$= (001)$

- Calcul d'une distance interréticulaire :

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

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

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

5 – Réseau réciproque (RR) relations avec le réseau direct

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

$$\vec{t}^{\star}_{hkl} \perp \vec{t}_{uvw}$$ ➔ produit scalaire nul

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

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

donc $$\boxed{h\,u + k\,v + l\,w = 0}$$

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 conventionnelle

8 – Projection stéréographique

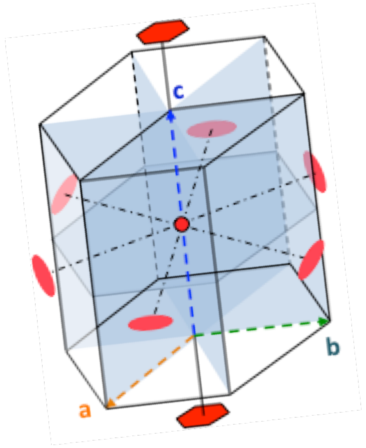
9 – Roto-inversions

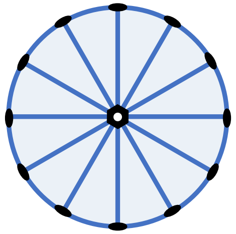
10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques

11 – Les 7 systèmes cristallins

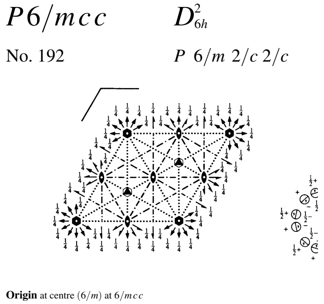
12 – Les 14 réseaux de Bravais

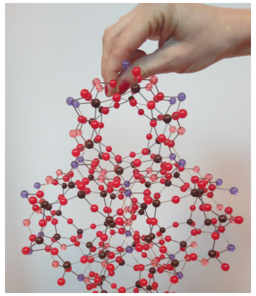
13 – Les 230 groupes d'espace





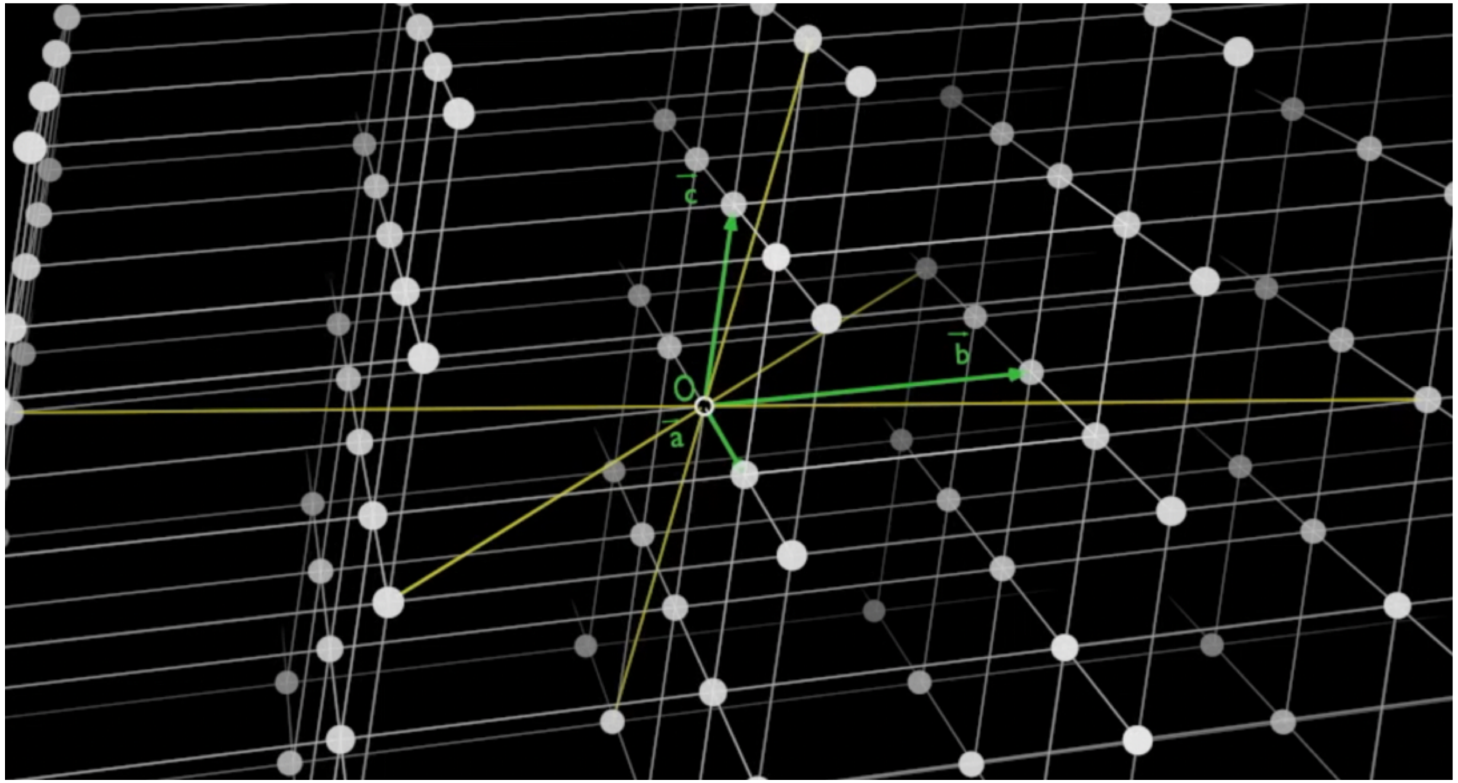
$\frac{6}{m}mm$





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

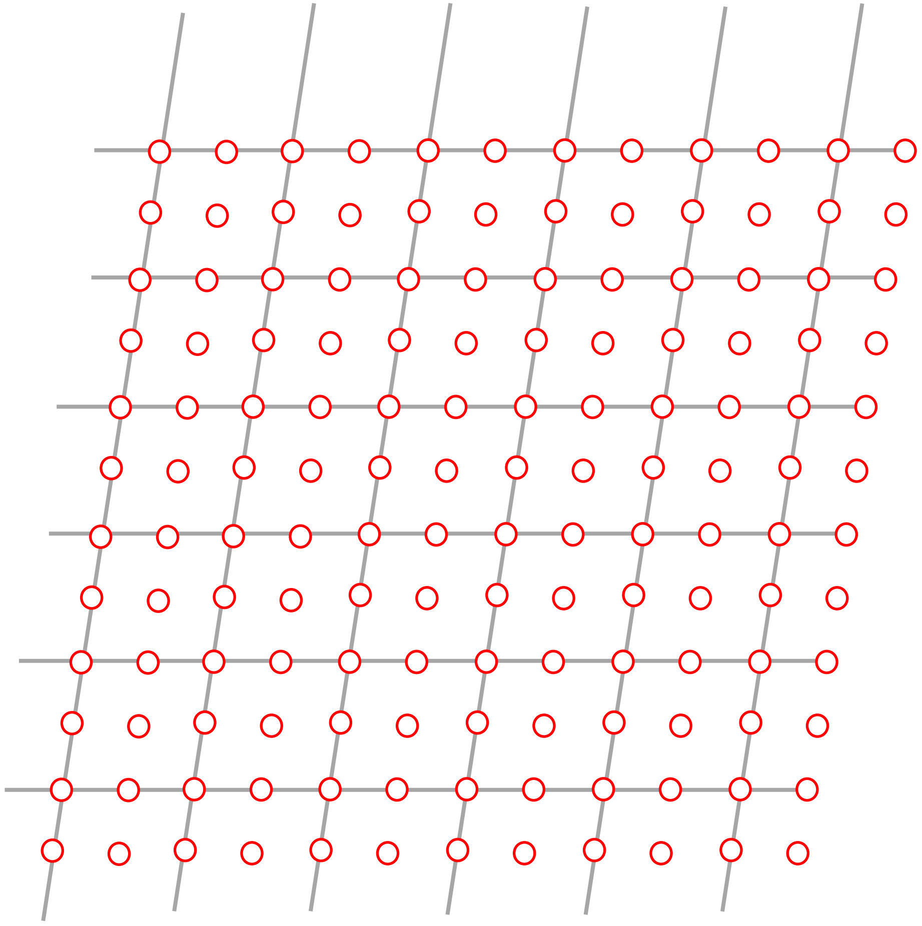
- en chaque nœud
- au milieu de chaque arête
- au milieu de chaque face
- au centre de chaque maille



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



Les axes de rotation compatibles avec le réseau cristallin

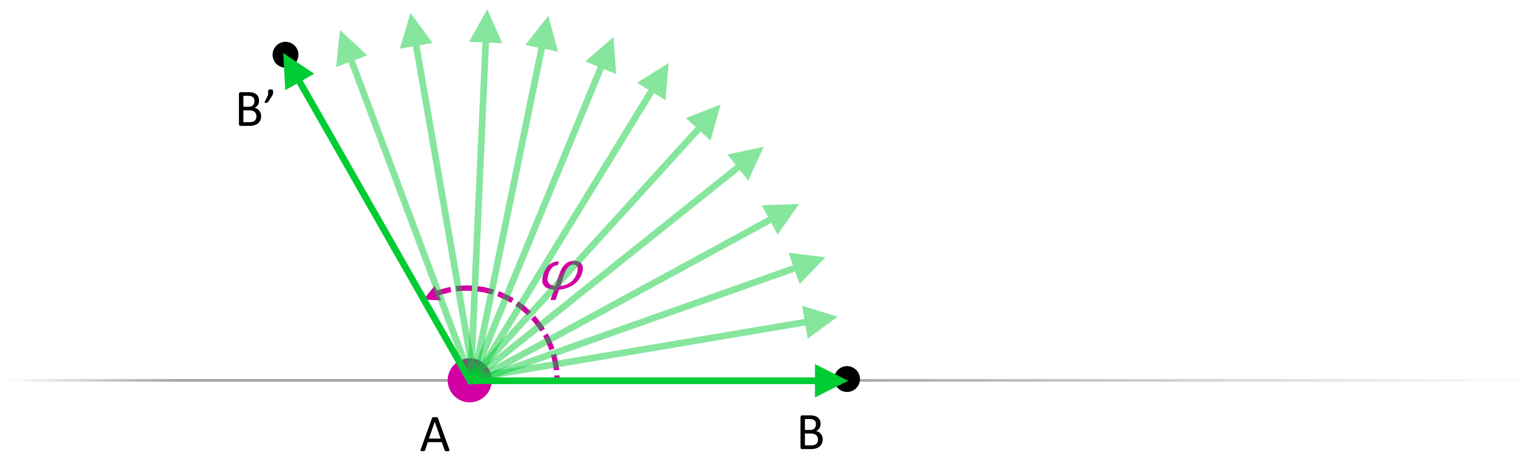
axes de rotation $\mathbf{A_n}$ d'angle $\varphi = \dfrac{2\pi}{n}$

A_2 A_3 A_4 A_6

D'autres valeurs de n sont-elles possibles ?

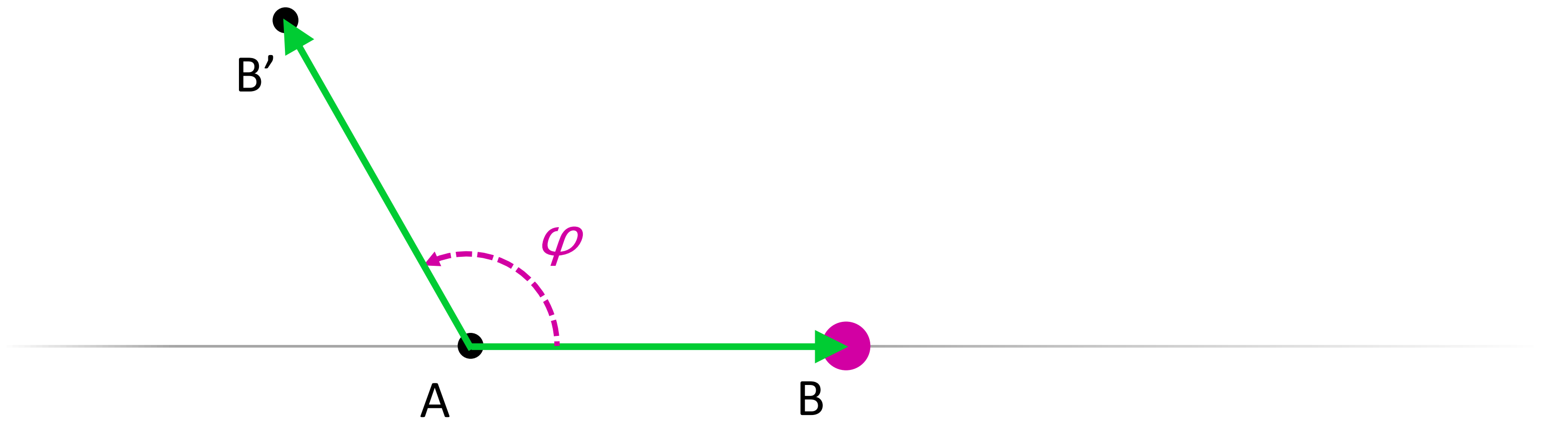
Les axes de rotation compatibles avec le réseau cristallin

axe A_n d'angle φ **en A**



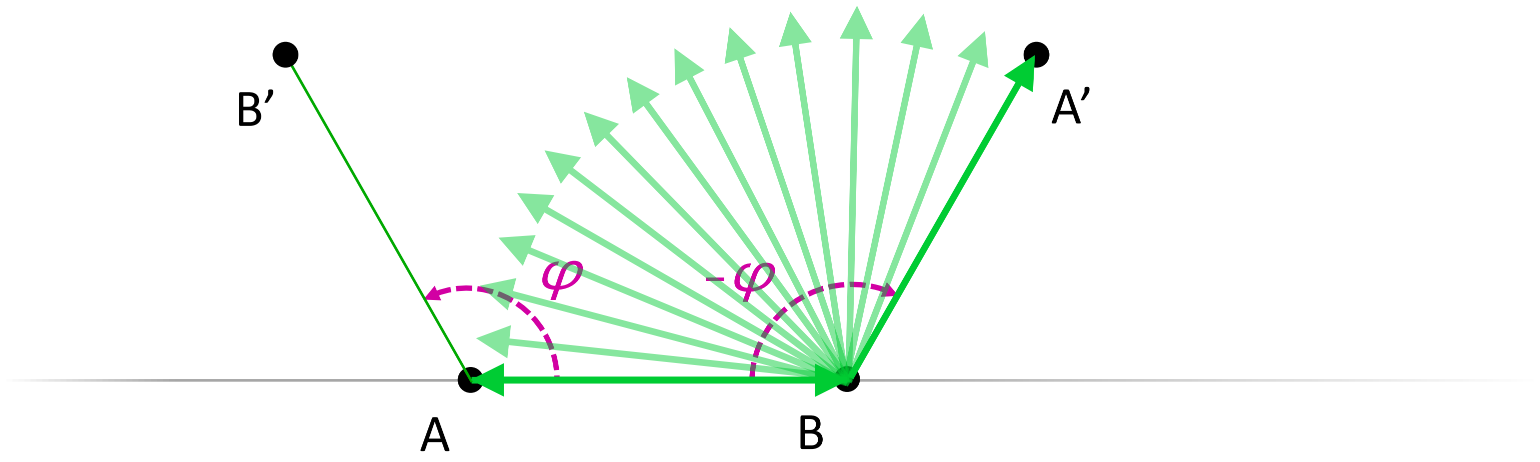
Les axes de rotation compatibles avec le réseau cristallin

axe A_n d'angle φ **en A** **en B**



Les axes de rotation compatibles avec le réseau cristallin

axe A_n d'angle φ **en A** **en B**

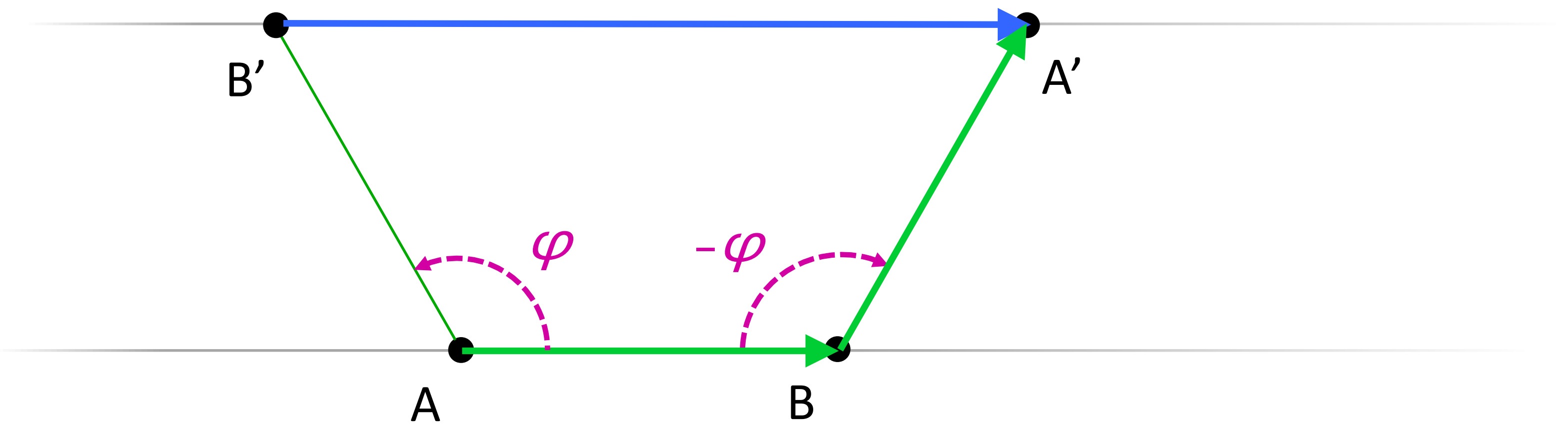


Les axes de rotation compatibles avec le réseau cristallin

Quelles sont les valeurs de φ possibles ?

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

?



B'A' = k AB avec k entier

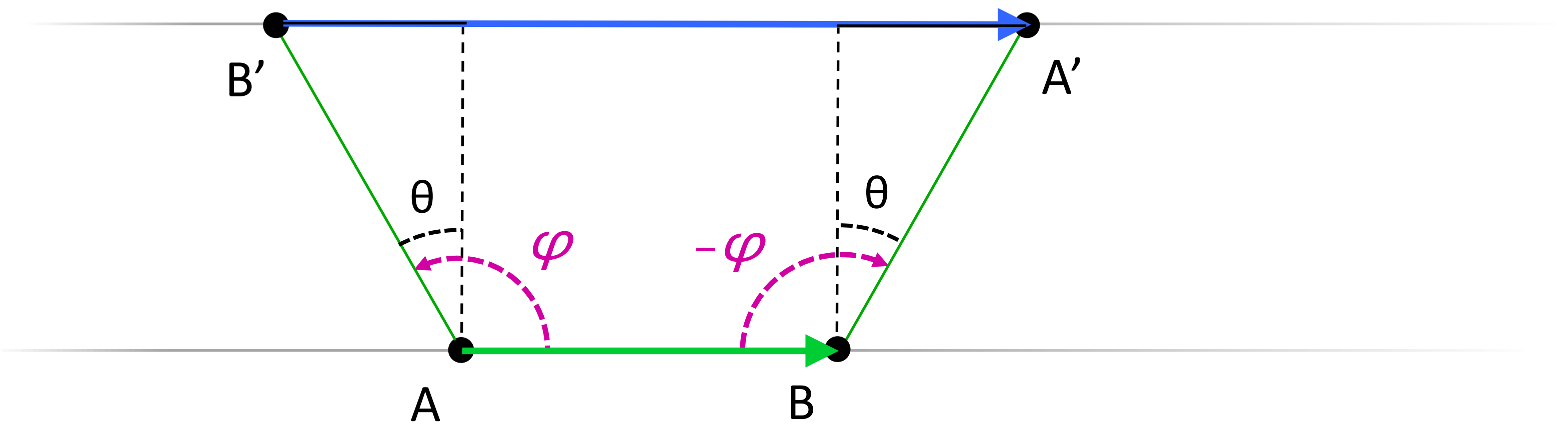
?

Les axes de rotation compatibles avec le réseau cristallin

Quelles sont les valeurs de φ possibles ?

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

?



$B'A' = k\, AB$ avec k entier

$B'A' = AB + 2\, AB' \sin\theta$ où $\theta = \varphi - \pi/2$

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

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 φ) 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 conventionnelle

8 – Projection stéréographique

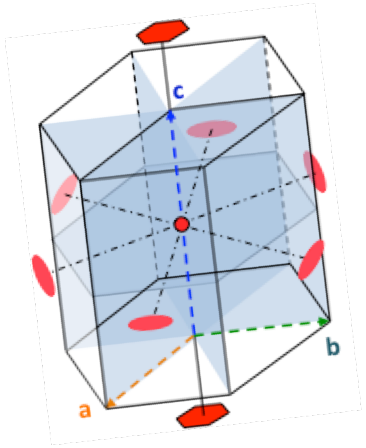
9 – Roto-inversions

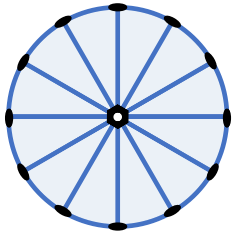
10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques

11 – Les 7 systèmes cristallins

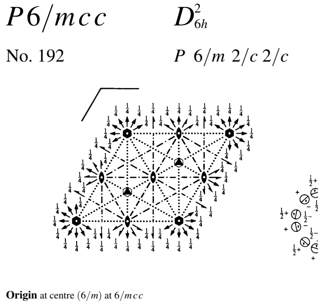
12 – Les 14 réseaux de Bravais

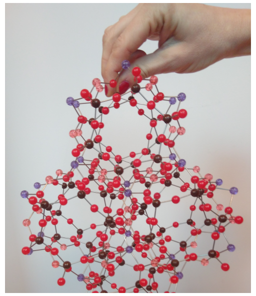
13 – Les 230 groupes d'espace



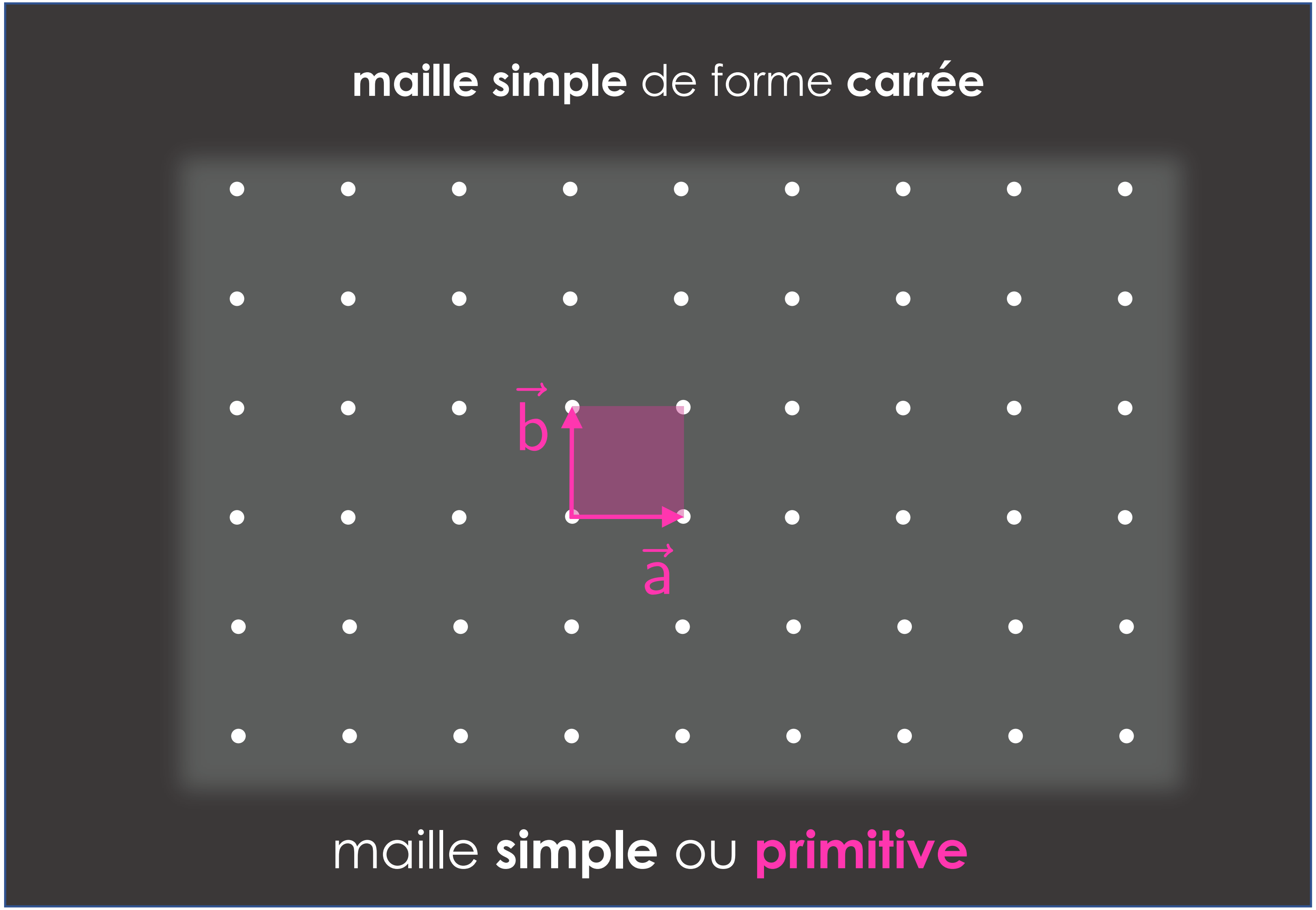


$\frac{6}{m}mm$





7 – Maille conventionnelle

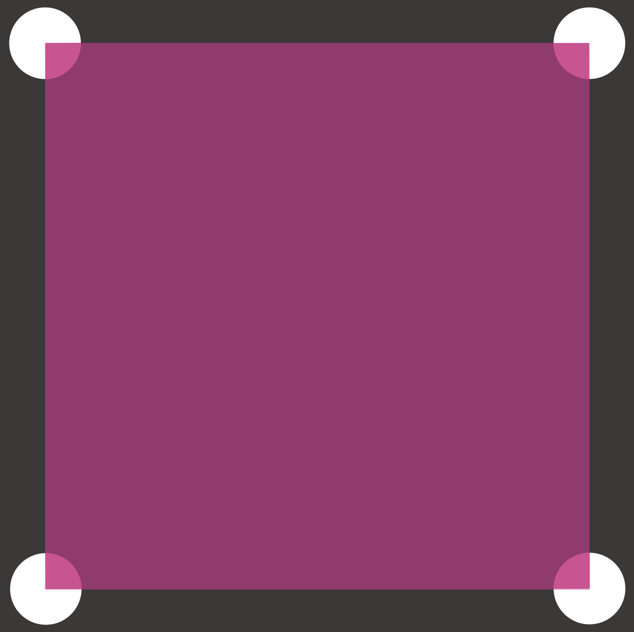


7 - Maille conventionnelle

un seul nœud

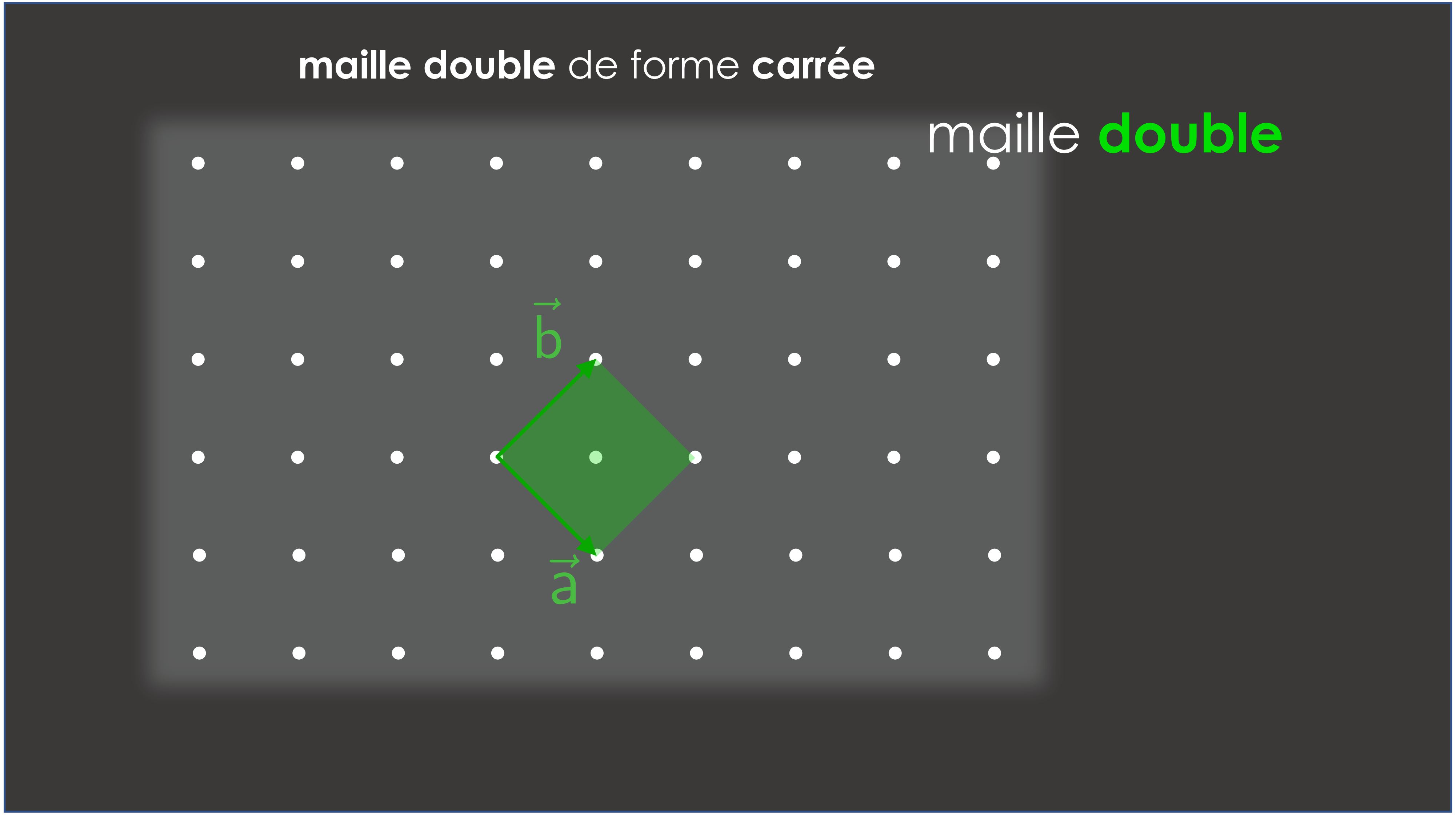
par maille

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



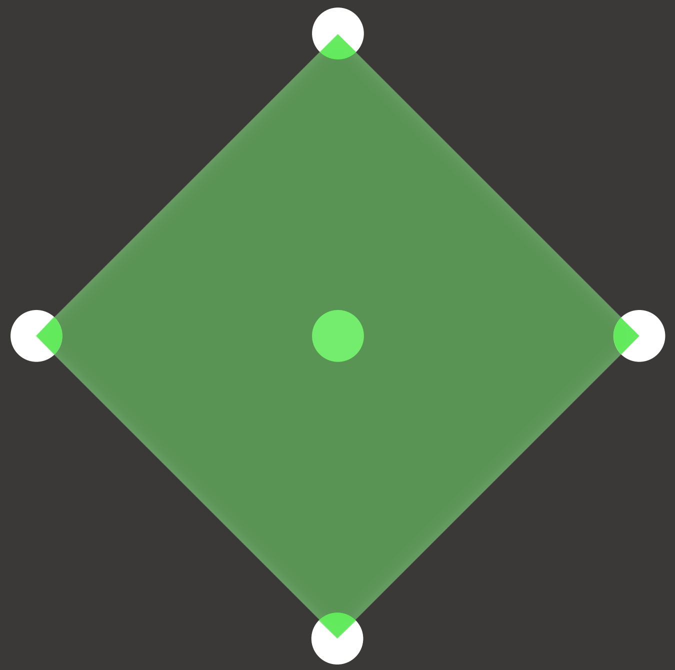
maille **simple** ou **primitive**

7 - Maille conventionnelle



7 - Maille conventionnelle

maille double de forme **carrée**



maille **double**

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

deux nœuds

par maille

7 - Maille conventionnelle

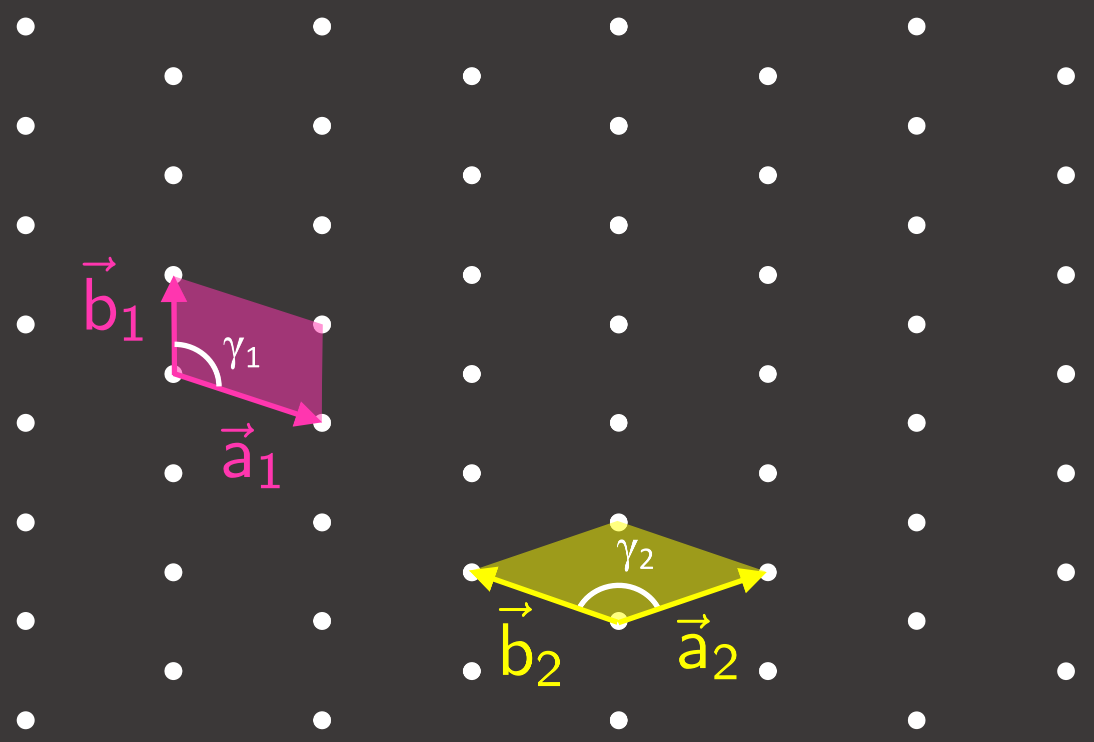
Visualiser deux mailles simples de forme différentes

