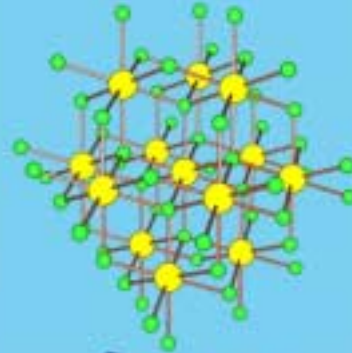


XVI^{ème} siècle (fondant pour verres et émaux)



Cube de fluorine CaF_2



Structure



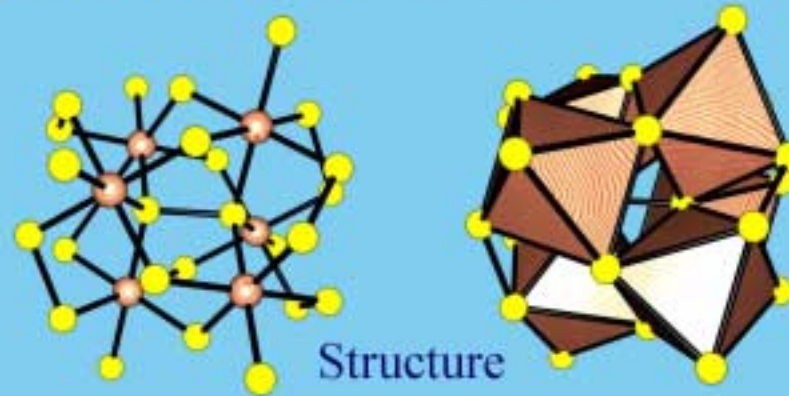
Octaèdre de fluorine CaF_2



Symétries cristallines



Cristaux de pyrite FeS_2



Structure

Empilement de cubes dans la structure fluorine CaF_2 ...

mais clivage octaédrique...



WinPacha © 2001 by Marc HENRY (ULP/LCMES)

Groupe spatial Fm-3m
a = 545.1 pm
Ca (0,0,0) et F(1/4, 1/4, 1/4)



La fluorine n'est pas
toujours violette...

Structures métalliques et empilements de sphères

	Cu (cfc)	Mg (hc)	W (cc)	α Po (cs)
GS	Fm $\bar{3}m$	P6 $_3$ /mmc	Im $\bar{3}m$	Pm $\bar{3}m$
Maille asym.	0,0,0	0,0,0 2/3,1/3,1/2	0,0,0	0,0,0
CN	[12]	[12]	[8]	[6]
R _{at}	$\frac{1}{4}a_0\sqrt{2}$	$\frac{1}{2}a_0$	$\frac{1}{4}a_0\sqrt{3}$	$\frac{1}{2}a_0$
ζ	$\frac{\pi\sqrt{2}}{6}$	$\frac{\pi\sqrt{2}}{6}$	$\frac{\pi\sqrt{3}}{8}$	$\frac{\pi}{6}$
Autres	Ag, Au Ni, Al Pt, Ir Pb, Rh	Zn=1.86 Mg=1.62 Ti=1.59 Be=1.56	Mo, V Ba, Na Zr, Fe	-

Structure hc
idéale

$$\frac{c_0}{a_0} = \frac{2}{3}\sqrt{6} = 1.63$$

Compacité

$$\zeta = \frac{Z \times (4/3)\pi R^3}{V_{maille}}$$

→ Propriétés métalliques:

- * Conduction électrique et thermique
- * Mirroirs parfaits
- * Malléabilité: cfc \gg hc \gg cc

Opérations de symétrie naturelles...



Réflexion par plan
miroir

Rotation selon un
axe de symétrie

Concept de symétrie

→ Un objet tridimensionnel peut être tourné, translaté ou réfléchi sans changer la distance entre deux points quelconques appartenant à l'objet.

→ Opération de symétrie g : action qui laisse invariant tout objet tridimensionnel F

$$g[\vec{x}] = \vec{x}' \Rightarrow F(\vec{x}) = F[g(\vec{x})] = F(\vec{x}')$$

* Interprétation n°1: Objet immobile et observateur change le système de coordonnées

* Interprétation n°2: Objet bouge dans un système de coordonnées fixe

→ Élément de symétrie: Lieu des points qui restent invariants lors de l'opération de symétrie

$$g[\vec{x}] = \vec{x} \quad \Leftrightarrow \text{Point (0-D), axe (1-D), plan (2-D) ou objet (3-D)}$$

→ L'ensemble des opérations de symétrie g_i laissant invariant un objet forment un groupe G

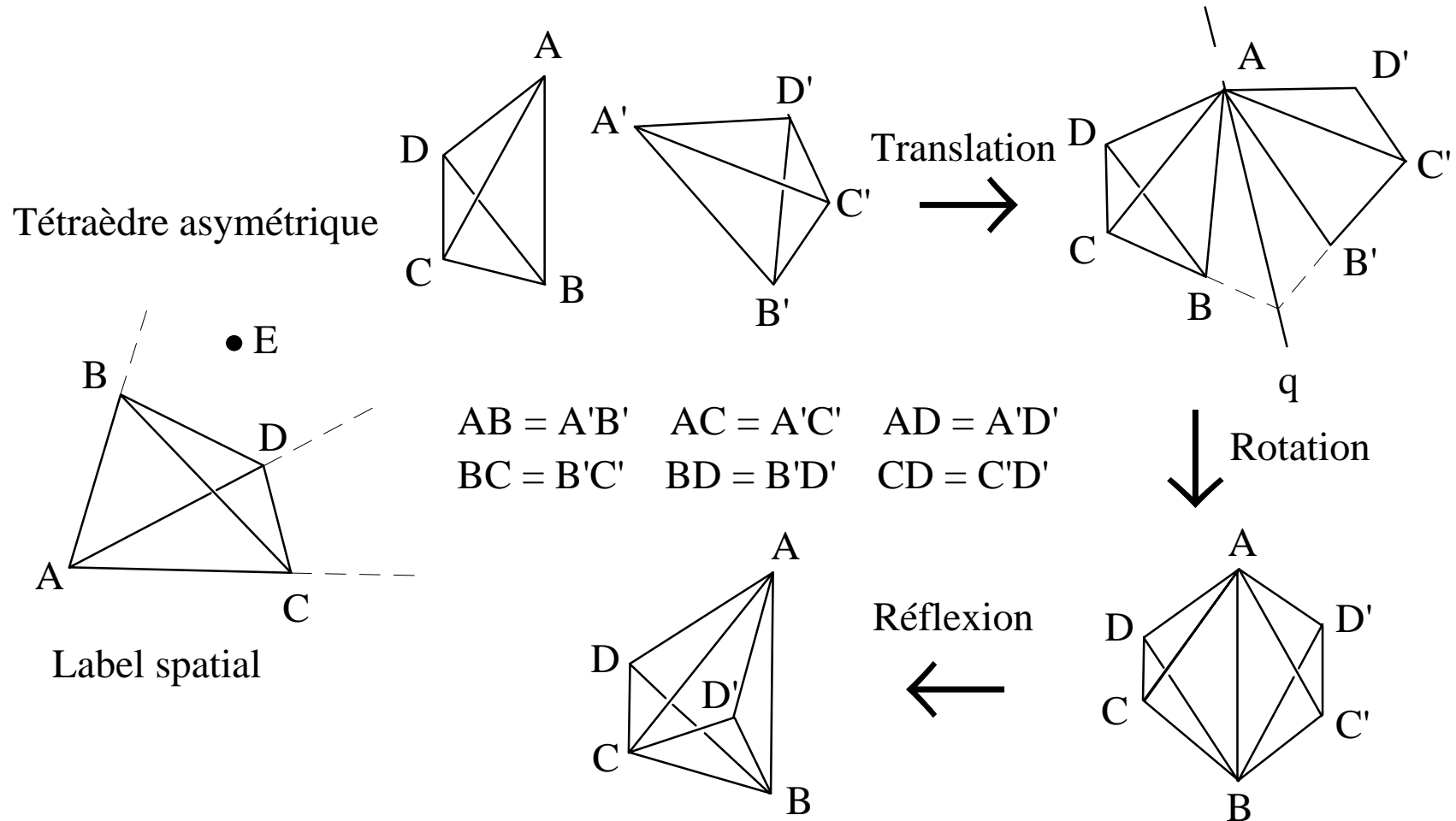
* $g_i \times g_j = g_k \in G \quad \forall (g_i, g_j) \in G$ et $g_j \times (g_i \times g_k) = (g_i \times g_j) \times g_k$ (multiplication associative)

* $\exists e \in G$ tel que $e \times g_i = g_i \quad \forall g_i \in G$ (existence d'un élément neutre ou identité)

* $\forall g_i \in G, \exists g_i^{-1}$ tel que $g_i \times g_i^{-1} = e$ (existence d'un élément inverse)

* Dans le cas général $g_i \times g_k \neq g_k \times g_i$ (non-commutativité)

Transformations isométriques de base de l'espace tridimensionnel



→ Transformations directes (translations, rotations)
ou inverses (réflexions)

Expression analytique cartésienne des opérations de symétrie

$$\vec{x}' = g[\vec{x}] \Leftrightarrow \begin{cases} x'_1 = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_1 \\ x'_2 = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + a_2 \\ x'_3 = a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + a_3 \end{cases} \Leftrightarrow \vec{x}' = [D]\vec{x} + \vec{t} \text{ avec } \sum_{j=1}^3 a_{ij}a_{jk} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = k \\ 0 & \text{si } i \neq k \end{cases}$$

→ Opérations directes $|D| = |a_{ij}| = +1$ et inverses $|D| = |a_{ij}| = -1$ $[D]^{-1} = {}^t[D]$

→ Rotation angle $\alpha = 2\pi/n$ autour d'un axe ayant comme cosinus directeurs $[\ell_1 \ell_2 \ell_3]$

$$[D] = \begin{bmatrix} \cos \alpha + \ell_1^2(1 - \cos \alpha) & \ell_1 \ell_2(1 - \cos \alpha) + \ell_3 \sin \alpha & \ell_1 \ell_3(1 - \cos \alpha) - \ell_2 \sin \alpha \\ \ell_1 \ell_2(1 - \cos \alpha) - \ell_3 \sin \alpha & \cos \alpha + \ell_2^2(1 - \cos \alpha) & \ell_2 \ell_3(1 - \cos \alpha) + \ell_1 \sin \alpha \\ \ell_3 \ell_1(1 - \cos \alpha) + \ell_2 \sin \alpha & \ell_3 \ell_2(1 - \cos \alpha) - \ell_1 \sin \alpha & \cos \alpha + \ell_3^2(1 - \cos \alpha) \end{bmatrix}$$

1, t ($\alpha = 2\pi$) $\Leftrightarrow (x, y, z) \rightarrow (x, y, z)$

$\bar{1}(x, y, z) \rightarrow (\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$ $\bar{n} = n \times \bar{1}$

2 ($\alpha = \pi$) // [001] $\Leftrightarrow (x, y, z) \rightarrow (\bar{x}, \bar{y}, z)$

$\bar{2} \equiv m \perp [001] \Leftrightarrow (x, y, z) \rightarrow (x, y, \bar{z})$

2 // [110] $\Leftrightarrow (x, y, z) \rightarrow (y, x, \bar{z})$

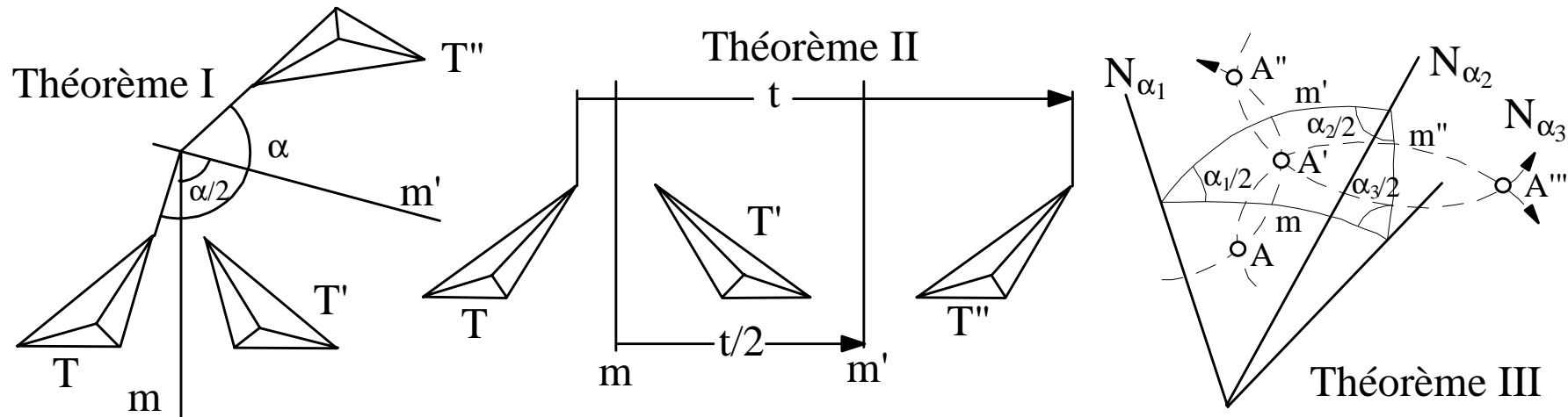
2 // $[\bar{1}\bar{1}0]$ $\Leftrightarrow (x, y, z) \rightarrow (\bar{y}, \bar{x}, \bar{z})$

3 ($\alpha = 2\pi/3$) // [111] $\Leftrightarrow (x, y, z) \rightarrow (y, z, x)$

4 ($\alpha = \pi/2$) // [001] $\Leftrightarrow (x, y, z) \rightarrow (y, \bar{x}, z)$