maille 1

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

maille 2

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

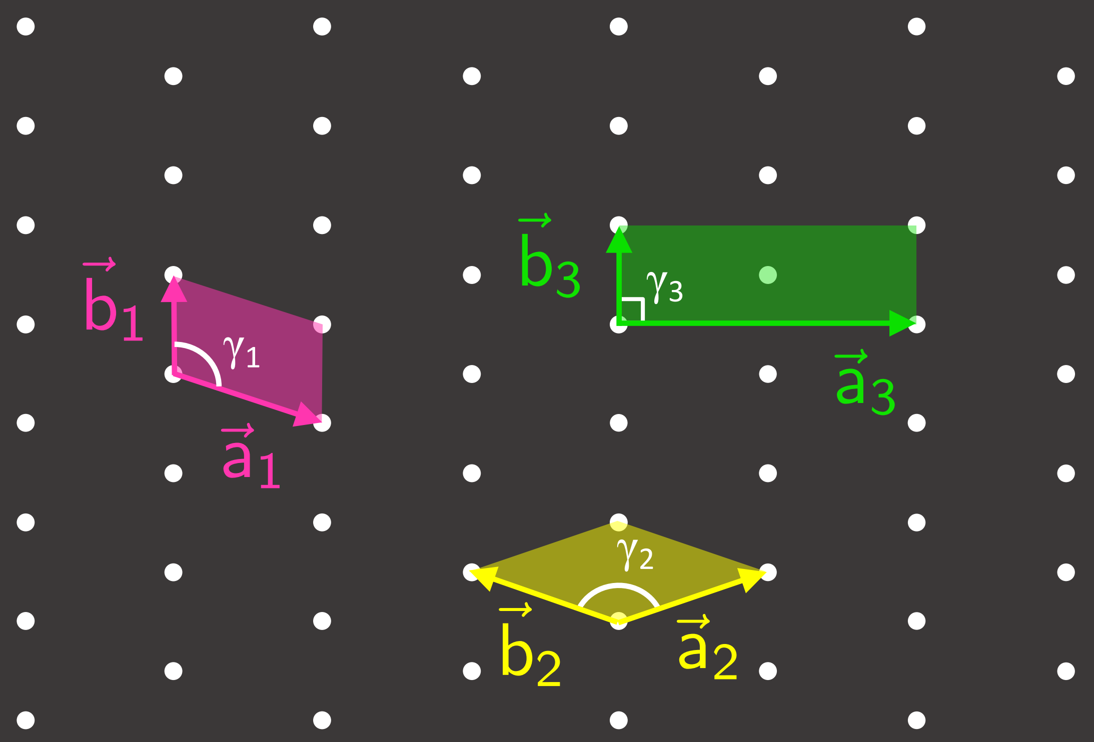


Visualiser une **maille double centrée**

maille 1
$a_1 \neq b_1,\ \gamma_1 \neq 90°$

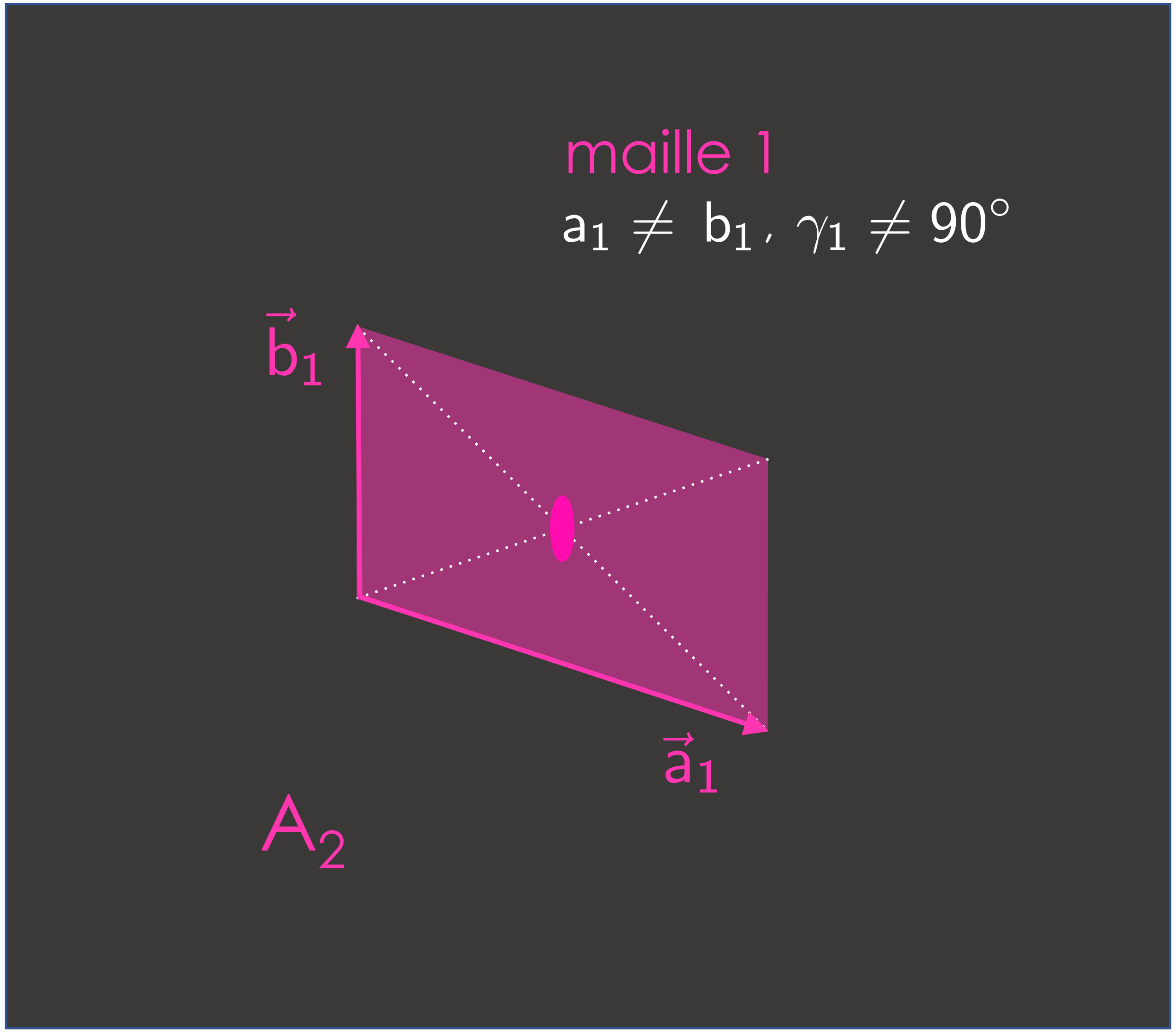
maille 2
$a_2 = b_2,\ \gamma_2 \neq 90°$

maille 3
$a_3 \neq b_3,\ \gamma_3 = 90°$

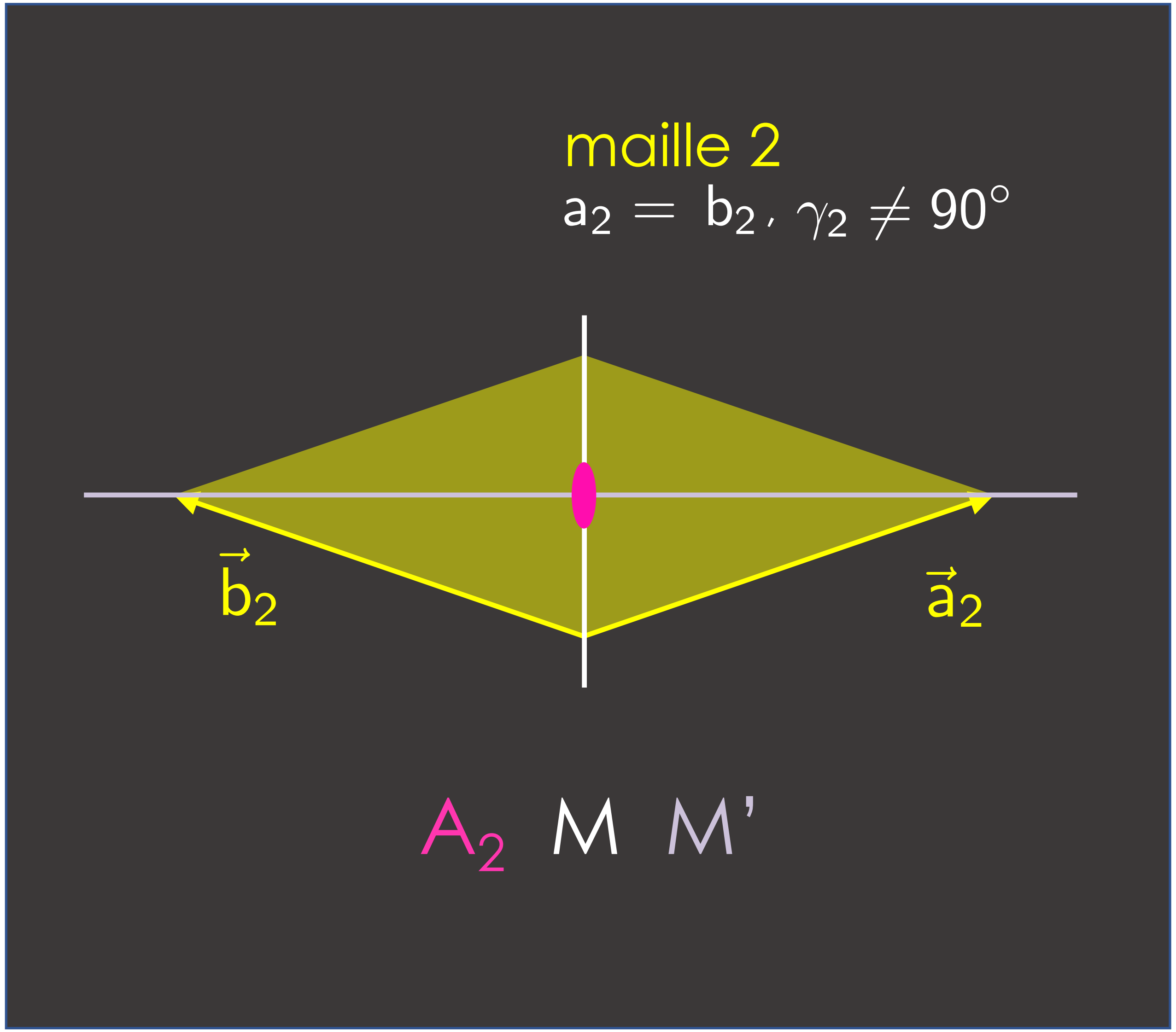


maille conventionnelle ?

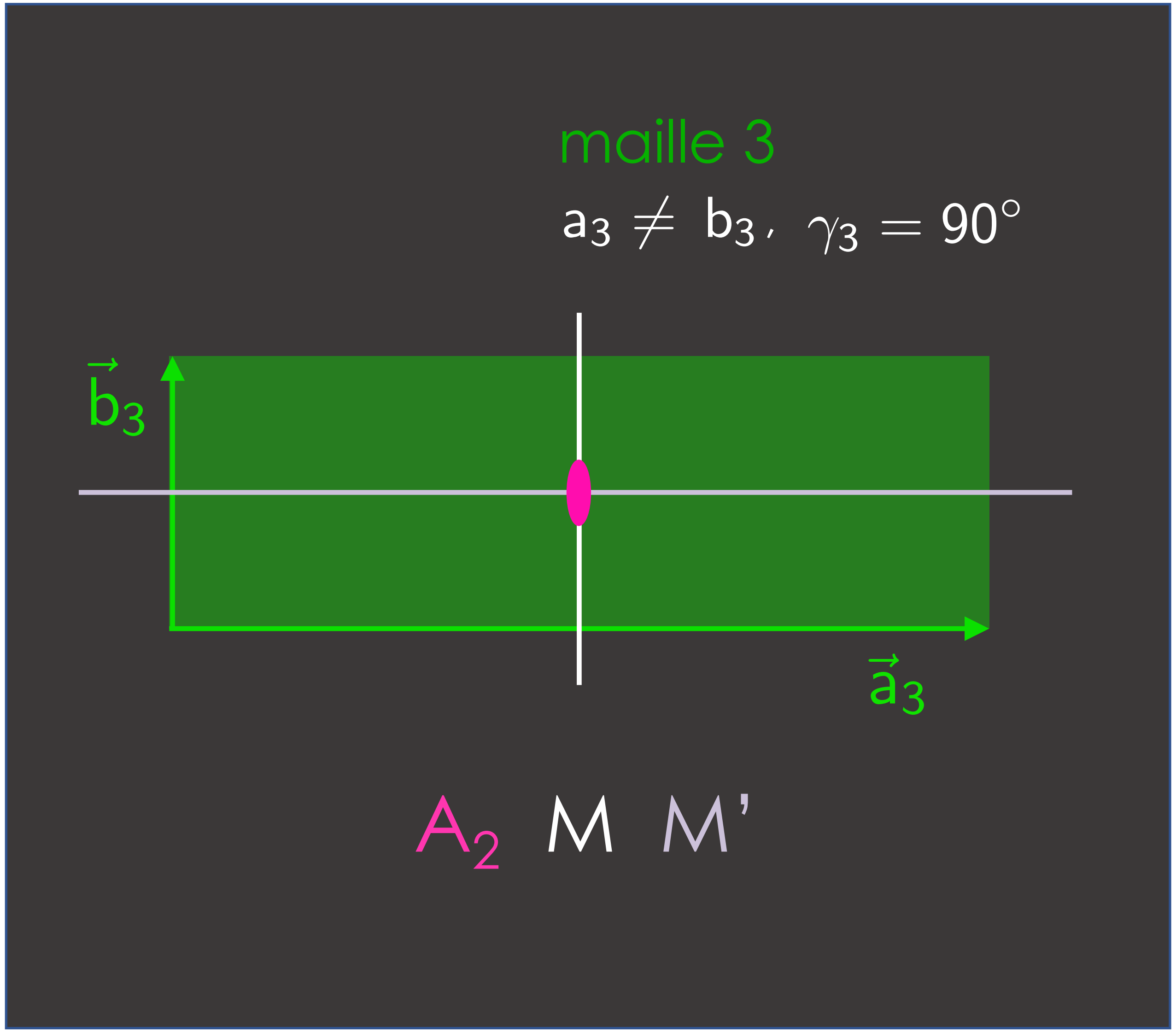
7 - Maille conventionnelle



7 - Maille conventionnelle



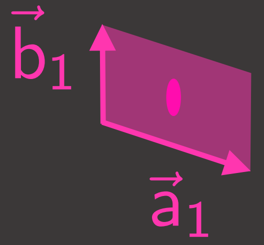
7 - Maille conventionnelle



7 - Maille conventionnelle

maille 1: simple

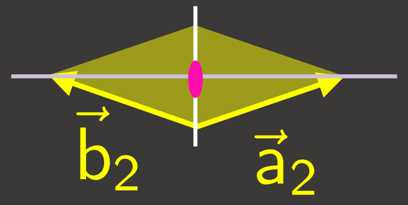
$a_1 \neq b_1 ,\ \gamma_1 \neq 90°$



A_2

maille 2 : simple

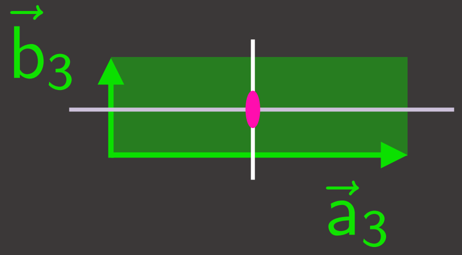
$a_2 = b_2 ,\ \gamma_2 \neq 90°$



A_2 M M'

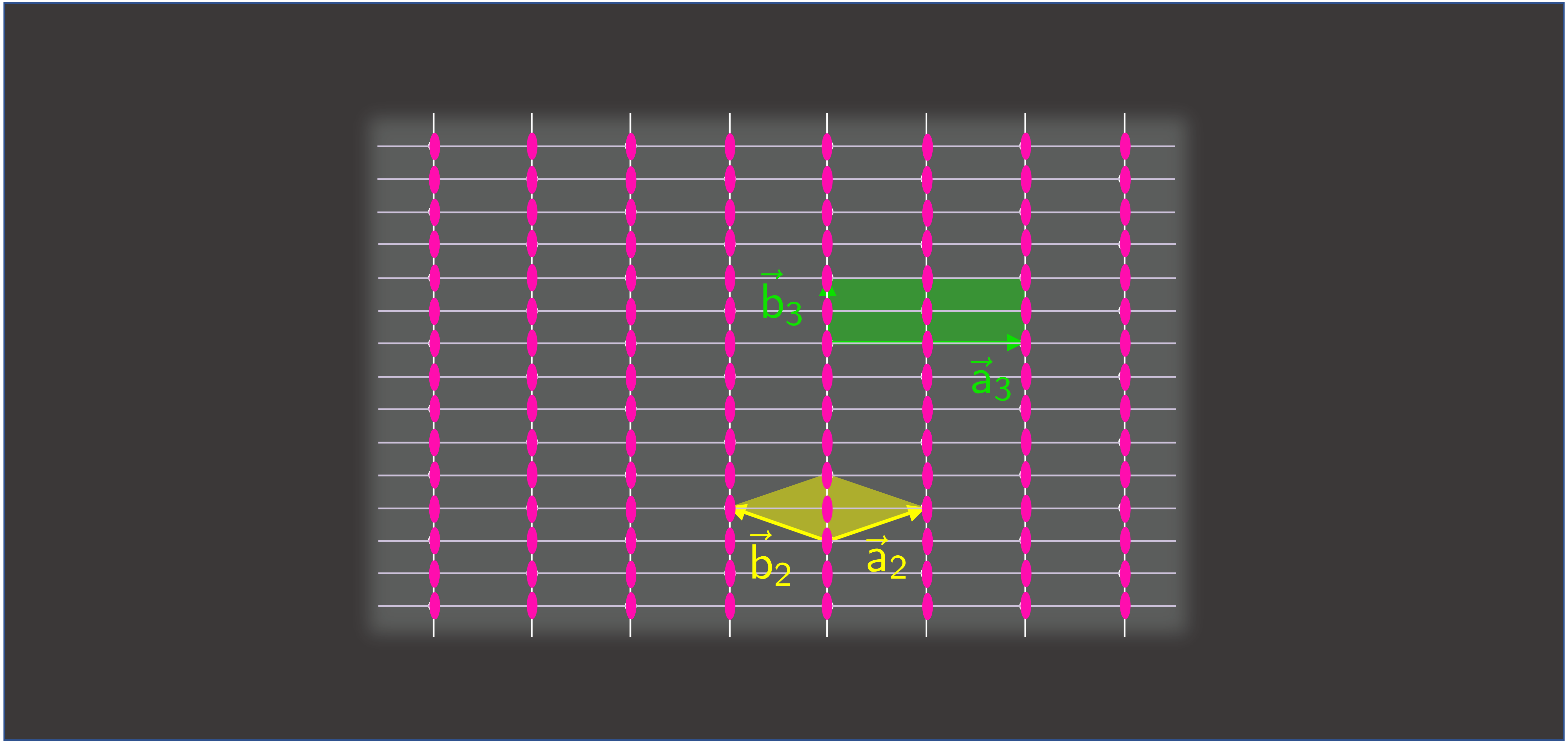
maille 3 : double

$a_3 \neq b_3 ,\ \gamma_3 = 90°$



A_2 M M'

7 - Maille conventionnelle



7 - 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 conventionnelle

8 – Projection stéréographique

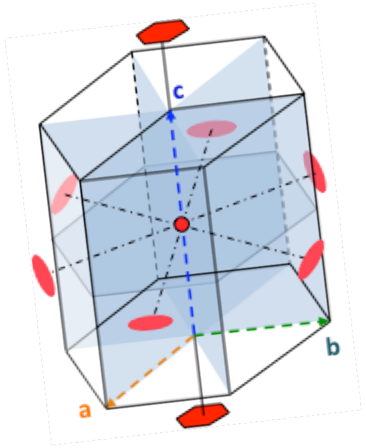
9 – Roto-inversions

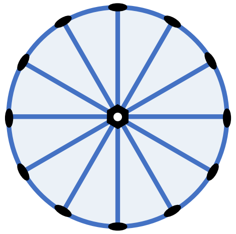
10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques

11 – Les 7 systèmes cristallins

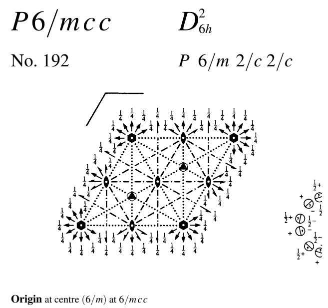
12 – Les 14 réseaux de Bravais

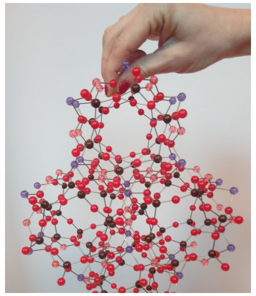
13 – Les 230 groupes d'espace





$\frac{6}{m}mm$

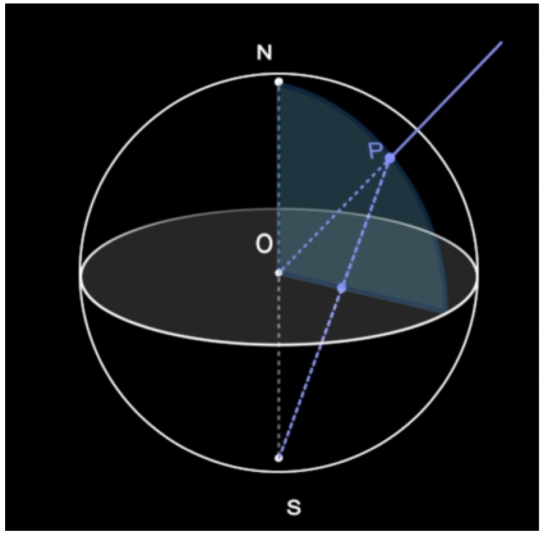


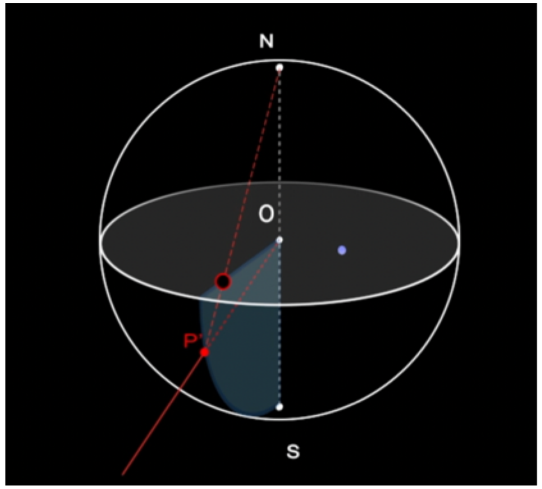


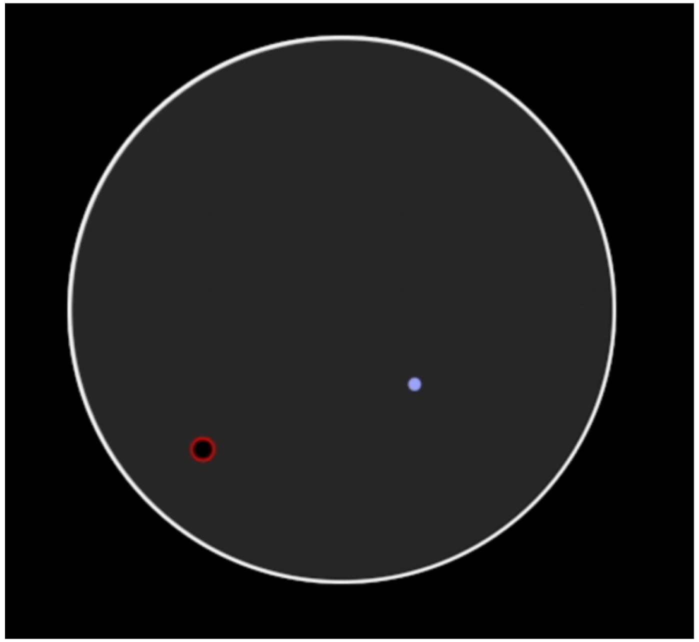
8 – Projection stéréographique

- 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 .

- 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 reliantP' au pôle Nord.
- On la représente par un rond : O.

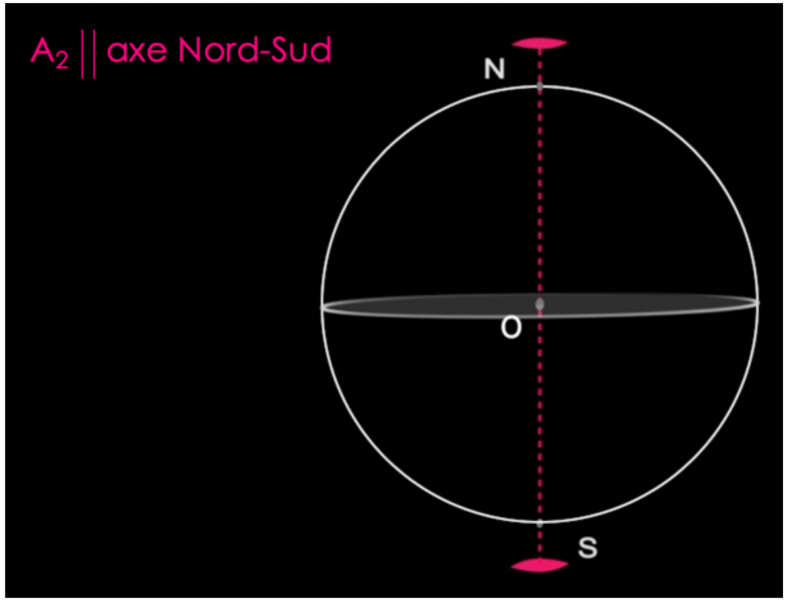


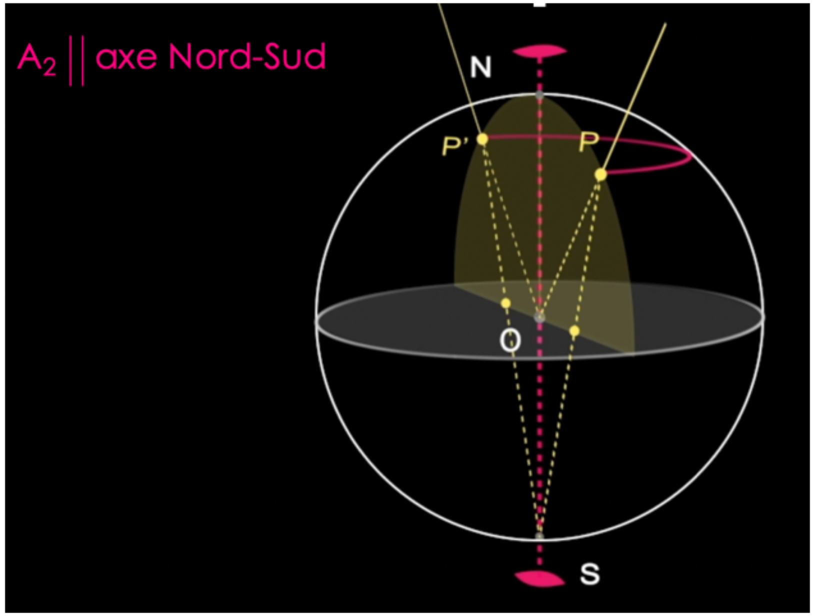


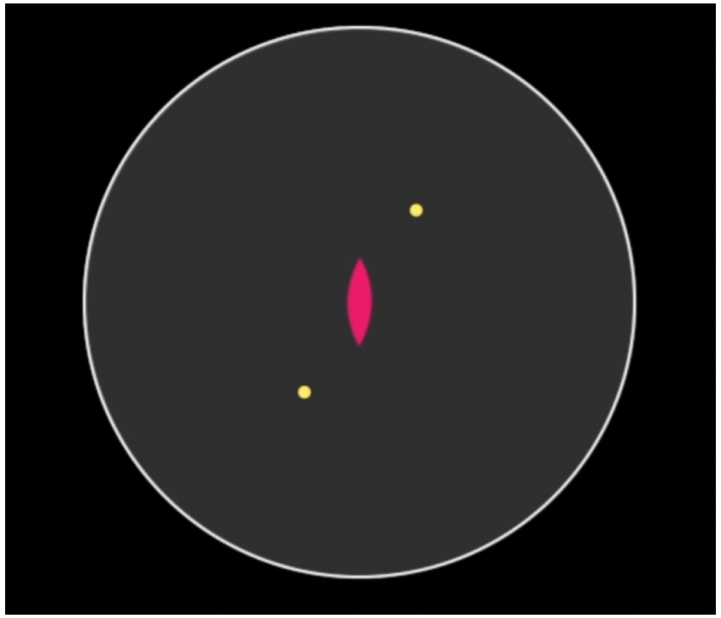


8 – Projection stéréographique

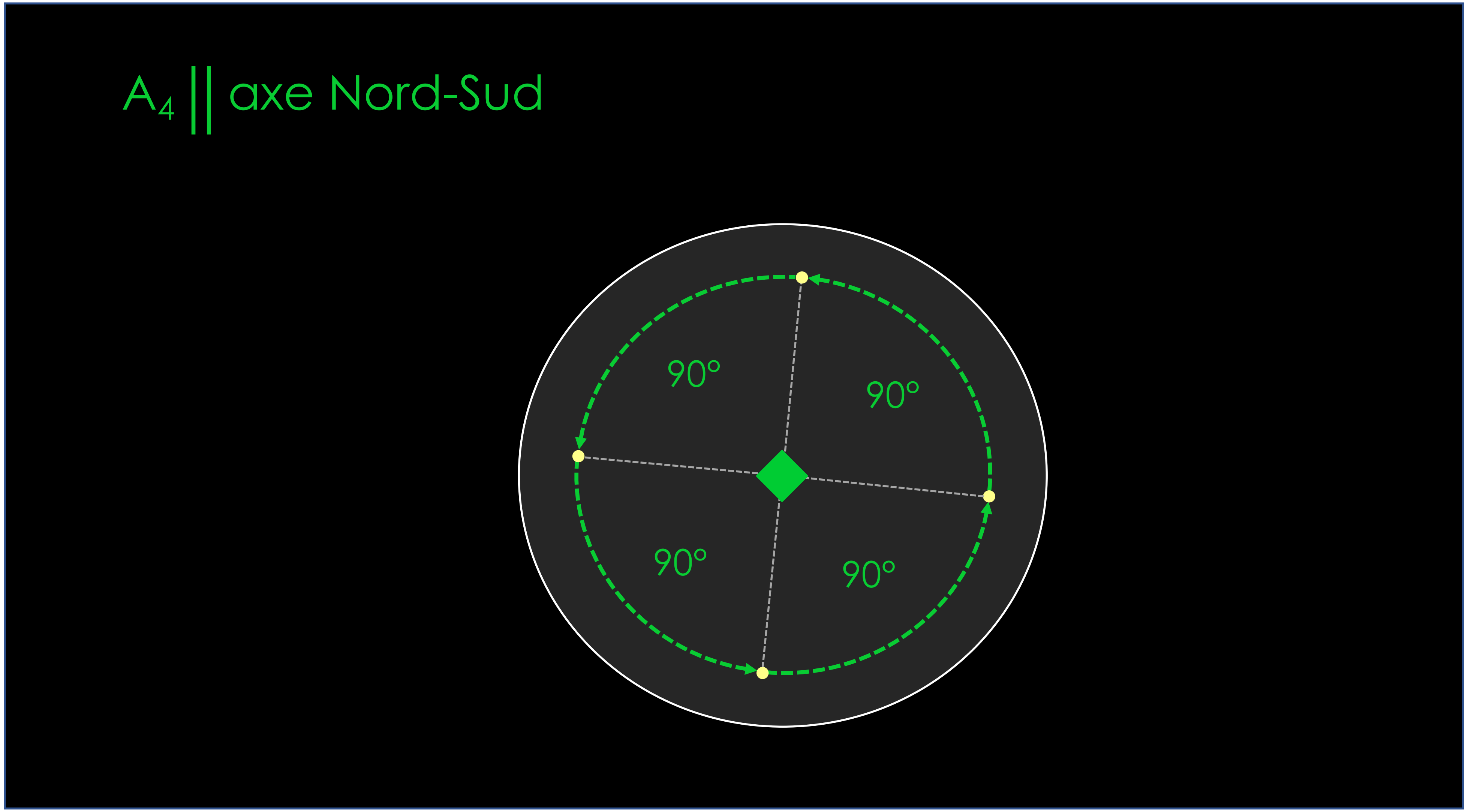
$A_2 \,||\,$ axe Nord-Sud





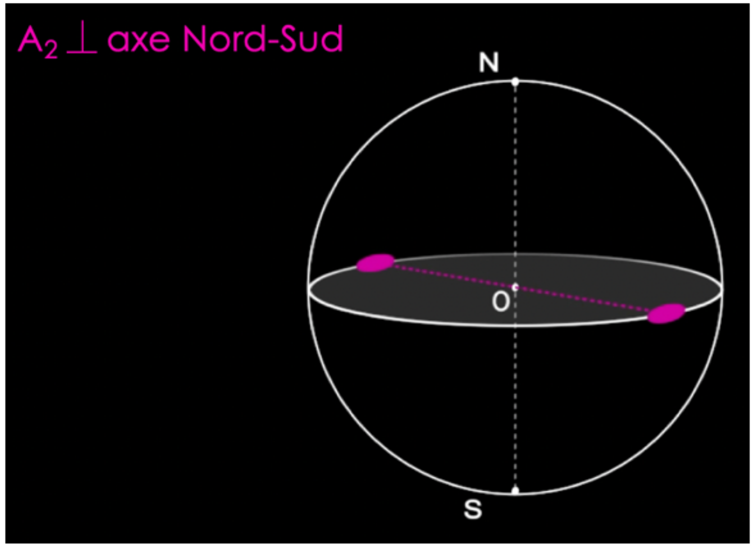


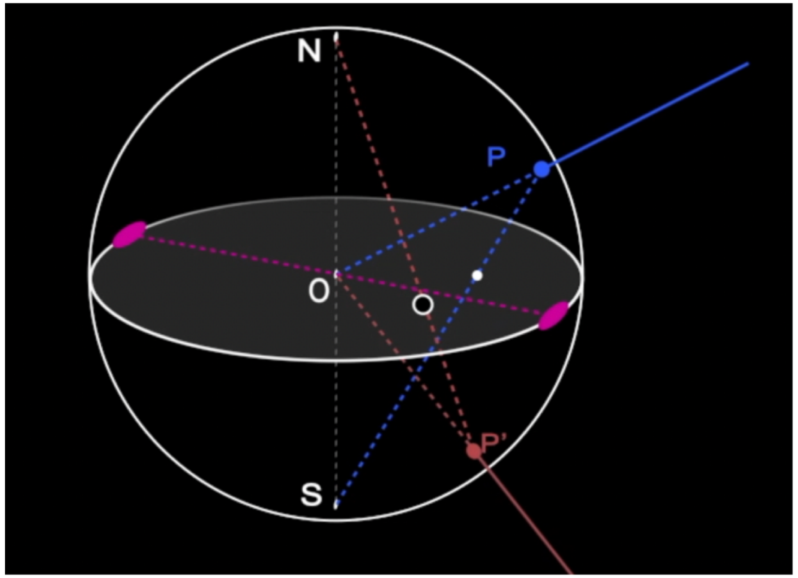
8 – Projection stéréographique

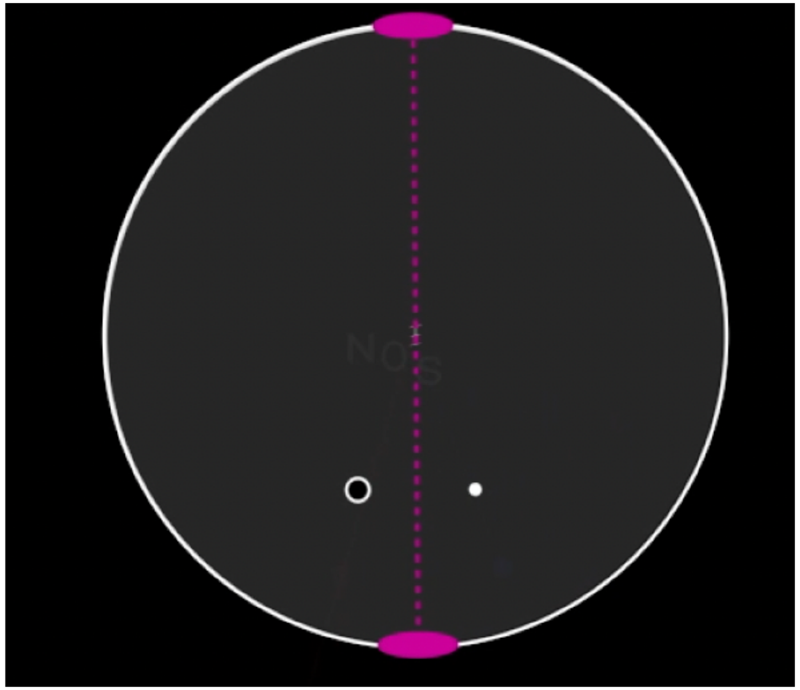


8 – Projection stéréographique

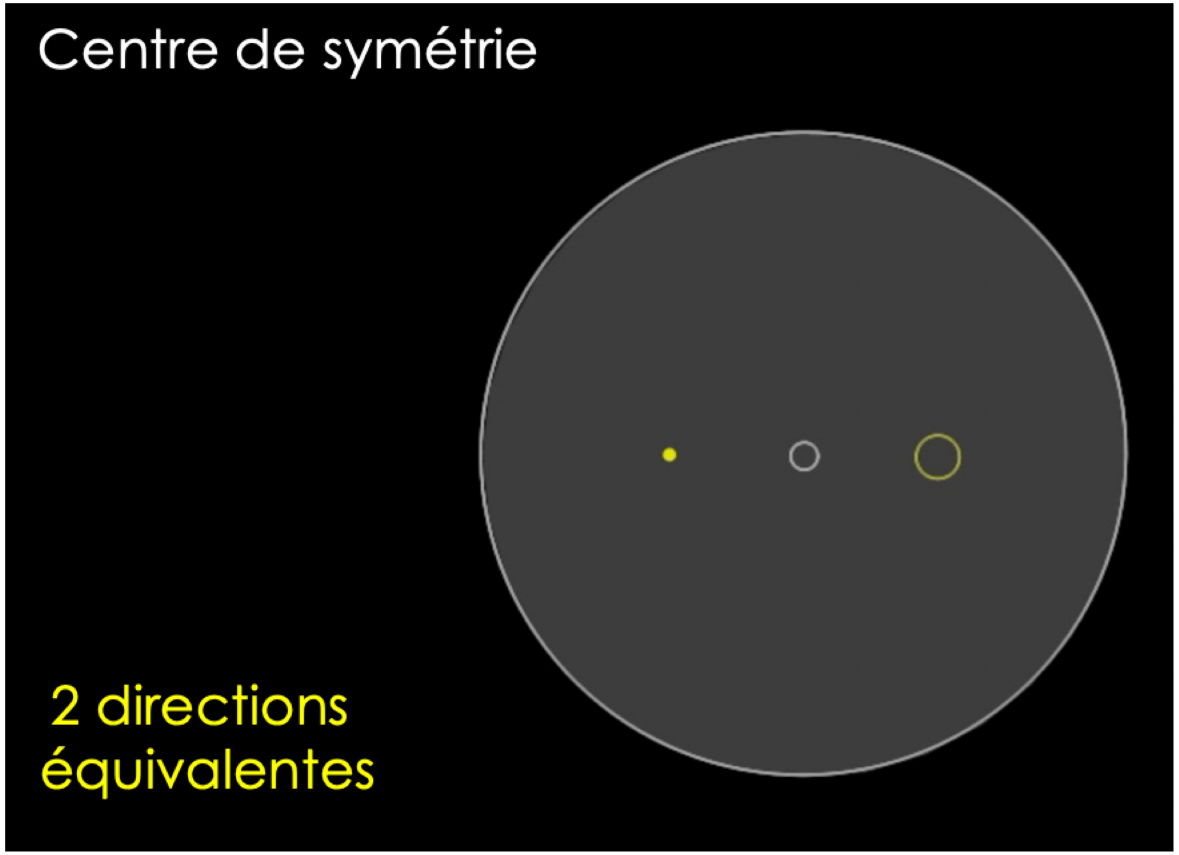
$A_2 \perp$ axe Nord-Sud



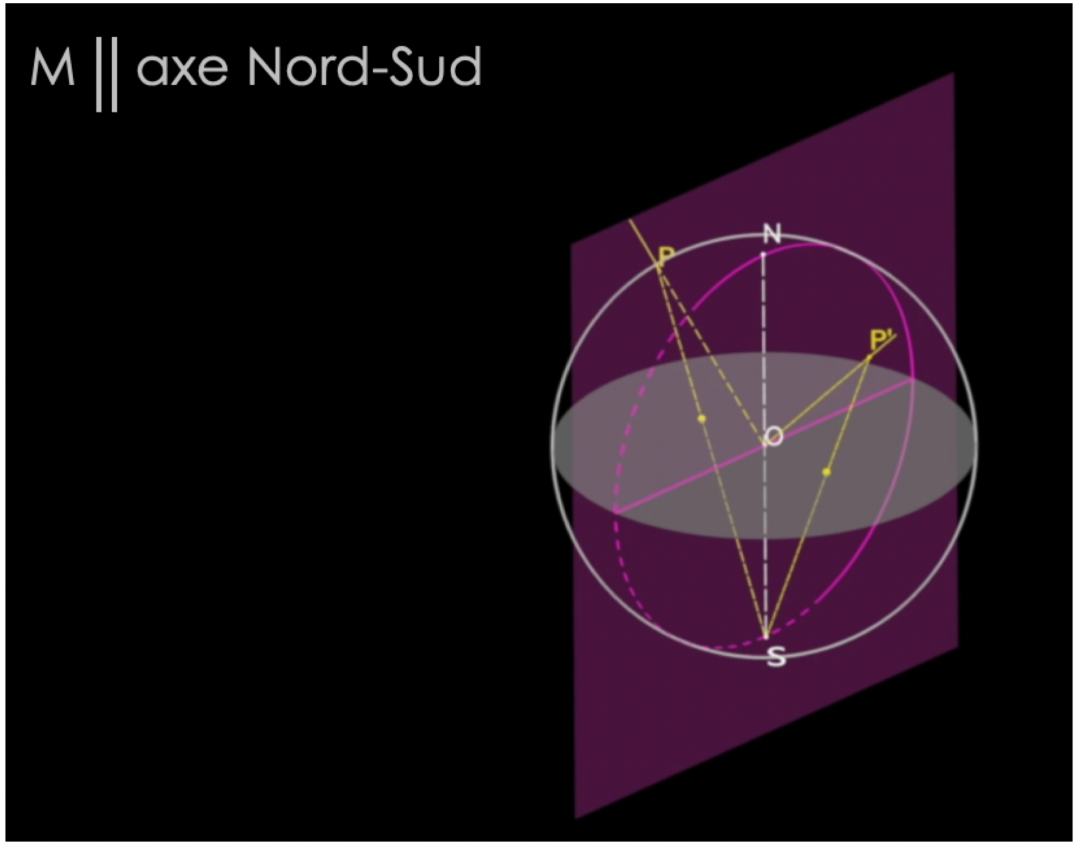


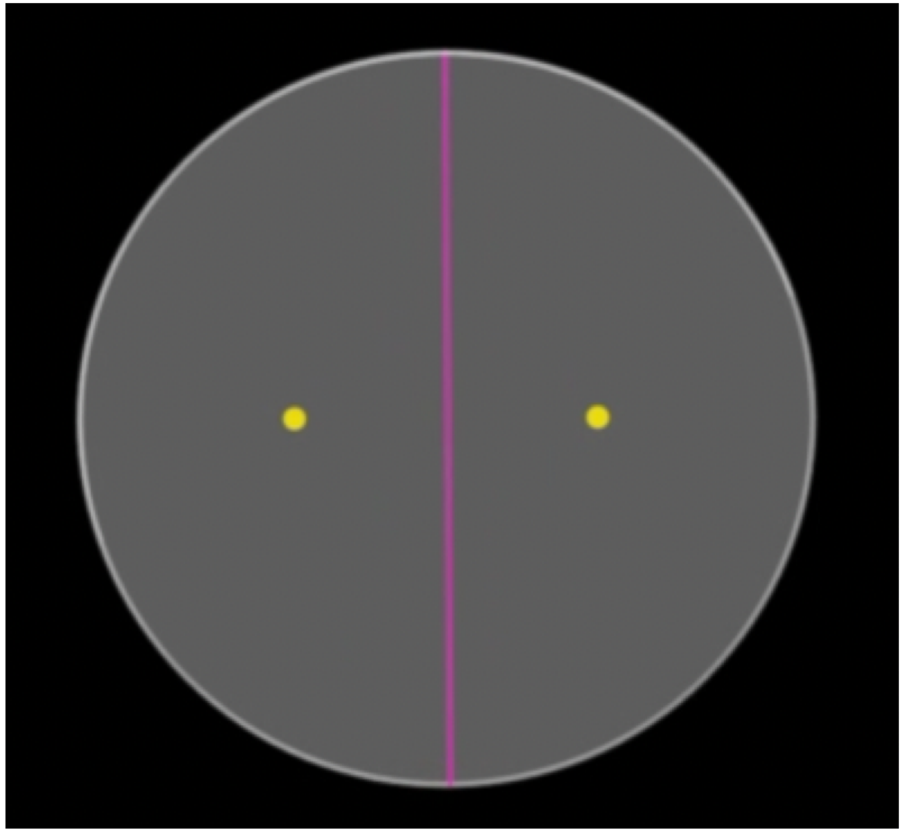


8 – Projection stéréographique



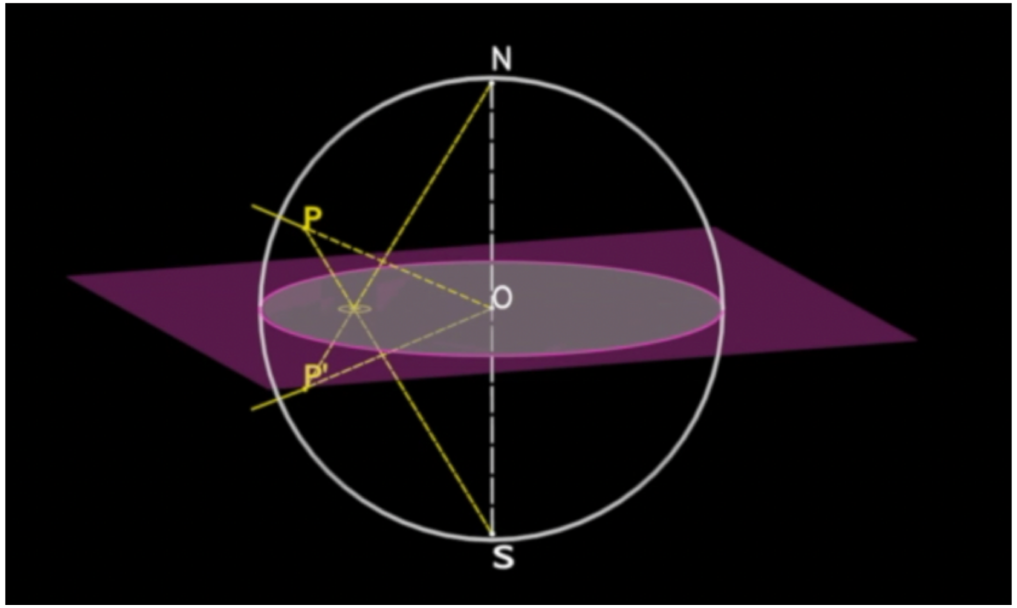
8 – Projection stéréographique

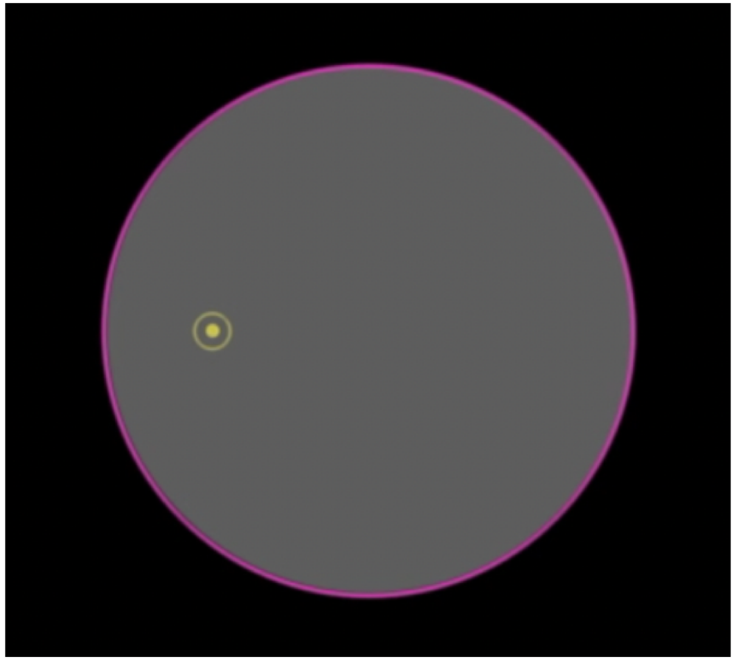




8 – Projection stéréographique

M ⊥ 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 conventionnelle

8 – Projection stéréographique

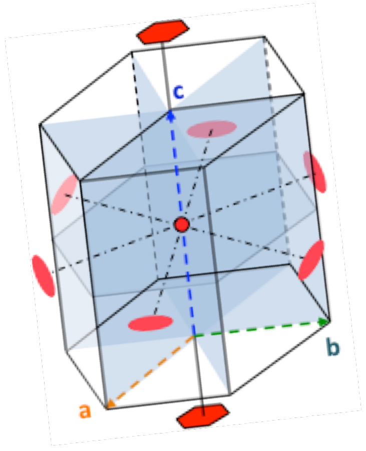
9 – Roto-inversions

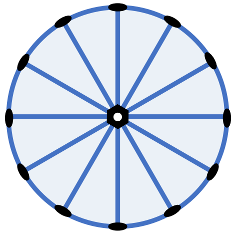
10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques

11 – Les 7 systèmes cristallins

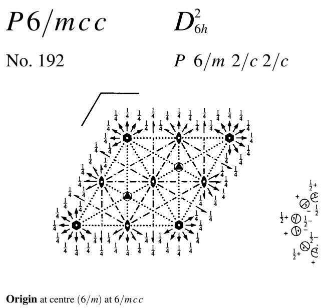
12 – Les 14 réseaux de Bravais

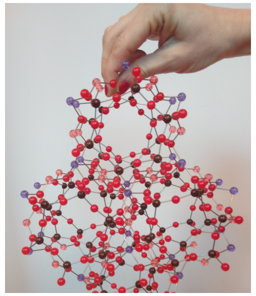
13 – Les 230 groupes d'espace





$\frac{6}{m}mm$

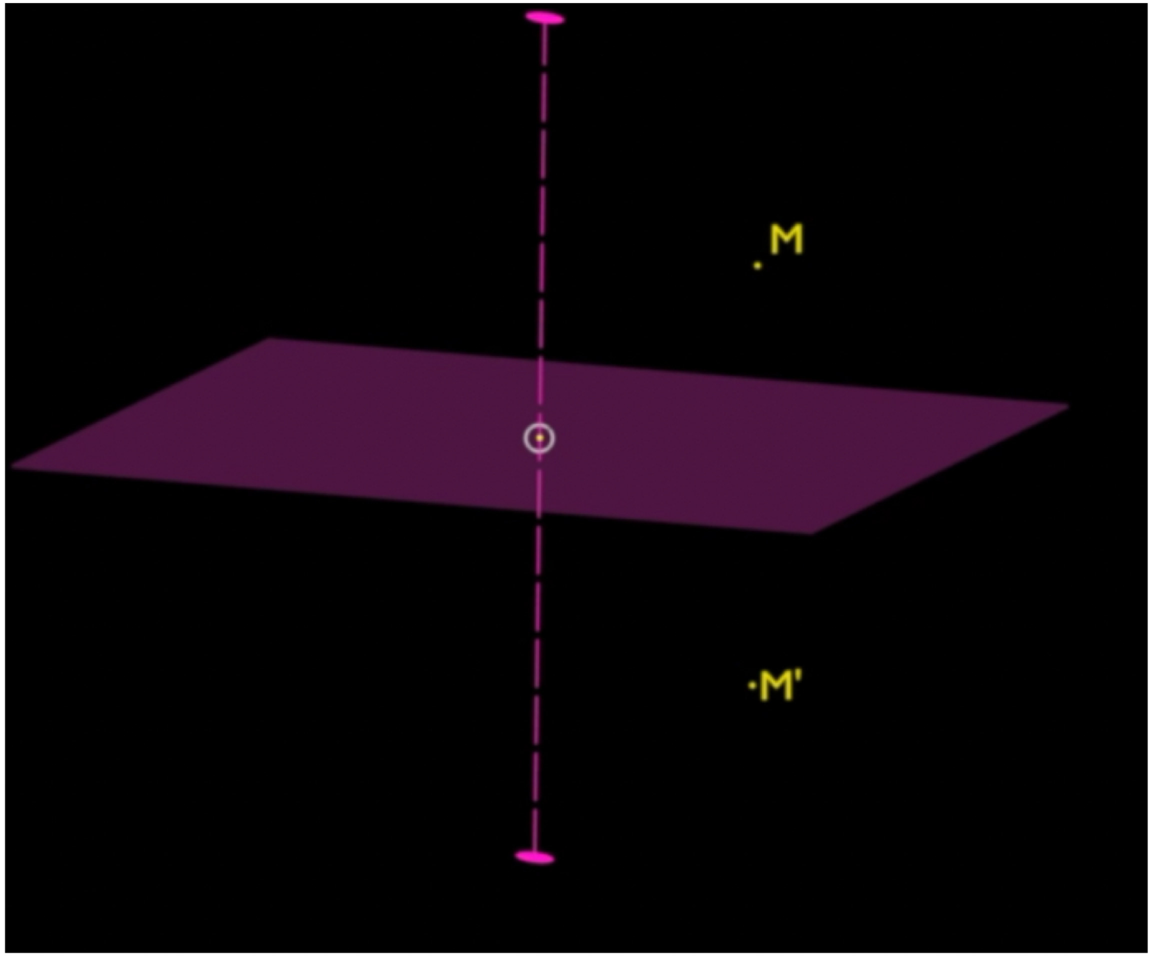




9 – Roto-inversions

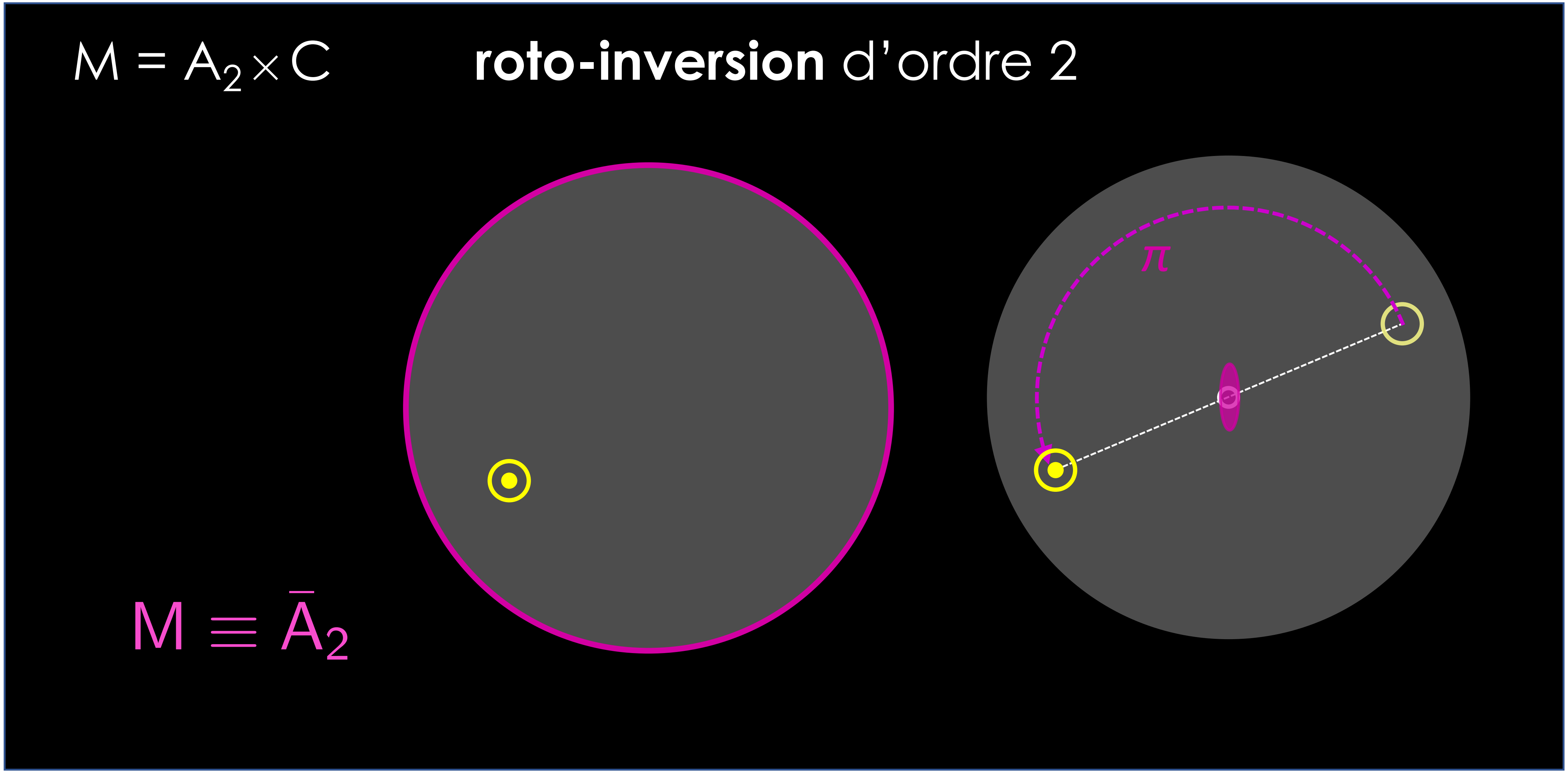
$M = A_2 \times C$

roto-inversion d'ordre 2



$M \equiv \bar{A}_2$

9 – Roto-inversions



9 – Roto-inversions

A_1 A_2 A_3 A_4 A_6

identité

1 2 3 4 6

notation de Hermann-Mauguin

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

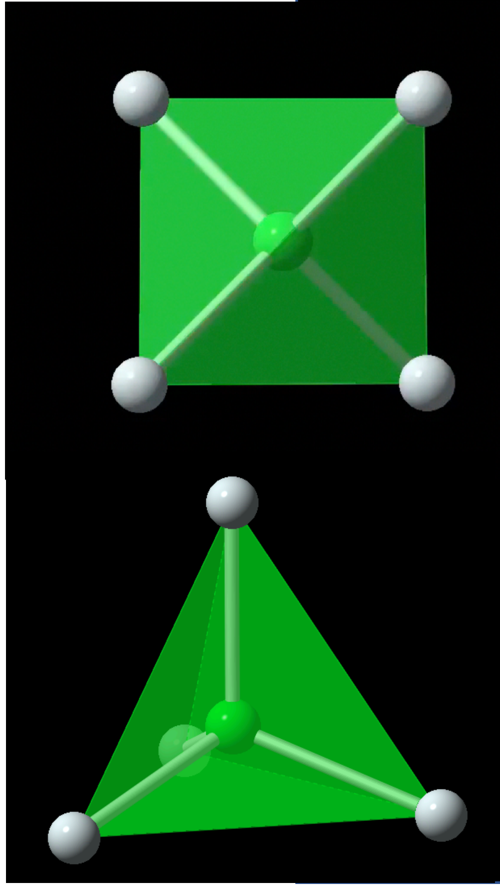
$C \equiv \bar{A}_1$ $M \equiv \bar{A}_2$ $\bar{A}_3$ $\bar{A}_4$ $\bar{A}_6$

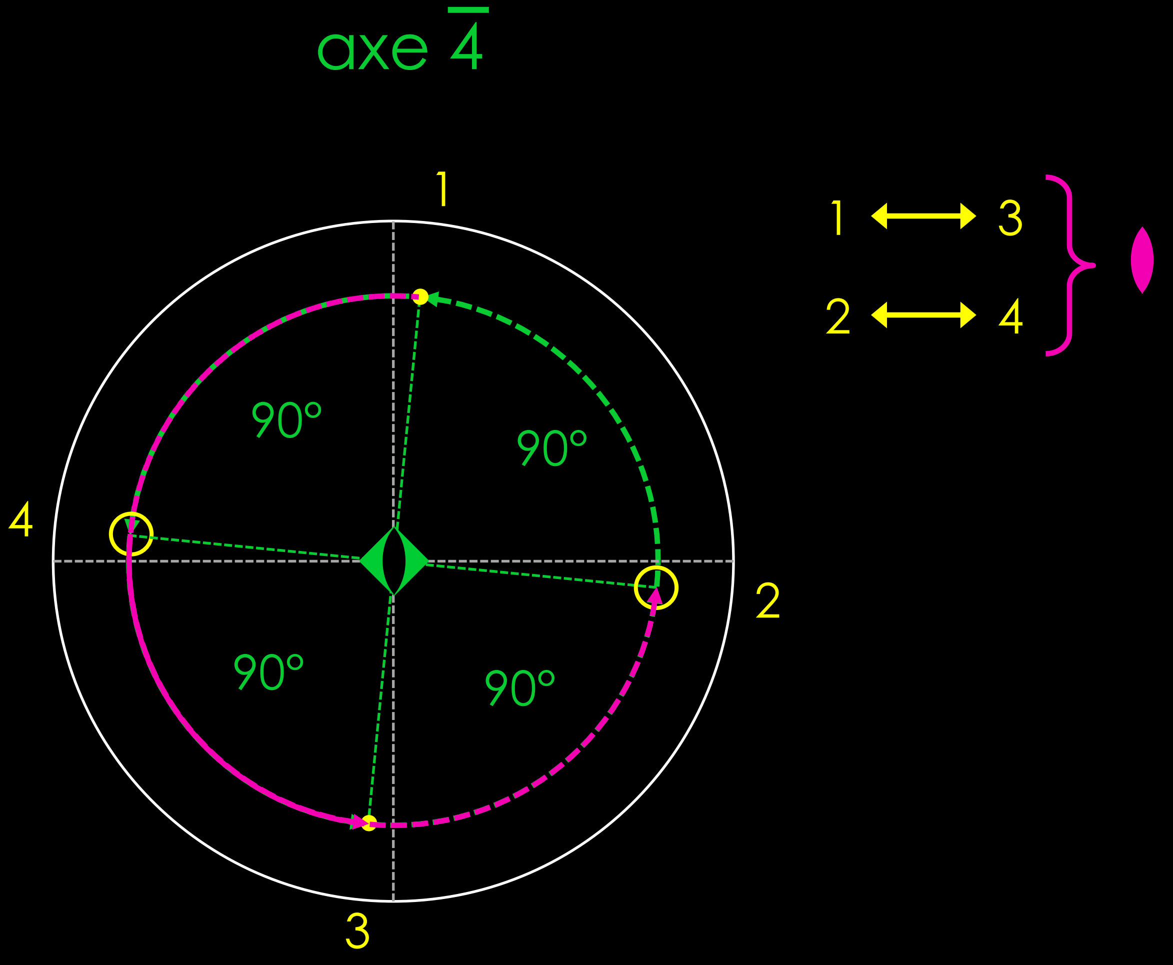
centre

$\bar{1}$ m $\bar{3}$ $\bar{4}$ $\bar{6}$

9 – Roto-inversions

$\bar{4}$





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 conventionnelle

8 – Projection stéréographique

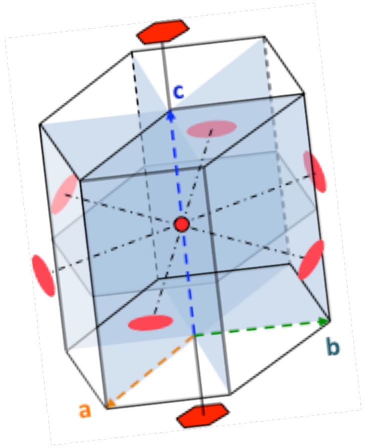
9 – Roto-inversions

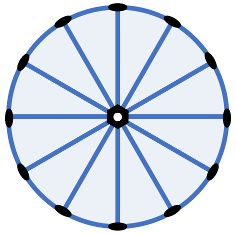
10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques

11 – Les 7 systèmes cristallins

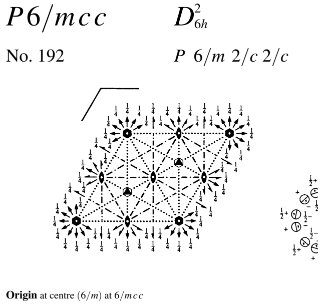
12 – Les 14 réseaux de Bravais

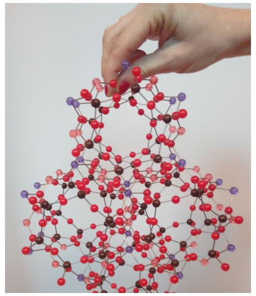
13 – Les 230 groupes d'espace





$\frac{6}{m}mm$





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.

10 – Groupes ponctuels cristallographiques

2 CATEGORIES :

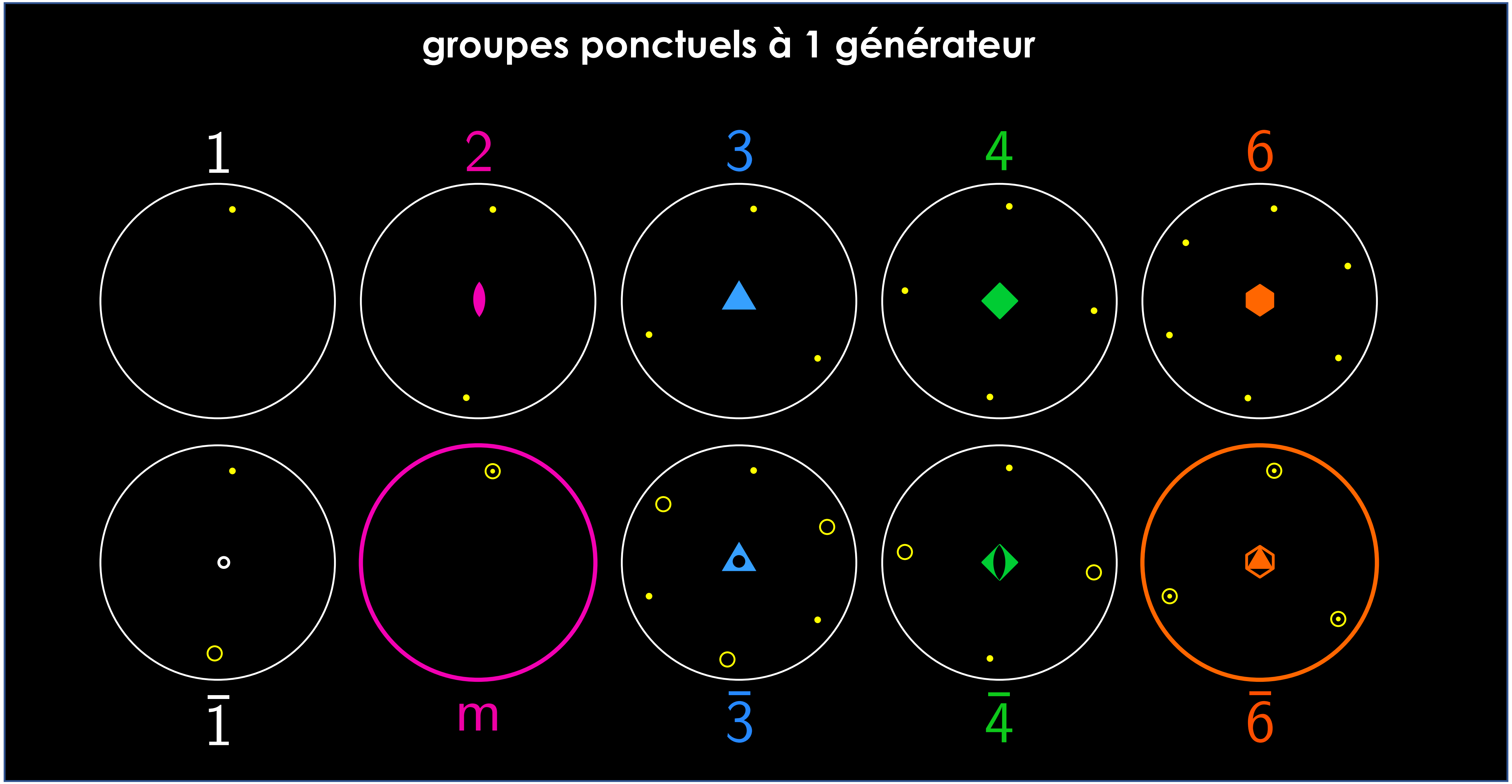
- Les groupes contenant PLUS d'un axe A_n avec n>2
  ➔ **les 5 groupes cubiques**

- Les autres groupes
  ➔ **les 27 groupes non cubiques**

- On en connait 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

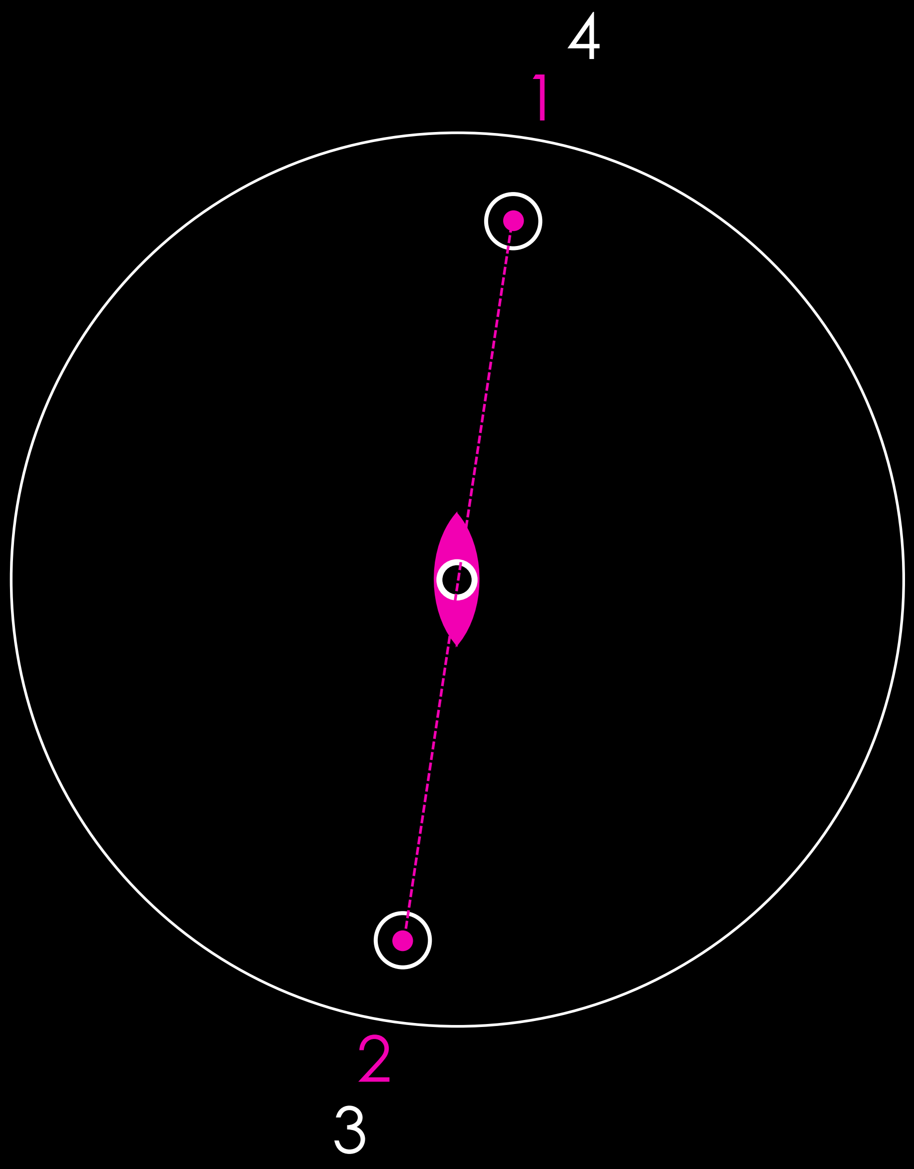
générateur 1		**générateur 2**
	C	C
A_2	M	M
A_3	$\bar{A}_3$	A_2
A_4	$\bar{A}_4$	$\perp$ ou $\parallel$ à A_n et $\bar{A}_n$
A_6	$\bar{A}_6$	

14 groupes
non-cubiques
à 2 générateurs

A_2 et C

$1 \longrightarrow 3$

$2 \longrightarrow 4$

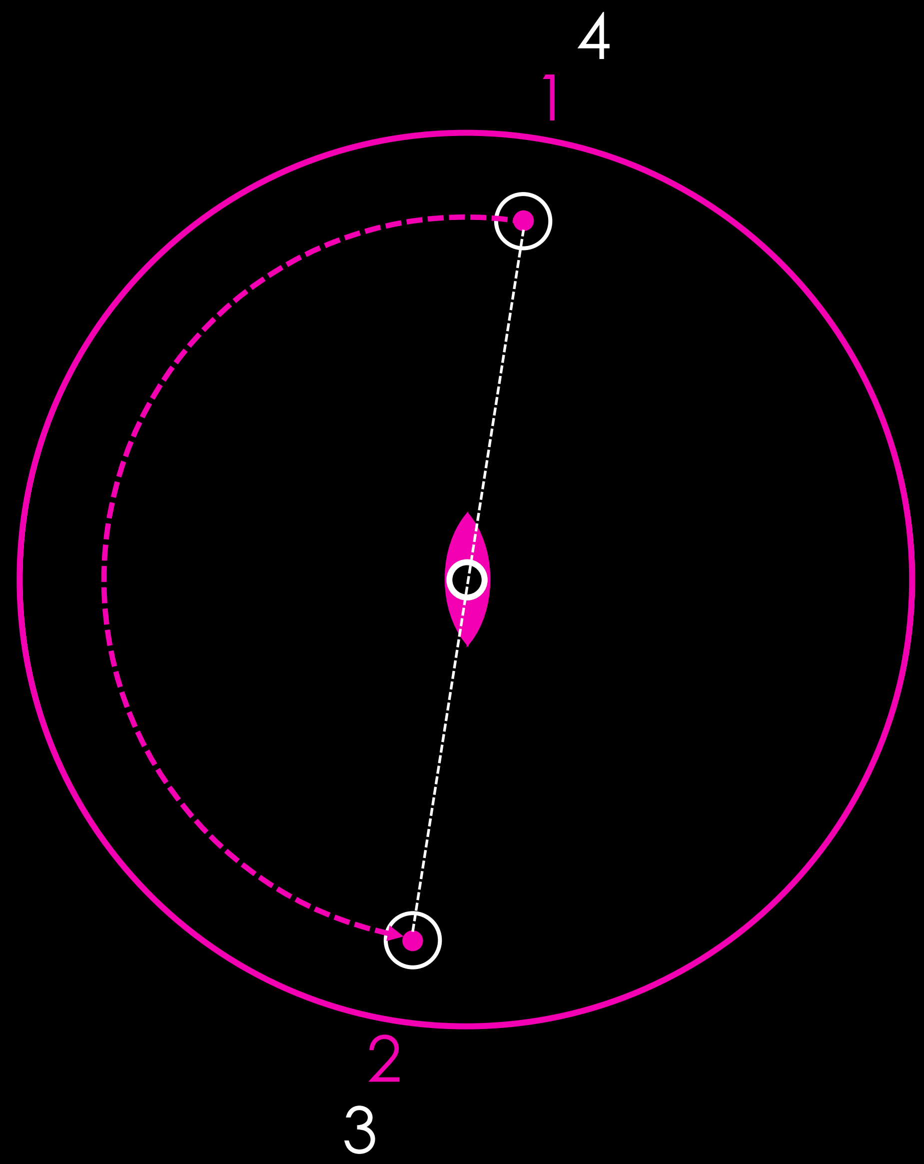


$1 \longrightarrow 2$: ?