Relations entre opérations de symétrie directes et inverses

→ Le produit de 2 opérations directes est toujours une opération directe (sous-groupe de G), tandis que le produit de deux opérations inverses est toujours une opération directe



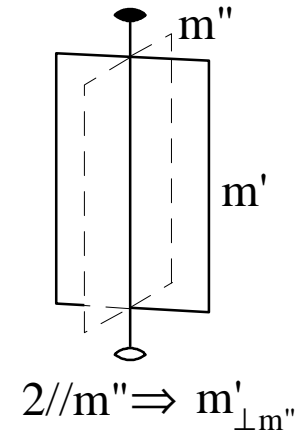
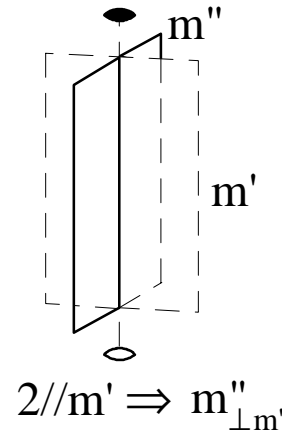
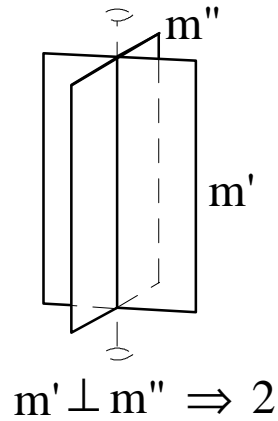
→ Théorème I: L'intersection de 2 plan miroirs m et m' d'angle $\alpha/2$ est un axe de rotation N_{α}

→ Théorème II: Deux miroirs m et m' // et séparés de $t/2 \Leftrightarrow$ translation $t \perp$ à m et m'

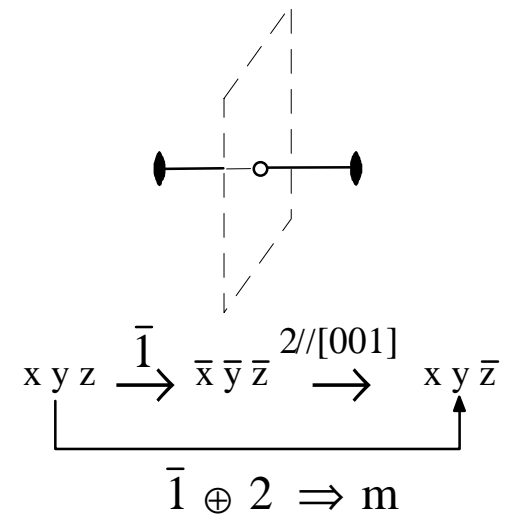
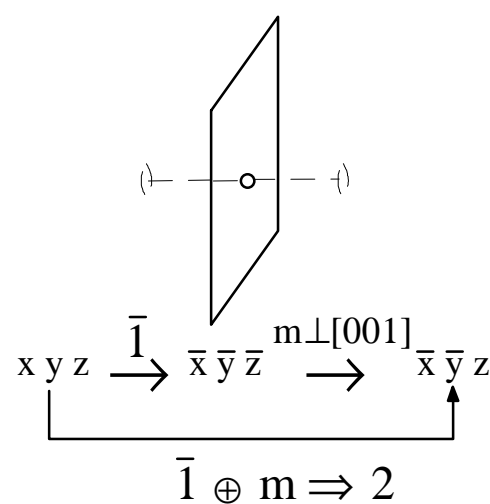
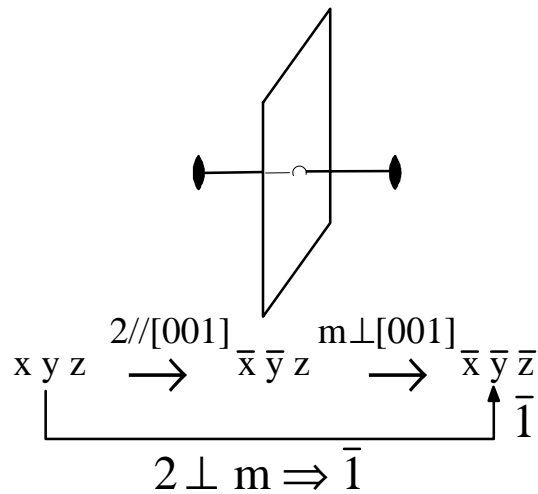
→ Théorème III (Euler): Rotation autour de 2 axes N_{α_1} et $N_{\alpha_2} \equiv$ Rotation autour d'un axe N_{α_3}

Quelques cas particuliers...

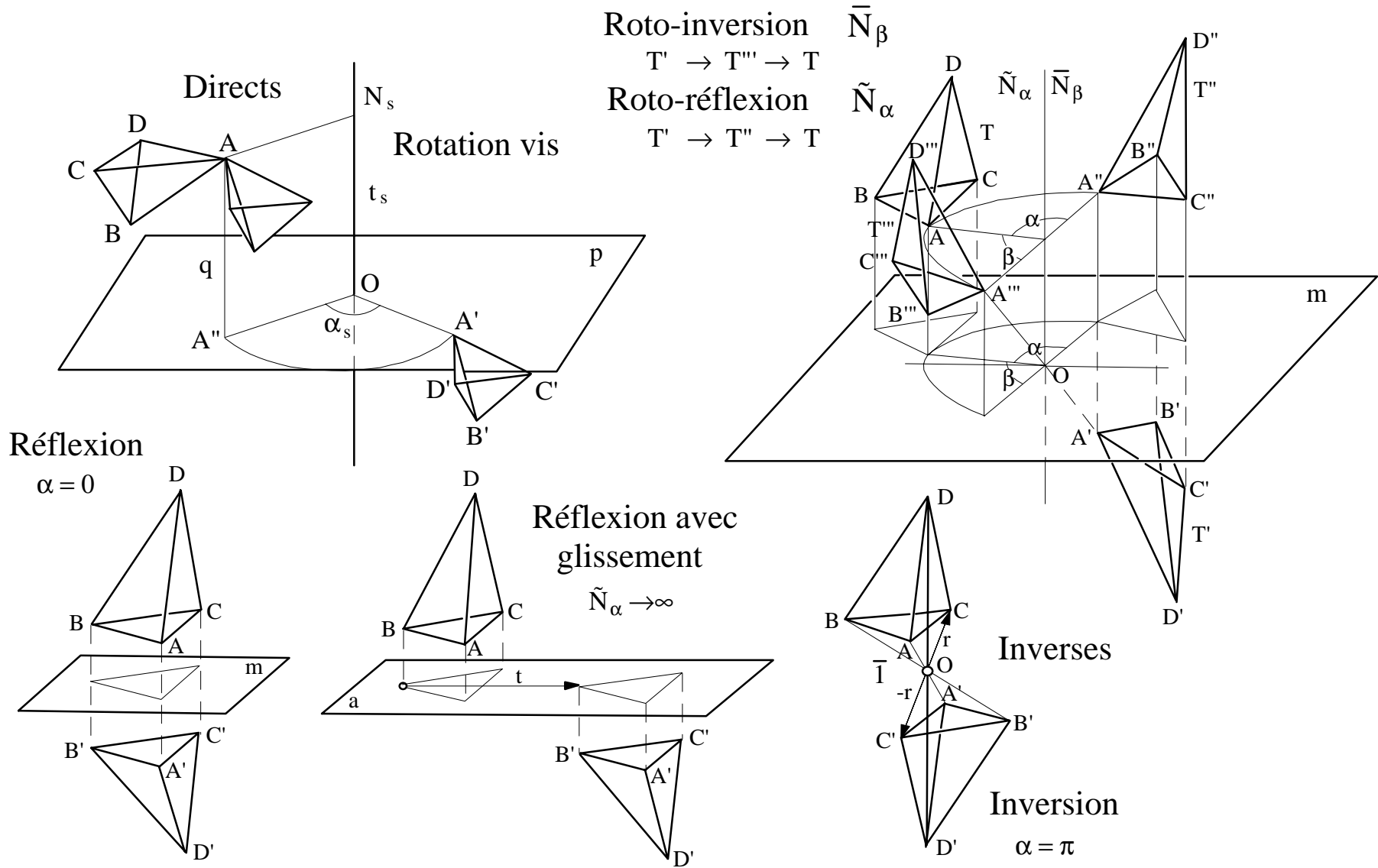
→ $m' \perp m'' \Rightarrow 2 // m' \cap m''$

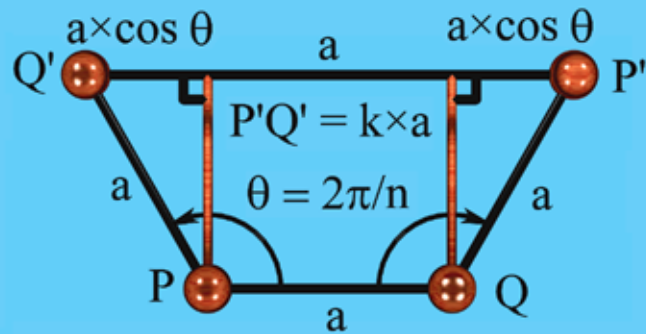


→ Axe binaire ($n = 2$) et $m \perp 2 \Rightarrow \bar{1}$ à $m \cap 2$: $2/m$, $4/m$ et $6/m \Rightarrow \bar{1}$



Opération de symétrie spatiale



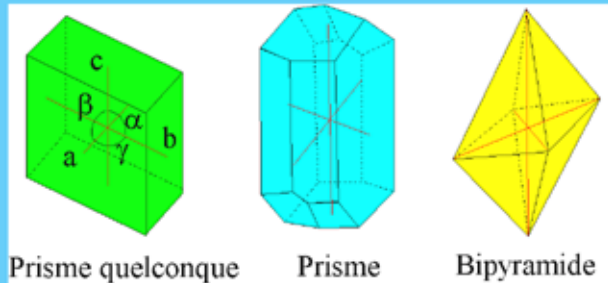


Incompatibilité entre Rotations et translations

$$-1 \leq \cos \theta = (k - 1)/2 \leq +1$$

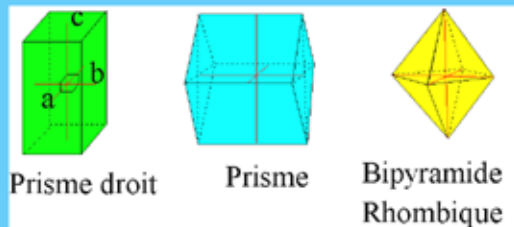
k	cos θ	Angle θ	Ordre n
-1	-1	π	2
0	-1/2	$2\pi/3$	3
1	0	$\pi/2$	4
2	1/2	$\pi/3$	6
3	1	0	1

7 Systèmes cristallins
14 Réseaux de points
32 Classes cristallines
230 Groupes spatiaux



Prisme quelconque Prisme Bipyramide

Système triclinique: 1×1



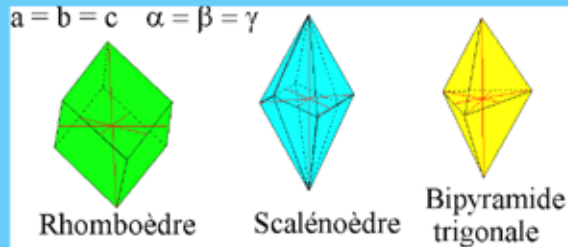
Prisme droit Prisme Bipyramide Rhombique

Système orthorhombique: 3×2

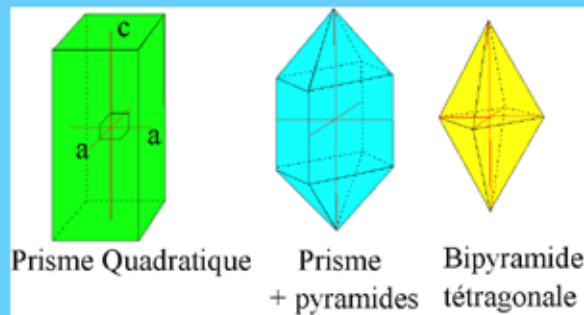


Cube Dodécaèdre rhombique Octaèdre

Système cubique: 4×3

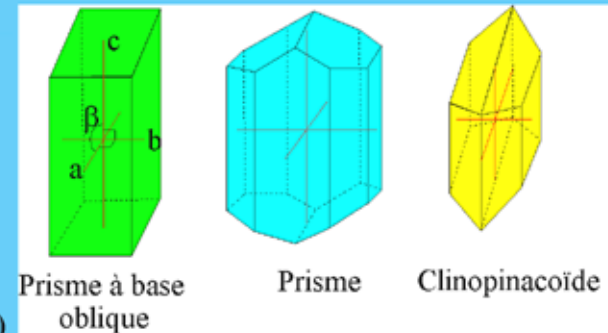


Rhomboèdre Scalénoèdre Bipyramide trigonale



Prisme Quadratique Prisme + pyramides Bipyramide tétragonale

Système quadratique: 1×4

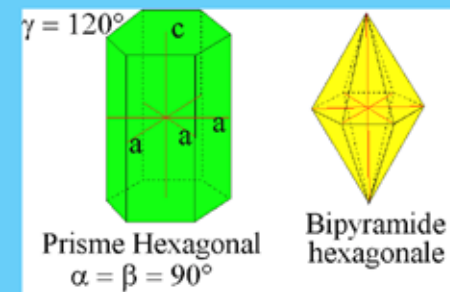


Prisme à base oblique Prisme Clinopinacoïde

Système monoclinique: 1×2

Système rhomboédrique: 1×3

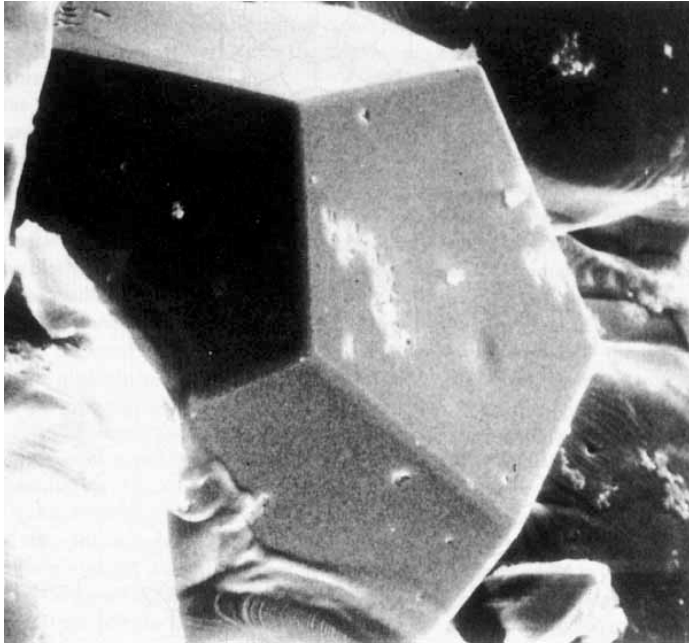
Système hexagonal: 1×6



Prisme Hexagonal $\alpha = \beta = 90^\circ$ Bipyramide hexagonale

© Marc HENRY ULP/LCMES (2000)