$1 \longrightarrow 3$: ?

$1 \longrightarrow 4$: ?

A_2 et C

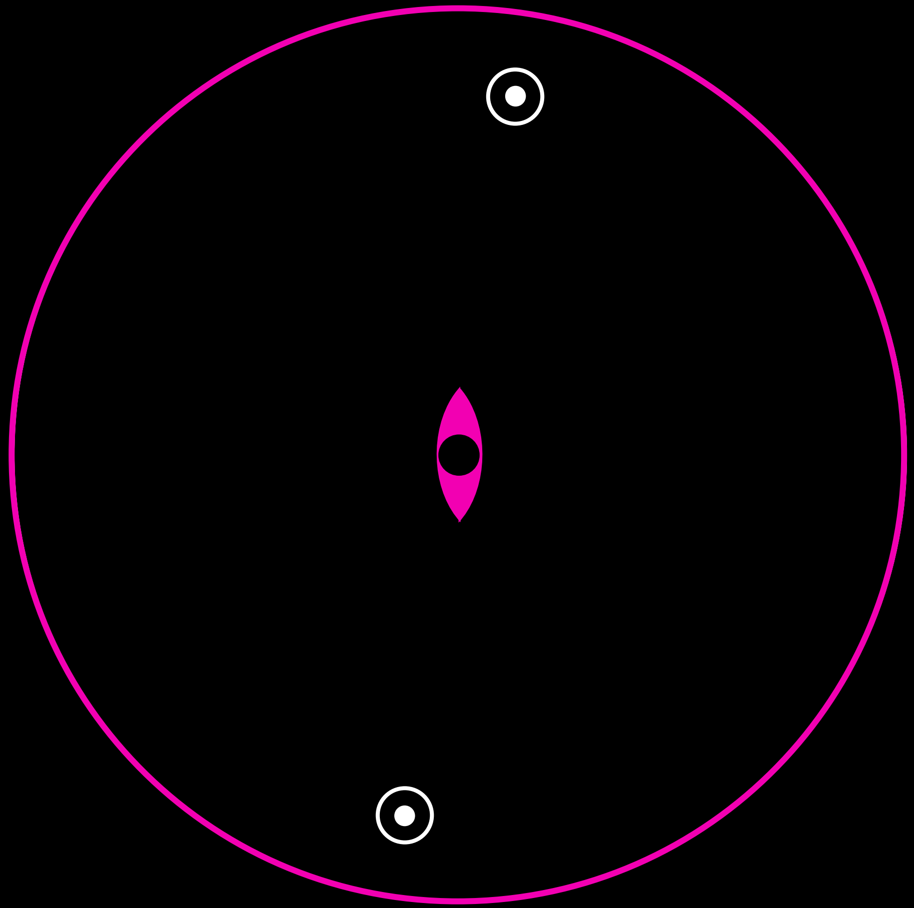


1 ⟶ 2 : ?

1 ⟶ 3 : O

1 ⟶ 4 : M

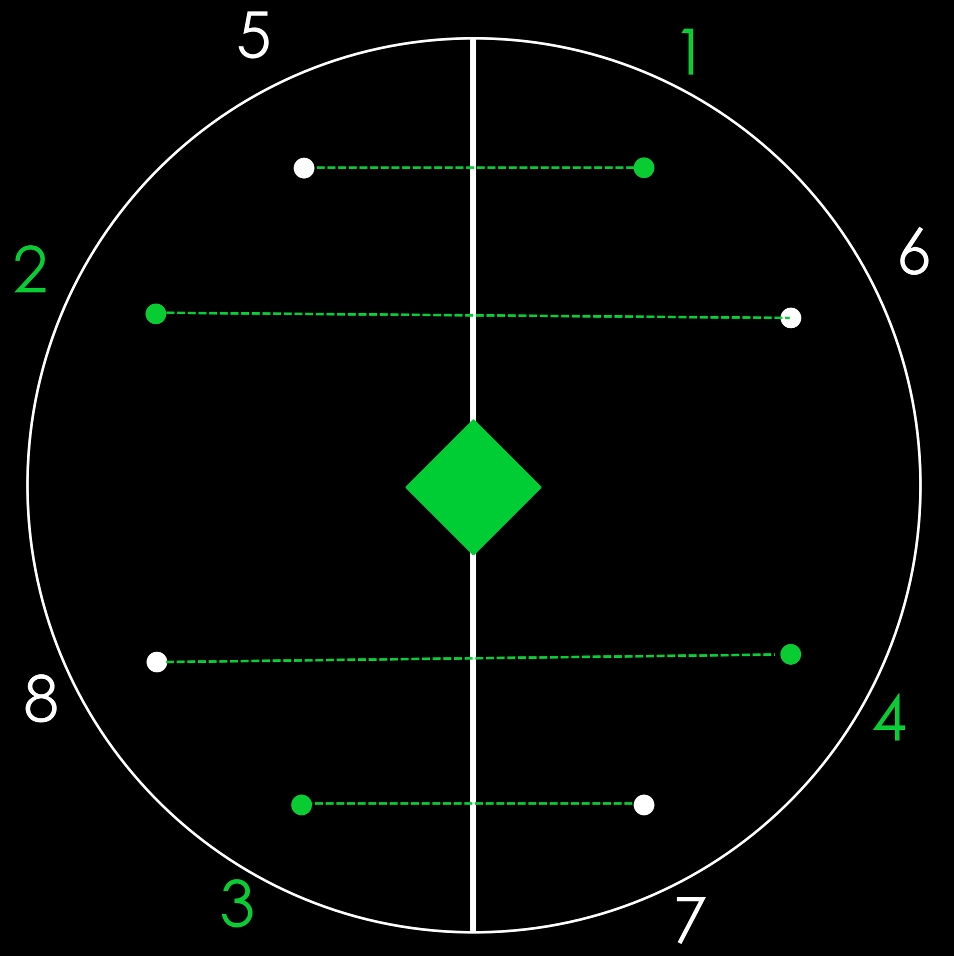
A_2 et C



$\frac{A_2}{M}C$

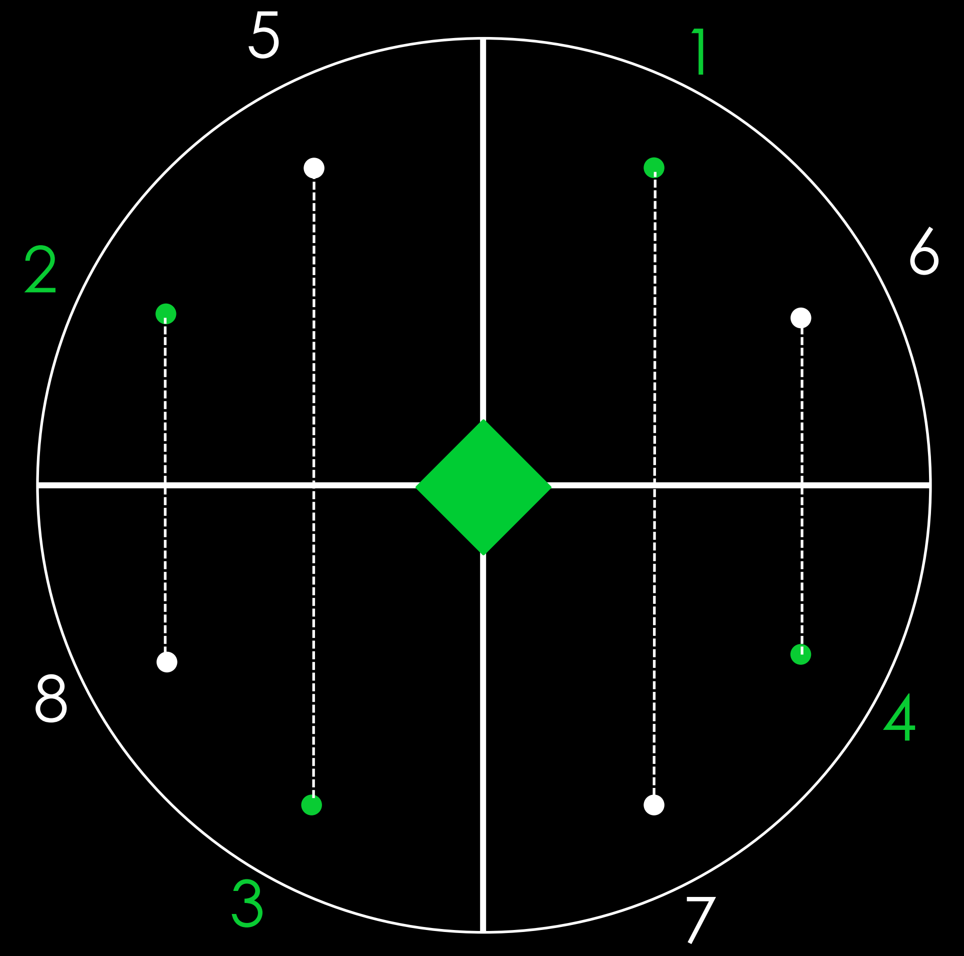
$\frac{2}{m}$

A_4 et M ||



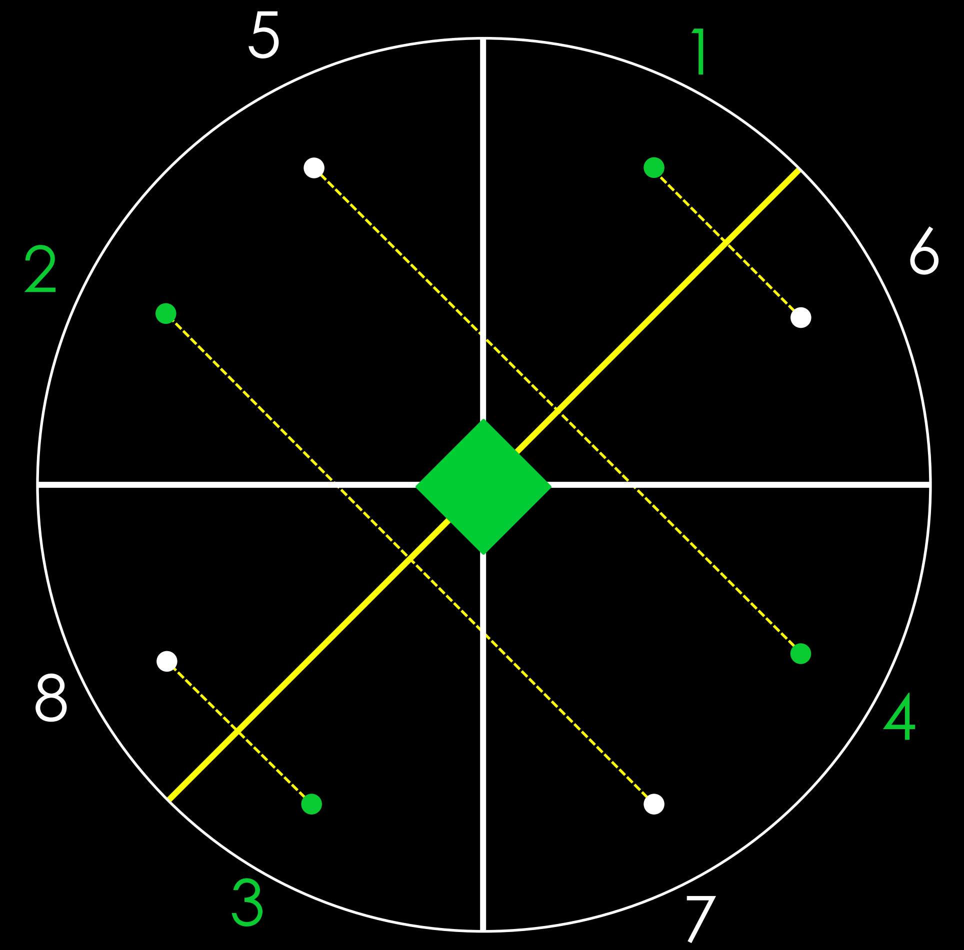
8 directions équivalentes

A_4 et M ||



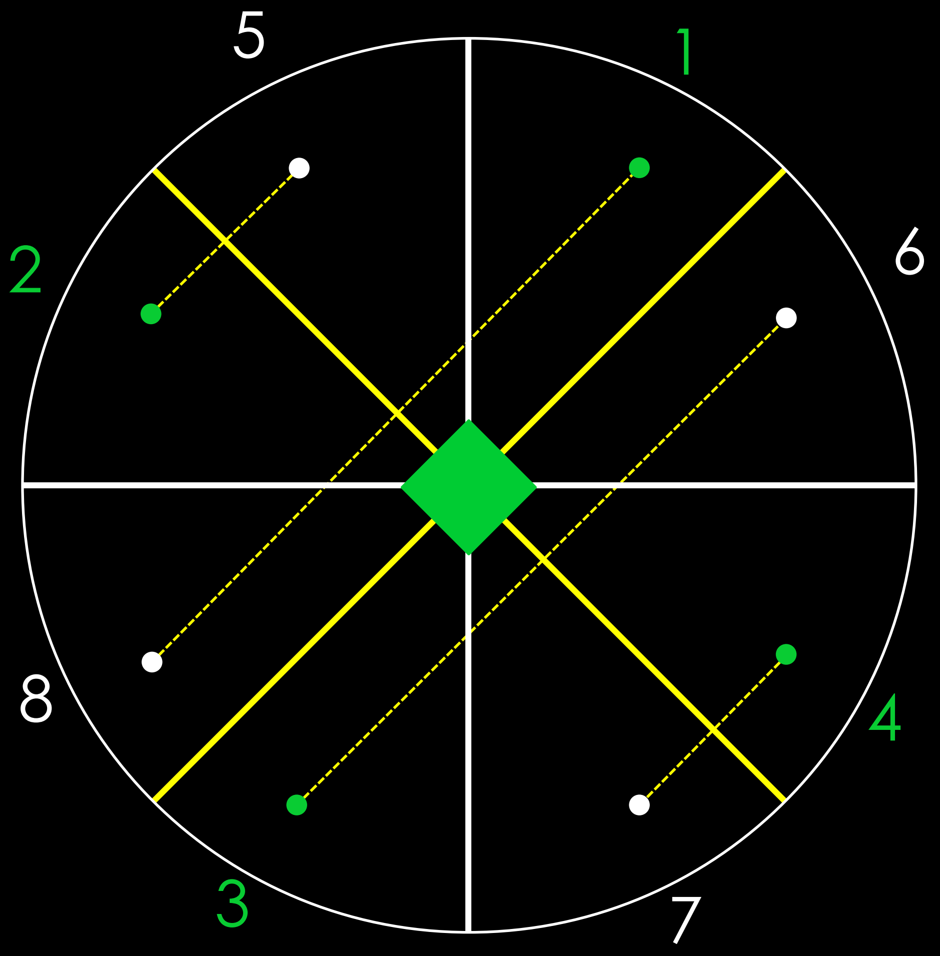
$$\left.\begin{array}{l} 1 \longrightarrow 7 \\ 2 \longrightarrow 8 \\ 3 \longrightarrow 5 \\ 4 \longrightarrow 6 \end{array}\right\} M \text{ —}$$

A_4 et M ||



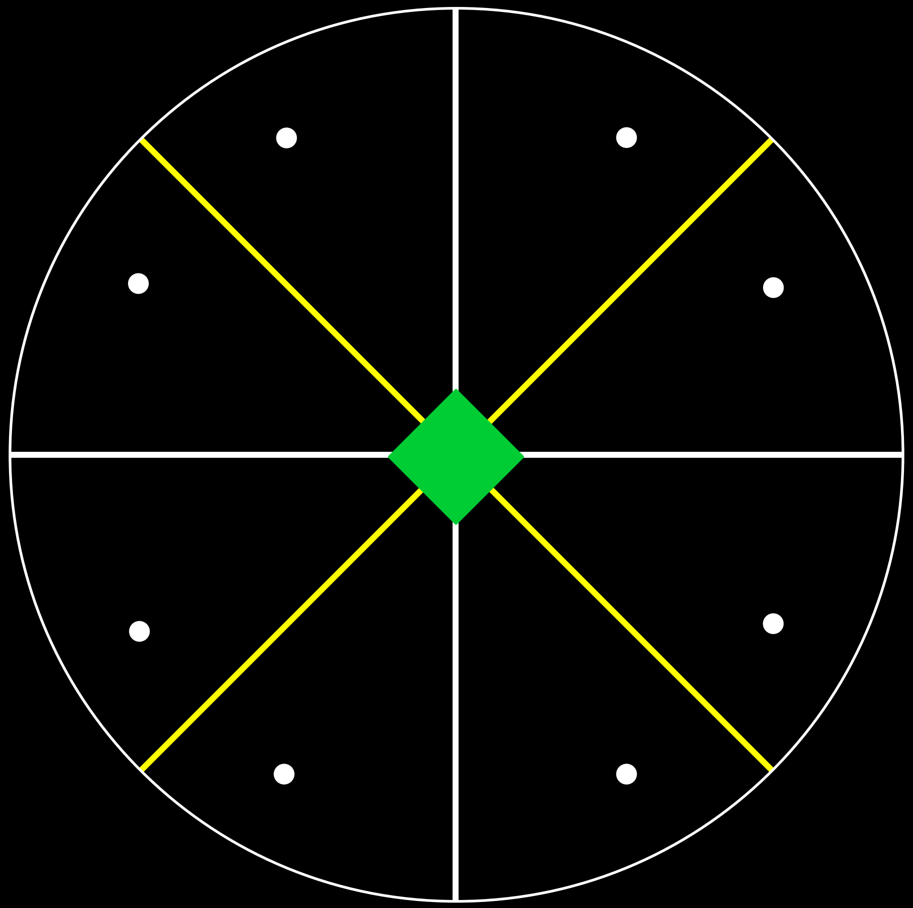
$$\left.\begin{array}{l} 1 \longrightarrow 6 \\ 2 \longrightarrow 7 \\ 3 \longrightarrow 8 \\ 4 \longrightarrow 5 \end{array}\right\} M'$$

A_4 et M ||



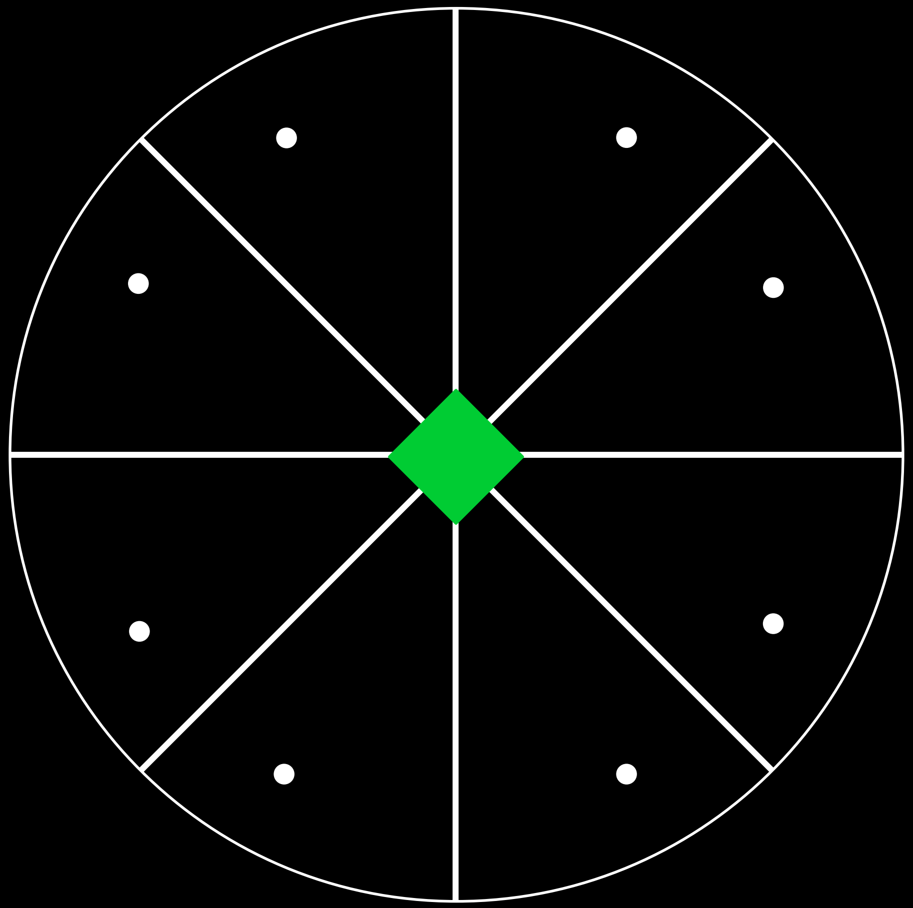
$$\left.\begin{array}{l} 1 \longrightarrow 8 \\ 2 \longrightarrow 5 \\ 3 \longrightarrow 6 \\ 4 \longrightarrow 7 \end{array}\right\} M'$$

A_4 et M ||



A_4 2 M 2 M'

A_4 et M ||



A_4 2 M 2 M'

4 m m

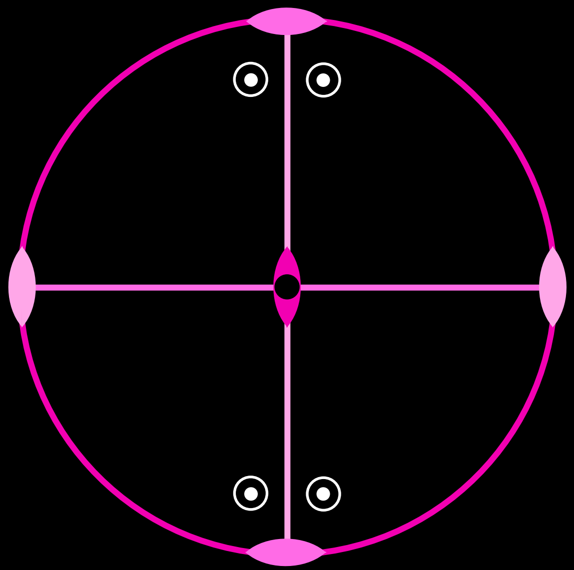
10 – Groupes ponctuels cristallographiques

$2/m$	222	$mm2$	
$\bar{3}m$	32	$3m$	
$4/m$	422	$4mm$	$\bar{4}2m$
$6/m$	622	$6mm$	$\bar{6}2m$

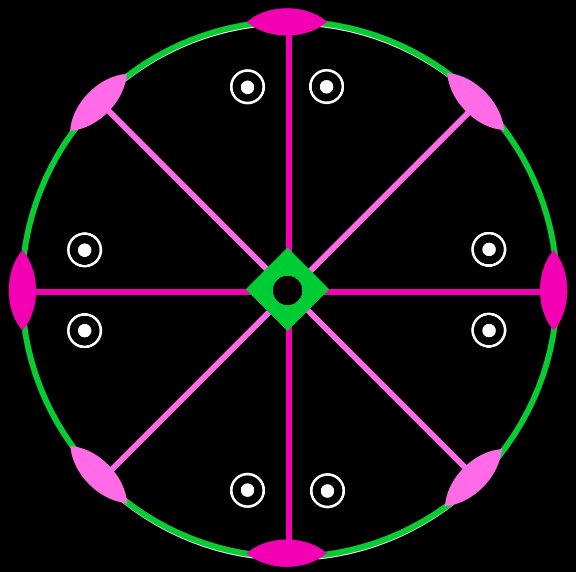
$\times\ \bar{1}$

3 groupes
non-cubiques
à 3 générateurs

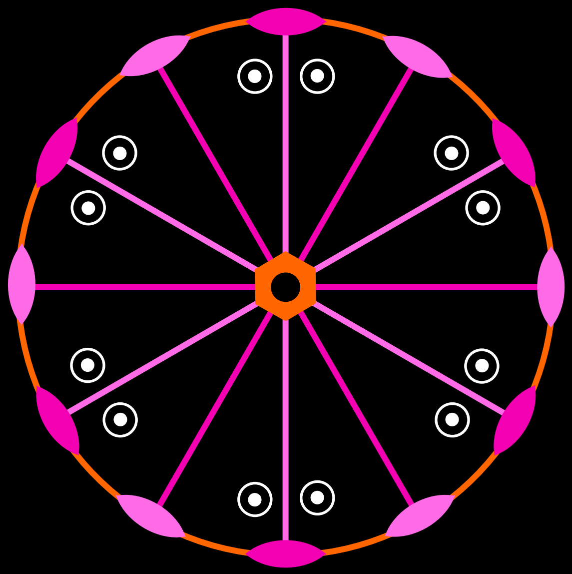
mmm



$\frac{4}{m}mm$



$\frac{6}{m}mm$

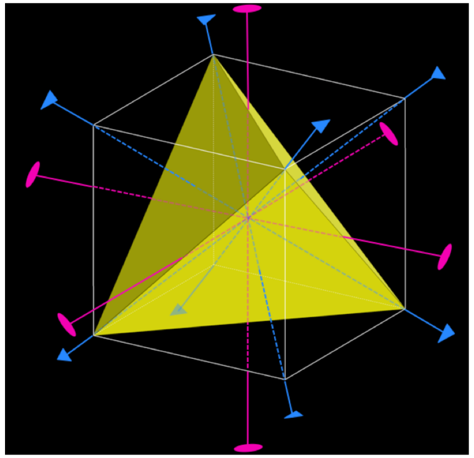


3 groupes ponctuels non-cubiques à 3 générateurs

10 – Groupes ponctuels cristallographiques

Les 5 groupes ponctuels cubiques

- Ils contiennent **au minimum** 4 A_3 (orientés selon les directions <111>)
  et 3 A_2 (orientés selon les directions <100>)



$3\,A_2\ \ 4\,A_3$	$2\,3$	T	**groupe des rotations du tétraèdre régulier**
$\dfrac{3\,A_2}{3\,M}\ \ 4\,\bar{A}_3\ \ C$	$m\ \bar{3}$	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**
$\dfrac{3\,A_4}{3\,M}\ \ 4\,\bar{A}_3\ \ \dfrac{6\,A'_2}{6\,M'}\ \ C$	$m\,\bar{3}\,m$	O_h	obtenu en ajoutant un centre à 4 3 2 **groupe de symétrie de l'octaèdre régulier**

Les 5 groupes ponctuels cubiques

T	$3A_2$	$4A_3$			23
T_h	$\frac{3A_2}{3M}$	$4\bar{A}_3$		C	$m\bar{3}$
T_d	$3\bar{A}_4$	$4A_3$	$6M'$		$\bar{4}3m$
O	$3A_4$	$4A_3$	$6A'_2$		432
O_h	$\frac{3A_4}{3M}$	$4\bar{A}_3$	$\frac{6A'_2}{6M'}$	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	$\dfrac{3\,A_2}{3\,M}$	$4\,\overline{A}_3$		C	$m\,\bar{3}$
T_d	$3\,\overline{A}_4$	$4\,A_3$	$6\,M'$		$\bar{4}\,3\,m$
O	$3\,A_4$	$4\,A_3$	$6\,A'_2$		$4\,3\,2$
O_h	$\dfrac{3\,A_4}{3\,M}$	$4\,\overline{A}_3$	$\dfrac{6\,A'_2}{6\,M'}$	C	$m\,\bar{3}\,m$

directions $\langle 111 \rangle$

10 – Groupes ponctuels cristallographiques

Les 5 groupes ponctuels cubiques

T	$3A_2$	$4A_3$			23
T_h	$\frac{3A_2}{3M}$	$4\bar{A}_3$		C	$m\bar{3}$
T_d	$3\bar{A}_4$	$4A_3$	$6M'$		$\bar{4}3m$
O	$3A_4$	$4A_3$	$6A'_2$		432
O_h	$\frac{3A_4}{3M}$	$4\bar{A}_3$	$\frac{6A'_2}{6M'}$	C	$m\bar{3}m$

directions $\langle 011 \rangle$

10 – Groupes ponctuels cristallographiques

Les 5 groupes ponctuels cubiques

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

10 – Groupes ponctuels cristallographiques

Les 5 groupes ponctuels cubiques

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

holoédrie

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 conventionnelle

8 – Projection stéréographique

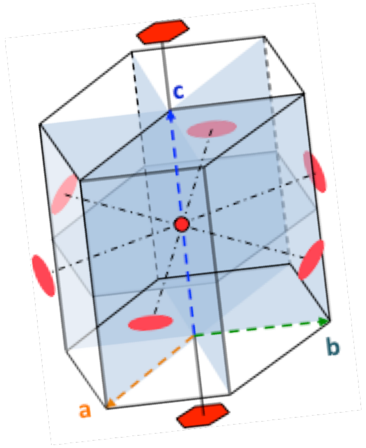
9 – Roto-inversions

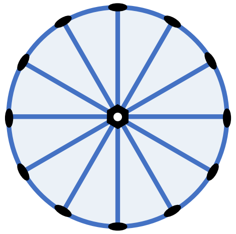
10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques

11 – Les 7 systèmes cristallins

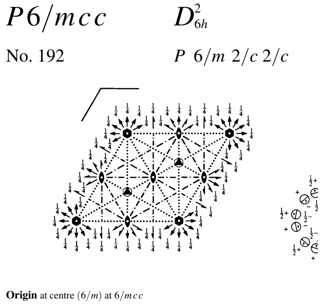
12 – Les 14 réseaux de Bravais

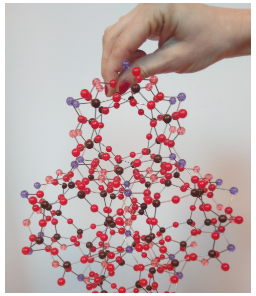
13 – Les 230 groupes d'espace



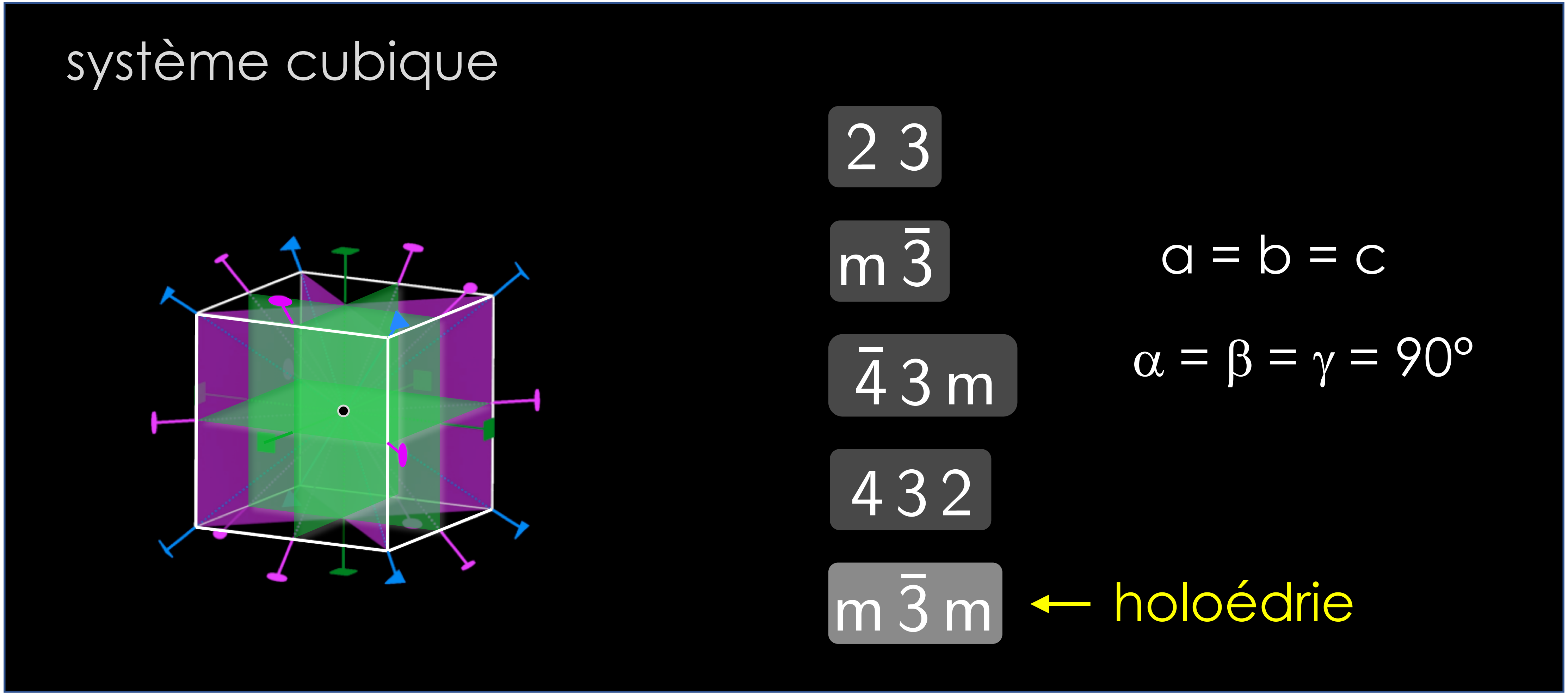


$\frac{6}{m}mm$





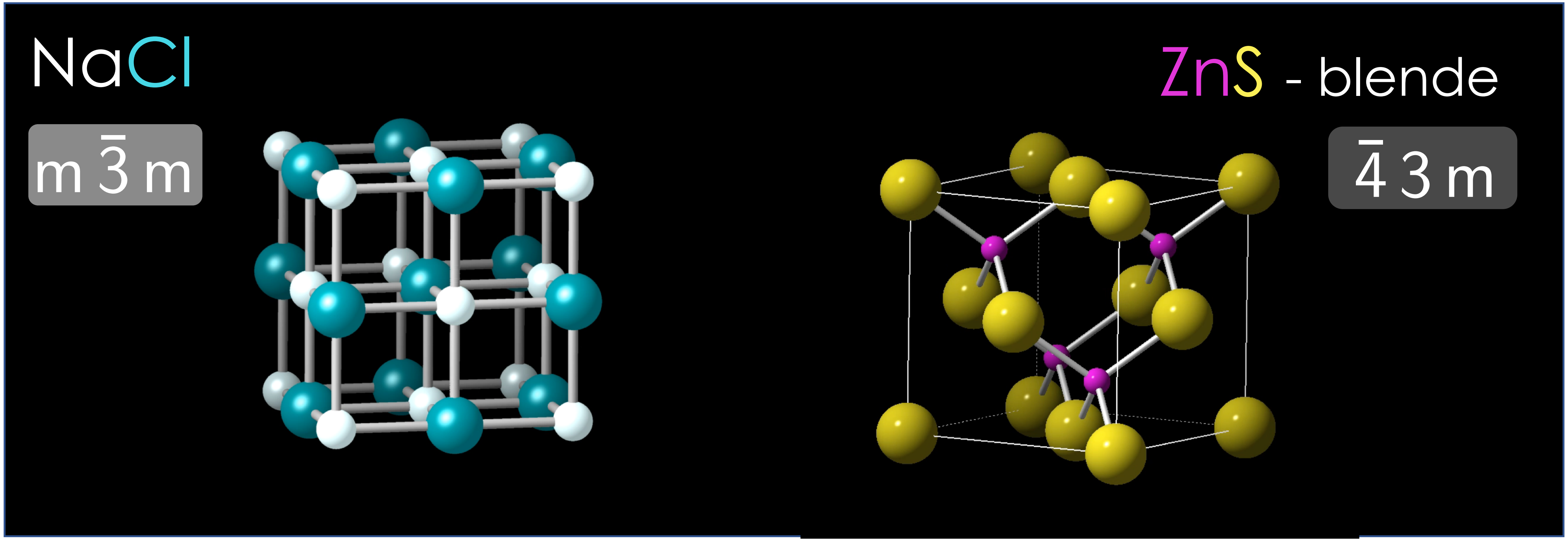
On peut classer les **32 groupes ponctuels cristallographiques** en **7 systèmes cristallins**.

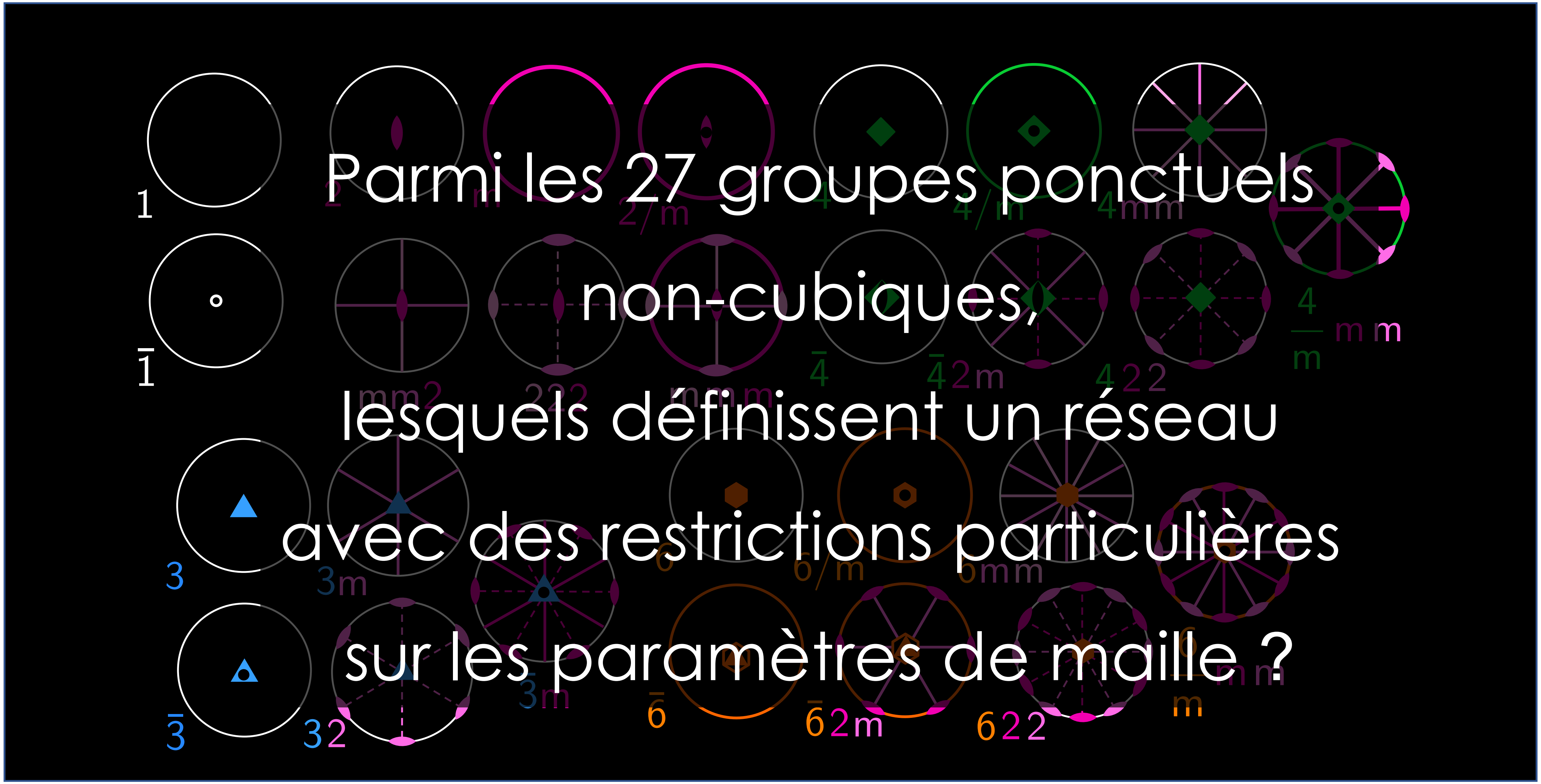


11 – Systèmes cristallins

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

symétrie du cristal ≤ symétrie du réseau



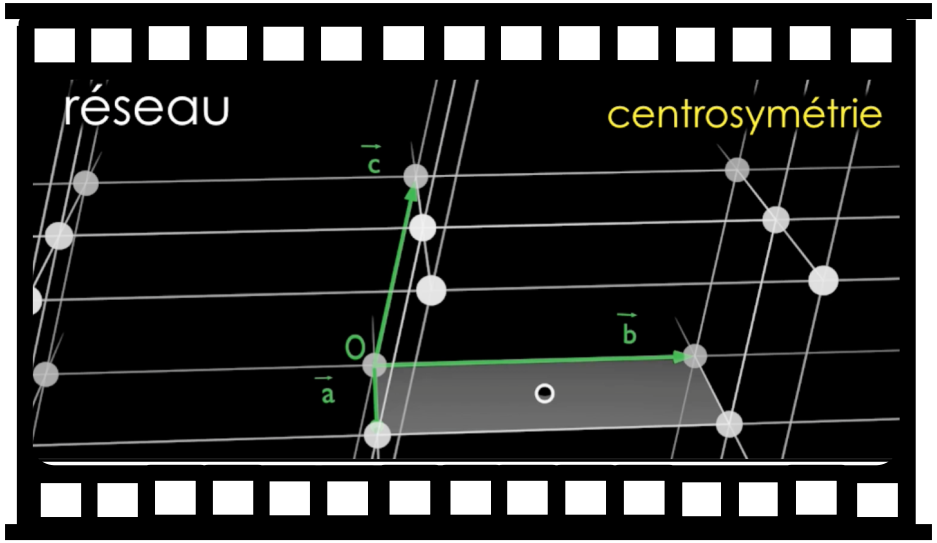


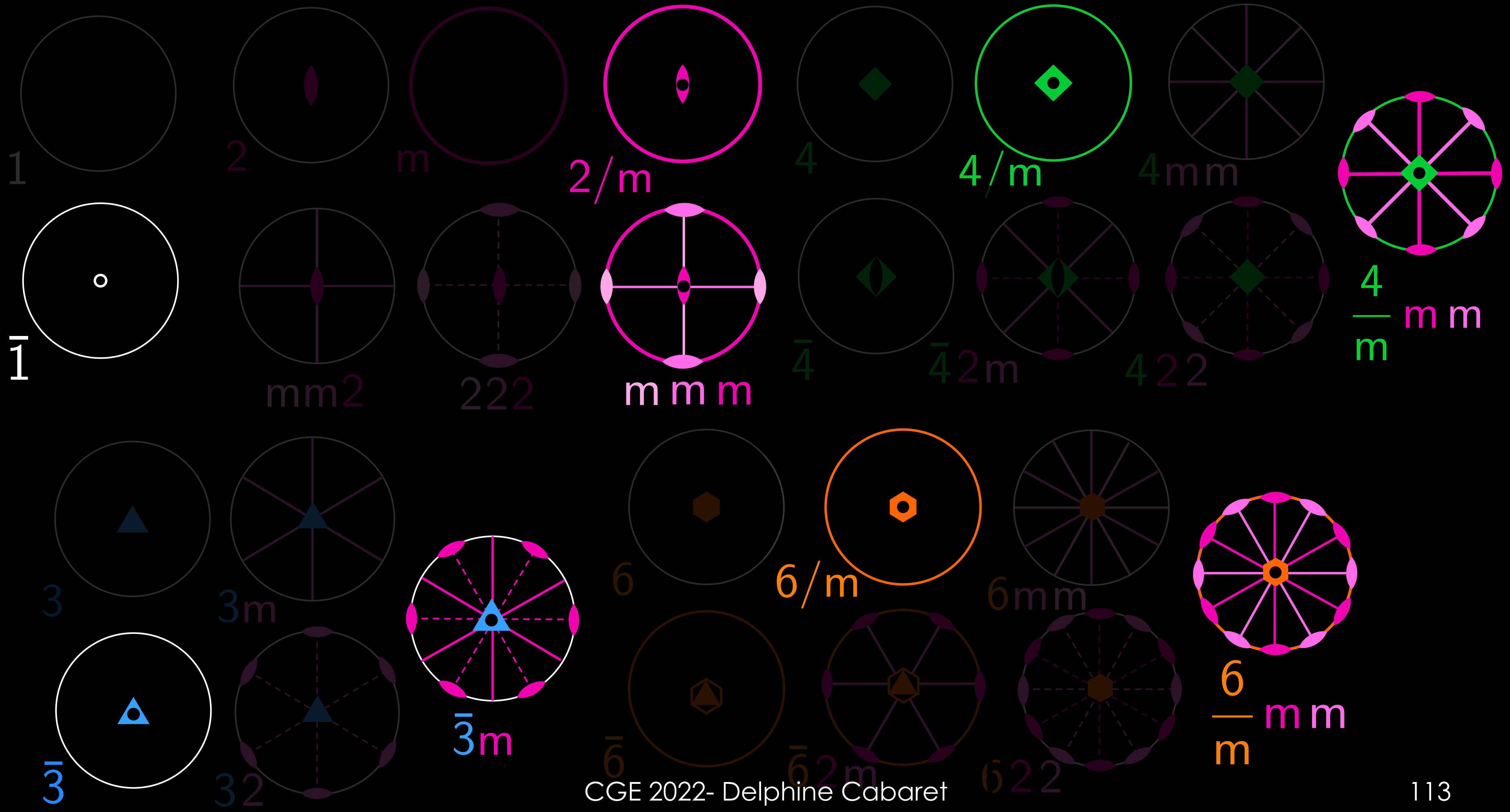
Parmi les 27 groupes ponctuels non-cubiques, lesquels définissent un réseau avec des restrictions particulières sur les paramètres de maille ?

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

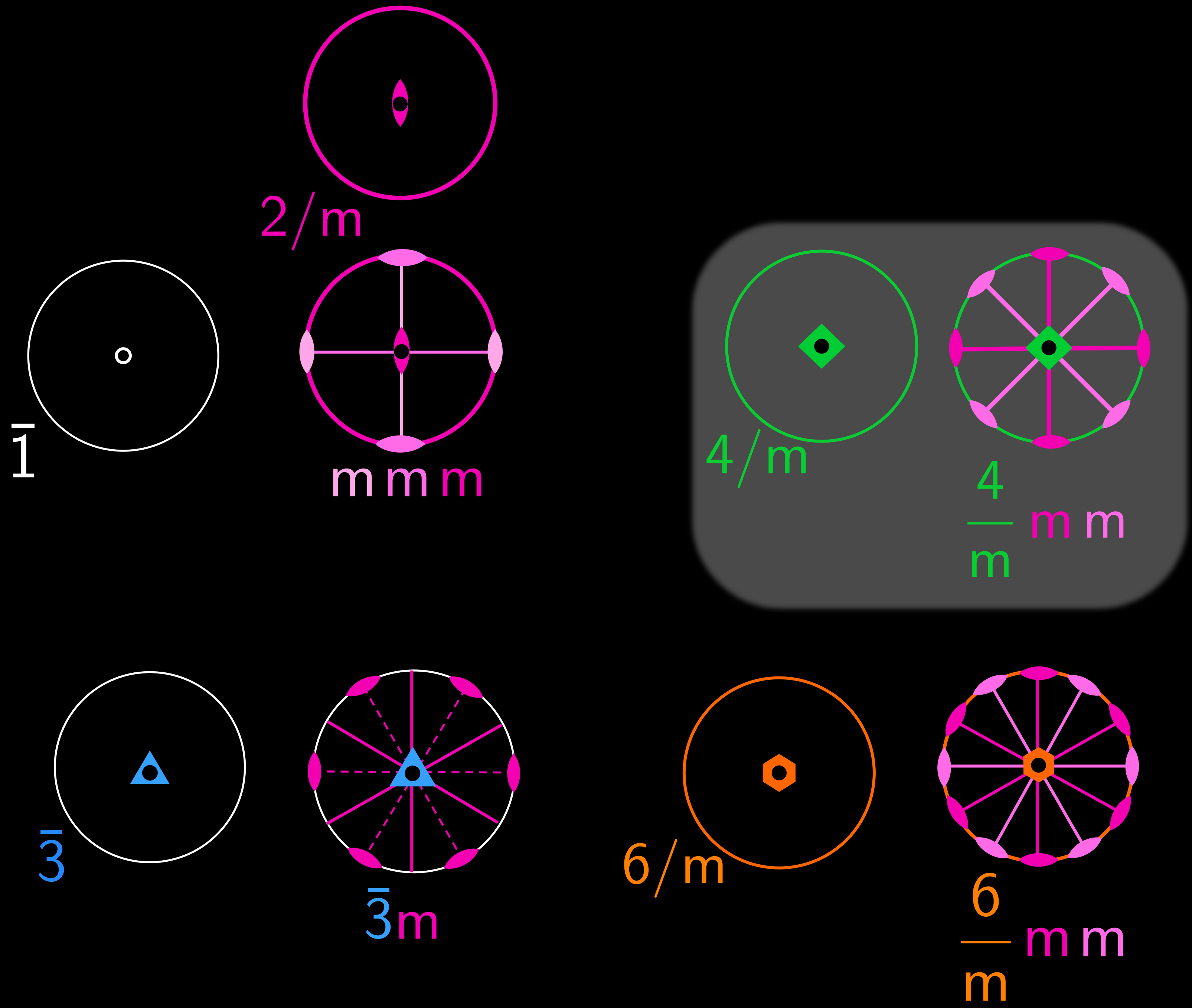
symétrie du cristal ≤ symétrie du réseau

tout réseau est centrosymétrique

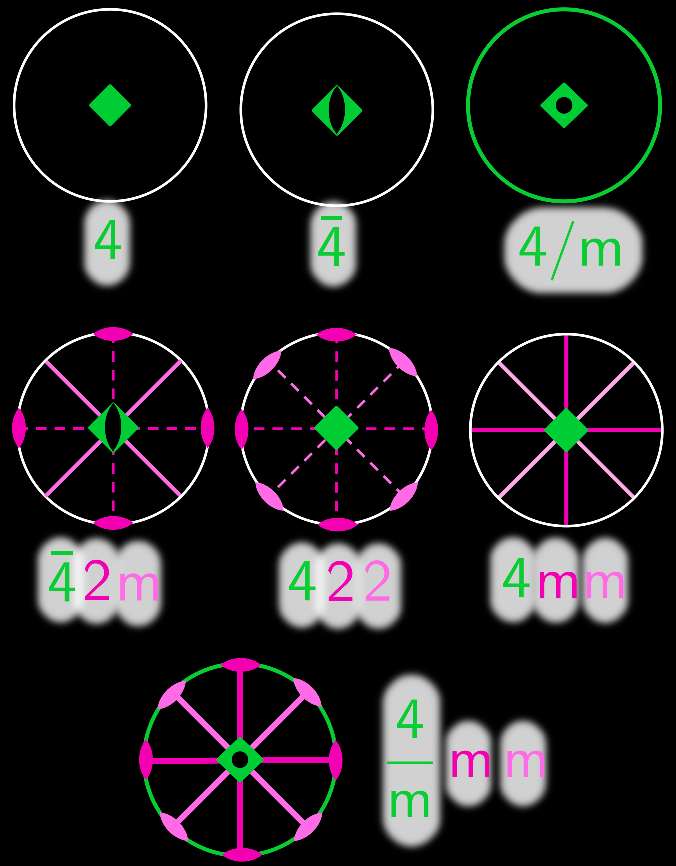


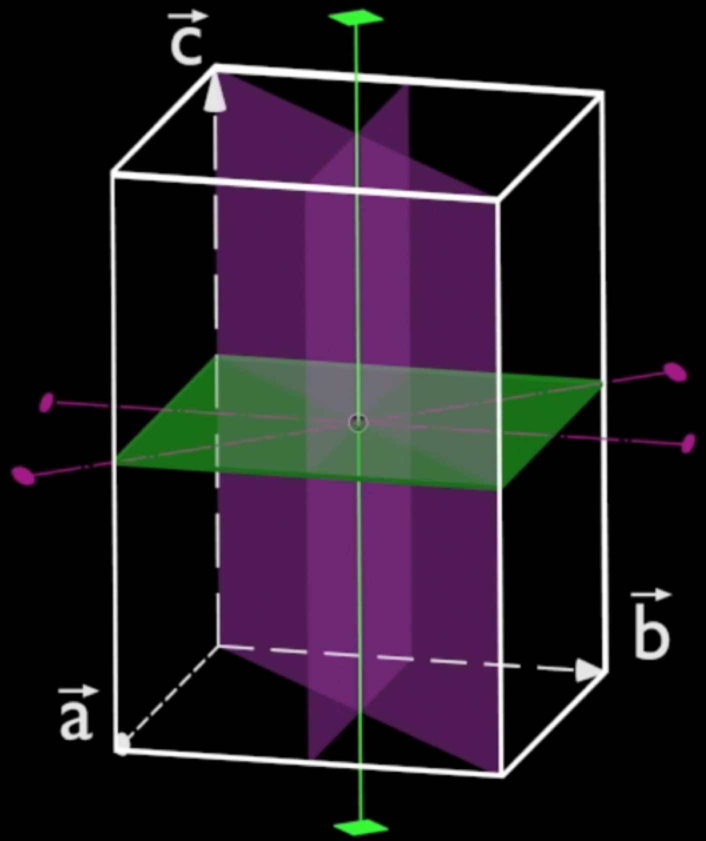

1
2
m
2/m
4
4/m
4mm
$\frac{4}{m}mm$
$\bar{1}$
mm2
222
mmm
$\bar{4}$
$\bar{4}2m$
422
3
3m
$\bar{3}m$
6
6/m
6mm
$\frac{6}{m}mm$
$\bar{3}$
32
$\bar{6}$
$\bar{6}2m$
622

Classes de Laue



système quadratique





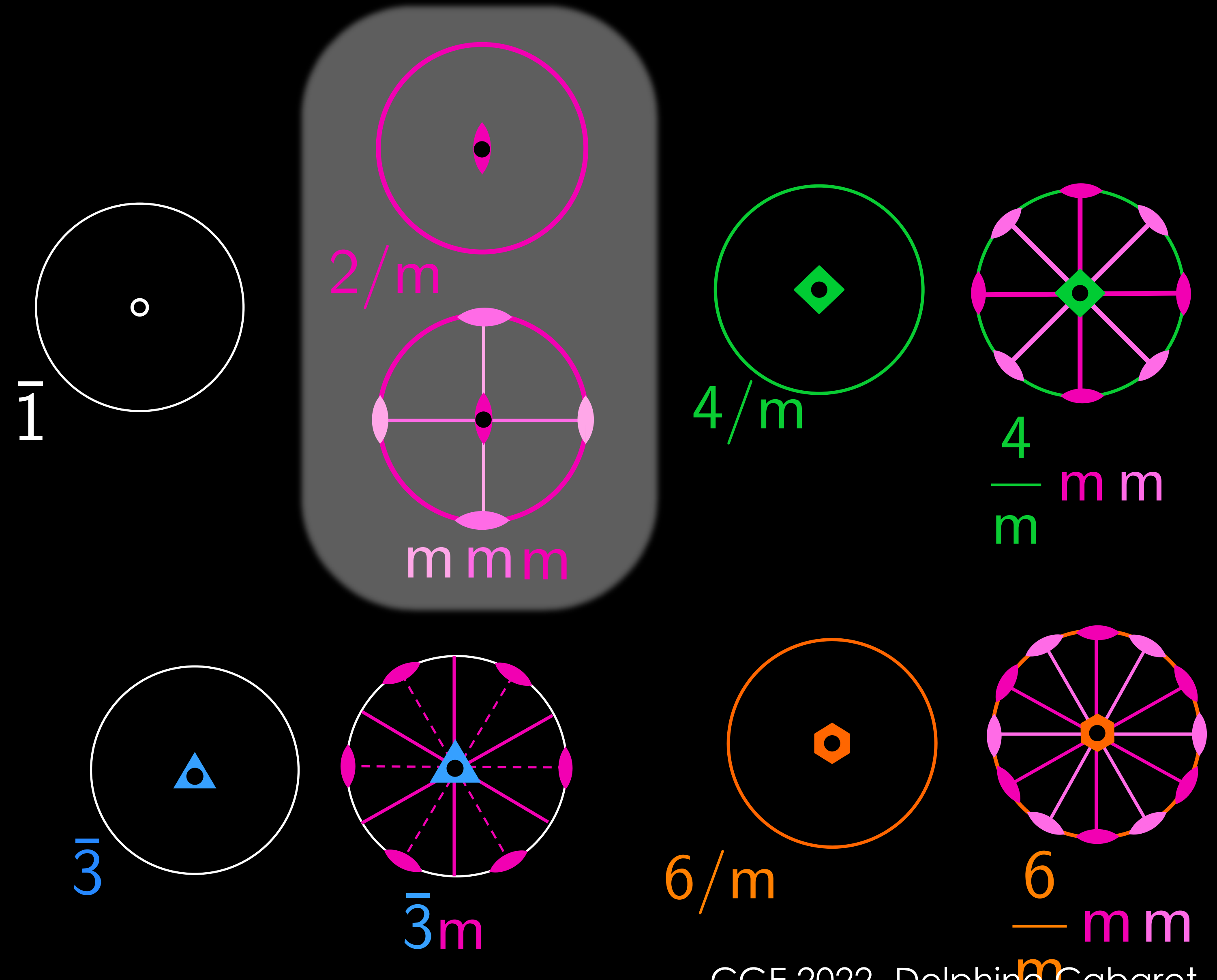
$a = b$

$\alpha = \beta = \gamma = 90°$

direction [001]

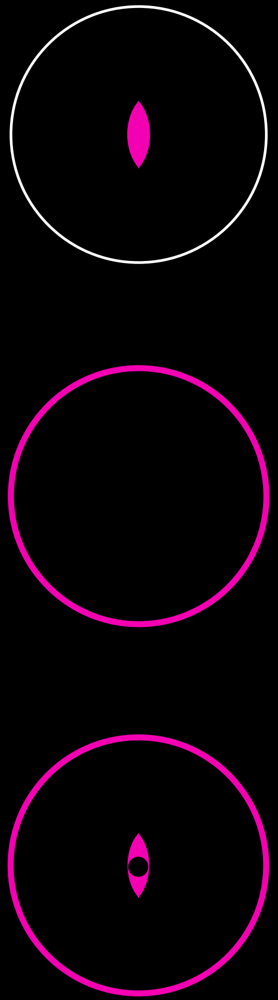
directions [100] et [010]

directions [110] et [$\bar{1}$10]



Classes de Laue

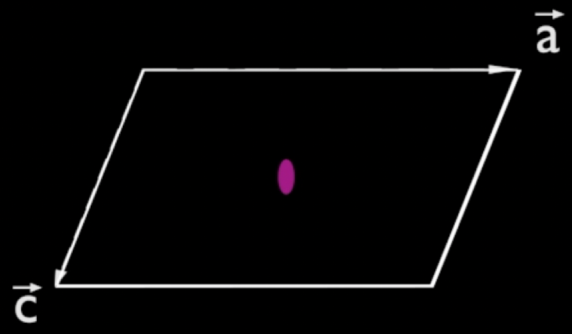
système monoclinique

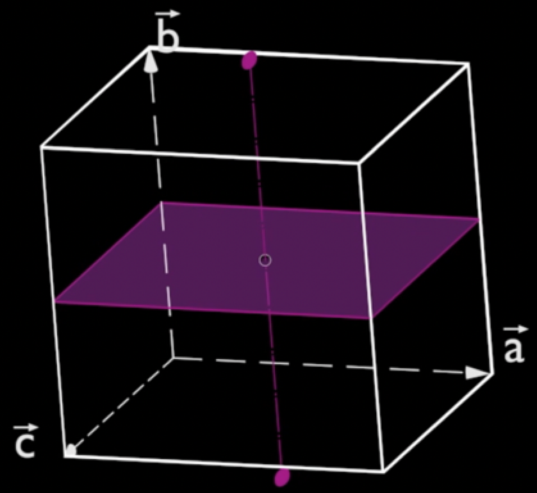


2

m

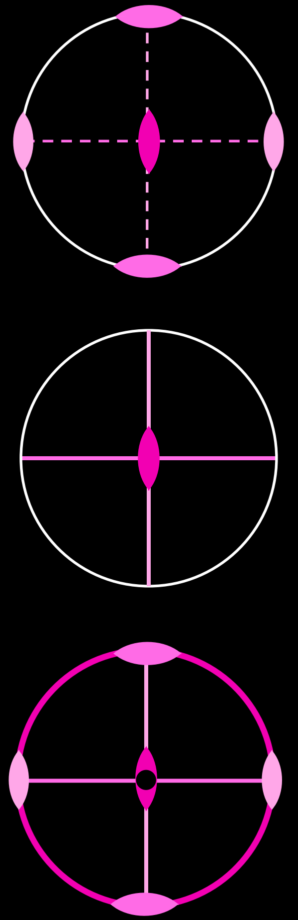
2/m





$$\alpha = \gamma = 90°$$

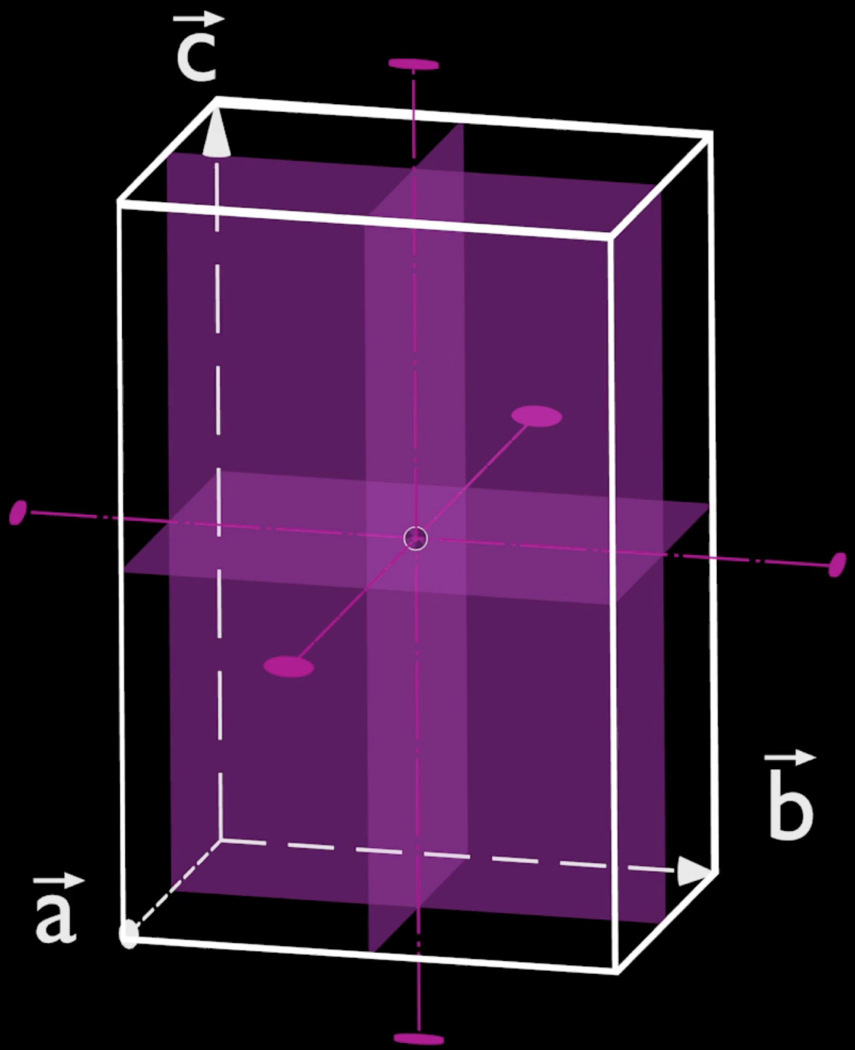
système orthorhombique



2 2 2

m m 2

m m m



$\alpha = \beta = \gamma = 90°$

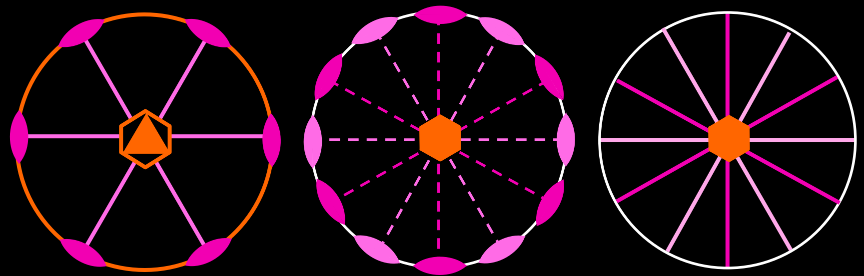
direction [100]

direction [010]

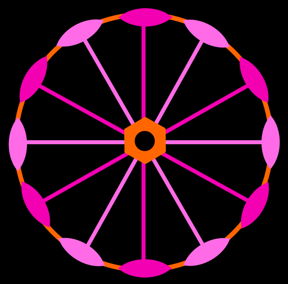
direction [001]

système hexagonal

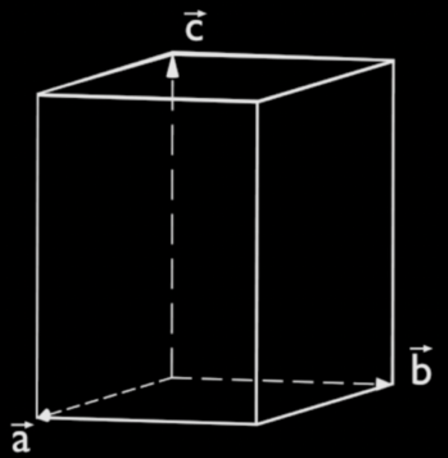
6 $\quad \bar{6} \quad$ 6/m

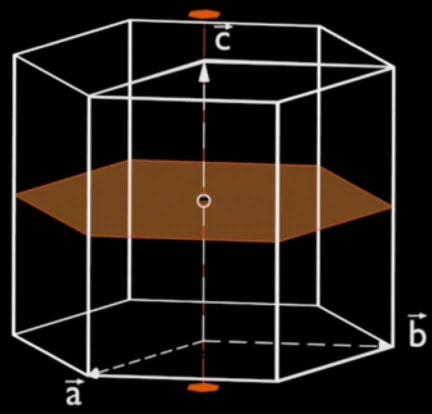


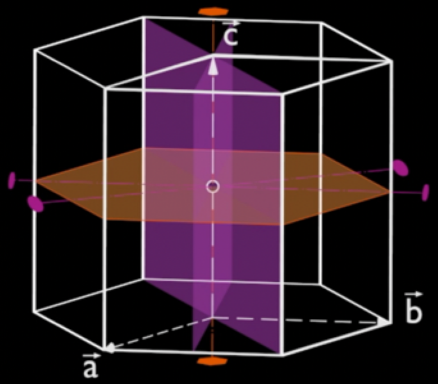
$\bar{6}2m \quad 622 \quad 6mm$



$\frac{6}{m}mm$







$a = b$

$\gamma = 120°$

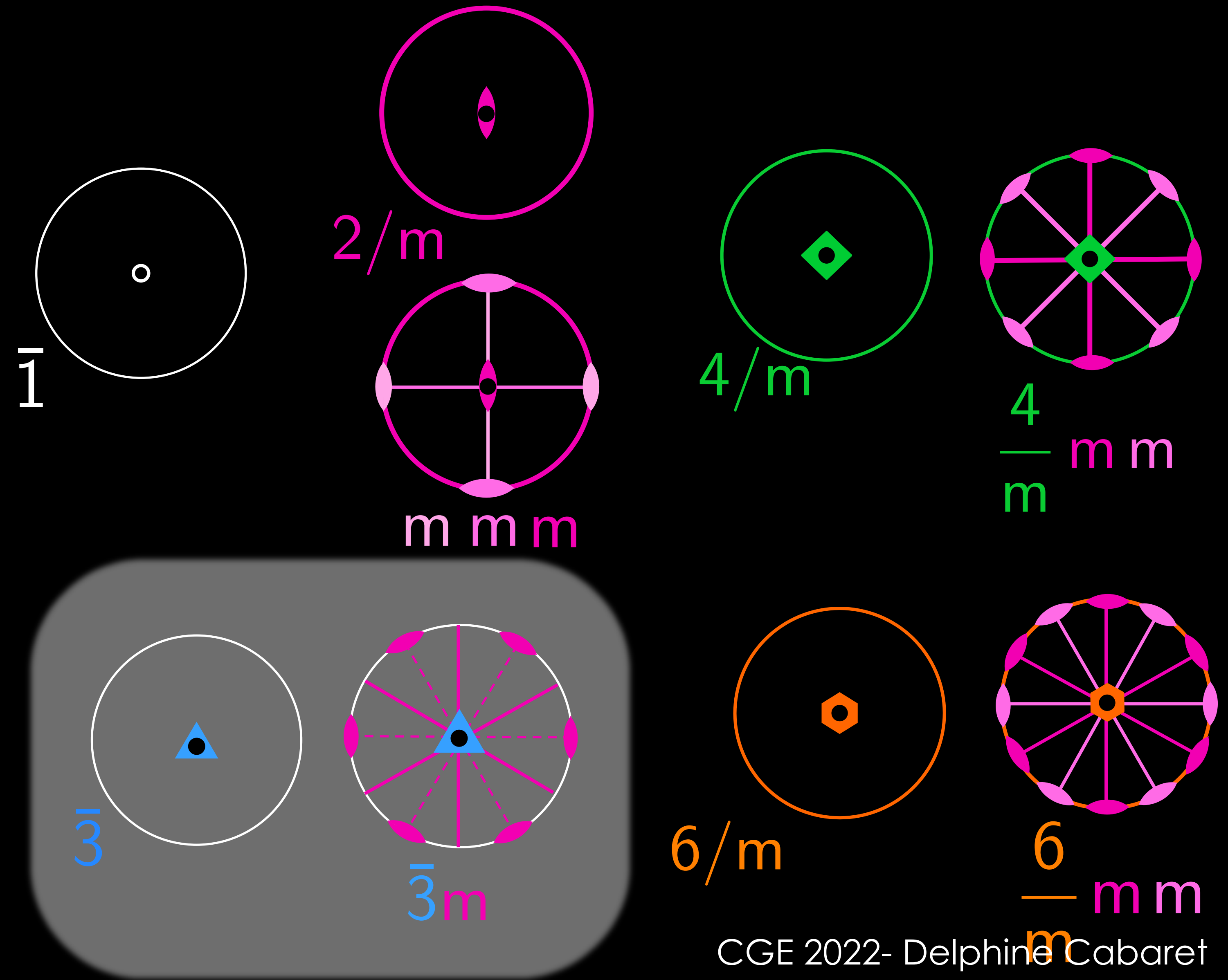
$\alpha = \beta = 90°$

direction [001]