L'ordre impossible fut découvert en 1984 dans les alliages Al-Mn

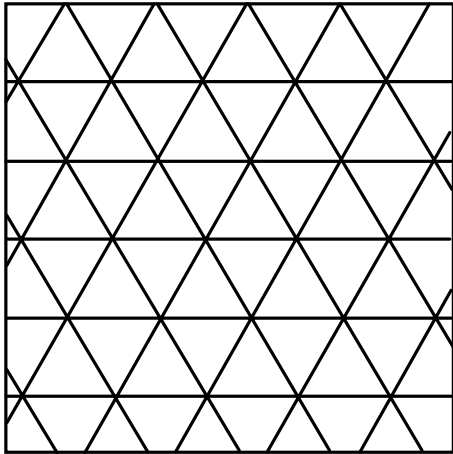


→ Les quasi-cristaux sont des mauvais conducteurs
du courant électrique ou de la chaleur...

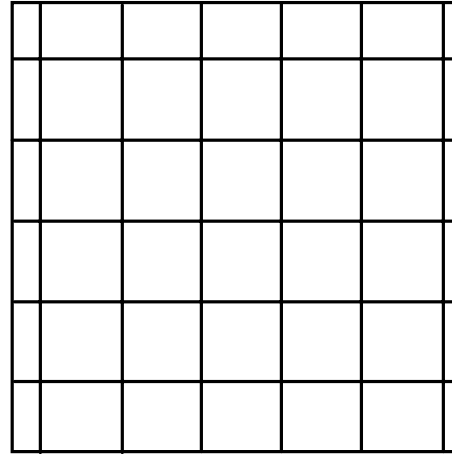
→ Fragiles à basse température mais ductiles à haute température

Quelques manières de paver le plan...

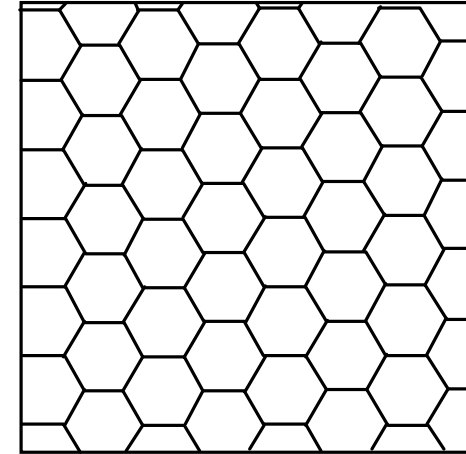
Les trois pavages réguliers du plan de Képler



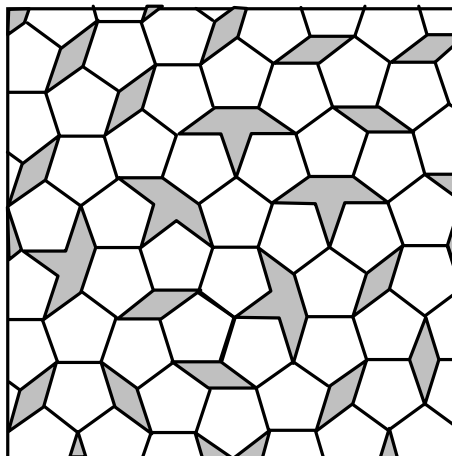
Connectivité 6



Connectivité 4

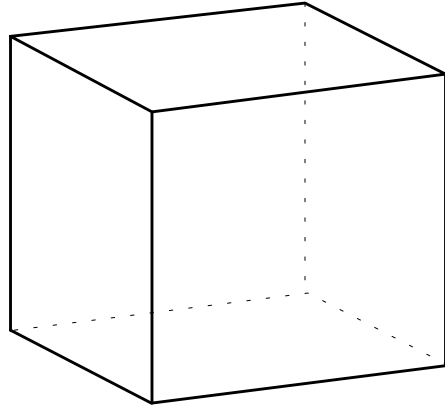


Connectivité 3

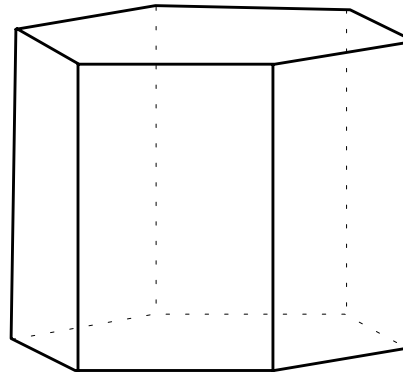


Pas de pavage périodique du plan
avec des pentagones

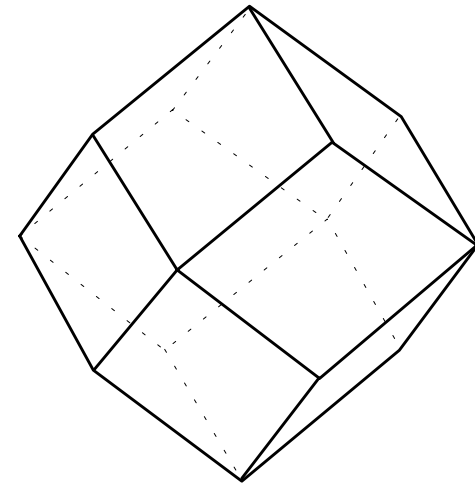
Les 5 solides de Fedorov pouvant remplir l'espace...



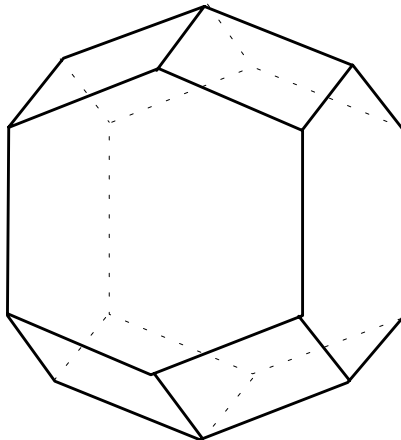
Cube



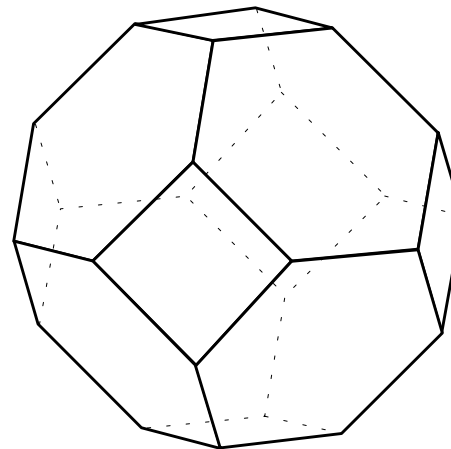
Prisme à base hexagonale



Dodécaèdre rhombique

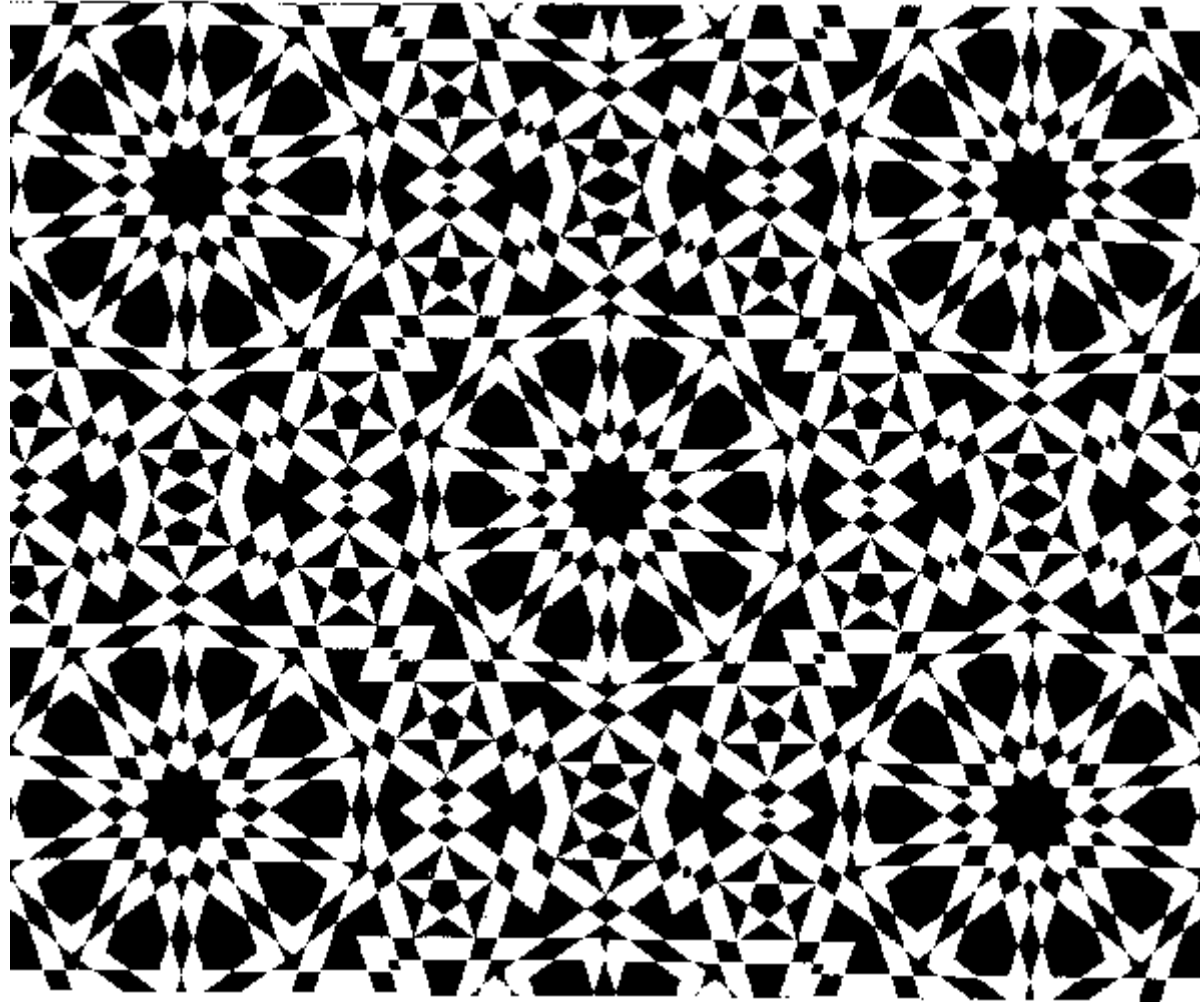


Dodécaèdre allongé



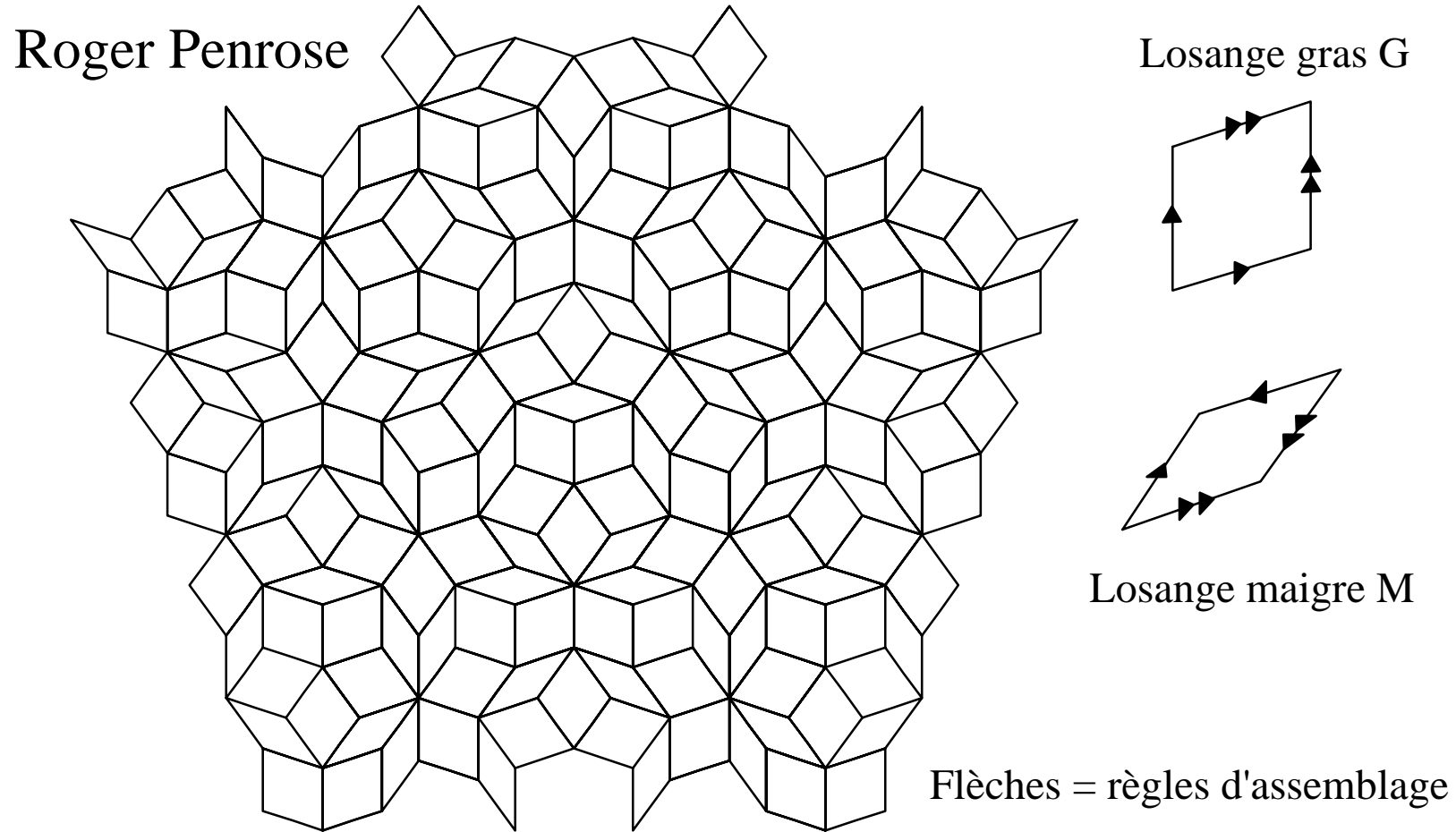
Octaèdre tronqué

Symétries d'ordre 5 et 10 utilisées par
les architectes maures pour paver le plan...



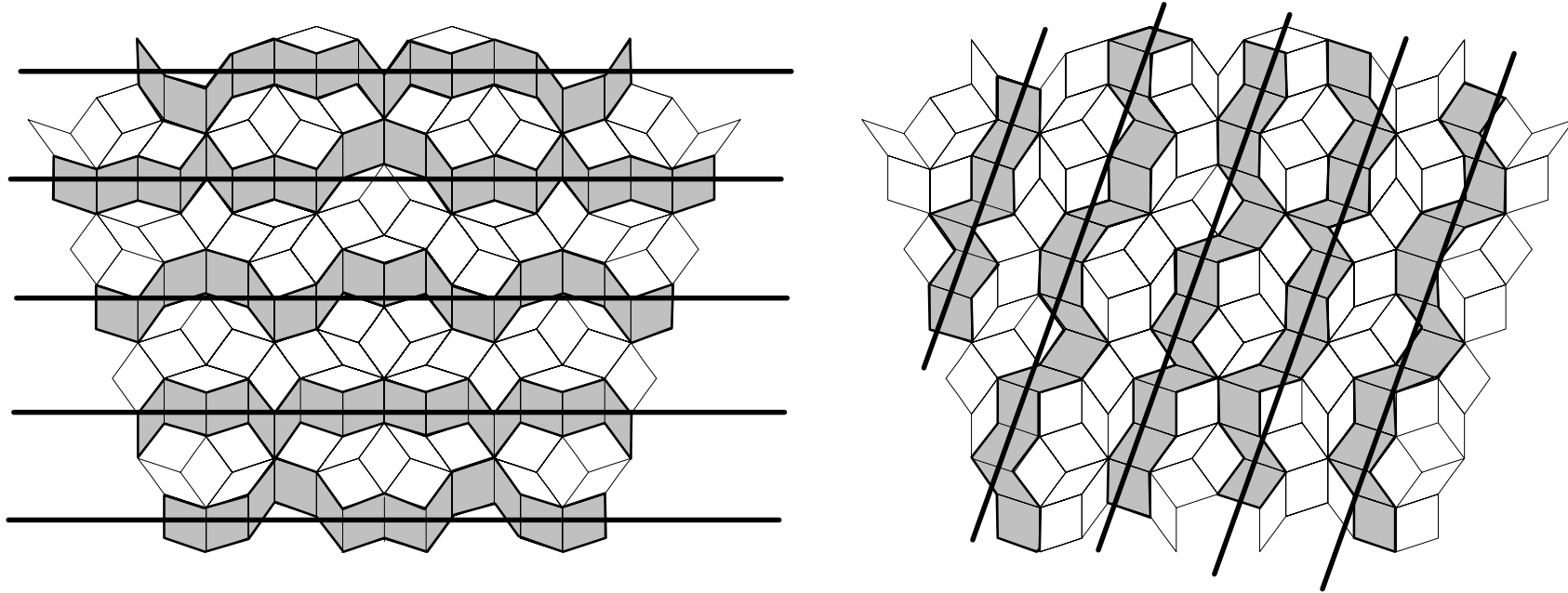
Fresque maure du palais de l'Alhambra à Grenade

Le pavage apériodique du plan avec deux types de losanges



Symétries d'ordre 5 et 10 avec $\rho = \frac{G}{M} = \varphi = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} = 1,618\dots$

Il existe cinq types de quasi-plans dans un pavage de Penrose



→ Diffraction des RX par les quasi-plans \Rightarrow
diagramme de diffraction avec symétrie d'ordre 5

→ Ordre moyen dans un quasi-cristal \equiv
vibrations atomiques dans un cristal parfait

désordre statique ou dynamique \Rightarrow
élargissement des tâches de diffraction

Croissance des quasi-cristaux

→ Alliages binaires et ternaires:

Al-Mn, Al-Cu-Fe, Al-Cu-Co, Al-Co-Ni, Al-Pd-Mn

Al_4Mn , Al_6Mn , $\text{Al}_6\text{Li}_3\text{Cu}$, $\text{Al}_{78}\text{Cr}_{17}\text{Ru}_5$, $\text{Mg}_{32}(\text{Al,Zn})_{49}$, $\text{Al}_{70}\text{Pd}_{20}\text{Re}_{10}$, $\text{Al}_{71}\text{Pd}_{21}\text{Mn}_8$

→ Le modèle de Penrose prévoit des tâches de diffraction beaucoup trop fines...

Règles de croissance très strictes \Rightarrow quasi-périodicité parfaite

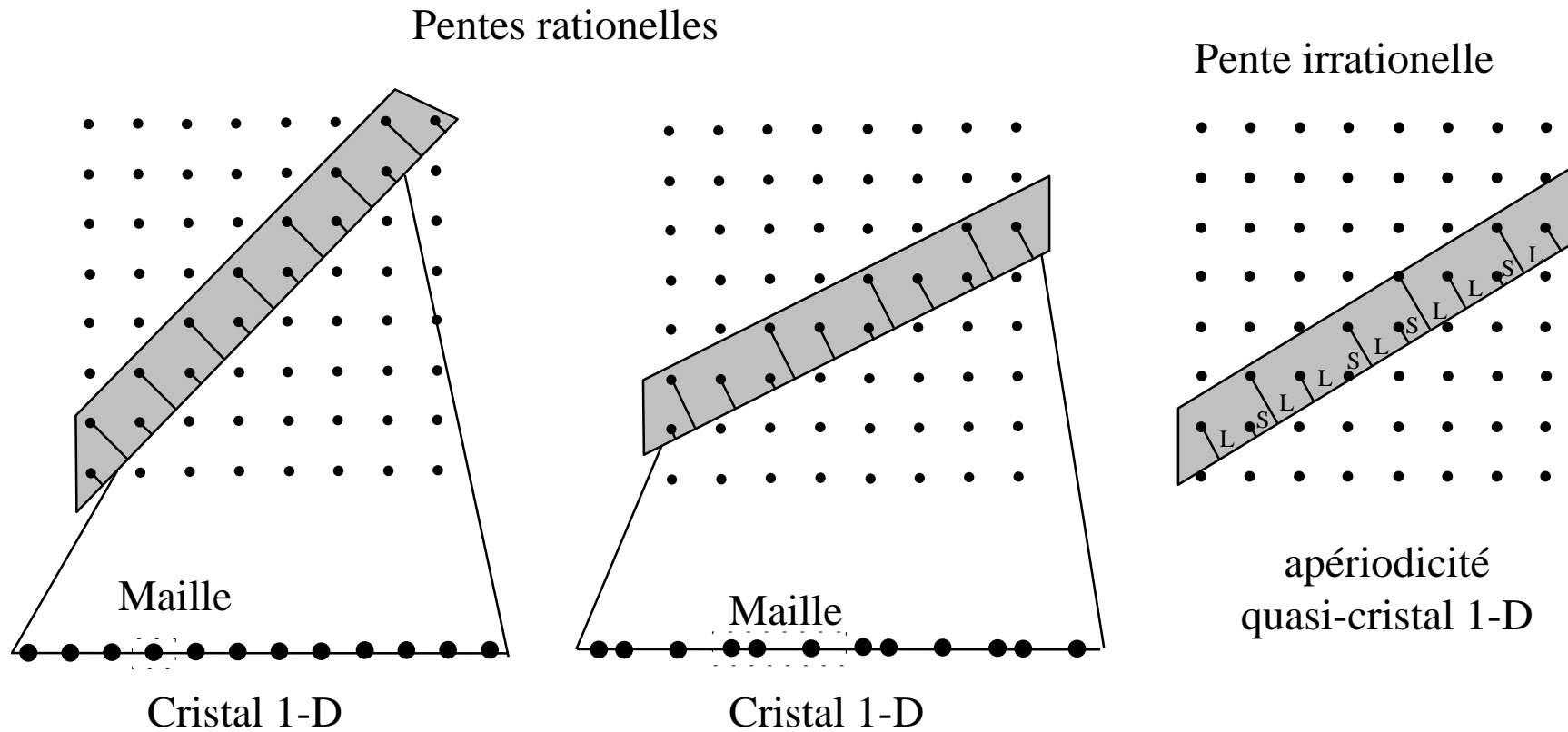
→ Un empilement aléatoire d'icosaèdres peut donner un diagramme de diffraction présentant des symétries d'ordre 5 ou 10, mais les tâches sont très larges

Pas de règles de croissance \Rightarrow trop de désordre

→ Un quasi-cristal croît de manière aléatoire en essayant de conserver un ordre local icosaédrique tout en minimisant son nombre de défauts (pas de trous) et en essayant de suivre les règles de Penrose

Un quasi-cristal peut dans certaines conditions être plus stable qu'un monocristal

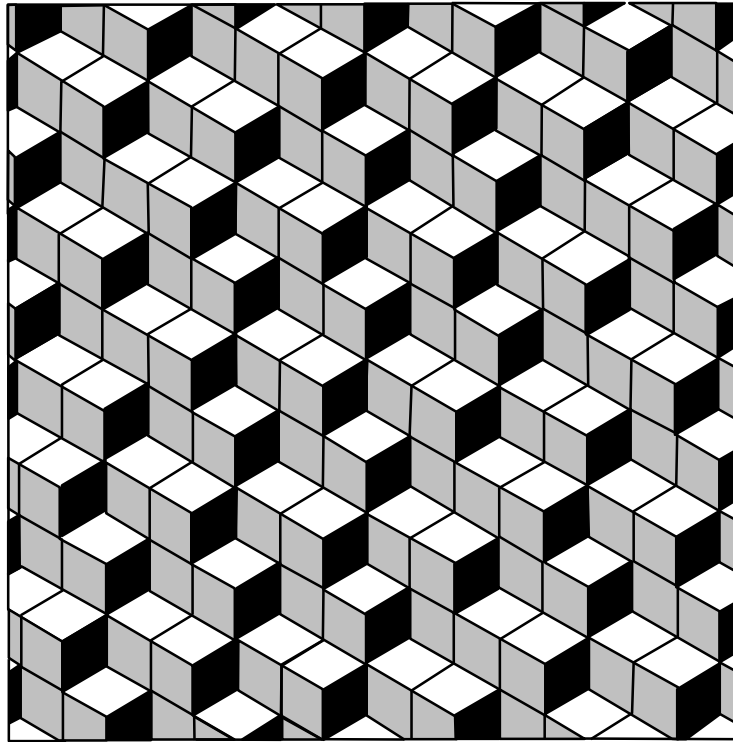
Formation d'un quasi-cristal unidimensionnel à partir d'un réseau bidimensionnel



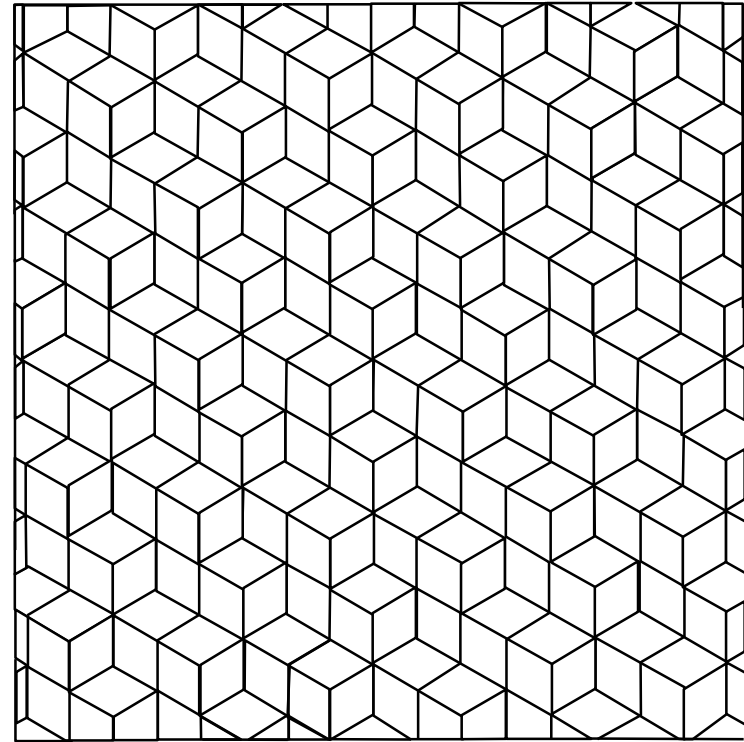
Quasi-cristal 1-D plus ordonné qu'une suite de points aléatoires