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

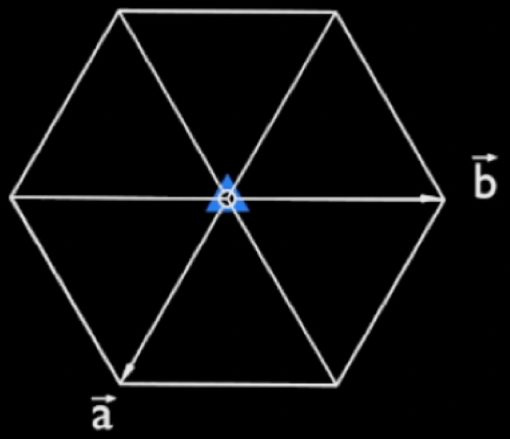
directions
$[1\bar{1}0], [120], [\bar{2}\bar{1}0]$

Classes de Laue



système trigonal

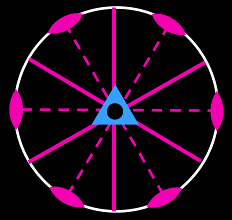
$\bar{3}$



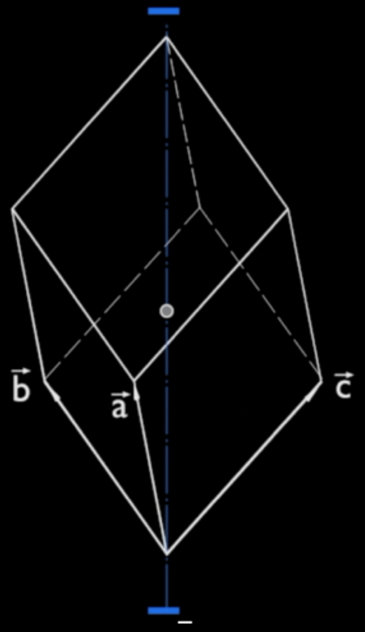
maille rhomboédrique

$$a = b = c$$

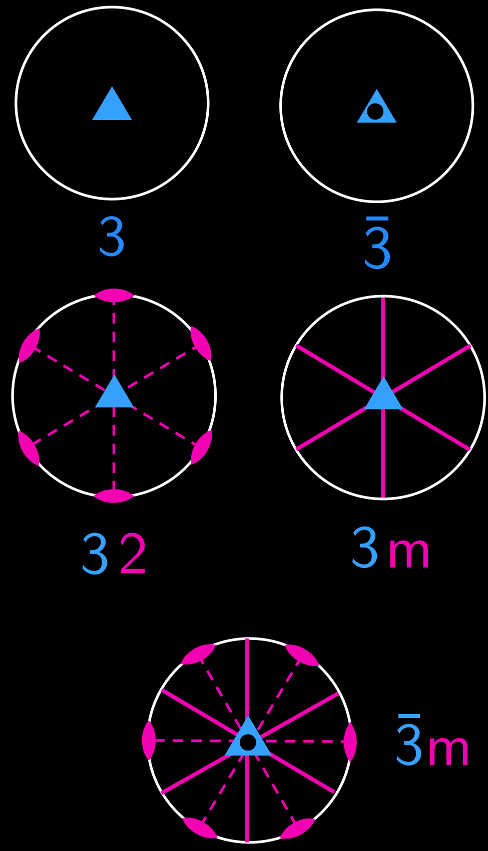
$$\alpha = \beta = \gamma$$



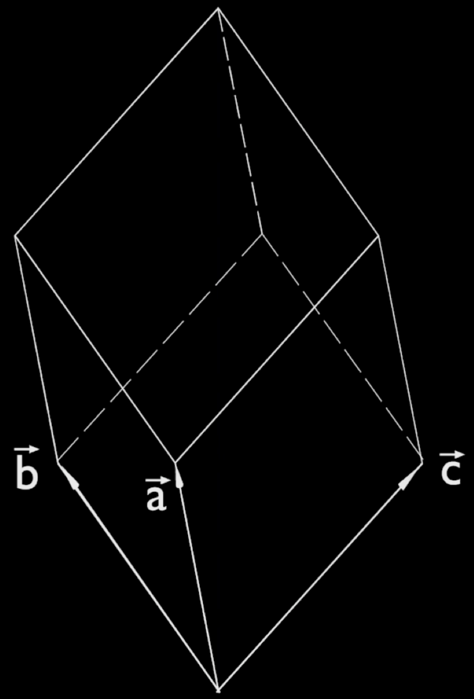
$\bar{3}m$



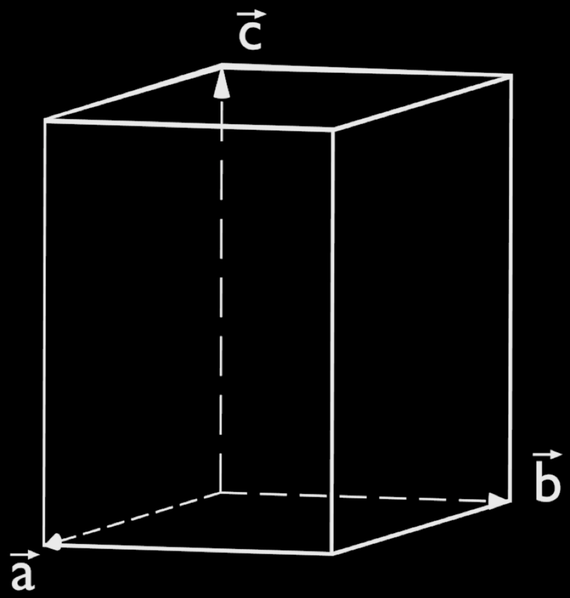
système trigonal



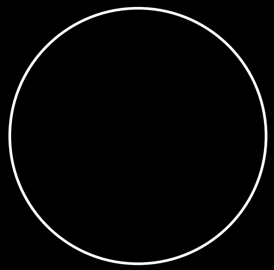
système d'axes
rhomboédriques



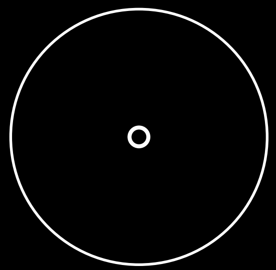
système d'axes
hexagonaux



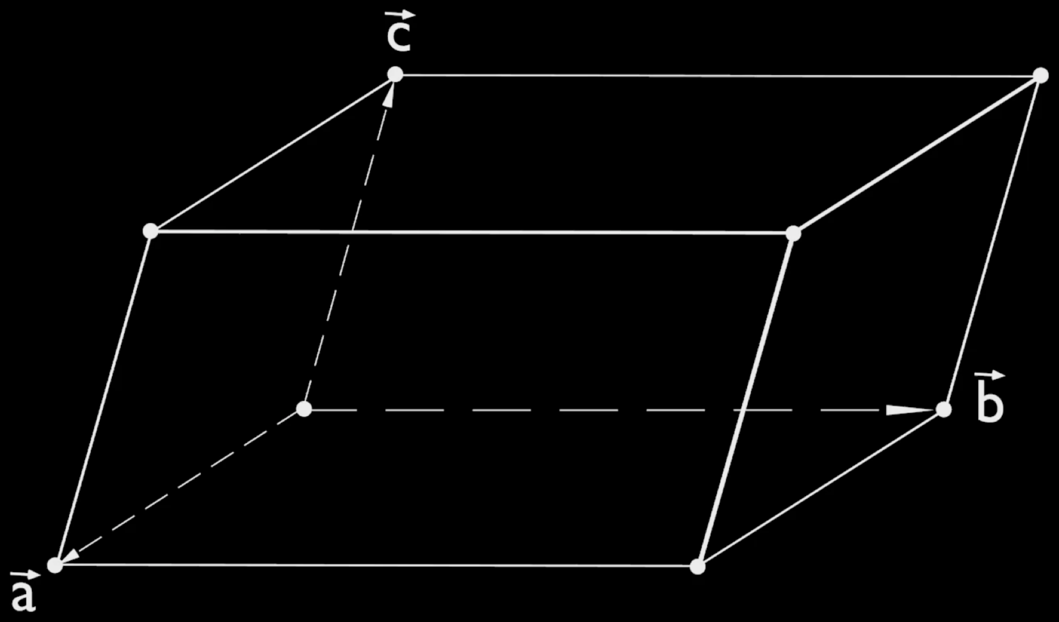
système triclinique



1



$\bar{1}$



Classement des 32 groupes ponctuels

symétrie du cristal ≤ 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).

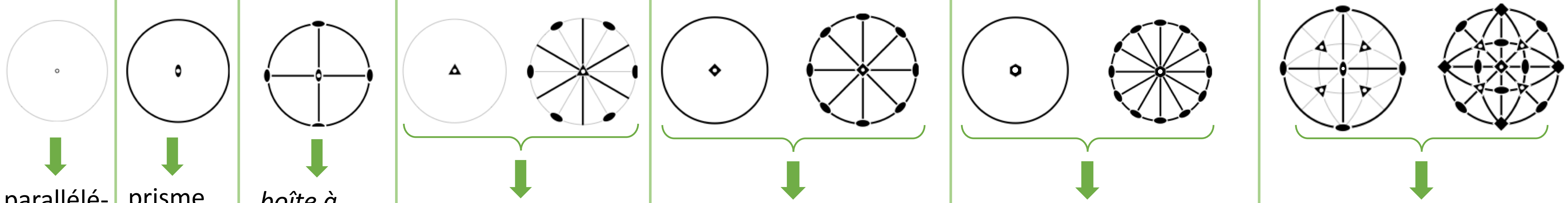
➔ Les 25 autres groupes sont de symétrie inférieure. Pour retrouver la symétrie de leur réseau, il suffit d'ajouter aux éléments de symétrie du groupe ceux qui sont nécessaires pour satisfaire les critères 1 et 2.

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**.

$\boxed{\bar{A}_1}$	$\boxed{\frac{A_2}{M}C}$	$\boxed{\frac{A_2}{M}\frac{A'_2}{M'}\frac{A''_2}{M''}C}$	$\bar{A}_3$; $\boxed{\bar{A}_3\frac{3A'_2}{3M'}C}$	$\frac{A_4}{M}C$; $\boxed{\frac{A_4}{M}\frac{2A'_2}{2M'}\frac{2A''_2}{2M''}C}$	$\frac{A_6}{M}C$; $\boxed{\frac{A_6}{M}\frac{3A'_2}{3M'}\frac{3A''_2}{3M''}C}$	$\frac{3A_2}{3M}4\bar{A}_3C$; $\boxed{\frac{3A_4}{3M}4\bar{A}_3\frac{6A'_2}{6M'}C}$



parallélé-pipède qq	prisme droit à base paralélo-gramme	*boîte à chaussures*	rhomboèdre	prisme droit à base carrée	1/3 de prisme droit à base hexagonale	cube

11 – Systèmes cristallins

Système cristallin	Notations *étendue*	Hermann-Mauguin	Schoenflies	Ordre du groupe
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
	$\bar{A}_4$	$\bar{4}$	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
	$\bar{\mathrm{A}}_3$	$\bar{3}$	$C_{3i} \equiv S_6$	6
	$\mathrm{A}_3\ 3\mathrm{M}'$	$3\ m$	C_{3v}	6
	$\mathrm{A}_3\ 3\mathrm{A}'_2$	$3\ 2$	D_3	6
	$\bar{\mathrm{A}}_3\ \frac{3\mathrm{A}'_2}{3\mathrm{M}'}\ \mathrm{C}$	$\bar{3}\ m$	D_{3d}	12
hexagonal	A_6	6	C_6	6
	$\bar{\mathrm{A}}_6$	$\bar{6}$	$C_{3h} \equiv S_3$	6
	$\mathrm{A}_6\ 3\mathrm{M}'\ 3\mathrm{M}''$	$6\ m\ m$	C_{6v}	12
	$\frac{\mathrm{A}_6}{\mathrm{M}}\ \mathrm{C}$	$6/m$	C_{6h}	12
	$\bar{\mathrm{A}}_6\ 3\mathrm{A}'_2\ 3\mathrm{M}''$	$\bar{6}\ 2\ m$	D_{3h}	12
	$\mathrm{A}_6\ 3\mathrm{A}'_2\ 3\mathrm{A}''_2$	$6\ 2\ 2$	D_6	12
	$\frac{\mathrm{A}_6}{\mathrm{M}}\ \frac{3\mathrm{A}'_2}{3\mathrm{M}'}\ \frac{3\mathrm{A}''_2}{3\mathrm{M}''}\ \mathrm{C}$	$6/m\ m\ m$	D_{6h}	24
cubique	$3\mathrm{A}_2\ 4\mathrm{A}_3$	$2\ 3$	T	12
	$\frac{3\mathrm{A}_2}{3\mathrm{M}}\ 4\bar{\mathrm{A}}_3\ \mathrm{C}$	$m\ \bar{3}$	T_h	24
	$3\bar{\mathrm{A}}_4\ 4\mathrm{A}_3\ 6\mathrm{M}'$	$\bar{4}\ 3\ m$	T_d	24
	$3\mathrm{A}_4\ 4\mathrm{A}_3\ 6\mathrm{A}'_2$	$4\ 3\ 2$	O	24
	$\frac{3\mathrm{A}_4}{3\mathrm{M}}\ 4\bar{\mathrm{A}}_3\ \frac{6\mathrm{A}'_2}{6\mathrm{M}'}\ \mathrm{C}$	$m\ \bar{3}\ m$	O_h	48

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 conventionnelle

8 – Projection stéréographique

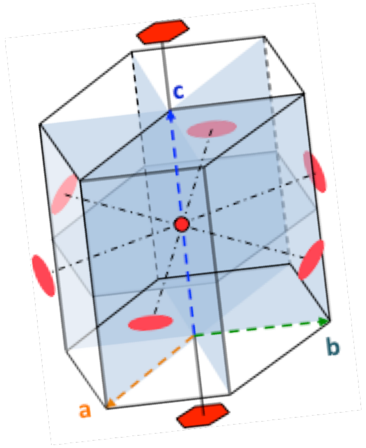
9 – Roto-inversions

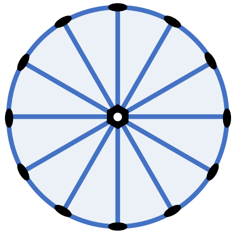
10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques

11 – Les 7 systèmes cristallins

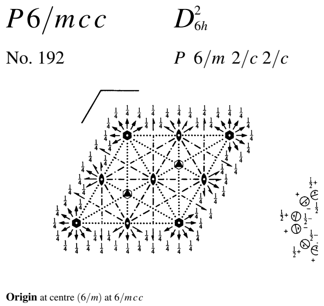
12 – Les 14 réseaux de Bravais

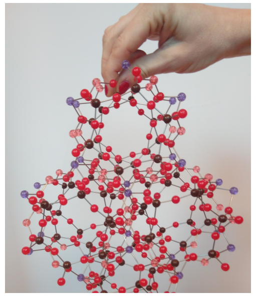
13 – Les 230 groupes d'espace





$\frac{6}{m}mm$





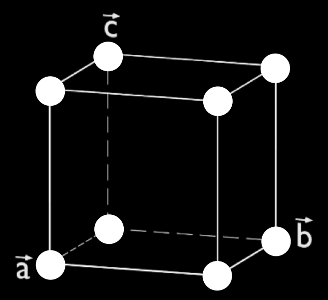
12 – Les 14 réseaux de Bravais

un réseau de Bravais → maille **conventionnelle**

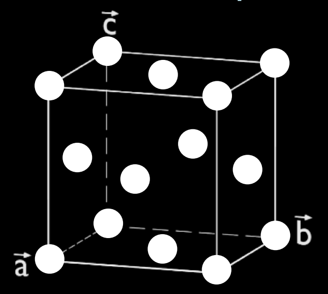
↓

maille holoèdre

maille primitive

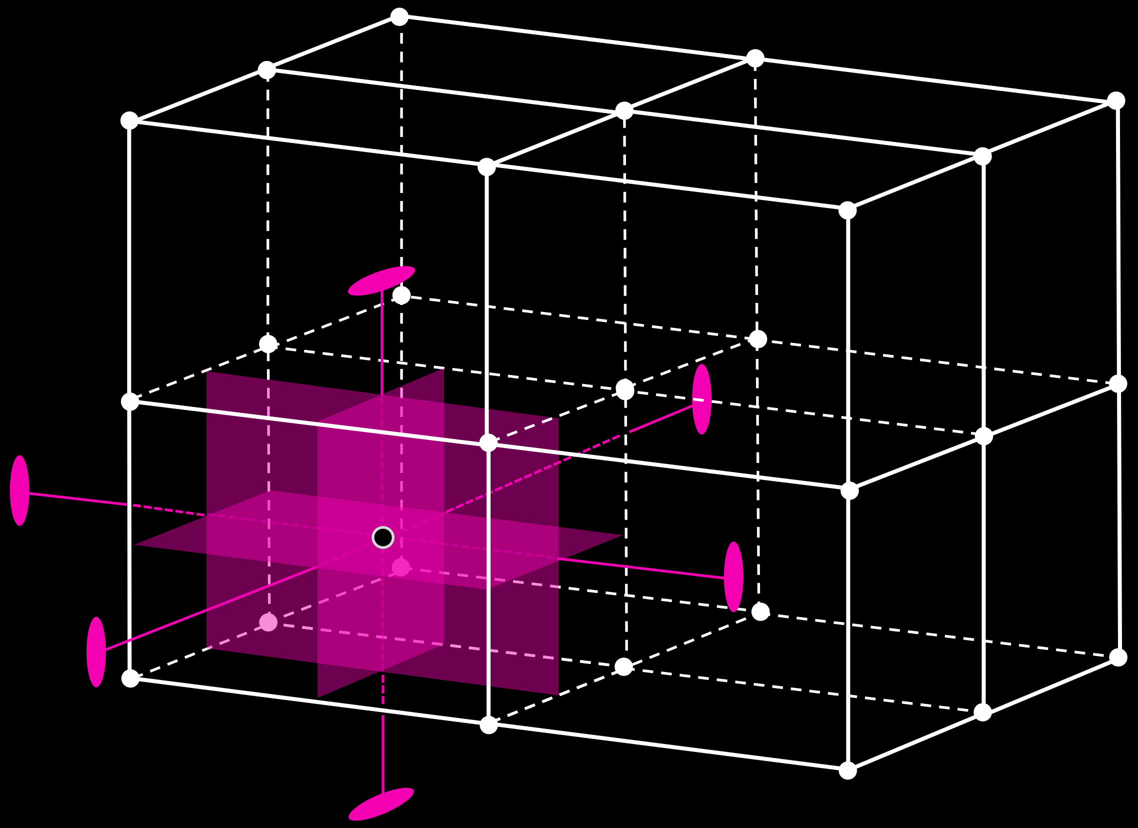


maille multiple



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

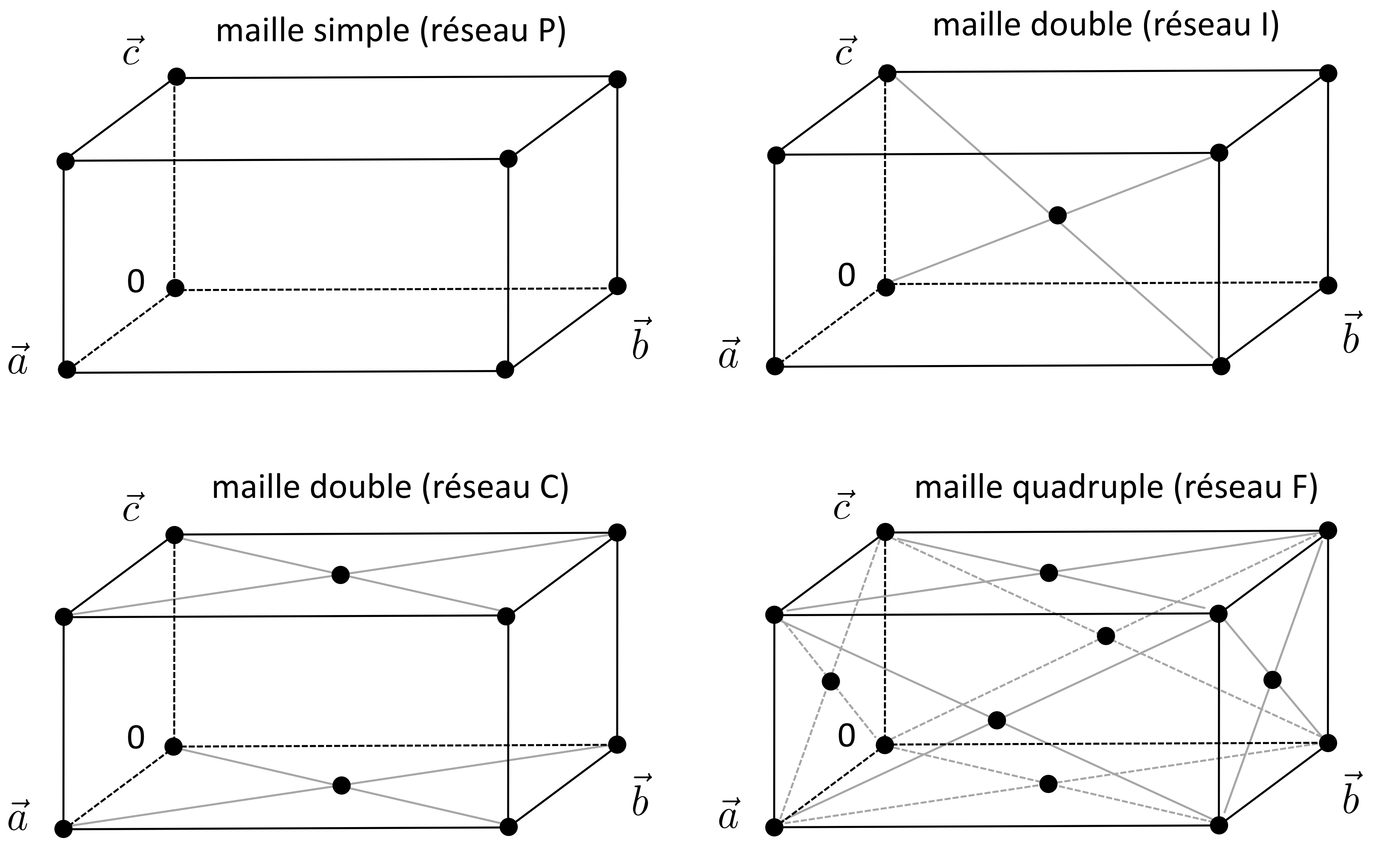
mailles multiples à 3D

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

➔ **4 modes de réseau** (i.e. 4 groupes de translations)

12 – Les 14 réseaux de Bravais

mailles multiples à 3D



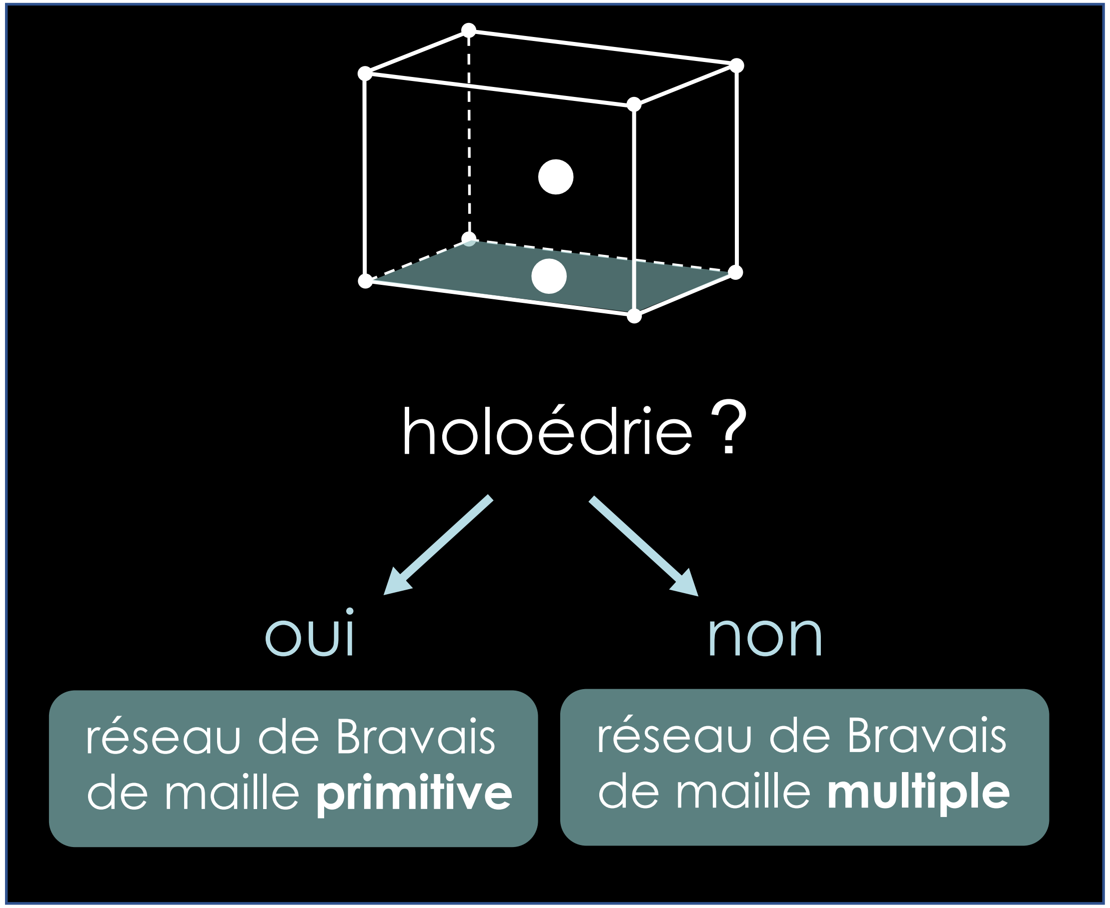
12 – Les 14 réseaux de Bravais

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

7 systèmes cristallins
4 modes de réseau

28 possibilités ?

➔ seulement 14 réseaux de Bravais



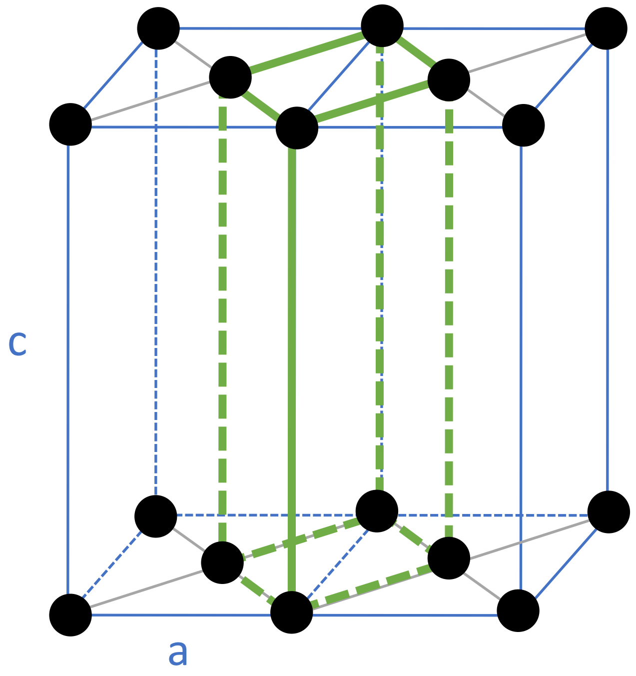
12 – Les 14 réseaux de Bravais

➡ 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 / √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*

Système trigonal

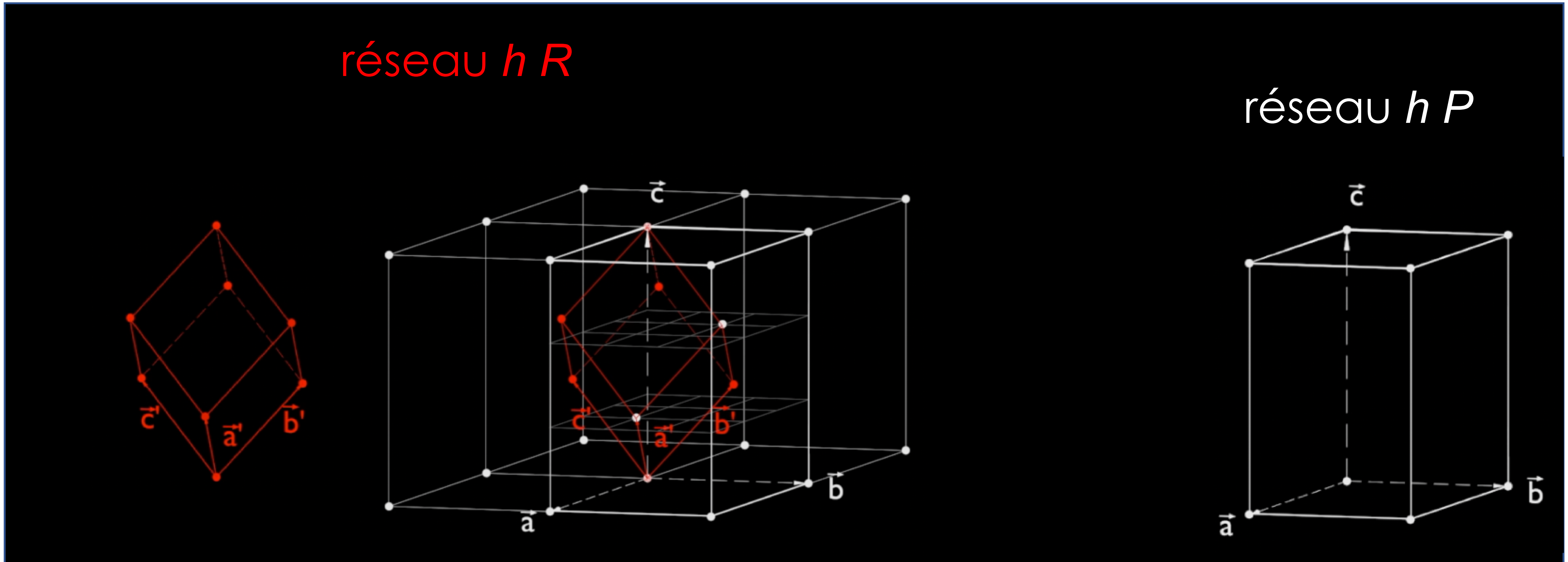
$\bar{3}\,m$

système d'axes hexagonaux ➔ le réseau de Bravais *hP*

système d'axes rhomboédriques ➔ réseau de Bravais *hR, qui est aussi primitif*

mais dans la pratique, on décrit souvent les structures cristallines rhomboédriques dans une maille triple hexagonale.

cas particulier du réseau *hR*



$$+\left(\frac{1}{3},\frac{2}{3},\frac{2}{3}\right)+\left(\frac{2}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{3}\right)$$

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 conventionnelle

8 – Projection stéréographique

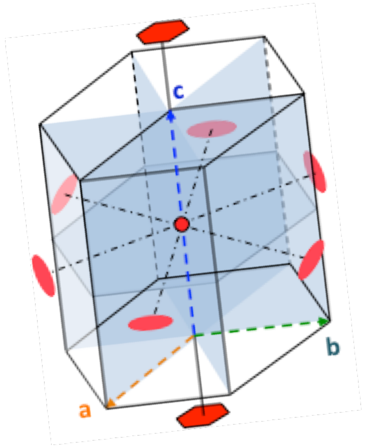
9 – Roto-inversions

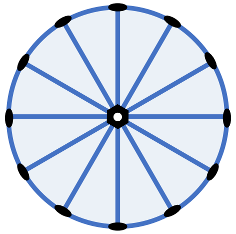
10 – Les 32 groupes ponctuels cristallographiques

11 – Les 7 systèmes cristallins

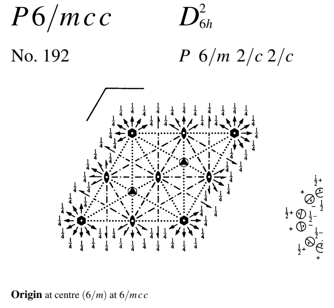
12 – Les 14 réseaux de Bravais

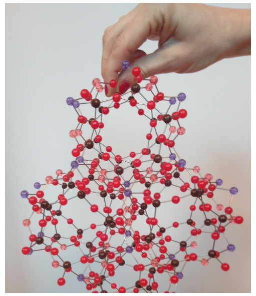
13 – Les 230 groupes d'espace





$\frac{6}{m}mm$





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

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

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 $\mathrm{A}_n \times \vec{t}$ et $m \times \vec{t}$

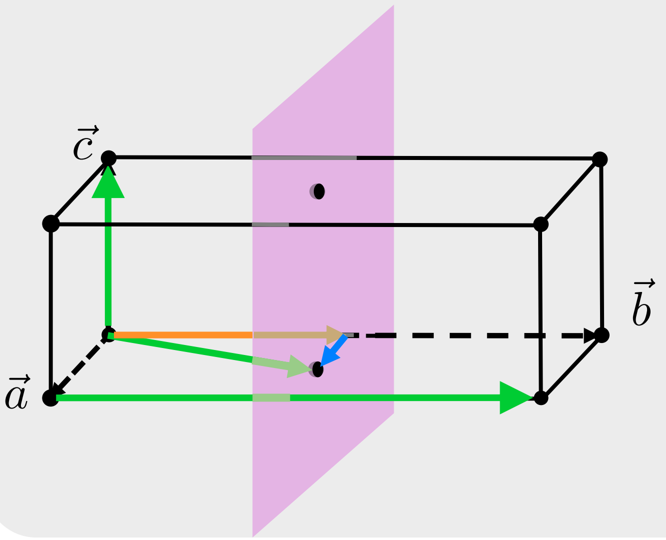
Symétrie de position : miroir × translation de réseau

miroir m $\times$ $\vec{t}$

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

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

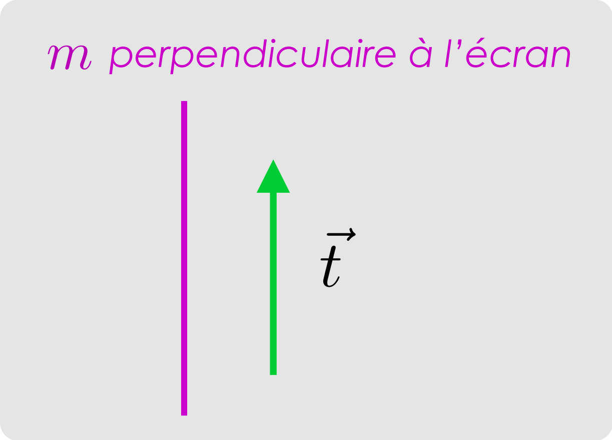
cas n°3 : $\vec{t}$ oblique / miroir $\qquad \vec{t} = \frac{\vec{a}+\vec{b}}{2} \qquad \vec{t} = \boxed{\vec{t}_\perp} + \boxed{\vec{t}_\parallel}$



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

Symétrie de position : miroir × translation de réseau

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

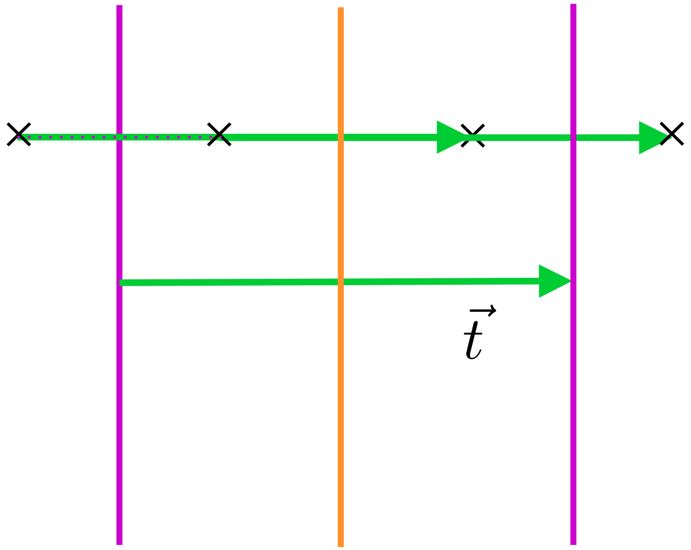


tout miroir m est un plan infini

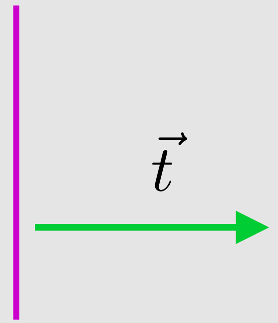
toute translation $\vec{t} \parallel m$
n'a aucun effet sur lui