Mais désordre total concernant l'alternance (L, S)

Quasi-cristal 2-D par projection d'un réseau cubique 3-D



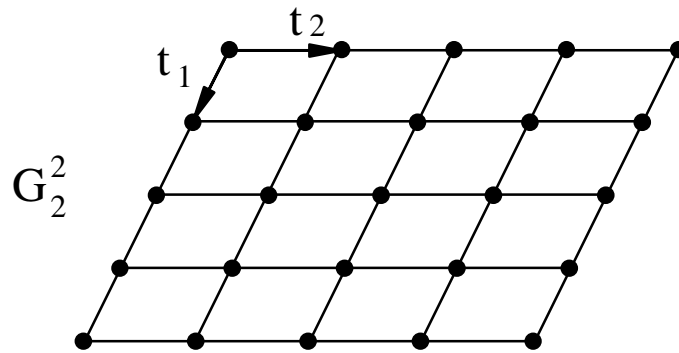
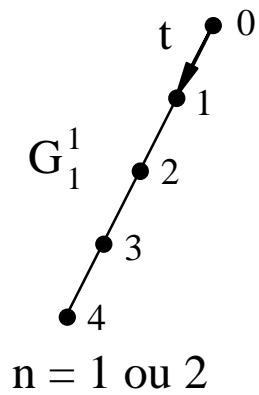
Réseau 3-D cubique



Pavage 2-D aperiodique

Quasi-cristal 3-D \equiv coupe irrationnelle à travers un espace 6-D

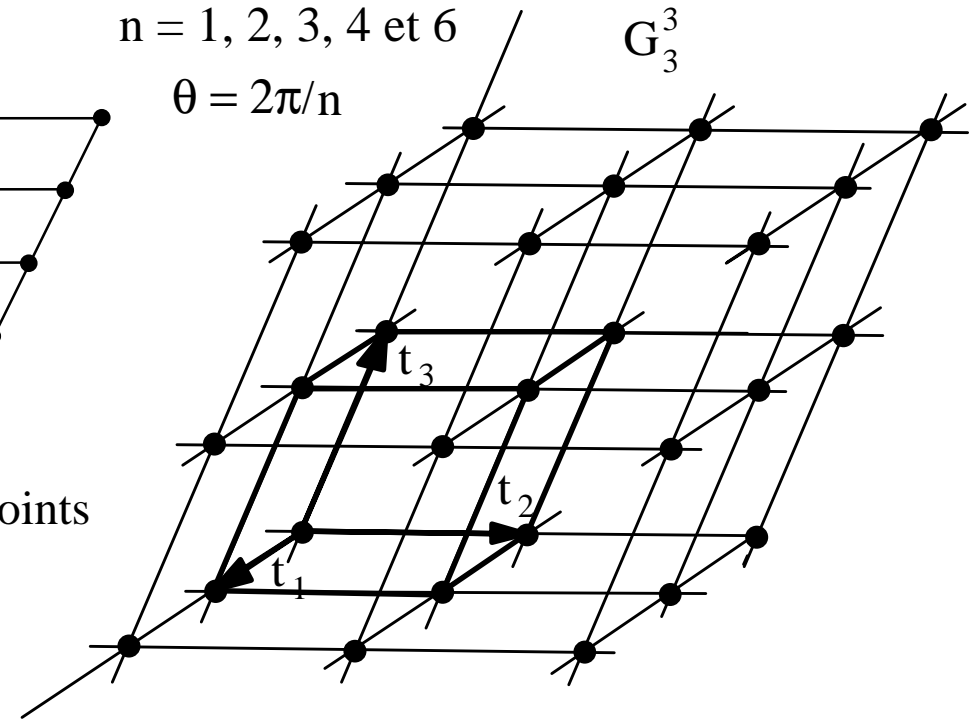
Groupes périodiques mono-, bi- et tridimensionnels



$G_m^m \Leftrightarrow$ Réseaux de points

$n = 1, 2, 3, 4 \text{ et } 6$

$\theta = 2\pi/n$

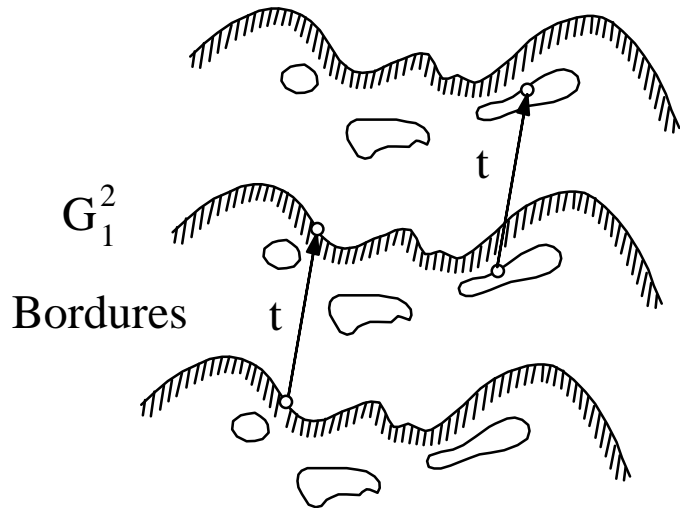


Groupes cylindriques

$G_1^3 \Leftrightarrow$ Tiges, chaînes, rubans, polymères...

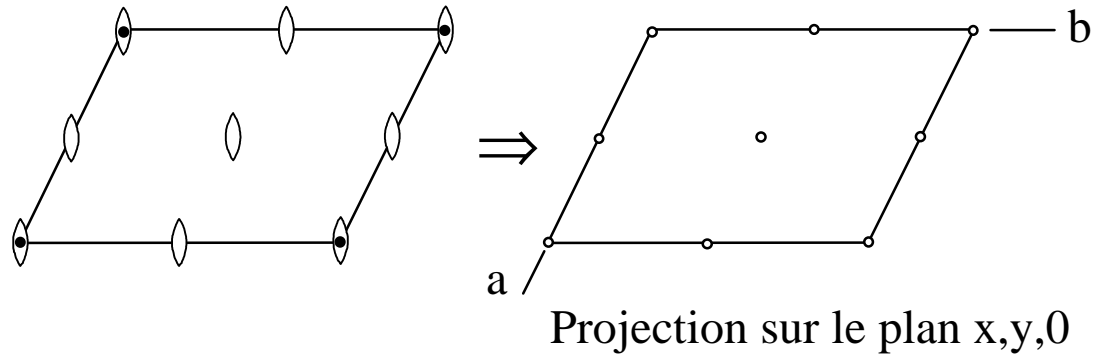
Groupes lamellaires

$G_2^3 \Leftrightarrow$ Murs, panneaux, alvéoles, feuillets...



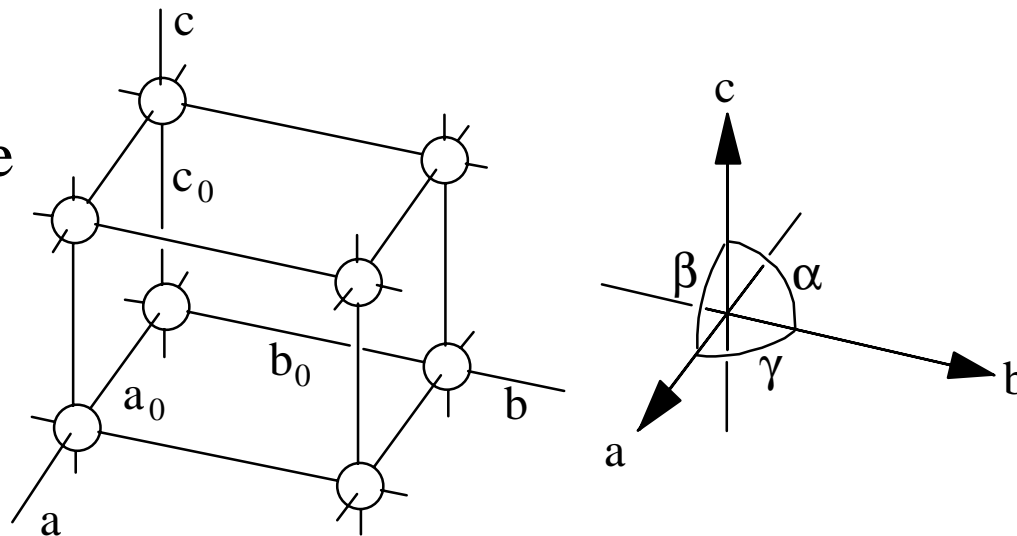
Notion de réseau primitif

→ Empilement quelconque de réseaux p2

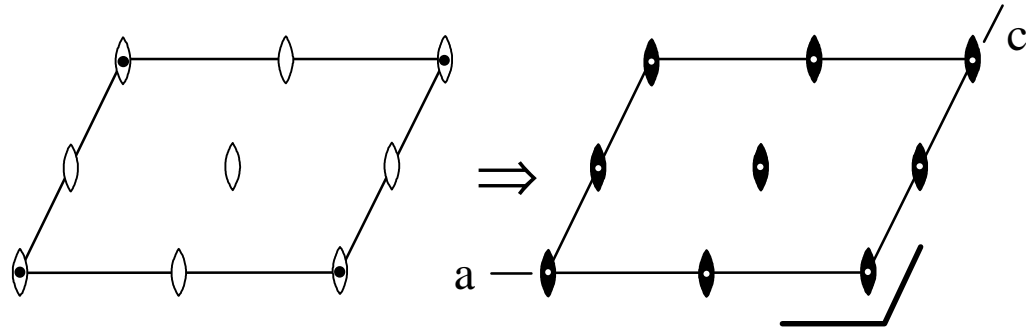


→ Un seul réseau triclinique
car liberté totale de choix pour a, b, c, α, β et γ

Maille primitive

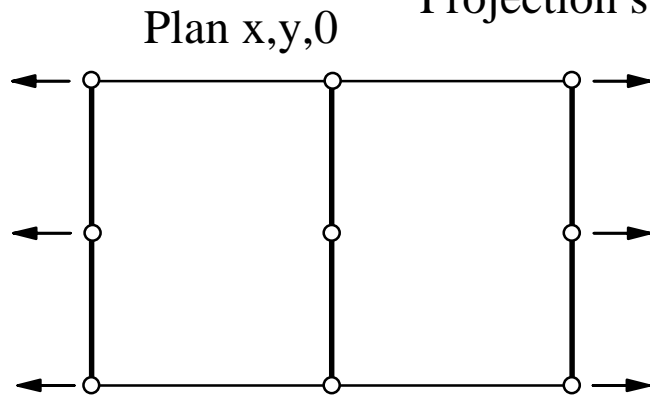


Réseaux avec un seul axe d'ordre 2



Projection sur le plan $x,0,z$

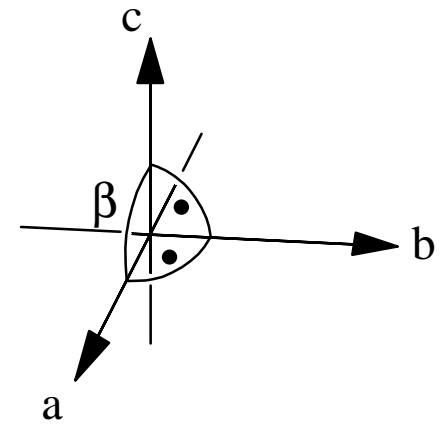
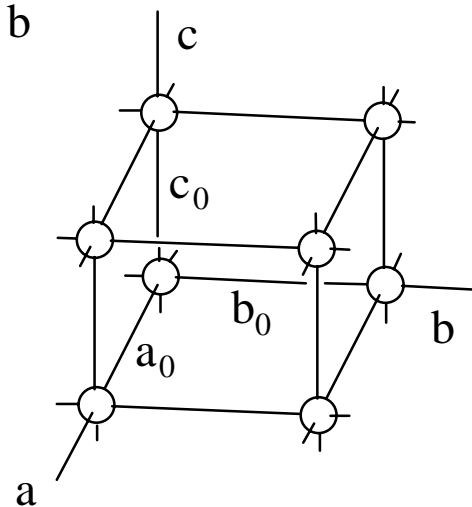
Superposition
directe $p2$
avec $c \neq b$ ou a



$P 2/m$



b

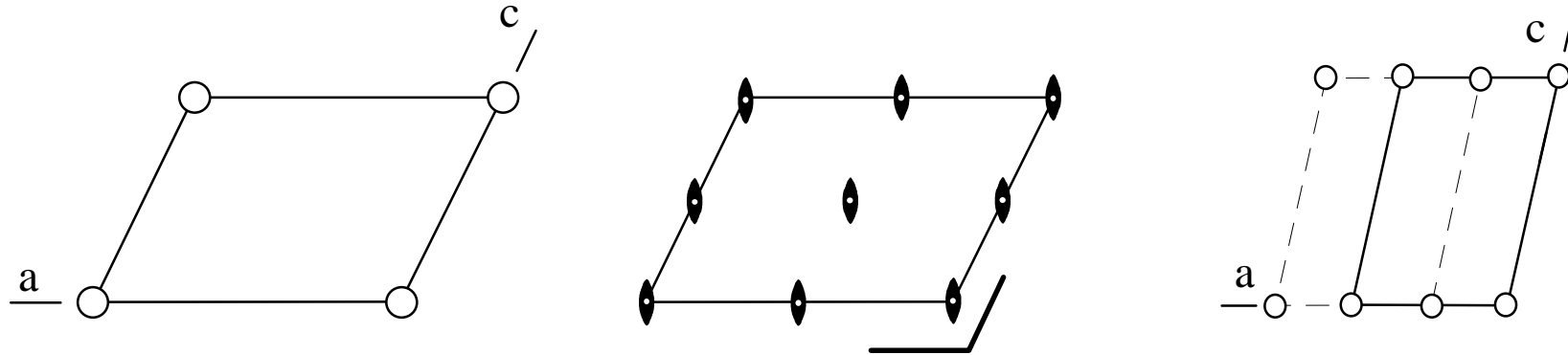


$$a_0 \neq b_0 \neq c_0$$

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

Les réseaux centrés

→ Réseau monoclinique P2/m



→ Points de symétrie 2/m:

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

→ Centrage des arêtes $\frac{1}{2}, 0, 0$; $0, \frac{1}{2}, 0$; $0, 0, \frac{1}{2}$;

⇔ réduction de moitié de la maille

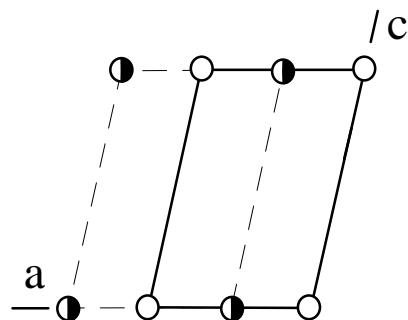
→ Autres modes de centrage:

Base centrée: A($0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$), B($\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$) ou C($\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$)

Corps centré: I($\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$) Faces centrées: F = A + B + C

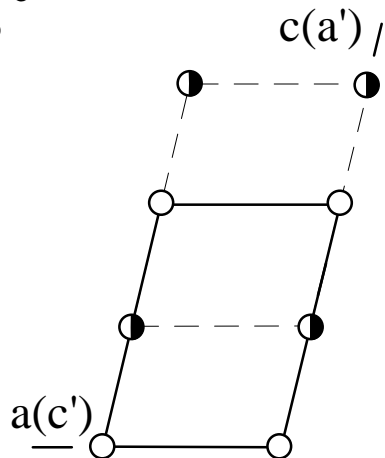
Centrage des faces et du corps de la maille

Mode C \Leftrightarrow (a,b)



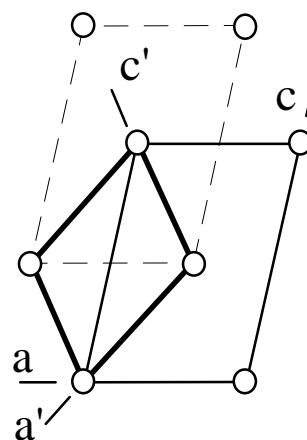
Réseau C2/m

Mode A \Leftrightarrow (b,c)



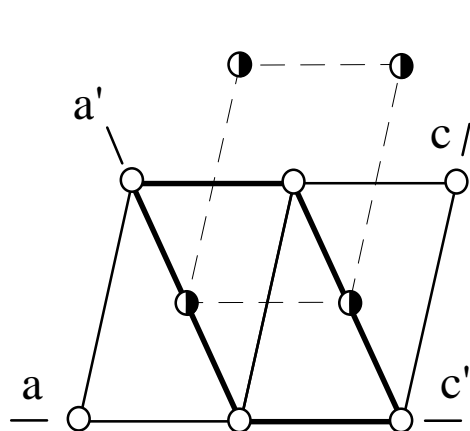
A2/m \equiv C2/m

Mode B \Leftrightarrow (a,c)



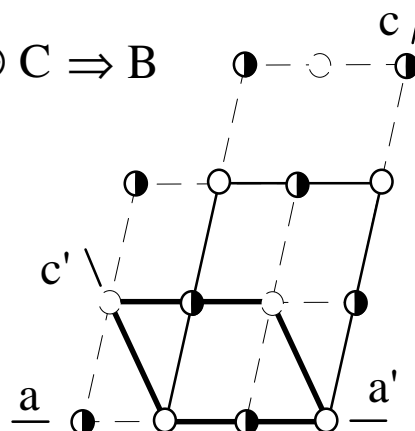
B2/m \equiv P2/m

β quelconque



Mode I I2/m \equiv C2/m

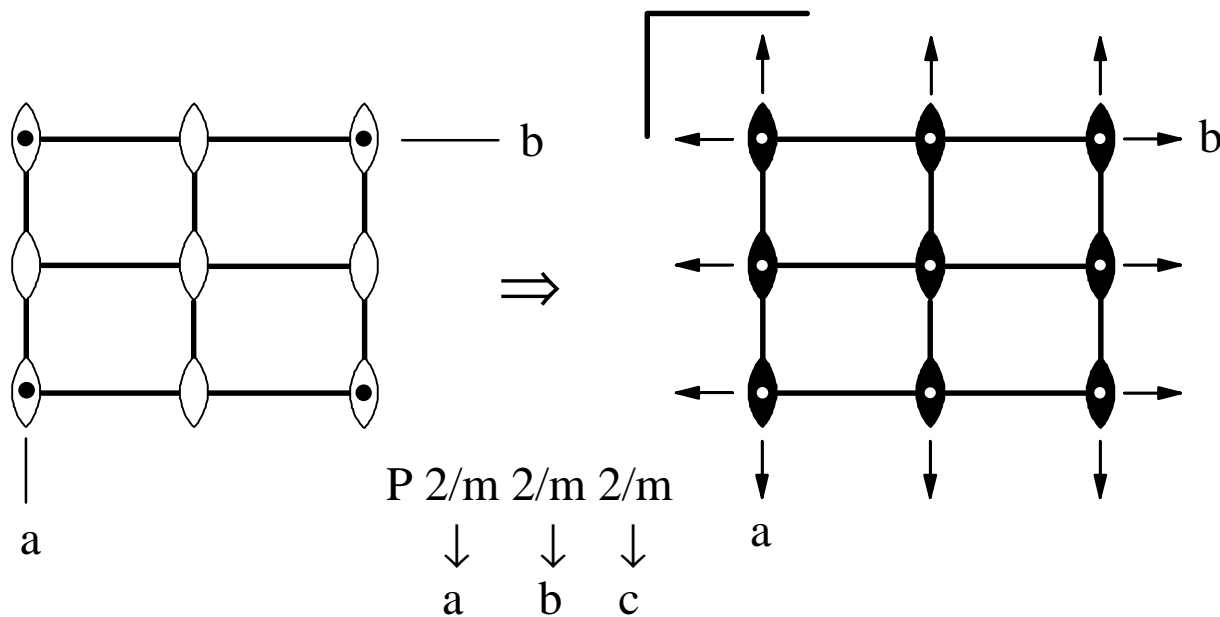
A \oplus C \Rightarrow B



Mode F F2/m \equiv C2/m

Il n'existe que
deux réseaux
monocliniques:
P2/m et C2/m

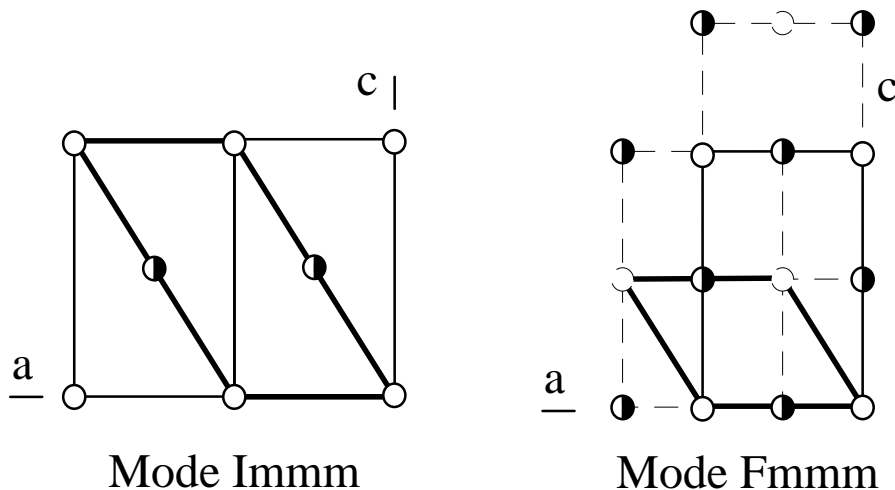
Réseaux avec 3 axes d'ordre 2



Superposition
directe de pmm
avec $c \neq a$ ou b

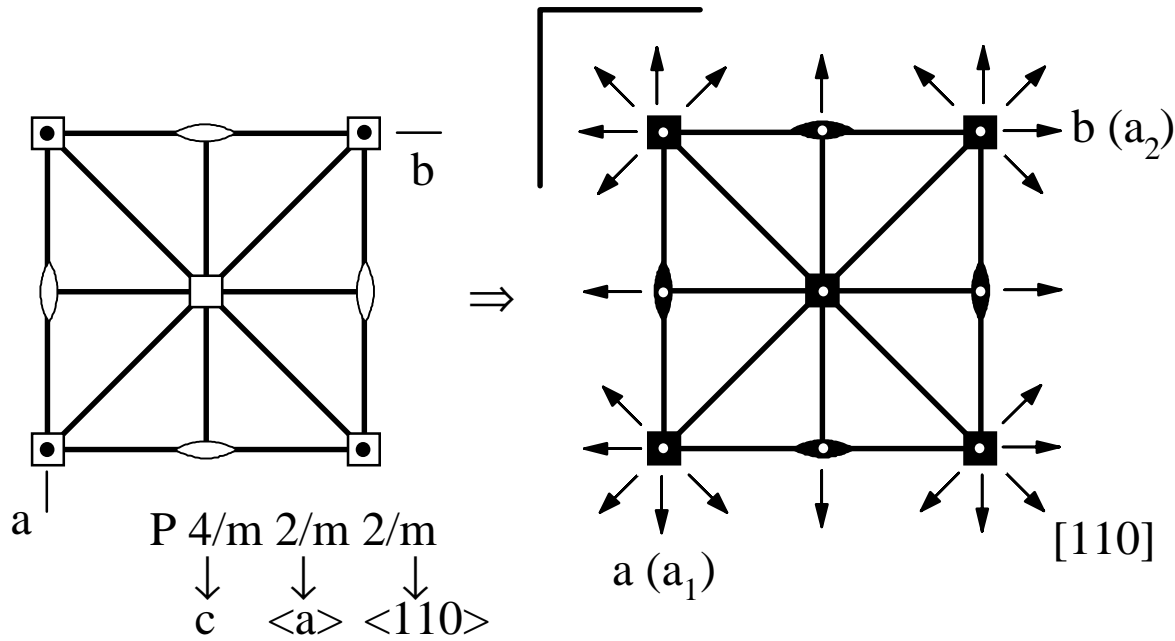
→ Quatre réseaux orthorhombiques

Pmmm, Cmmm, Immm et Fmmm car $\beta = 90^\circ$



$Ammm \equiv Bmmm \equiv Cmmm$
 (choix a, b, c)

Réseaux avec un axe d'ordre 4

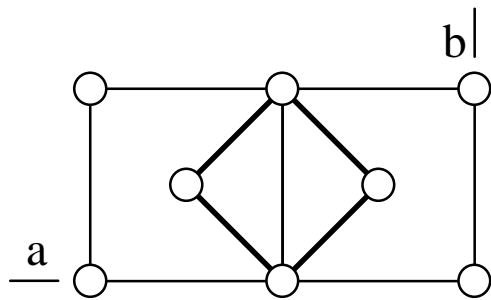


Superposition
directe de $p4mm$
avec $c \neq a$

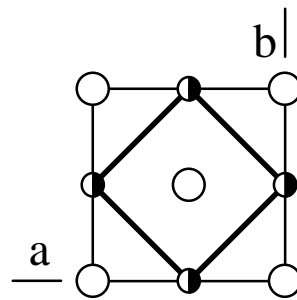
$$a_0 = b_0 \neq c_0$$

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

→ Deux réseaux tétraonaux $P4/mmm$ et $I4/mmm$



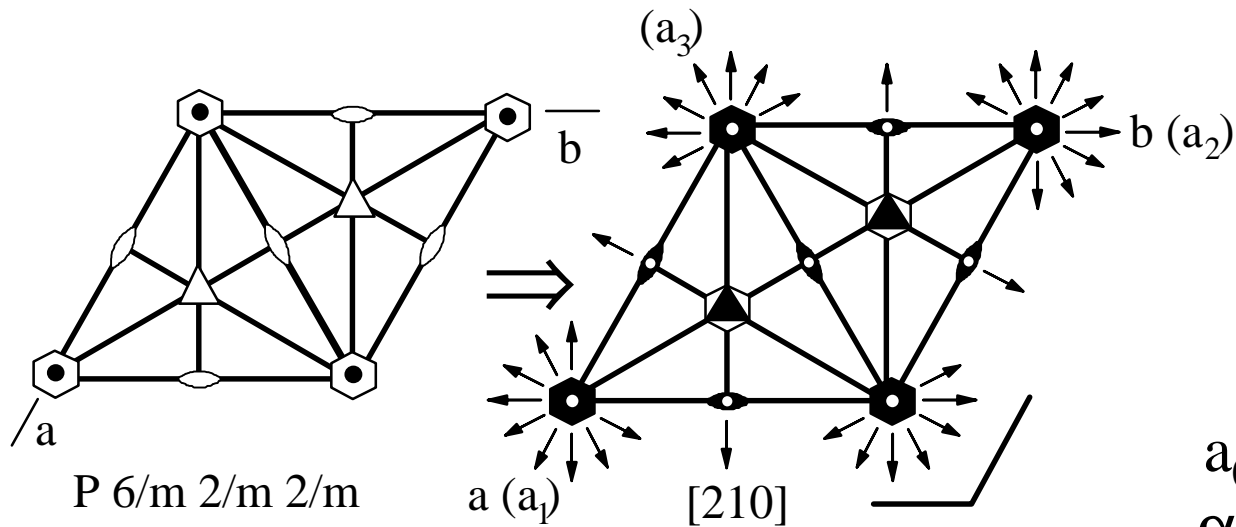
$Cm\ mm \equiv Pm\ mm$



$Fm\ mm \equiv Im\ mm$

$Ammm$
 $\Rightarrow Bmmm$
 $\Rightarrow Fmmm$
 $\Leftrightarrow Immm$

Réseaux avec un axe d'ordre 6



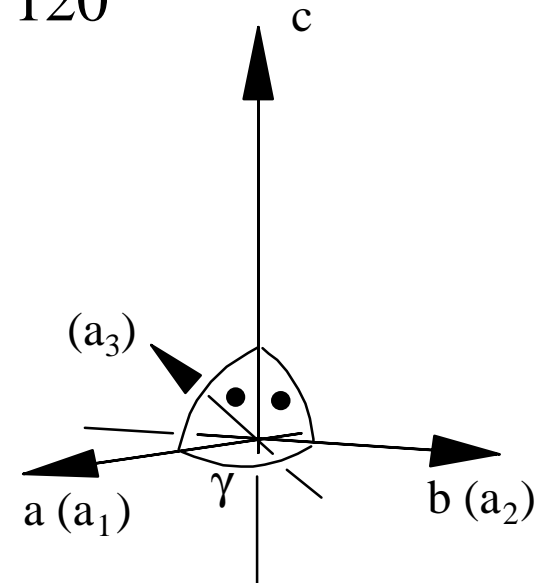
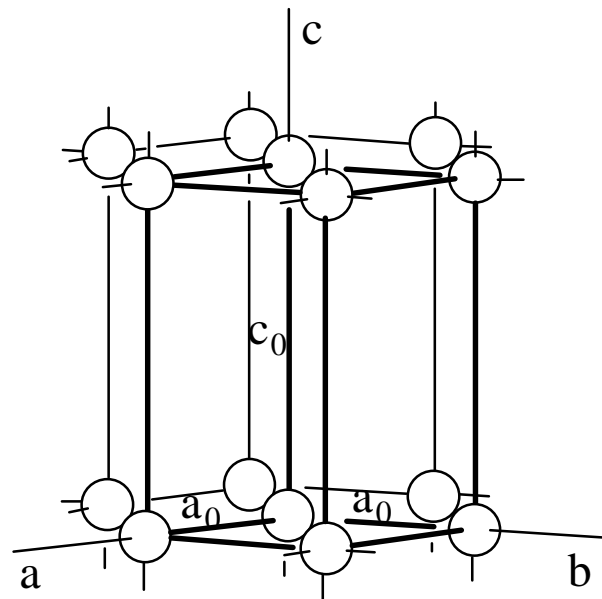
Superposition directe
de $p6mm$ avec $c \neq a$

$$a_0 = b_0 \neq c_0$$

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

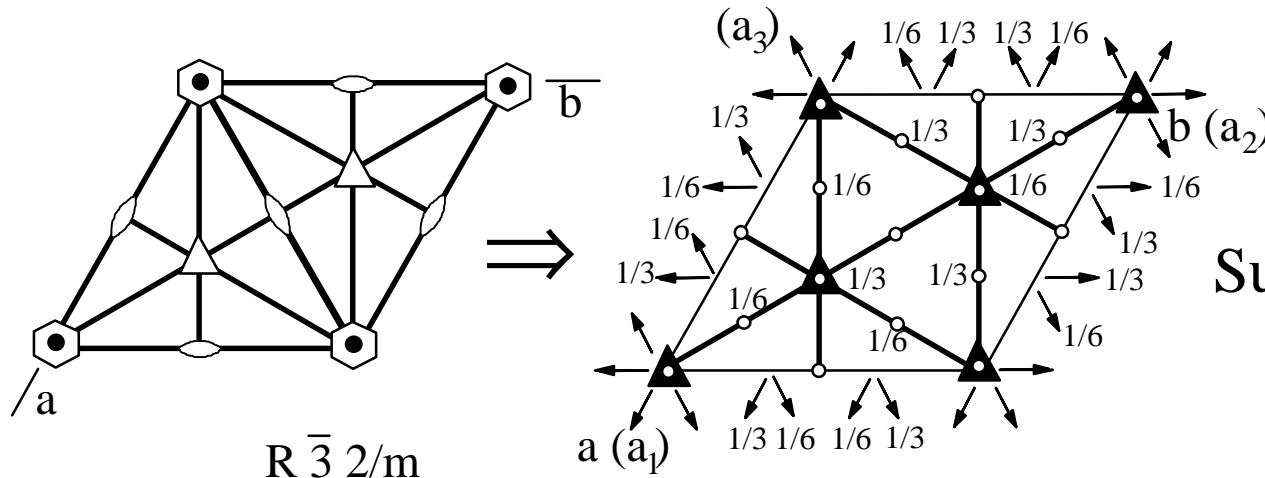
$$\gamma = 120^\circ$$

Même symétrie que
 $(0,0,0) \Rightarrow (0,0,1/2)$
 \Leftrightarrow réduction de moitié
 de la maille



Un seul réseau $P6/mmm$

Réseaux avec un axe d'ordre 3

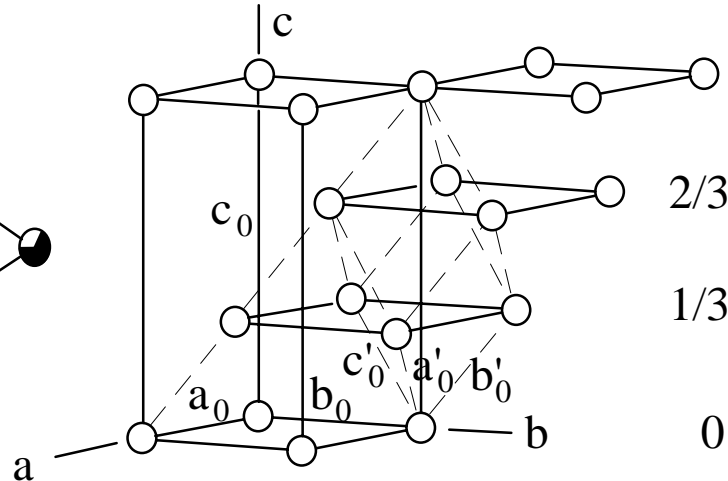
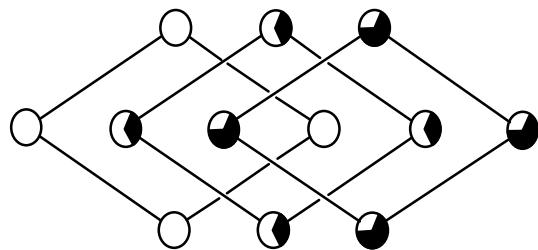


Superposition décalée
de réseaux p6mm

$R \bar{3} 2/m$

$\downarrow \downarrow$
 $c < a$

Un seul réseau trigonal



Maille trigonale

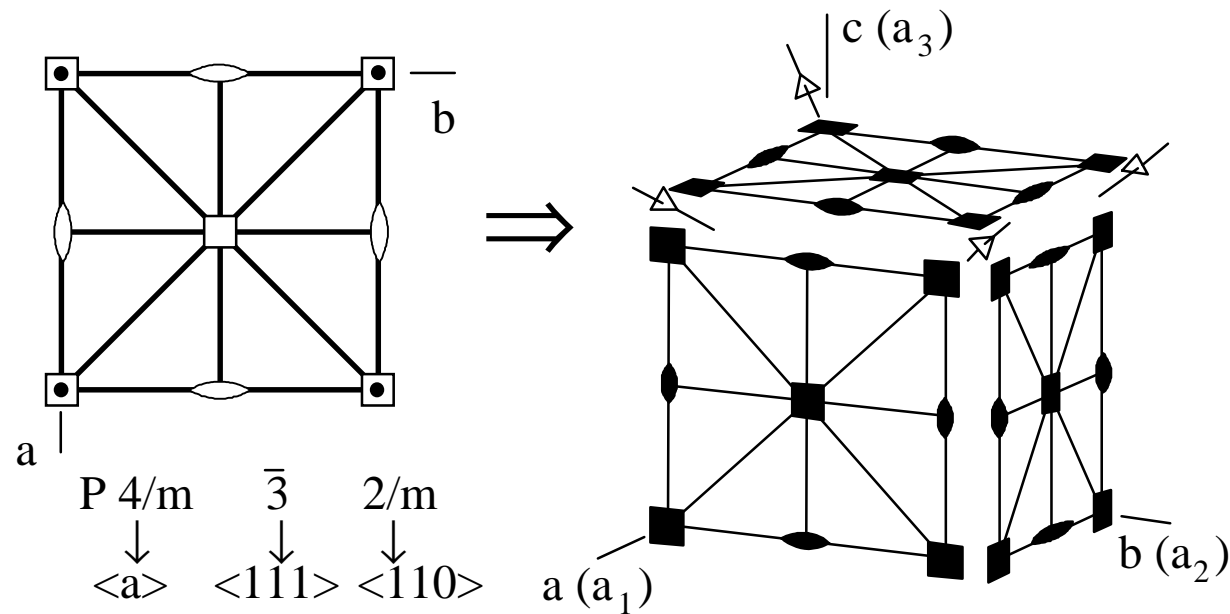
$$a_0 = b_0 \neq c_0$$

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

$$\gamma = 120^\circ$$

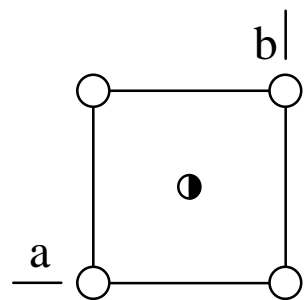
Maille rhomboédrique $a'_0 = b'_0 = c'_0$, $\alpha = \beta = \gamma$
 $\neq 60^\circ$ (Fm $\bar{3} m$) 90° (Pm $\bar{3} m$), 109.47° (Im $\bar{3} m$)

Réseaux avec axes d'ordre 3 et 4

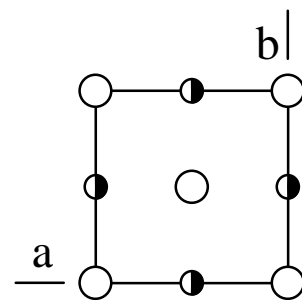


Superposition
directe de $p4mm$
avec $c = a = b$

→ Trois réseaux cubiques $Pm \bar{3} m$, $Im \bar{3} m$ et $Fm \bar{3} m$
car $A \Rightarrow B \Rightarrow C \Rightarrow Fm \bar{3} m$