Symétrie de position : miroir × translation de réseau

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



m *perpendiculaire à l'écran*



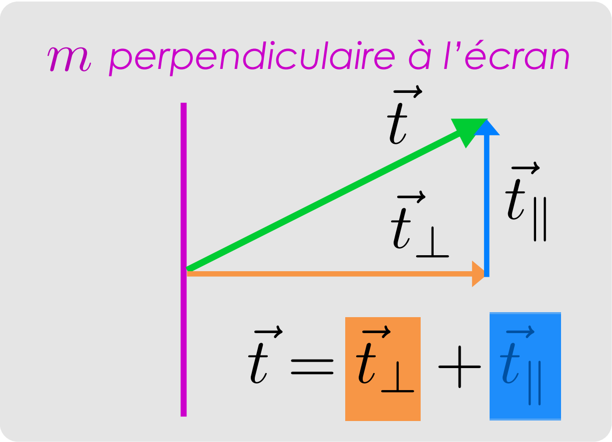
➡ nouveau miroir m à $\frac{\vec{t}}{2}$ du premier

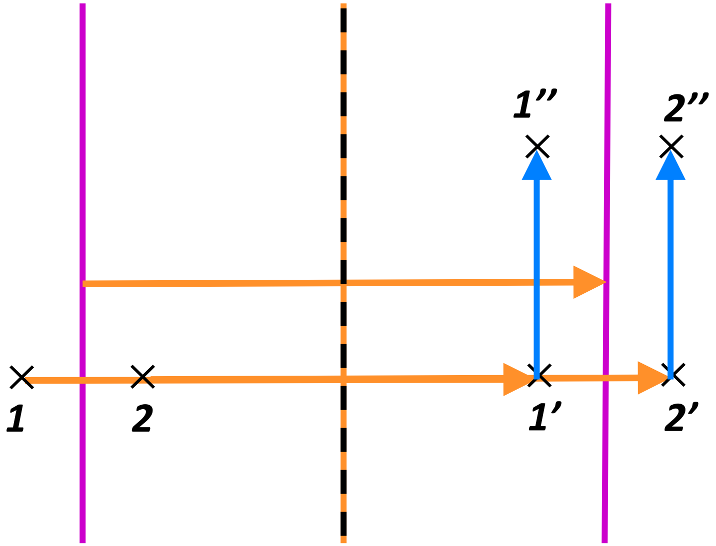
Symétrie de position : miroir × translation de réseau

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

Symétrie de position : miroir × translation de réseau

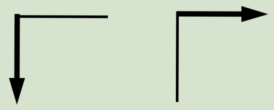
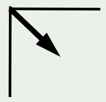
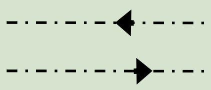
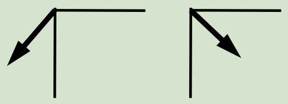
- Miroir m combiné à une translation $\vec{t}_{||}$ parallèle à m
  ($\vec{t}_{||}$ **n'est pas** une translation de réseau)
- Elément de symétrie d'ordre 2 ; opération associée notée $(m, \vec{t}_{||})$

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

Miroirs avec glissement axial

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

Symétrie de position : miroir × translation de réseau

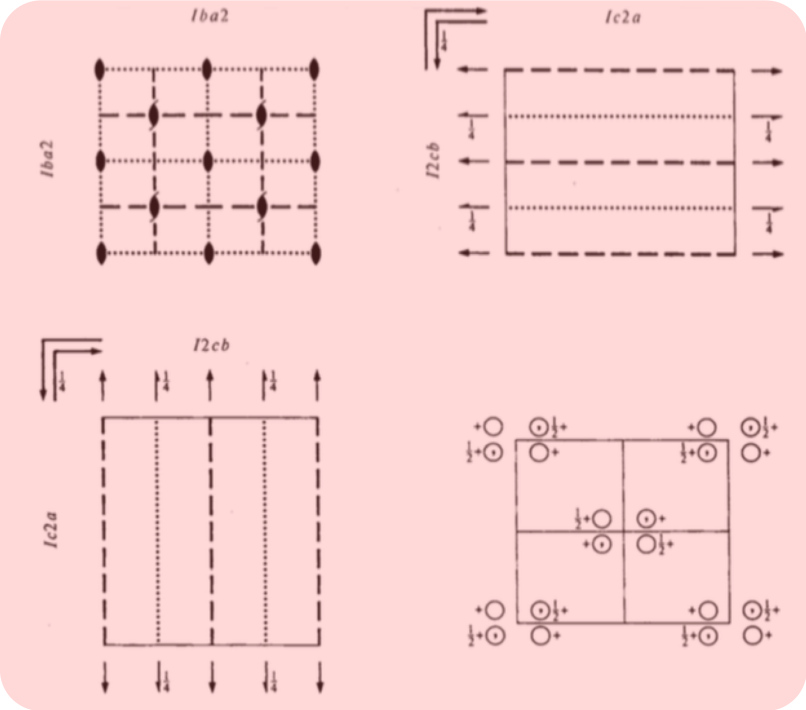
Type de plan	Notation	Translation	Symbole	
			normal au plan de la figure	parallèle au plan de la figure
miroir	m	0		
miroir avec glissement axial	a ou b c	$\vec{a}/2$ ou $\vec{b}/2$ $\vec{c}/2$		
miroir avec glissement diagonal	n	$(\vec{a} \pm \vec{b})/2$ $(\vec{a} \pm \vec{c})/2$ $(\vec{b} \pm \vec{c})/2$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

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



Origin on $cc2$

Asymmetric unit $0 \le x \le \frac{1}{4}$; $0 \le y \le \frac{1}{2}$; $0 \le z \le \frac{1}{2}$

Symmetry operations

For $(0,0,0)+$ set
(1) 1 (2) $2\ 0,0,z$ (3) $a\ x,\frac{1}{4},z$ (4) $b\ \frac{1}{4},y,z$

For $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})+$ set
(1) $t(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$ (2) $2(0,0,\frac{1}{2})\ \frac{1}{4},\frac{1}{4},z$ (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 *c*
sont engendrés par la translation
de réseau *I* (dont les
composantes parallèles aux miroirs *b* ou *a*
ne sont pas des translations de réseau).

Symétrie de position : A_n × translation de réseau

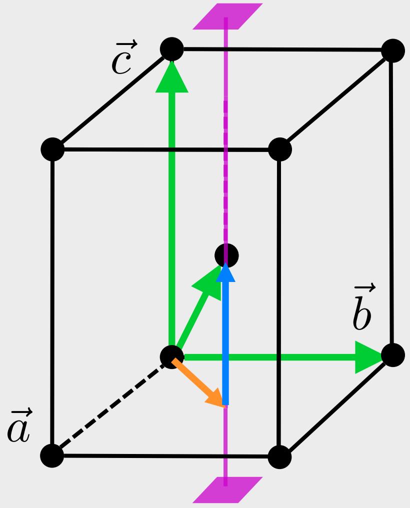
axe A_n $\times$ $\vec{t}$

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

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

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

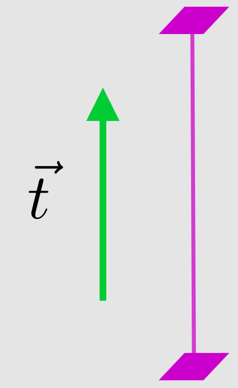
$\vec{t}_{\perp}$ et $\vec{t}_{\parallel}$ ne sont pas des translations de réseau



Symétrie de position : A_n × translation de réseau

cas n°1 : $\mathrm{A}_n \times \vec{t}$ avec $\vec{t} \parallel \mathrm{A}_n$

exemple :
$n = 4$



tout axe A_n est de longueur infinie

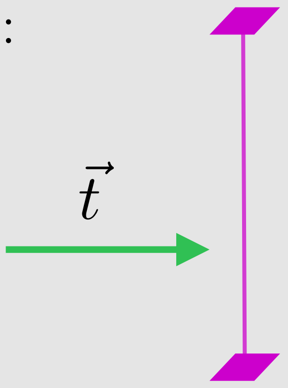
$\vec{t}$ n'a aucun effet sur lui

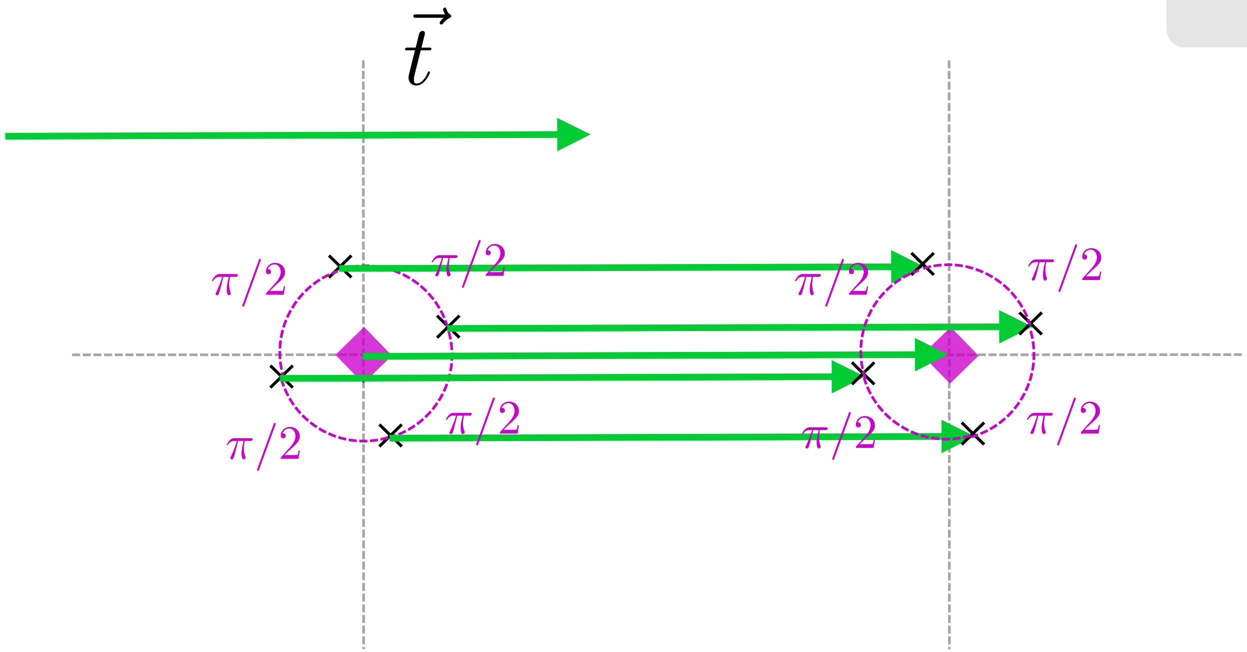
que $\vec{t}$ soit une translation de réseau ou pas

Symétrie de position : A_n × translation de réseau

cas n°2 : $\mathrm{A}_n \times \vec{t}$ avec $\vec{t} \perp \mathrm{A}_n$

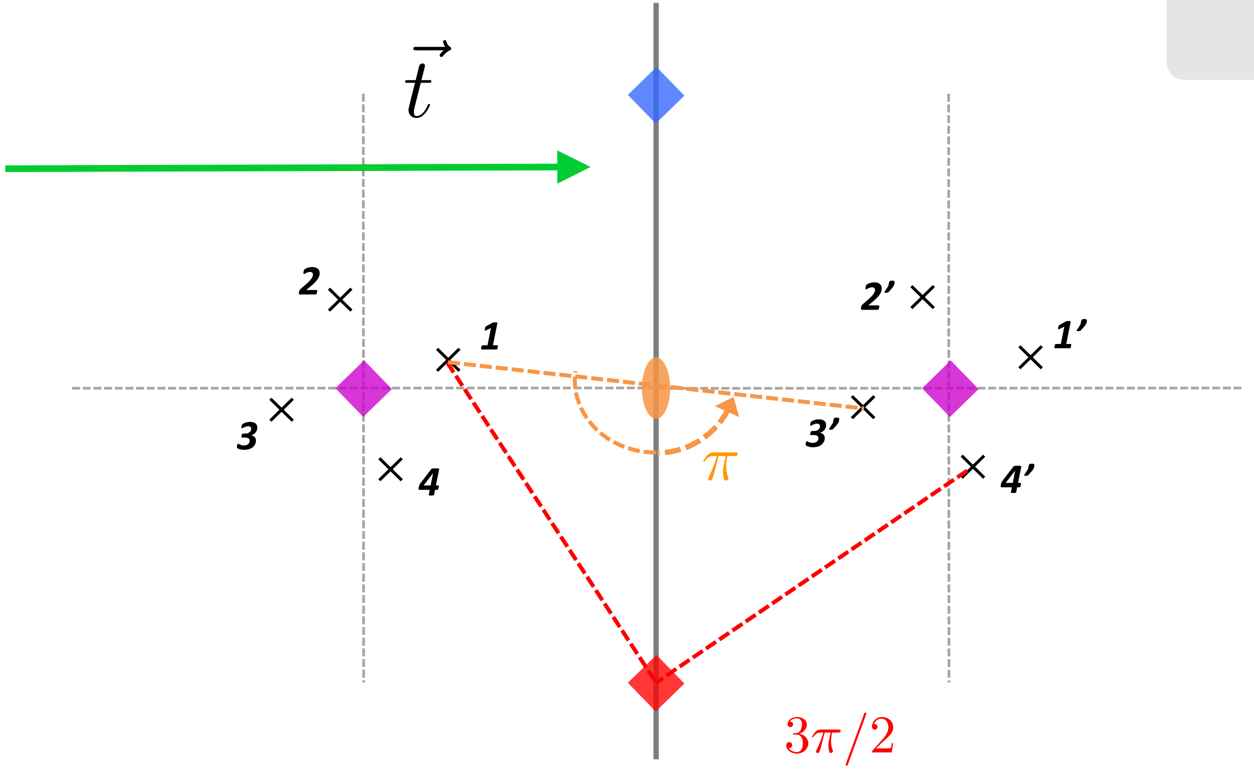
exemple :
$n = 4$



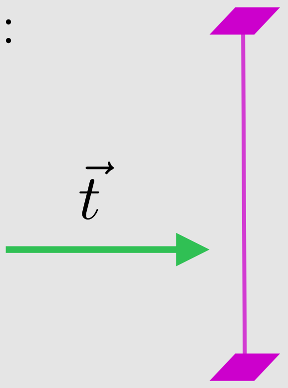


Symétrie de position : A_n × translation de réseau

cas n°2 : $\mathrm{A}_n \times \vec{t}$ avec $\vec{t} \perp \mathrm{A}_n$



exemple :
$n = 4$



1 ⟶ **1'** : $\vec{t}$

1 ⟶ **2'** : A_4

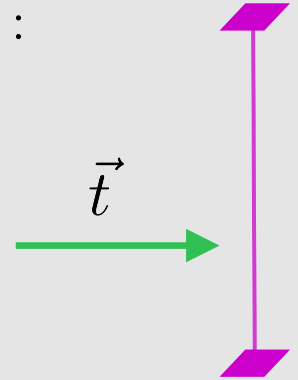
1 ⟶ **3'** : A_2

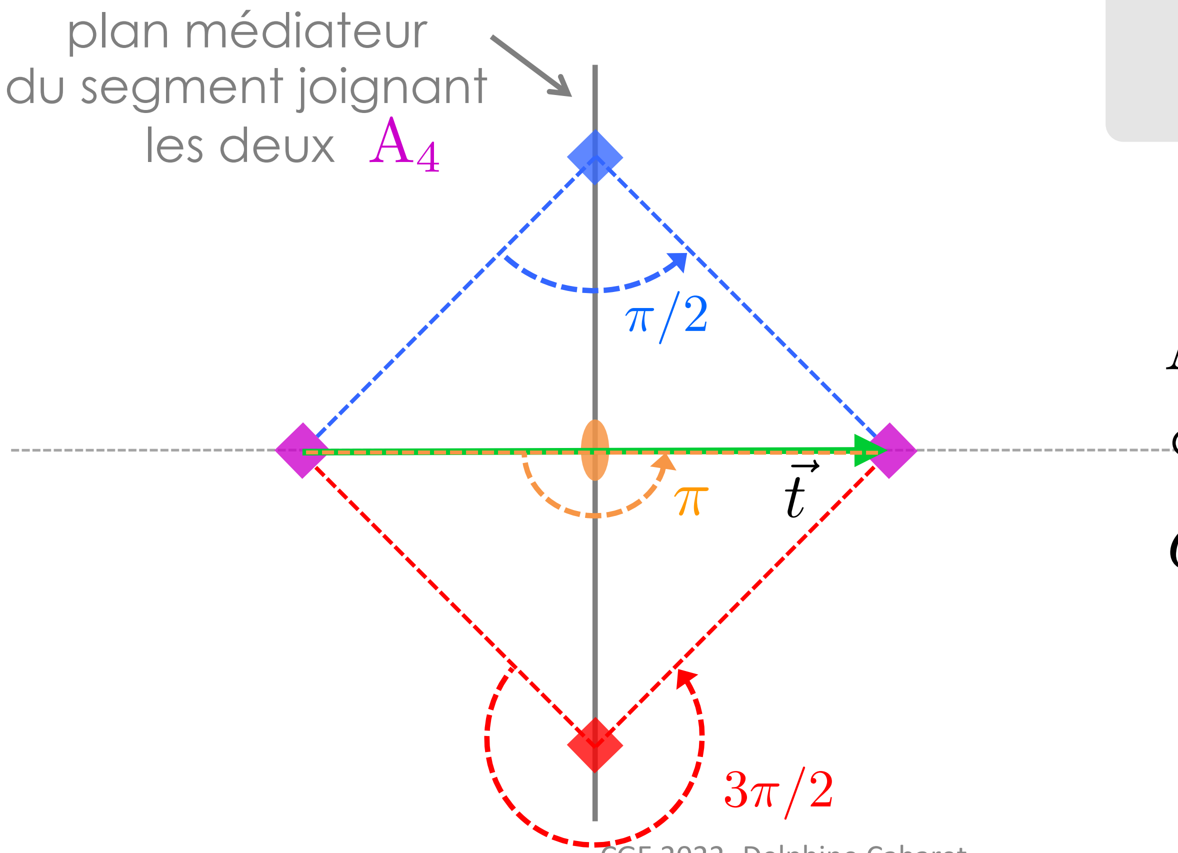
1 ⟶ **4'** : A_4

Symétrie de position : A_n × translation de réseau

cas n°2 : $\mathrm{A}_n \times \vec{t}$ avec $\vec{t} \perp \mathrm{A}_n$

exemple :
$n = 4$





A_4 = représentation du groupe cyclique

$$C_4 = (a, a^2, a^3, e)$$

Symétrie de position : A_n × translation de réseau

cas n°2 : $\mathrm{A}_n \times \vec{t}$ avec $\vec{t} \perp \mathrm{A}_n$

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 $m = 1, \ldots, n-1$

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 $m\dfrac{2\pi}{n}$

A_n est une représentation du groupe cyclique

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

tel que $a^n = e$

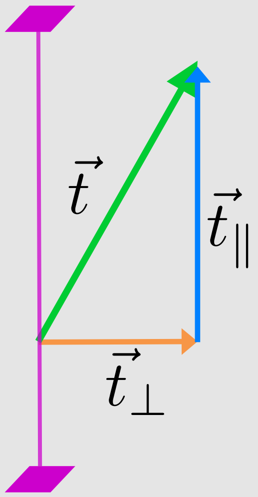
cas n°3 : $\mathrm{A}_n \times \vec{t}$ avec $\vec{t}$ oblique / A_n

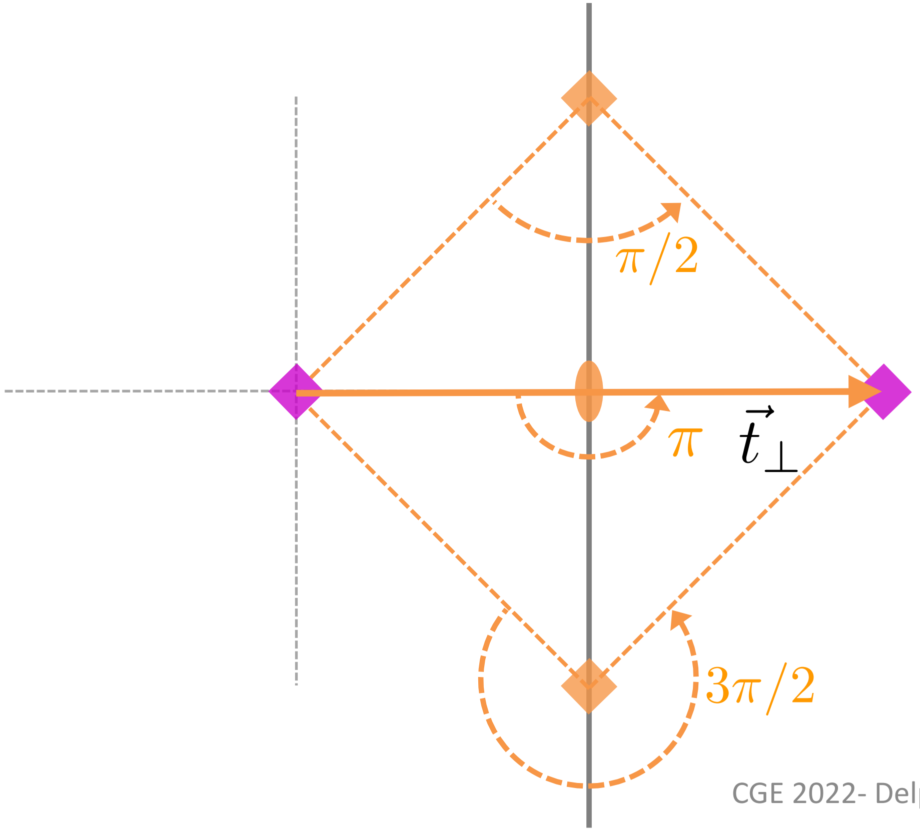
On décompose $\vec{t} = \vec{t}_\perp + \vec{t}_{||}$

où $\vec{t}_\perp$ et $\vec{t}_{||}$ sont les composantes $\perp$ et $||$ à A_n.

exemple :
$n = 4$

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

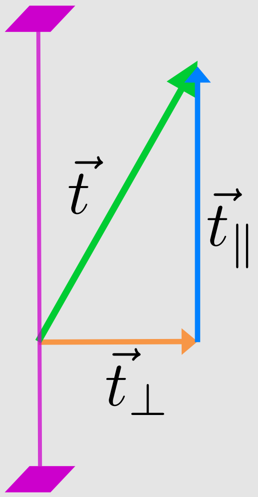


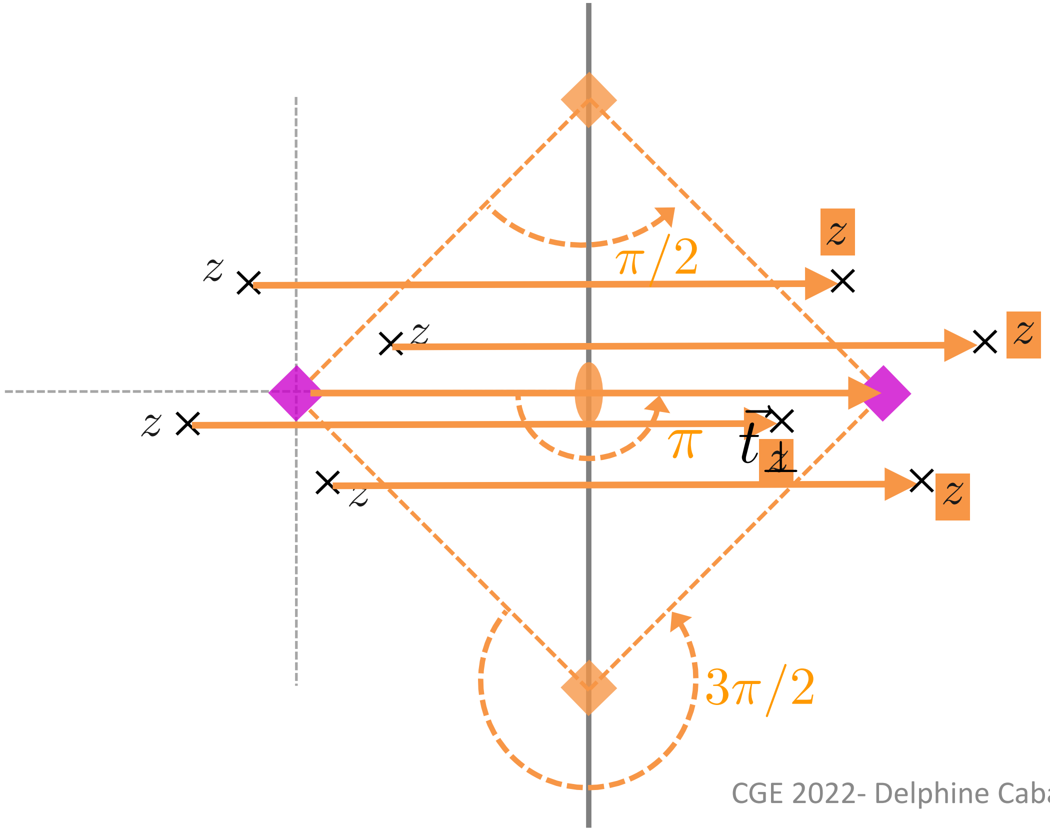


cas n°3 : $\mathrm{A}_n \times \vec{t}$ avec $\vec{t}$ oblique / A_n

exemple :
$n = 4$

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

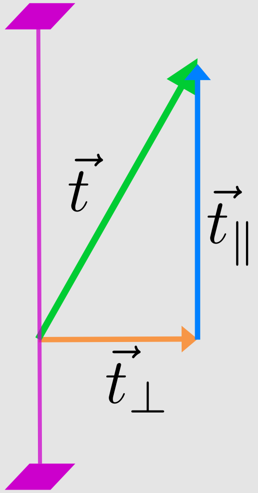




cas n°3 : $\mathrm{A}_n \times \vec{t}$ avec $\vec{t}$ oblique / A_n

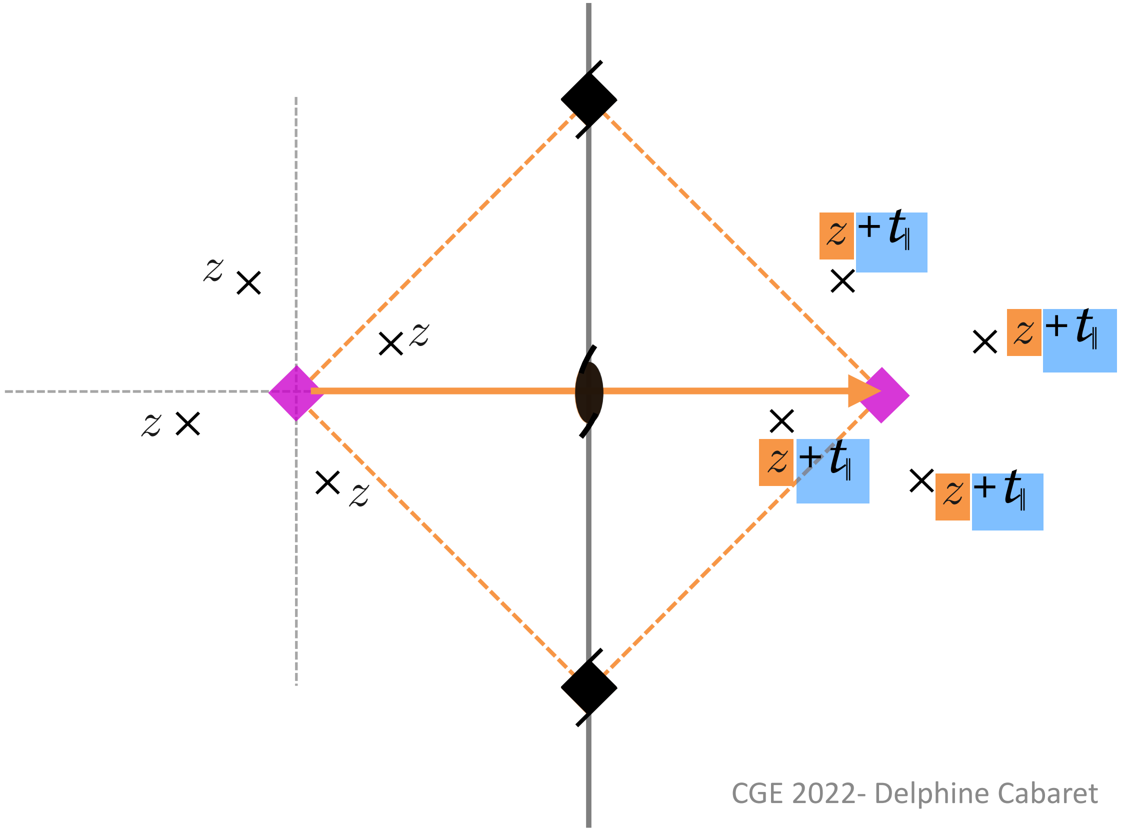
exemple :
$n = 4$

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



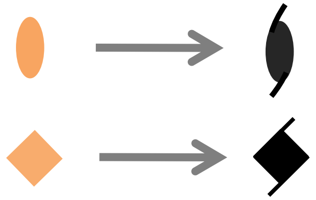
Prise en compte de $\vec{t}_\parallel$

➔ ajout d'une composante $t_\parallel$ à z



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.

axes hélicoïdaux



Symétrie de position : axe hélicoïdal

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

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

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

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

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

$$p = 0 \quad \Rightarrow \quad \vec{t}_{||} = \vec{0}$$

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

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

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

$$\ldots$$

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

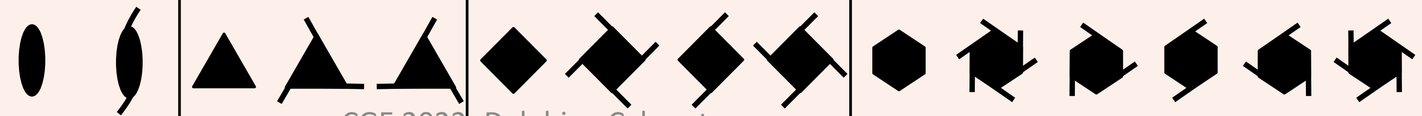
Symétrie de position : axe hélicoïdal

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

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 $\vec{t}_{||}$ possibles ?

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

donc $n\vec{t}_{||} = p\vec{c}$ 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																

Symétrie de position : axe hélicoïdal

axe A_n $\times$ $\vec{t}$

cas n°1 : $\vec{t} \parallel$ axe → pas d'effet

cas n°2 : $\vec{t} \perp$ axe → **nouveaux axes de rotation** sur le plan médiateur du segment qui joint l'axe A_n et son image par application de $\vec{t}$

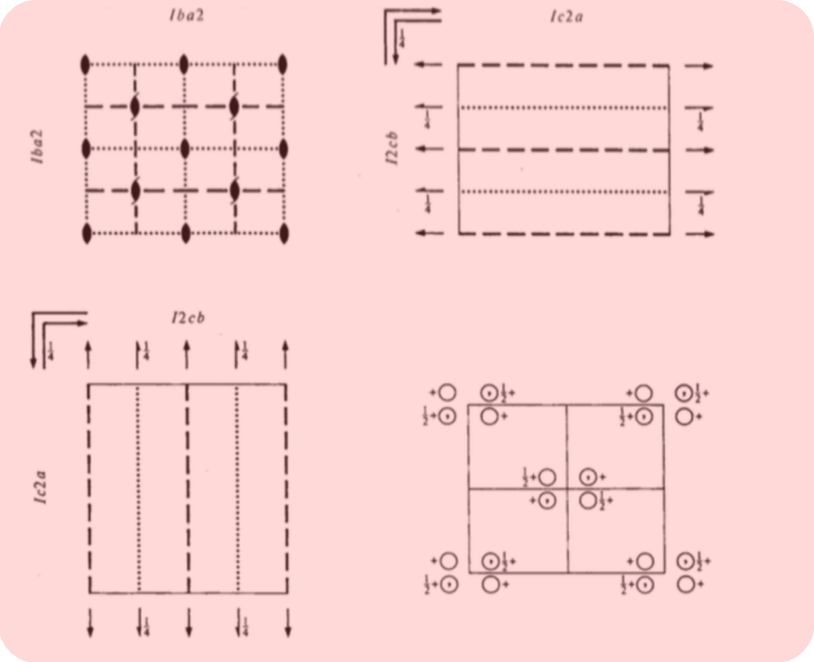
cas n°3 : $\vec{t}$ oblique / axe $\quad \vec{t} = \vec{t}_{\perp} + \vec{t}_{\parallel}$

→ **Changement de nature des nouveaux axes** si $\vec{t}_{\parallel}$ n'est pas une translation de réseau

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 $cc2$

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

Symmetry operations

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

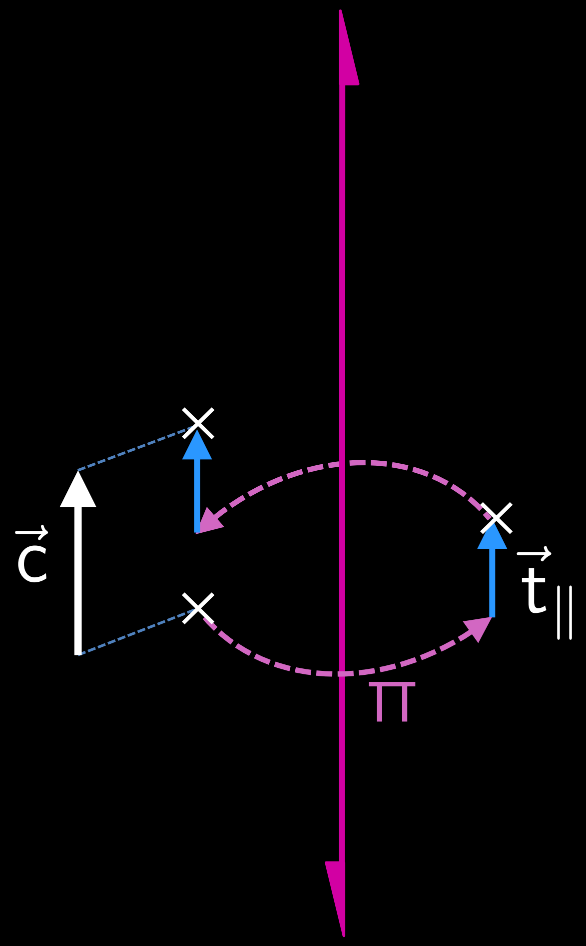
(1) 1	(2) $2 \quad 0,0,z$	(3) $a \quad x,\frac{1}{4},z$	(4) $b \quad \frac{1}{4},y,z$

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

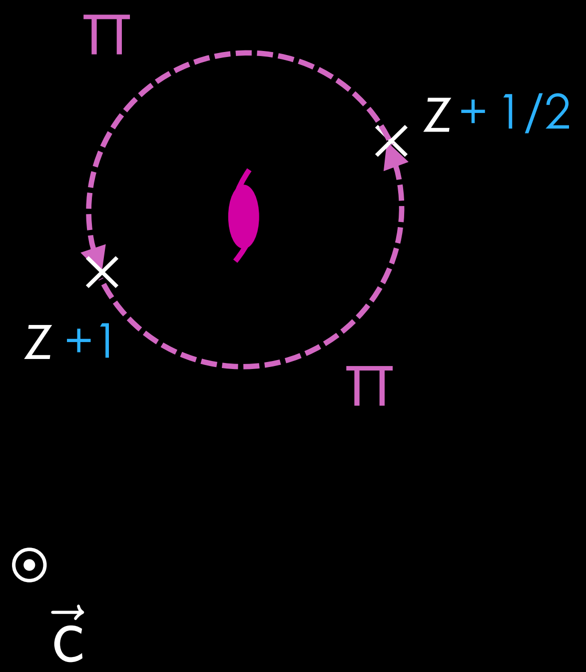
(1) $t(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$	(2) $2(0,0,\frac{1}{2}) \quad \frac{1}{4},\frac{1}{4},z$	(3) $c \quad x,0,z$	(4) $c \quad 0,y,z$

Des axes hélicoïdaux 2_1
sont engendrés par la translation
de réseau I (dont la composante parallèle à [001]
n'est pas une translation de réseau).

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

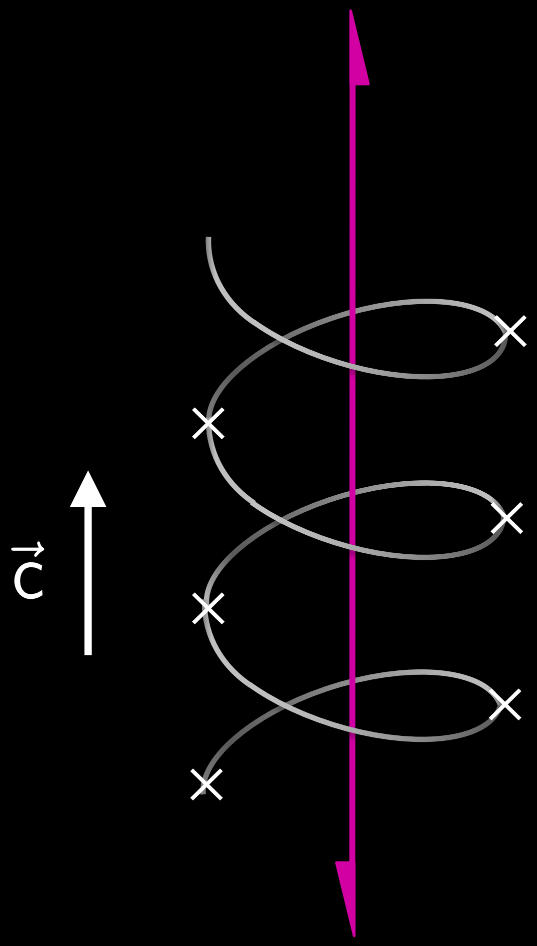


dans le plan de l'écran



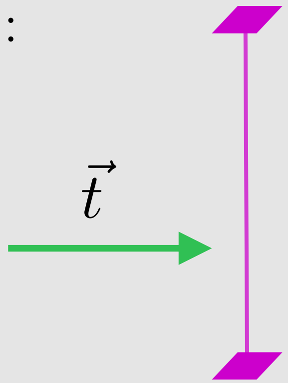
normal au plan de l'écran

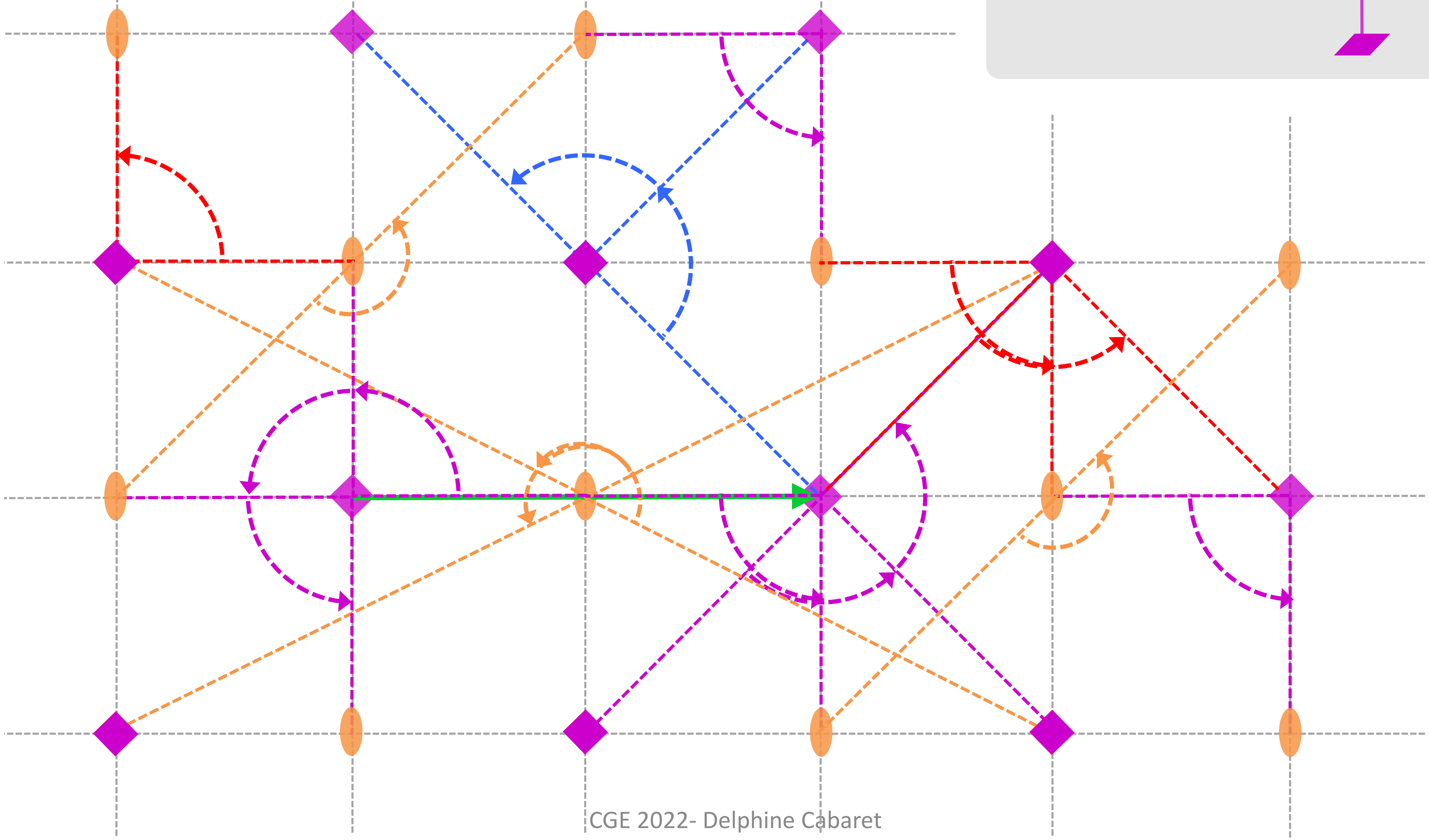
Axe hélicoïdal $2_1 \parallel \vec{c}$



cas n°2 : $\mathrm{A}_n \times \vec{t}$ avec $\vec{t} \perp \mathrm{A}_n$

exemple :
$n = 4$



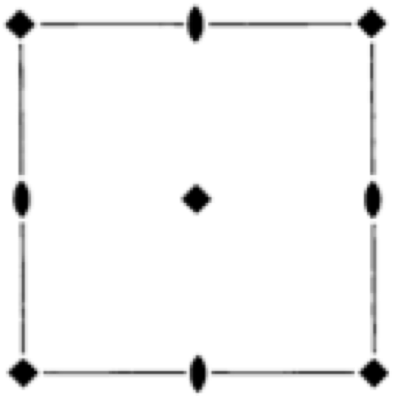


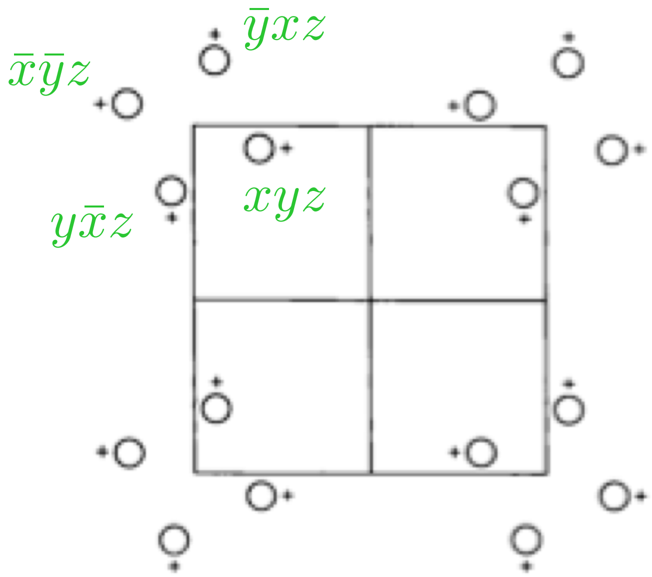
exemples de groupe d'espace à 1 générateur

1st space group of point group C_4

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

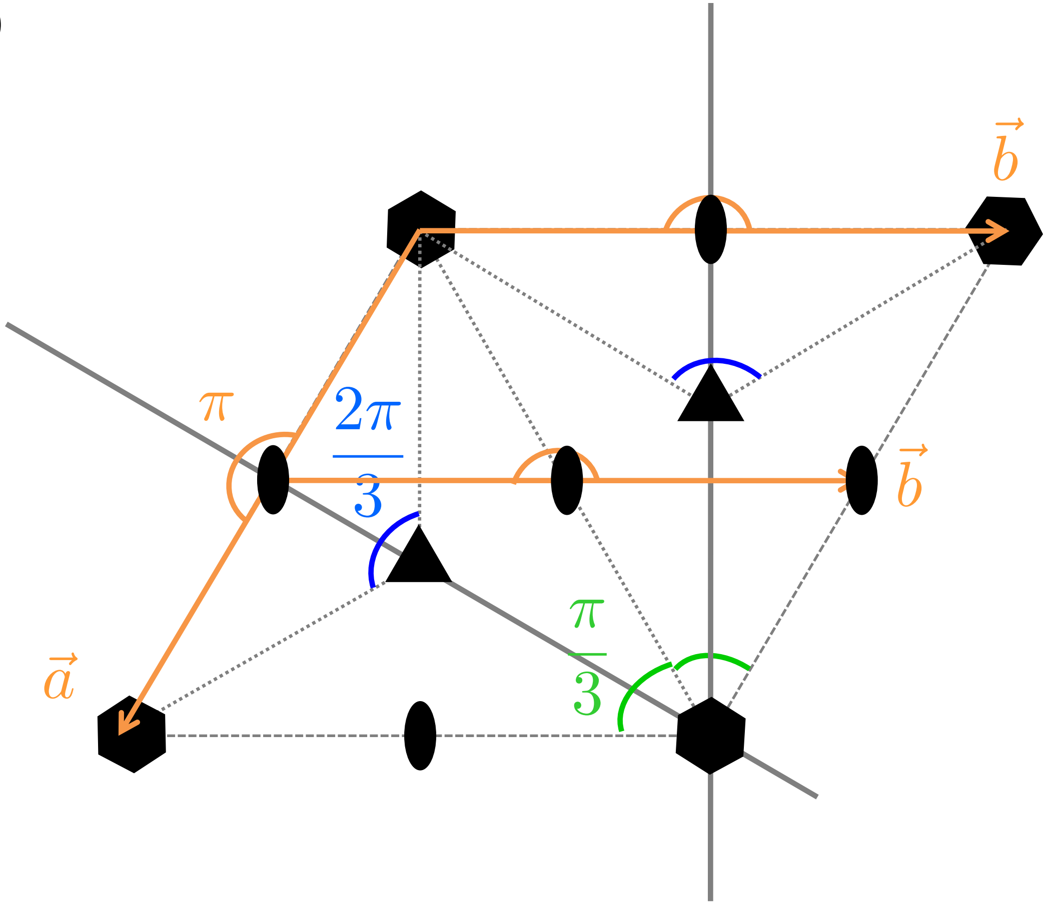
$P4$	C_4^1	4	Tetragonal
No. 75	$P4$		Patterson symmetry $P4/m$





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.

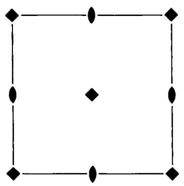
$P4$ No. 75	C_4^1 $P4$	4	Tetragonal Patterson symmetry $P4/m$

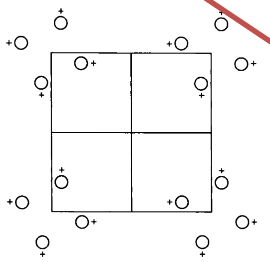
nom et n° du groupe

nom du groupe
(notation Schoenflies)

système cristallin

groupe ponctuel
correspondant





choix d'origine

plus petite partie de l'espace
à partir de laquelle on remplit tout l'espace
par l'application
de toutes les opérations de symétrie
du groupe d'espace.

Origin on 4

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

Symmetry operations

(1) 1 (2) 2 $0,0,z$ (3) 4^+ $0,0,z$ (4) 4^- $0,0,z$

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

Positions

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry			Coordinates				Reflection conditions
							General:
4	d	1	(1) x,y,z	(2) $\bar{x},\bar{y},z$	(3) $\bar{y},x,z$	(4) $y,\bar{x},z$	no conditions
							Special:
2	c	2 . .	$0,\frac{1}{2},z$	$\frac{1}{2},0,z$			hkl : $h+k=2n$
1	b	4 . .	$\frac{1}{2},\frac{1}{2},z$				no extra conditions
1	a	4 . .	$0,0,z$				no extra conditions

Symmetry of special projections

Along [001] $p4$
$\mathbf{a}' = \mathbf{a}$ $\mathbf{b}' = \mathbf{b}$
Origin at $0,0,z$

Along [100] $p1m1$
$\mathbf{a}' = \mathbf{b}$ $\mathbf{b}' = \mathbf{c}$
Origin at $x,0,0$

Along [110] $p1m1$
$\mathbf{a}' = \frac{1}{2}(-\mathbf{a}+\mathbf{b})$ $\mathbf{b}' = \mathbf{c}$
Origin at $x,x,0$

Maximal non-isomorphic subgroups

I [2] $P2$ (3) 1; 2
IIa none
IIb [2] $P4_2$ ($\mathbf{c}' = 2\mathbf{c}$) (77); [2] $F4$ ($\mathbf{a}' = 2\mathbf{a}, \mathbf{b}' = 2\mathbf{b}, \mathbf{c}' = 2\mathbf{c}$) ($I4$, 79)

Maximal isomorphic subgroups of lowest index

IIc [2] $P4$ ($\mathbf{c}' = 2\mathbf{c}$) (75); [2] $C4$ ($\mathbf{a}' = 2\mathbf{a}, \mathbf{b}' = 2\mathbf{b}$) ($P4$, 75)

Minimal non-isomorphic supergroups

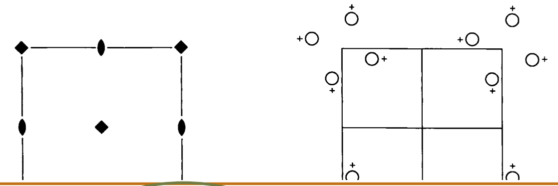
I [2] $P4/m$ (83); [2] $P4/n$ (85); [2] $P422$ (89); [2] $P42_12$ (90); [2] $P4mm$ (99); [2] $P4bm$ (100); [2] $P4cc$ (103); [2] $P4nc$ (104)
II [2] $I4$ (79)

 332

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

Multiplicity,	Wyckoff letter,	Site symmetry	Coordinates				Reflection conditions
							General:
4	d	1	(1) x,y,z	(2) $\bar{x},\bar{y},z$	(3) $\bar{y},x,z$	(4) $y,\bar{x},z$	no conditions
							Special:
2	c	2 . .	$0,\frac{1}{2},z$	$\frac{1}{2},0,z$			hkl : $h+k=2n$
1	b	4 . .	$\frac{1}{2},\frac{1}{2},z$				no extra conditions
1	a	4 . .	$0,0,z$				no extra conditions

cf. cours diffraction

Symmetry of special projections

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

Maximal isomorphic subgroups of lowest index

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)

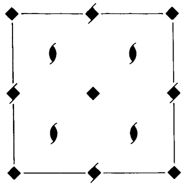
13 – Groupes d'espace

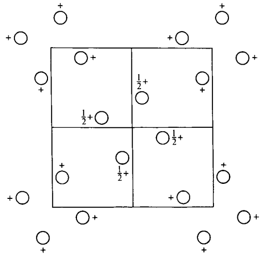
International Tables for Crystallography (2006). Vol. A, Space group 79, pp. 336–337.

CONTINUED No. 79 $I4$

$I4$ C_4^5 4 Tetragonal

No. 79 $I4$ Patterson symmetry $I4/m$





Origin on 4

Asymmetric unit $0 \le x \le \frac{1}{2}$; (

Symmetry operations

For $(0,0,0)+$ set
(1) 1 (2) 2 $0,0,z$

For $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})+$ set
(1) $t(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$ (2) $2(0,0,\frac{1}{2})$

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); (3)

Positions

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry			Coordinates $(0,0,0)+$ $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})+$				Reflection conditions
							General:
8	c	1	(1) x,y,z	(2) $\bar{x},\bar{y},z$	(3) $\bar{y},x,z$	(4) $y,\bar{x},z$	hkl : $h+k+l=2n$ $hk0$: $h+k=2n$ $0kl$: $k+l=2n$ hhl : $l=2n$ $00l$: $l=2n$ $h00$: $h=2n$
							Special: as above, plus
4	b	2 . .	$0,\frac{1}{2},z$	$\frac{1}{2},0,z$			hkl : $l=2n$
2	a	4 . .	$0,0,z$				no extra conditions

Symmetry of special projections

Along [001] $p4$ Along [100] $c1m1$ Along [110] $p1m1$
$\mathbf{a}'=\mathbf{b}$ $\mathbf{b}'=\mathbf{c}$ $\mathbf{a}'=\frac{1}{2}(-\mathbf{a}+\mathbf{b})$ $\mathbf{b}'=\frac{1}{2}\mathbf{c}$
Origin at $x,0,0$ Origin at $x,x,0$

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

west index

$-2\mathbf{b}, \mathbf{b}'=-2\mathbf{a}+\mathbf{b}$ or $\mathbf{a}'=\mathbf{a}-2\mathbf{b}, \mathbf{b}'=2\mathbf{a}+\mathbf{b})$ (79)

s

mm (107); [2] $I4cm$ (108)

Positions

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

comparaison entre les groupes *P*3 et *R*3

groupe ponctuel cristallographique 3

système d'axes rhomboédriques
→ réseau R

groupe d'espace : R 3 (n° 146)

système d'axes hexagonaux
→ réseau P

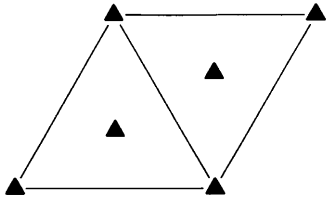
groupe d'espace : P 3 (n° 143)

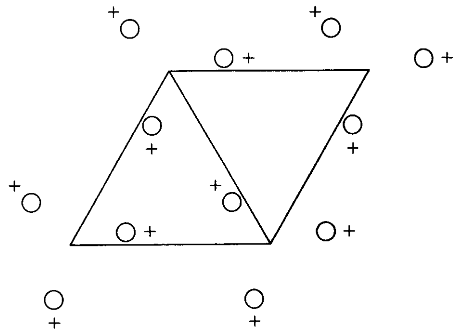
13 – Groupes d'espace

comparaison entre les groupes *P*3 et *R*3

$P3$ — C_3^1 — 3 — Trigonal

No. 143 — $P3$ — Patterson symmetry $P\bar{3}$





Origin on 3

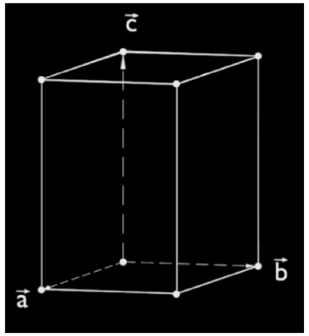
Asymmetric unit $0 \le x \le \frac{2}{3}$; $0 \le y \le \frac{2}{3}$; $0 \le z \le 1$; $x \le (1+y)/2$; $y \le \min(1-x,(1+x)/2)$

Vertices $0,0,0$ $\frac{1}{2},0,0$ $\frac{2}{3},\frac{1}{3},0$ $\frac{1}{3},\frac{2}{3},0$ $0,\frac{1}{2},0$

$0,0,1$ $\frac{1}{2},0,1$ $\frac{2}{3},\frac{1}{3},1$ $\frac{1}{3},\frac{2}{3},1$ $0,\frac{1}{2},1$

Symmetry operations

(1) 1 (2) 3^+ $0,0,z$ (3) 3^- $0,0,z$



CONTINUED No. 143 $P3$

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

Positions

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry	Coordinates			Reflection conditions
				General:
3 d 1	(1) x,y,z	(2) $\bar{y},x-y,z$	(3) $\bar{x}+y,\bar{x},z$	no conditions
				Special: no extra conditions
1 c 3 . .	$\frac{2}{3},\frac{1}{3},z$			
1 b 3 . .	$\frac{1}{3},\frac{2}{3},z$			
1 a 3 . .	$0,0,z$			

Symmetry of special projections

Along [001] $p3$
$\mathbf{a}'=\mathbf{a}$ $\mathbf{b}'=\mathbf{b}$
Origin at $0,0,z$

Along [100] $p1$
$\mathbf{a}'=\frac{1}{2}(\mathbf{a}+2\mathbf{b})$ $\mathbf{b}'=\mathbf{c}$
Origin at $x,0,0$

Along [210] $p1$
$\mathbf{a}'=\frac{1}{2}\mathbf{b}$ $\mathbf{b}'=\mathbf{c}$
Origin at $x,\frac{1}{2}x,0$

Maximal non-isomorphic subgroups

I [3] $P1$ (1) 1

IIa none

IIb [3] $P3_2$ ($\mathbf{c}'=3\mathbf{c}$) (145); [3] $P3_1$ ($\mathbf{c}'=3\mathbf{c}$) (144); [3] $R3$ ($\mathbf{a}'=\mathbf{a}-\mathbf{b}, \mathbf{b}'=\mathbf{a}+2\mathbf{b}, \mathbf{c}'=3\mathbf{c}$) (146); [3] $R3$ ($\mathbf{a}'=2\mathbf{a}+\mathbf{b}, \mathbf{b}'=-\mathbf{a}+\mathbf{b}, \mathbf{c}'=3\mathbf{c}$) (146)

Maximal isomorphic subgroups of lowest index

IIc [2] $P3$ ($\mathbf{c}'=2\mathbf{c}$) (143); [3] $H3$ ($\mathbf{a}'=3\mathbf{a}, \mathbf{b}'=3\mathbf{b}$) ($P3$, 143)

Minimal non-isomorphic supergroups

I [2] $P\bar{3}$ (147); [2] $P312$ (149); [2] $P321$ (150); [2] $P3m1$ (156); [2] $P31m$ (157); [2] $P3c1$ (158); [2] $P31c$ (159); [2] $P6$ (168); [2] $P6_3$ (173); [2] $P\bar{6}$ (174)

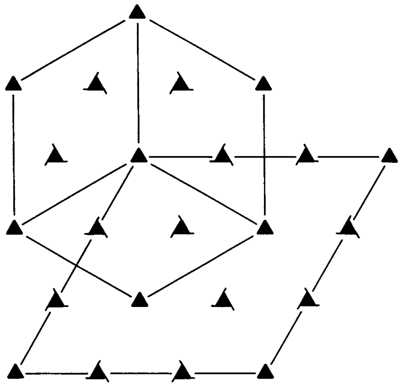
II [3] $R3$ (obverse) (146); [3] $R3$ (reverse) (146)

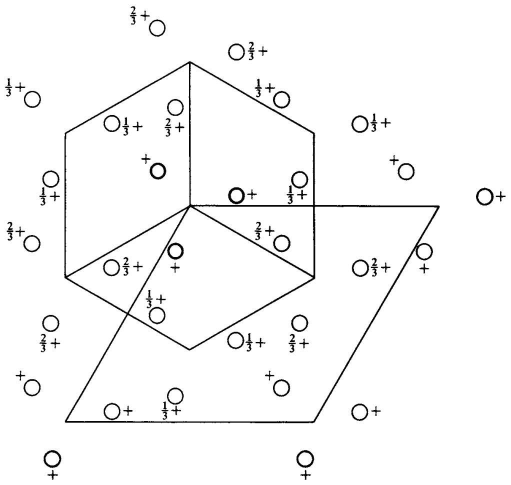
13 – Groupes d'espace

comparaison entre les groupes *P*3 et *R*3

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

HEXAGONAL AXES





Origin on 3

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

Vertices $0,0,0$ $\frac{1}{2},0,0$ $\frac{2}{3},\frac{1}{3},0$ $\frac{1}{3},\frac{2}{3},0$ $0,\frac{1}{2},0$

$0,0,\frac{1}{3}$ $\frac{1}{2},0,\frac{1}{3}$ $\frac{2}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{3}$ $\frac{1}{3},\frac{2}{3},\frac{1}{3}$ $0,\frac{1}{2},\frac{1}{3}$

Symmetry operations

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

(1) 1 (2) 3^+ $0,0,z$ (3) 3^- $0,0,z$

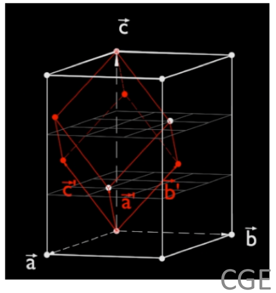
For $(\frac{2}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{3})+$ set

(1) $t(\frac{2}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{3})$ (2) $3^+(0,0,\frac{1}{3})$ $\frac{1}{3},\frac{1}{3},z$ (3) $3^-(0,0,\frac{1}{3})$ $\frac{1}{3},0,z$

For $(\frac{1}{3},\frac{2}{3},\frac{2}{3})+$ set

(1) $t(\frac{1}{3},\frac{2}{3},\frac{2}{3})$ (2) $3^+(0,0,\frac{2}{3})$ $0,\frac{1}{3},z$ (3) $3^-(0,0,\frac{2}{3})$ $\frac{1}{3},\frac{1}{3},z$

conventionnel setting



CONTINUED No. 146 $R3$

Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; $t(\frac{2}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{3})$; (2)

Positions

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry	Coordinates $(0,0,0)+$ $(\frac{2}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{3})+$ $(\frac{1}{3},\frac{2}{3},\frac{2}{3})+$	Reflection conditions
		General:
9 *b* 1	(1) x,y,z (2) $\bar{y},x-y,z$ (3) $\bar{x}+y,\bar{x},z$	$hkil$: $-h+k+l=3n$ $hki0$: $-h+k=3n$ $hh\overline{2h}l$: $l=3n$ $h\bar{h}0l$: $h+l=3n$ $000l$: $l=3n$ $h\bar{h}00$: $h=3n$
		Special: no extra conditions
3 *a* 3 .	$0,0,z$	

Symmetry of special projections

Along [001] $p3$
$\mathbf{a}'=\frac{1}{3}(2\mathbf{a}+\mathbf{b})$ $\mathbf{b}'=\frac{1}{3}(-\mathbf{a}+\mathbf{b})$
Origin at $0,0,z$

Along [100] $p1$
$\mathbf{a}'=\frac{1}{2}(\mathbf{a}+2\mathbf{b})$ $\mathbf{b}'=\frac{1}{3}(-\mathbf{a}-2\mathbf{b}+\mathbf{c})$
Origin at $x,0,0$

Along [210] $p1$
$\mathbf{a}'=\frac{1}{2}\mathbf{b}$ $\mathbf{b}'=\frac{1}{3}\mathbf{c}$
Origin at $x,\frac{1}{2}x,0$

Maximal non-isomorphic subgroups

I [3] $R1$ ($P1$, 1) 1+

IIa [3] $P3_2$ (145) 1; $2+(\frac{1}{3},\frac{2}{3},\frac{2}{3})$; $3+(\frac{2}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{3})$
[3] $P3_1$ (144) 1; $2+(\frac{2}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{3})$; $3+(\frac{1}{3},\frac{2}{3},\frac{2}{3})$
[3] $P3$ (143) 1; 2; 3

IIb none

Maximal isomorphic subgroups of lowest index

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

Minimal non-isomorphic supergroups

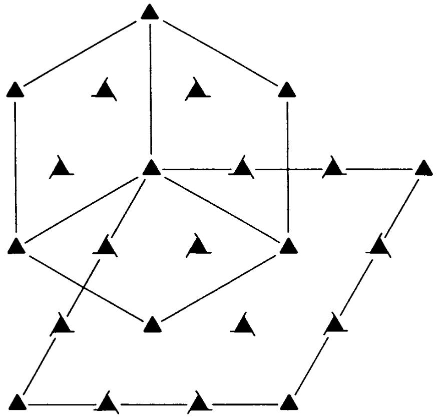
I [2] $R\bar{3}$ (148); [2] $R32$ (155); [2] $R3m$ (160); [2] $R3c$ (161); [4] $P23$ (195); [4] $F23$ (196); [4] $I23$ (197); [4] $P2_13$ (198); [4] $I2_13$ (199)

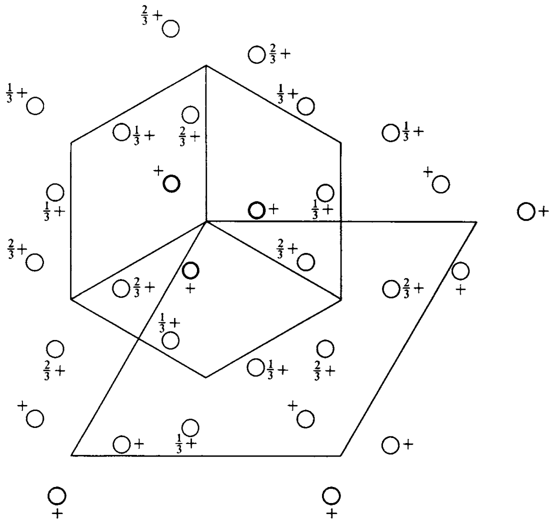
II [3] $P3$ ($\mathbf{a}'=\frac{1}{3}(2\mathbf{a}+\mathbf{b}),\mathbf{b}'=\frac{1}{3}(-\mathbf{a}+\mathbf{b}),\mathbf{c}'=\frac{1}{3}\mathbf{c}$) (143)

comparaison entre les groupes *P*3 et *R*3

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

RHOMBOHEDRAL AXES





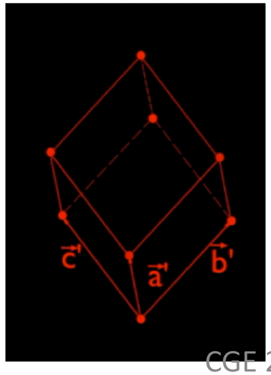
Heights refer to hexagonal axes

Origin on 3

Asymmetric unit $0 \le x \le 1$; $0 \le y \le 1$; $0 \le z \le 1$; $z \le \min(x,y)$
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	Coordinates	Reflection conditions
		General:
3 *b* 1	(1) x,y,z (2) z,x,y (3) y,z,x	no conditions
		Special: no extra conditions
1 *a* 3 .	x,x,x	

Symmetry of special projections

Along [111] $p3$
$\mathbf{a}' = \frac{1}{3}(2\mathbf{a}-\mathbf{b}-\mathbf{c})$ $\mathbf{b}' = \frac{1}{3}(-\mathbf{a}+2\mathbf{b}-\mathbf{c})$
Origin at x,x,x

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

Along $[2\bar{1}\bar{1}]$ $p1$
$\mathbf{a}' = \frac{1}{2}(\mathbf{b}-\mathbf{c})$ $\mathbf{b}' = \frac{1}{3}(\mathbf{a}+\mathbf{b}+\mathbf{c})$
Origin at $2x,\bar{x},\bar{x}$

Maximal non-isomorphic subgroups

I [3] $R1$ ($P1$, 1) 1
IIa none
IIb [3] $P3_2$ ($\mathbf{a}'=\mathbf{a}-\mathbf{b}, \mathbf{b}'=\mathbf{b}-\mathbf{c}, \mathbf{c}'=\mathbf{a}+\mathbf{b}+\mathbf{c}$) (145); [3] $P3_1$ ($\mathbf{a}'=\mathbf{a}-\mathbf{b}, \mathbf{b}'=\mathbf{b}-\mathbf{c}, \mathbf{c}'=\mathbf{a}+\mathbf{b}+\mathbf{c}$) (144); [3] $P3$ ($\mathbf{a}'=\mathbf{a}-\mathbf{b}, \mathbf{b}'=\mathbf{b}-\mathbf{c}, \mathbf{c}'=\mathbf{a}+\mathbf{b}+\mathbf{c}$) (143)

Maximal isomorphic subgroups of lowest index

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

Minimal non-isomorphic supergroups

I [2] $R\bar{3}$ (148); [2] $R32$ (155); [2] $R3m$ (160); [2] $R3c$ (161); [4] $P23$ (195); [4] $F23$ (196); [4] $I23$ (197); [4] $P2_13$ (198); [4] $I2_13$ (199)
II [3] $P3$ ($\mathbf{a}'=\frac{1}{3}(2\mathbf{a}-\mathbf{b}-\mathbf{c}), \mathbf{b}'=\frac{1}{3}(-\mathbf{a}+2\mathbf{b}-\mathbf{c}), \mathbf{c}'=\frac{1}{3}(\mathbf{a}+\mathbf{b}+\mathbf{c})$) (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 Cr^{3+} in $MgAl_2O_4$

Amélie Juhin,[1,*] Christian Brouder,[1] Marie-Anne Arrio,[1] Delphine Cabaret,[1] Philippe Sainctavit,[1] Etienne Balan,[1,2] Amélie Bordage,[1] Ari P. Seitsonen,[1] Georges Calas,[1] Sigrid G. Eeckhout,[3] and Pieter Glatzel[3]

mechanical properties.[13] In $MgAl_2O_4$ spinel ($Fd\bar{3}m$ space-group symmetry), Al^{3+} 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

$Fd\bar{3}m$	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

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

Positions

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry — Coordinates — Reflection conditions

$(0,0,0)+\quad (0,\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2})+\quad (\tfrac{1}{2},0,\tfrac{1}{2})+\quad (\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},0)+$

h,k,l permutable
General:

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

Pour reprendre toutes ces notions à tête reposée …

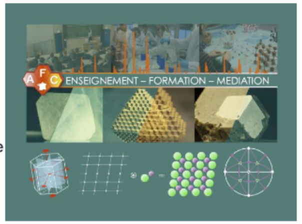
Association Française de Cristallographie

Association ▾ Adhésion Connexion Cristallographie

L'axe transverse Enseignement de la Cristallographie

L'objectif de cet axe est multiple :

- Promouvoir l'enseignement de la cristallographie en France
- Diffuser auprès d'un large public des ressources pédagogiques
- Informer sur les différentes événements en lien avec l'enseignement de la cristallographie



Vous êtes

étudiant-e de licence et master

et vous cherchez

des cours
des ouvrages
des conférences
des logiciels

doctorant-e, ingénieur-e, chercheur-e, enseignant-e du supérieur

et vous cherchez

une formation
une école
un manuel
un logiciel

élève ou enseignant-e du secondaire

et vous cherchez

une vidéo pédagogique
de la documentation

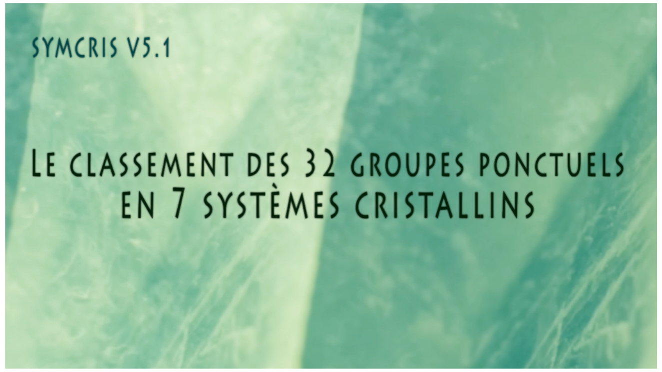
curieux de découvrir le monde des cristaux et la cristallographie

et vous cherchez

de la documentation et des vidéos accesibles à tous

Pour reprendre toutes ces notions à tête reposée …

Pour reprendre toutes ces notions à tête reposée …



Cours en ligne SYMCRIS : Ensemble de 24 vidéos (dont 6 en cours de finalisation) sur YouTube (ou moodle SU)