$Im \bar{3} m$

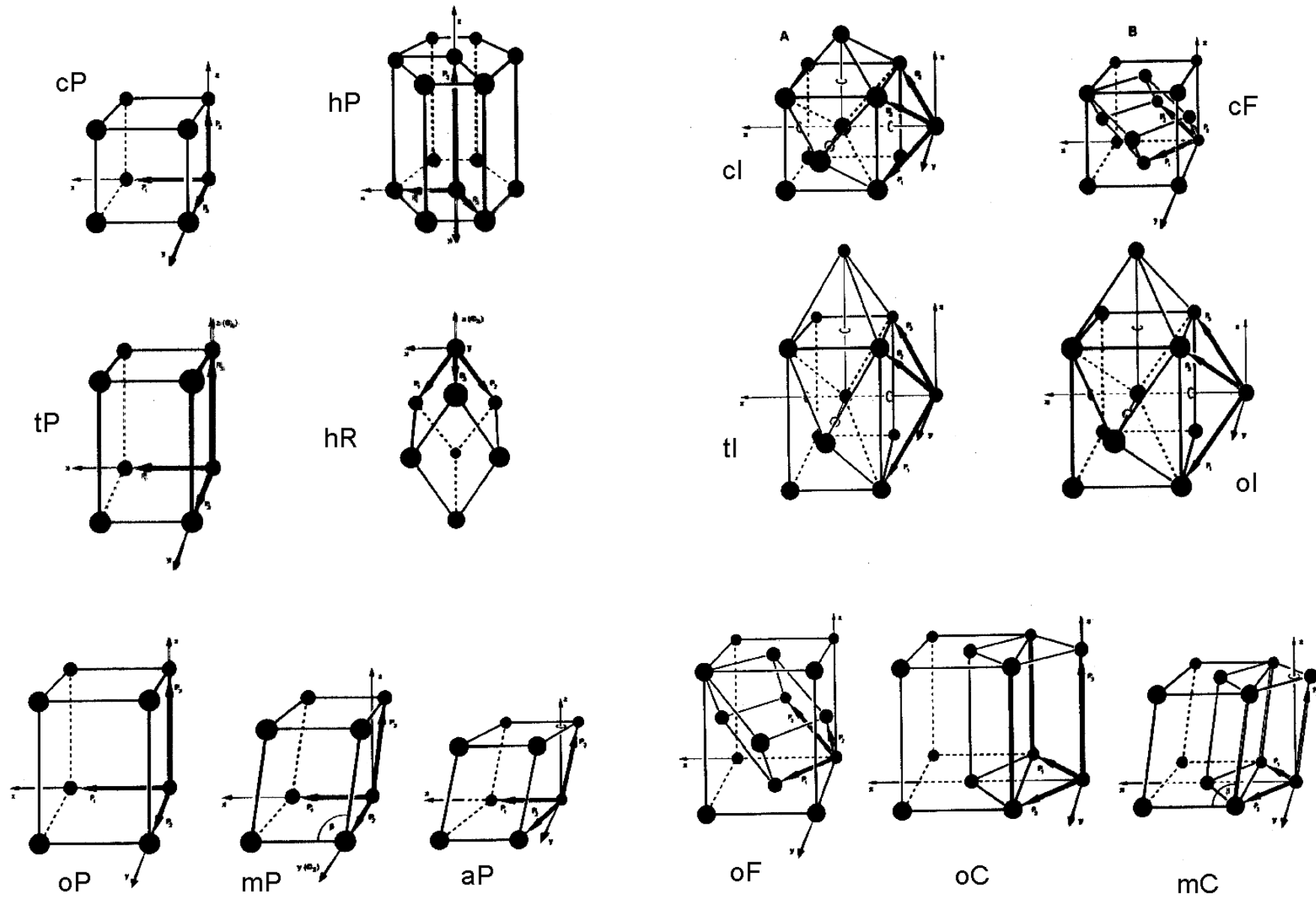


$Fm \bar{3} m \neq Im \bar{3} m$

$$a_0 = b_0 = c_0$$

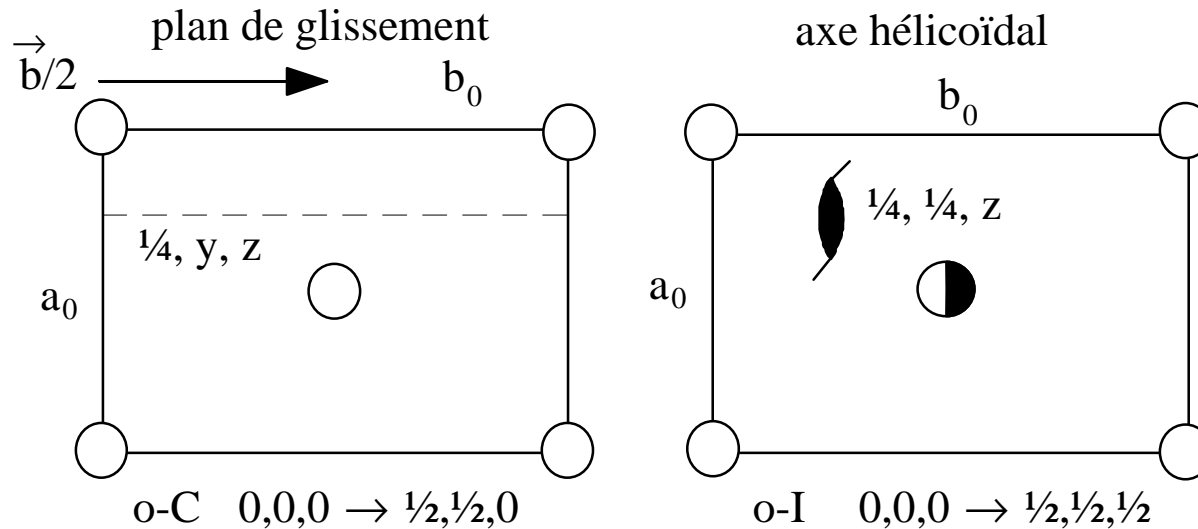
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

Il existe un total de 14 réseaux de Bravais: $14 = 7P + 2C + 3I + 2F$



Groupes d'espace

→ Opérateurs de translation et/ou rotation/réflexion



→ Ordre n des axes de rotation: $n = 1, 2, 3, 4$ et 6

⇒ 7 systèmes cristallins

→ Opérateurs de translation P, A, B, C, I et F

⇒ 14 réseaux de Bravais

→ Composition de l'inversion et des rotations

⇒ 32 classes de symétrie

→ Translations \otimes éléments de symétrie ponctuels

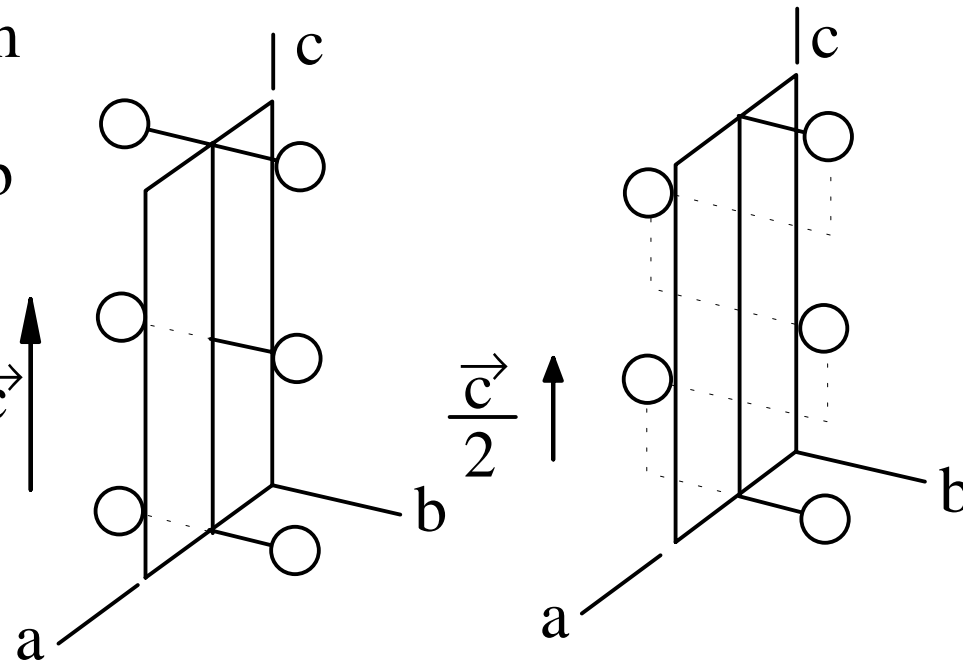
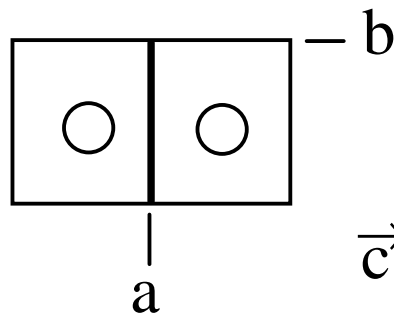
⇒ 230 groupes d'espaces

Les miroirs glissants

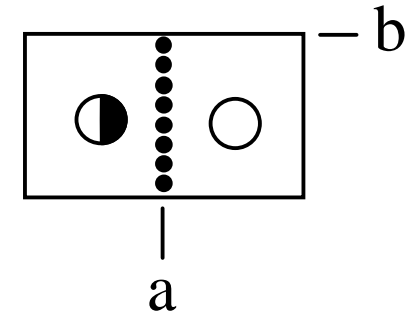
→ Réflexion dans un plan \oplus translation d'un vecteur

// au plan du miroir

Plan miroir m



Plan glissant c



t



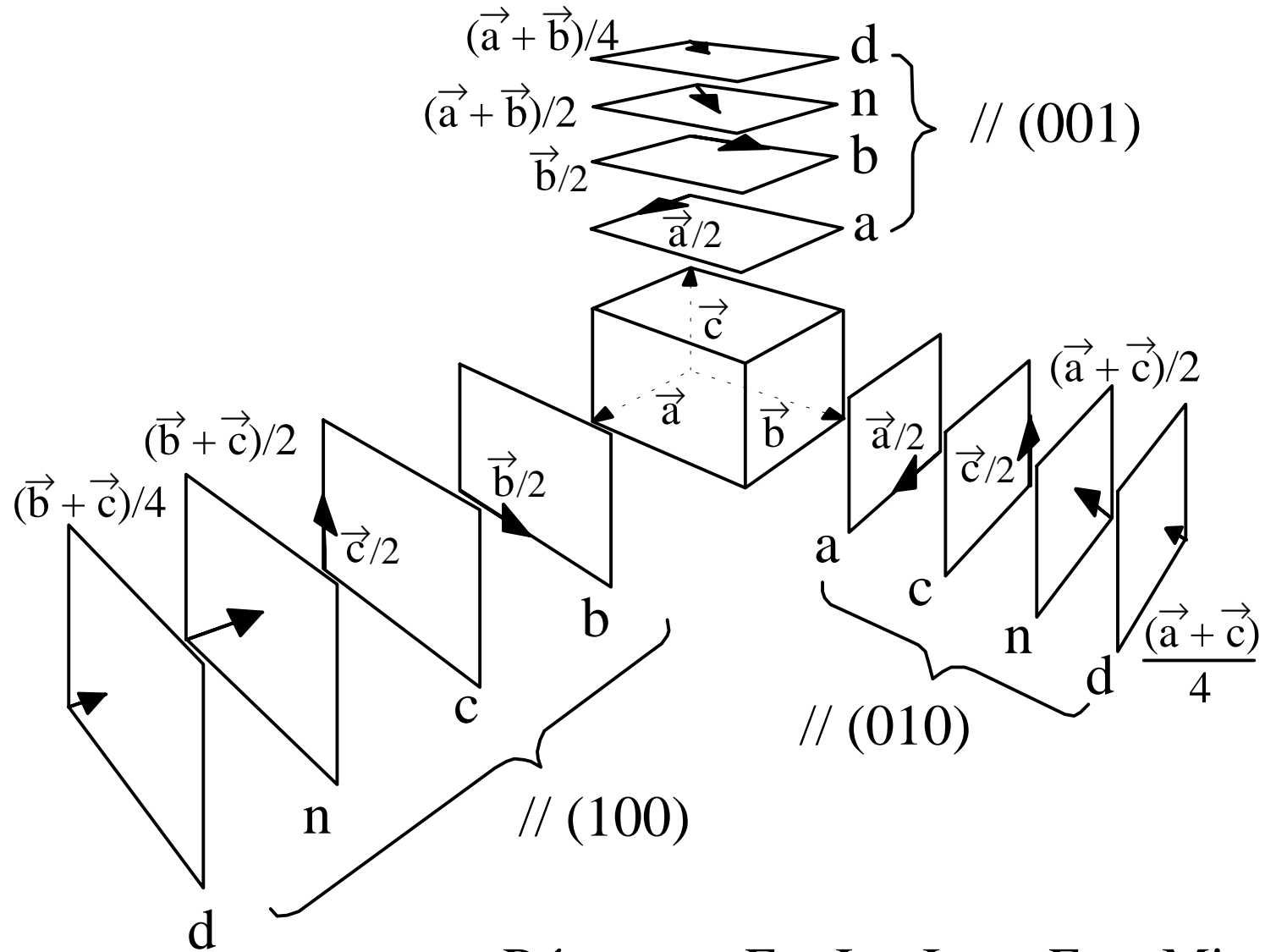
t.m



t.a



Miroirs glissants du système orthorhombique



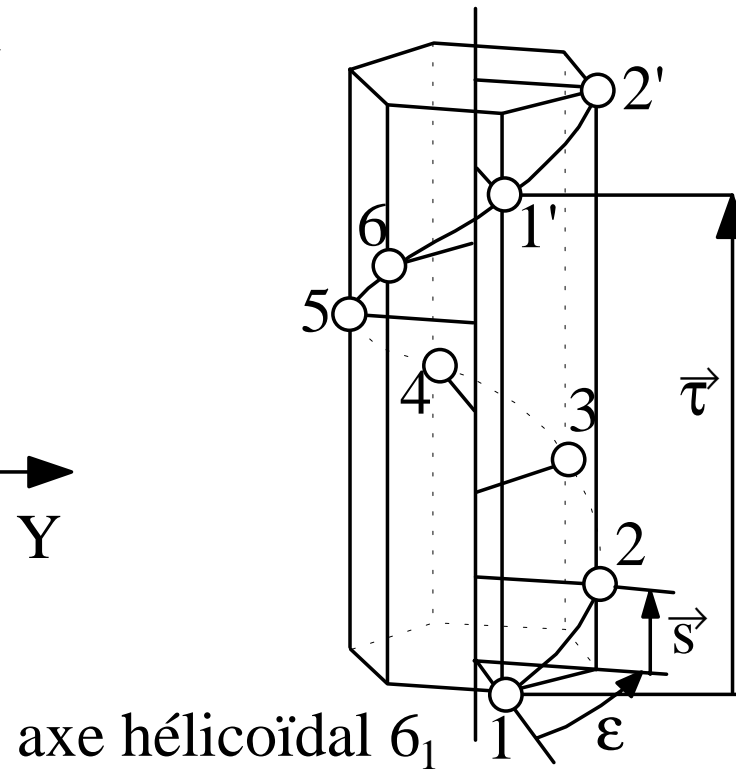
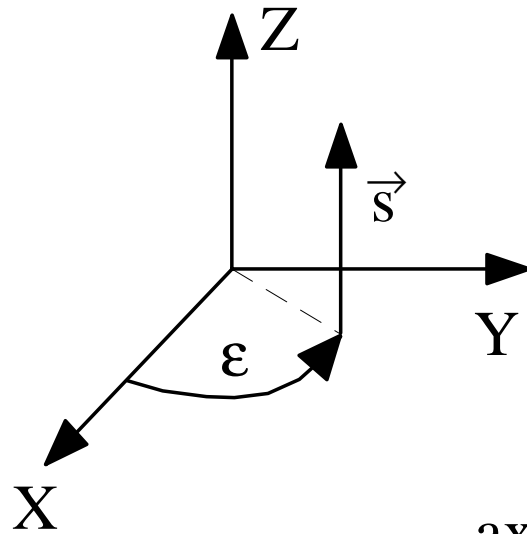
Réseaux o-F, t-I, c-I et c-F \Leftrightarrow Miroirs d

Axes hélicoïdaux ou rotation vis X_σ ($X = 1, 2, 3, 4, 6$)

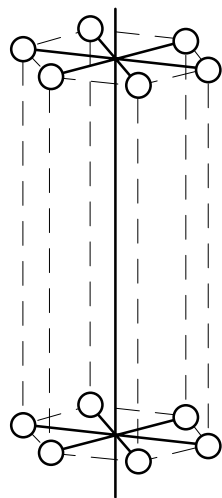
→ Rotation $\varepsilon = 2\pi/X \oplus$ translation $\sigma/X //$ à l'axe de rotation

$$X_\sigma \Leftrightarrow X \cdot |\vec{s}| = \sigma |\vec{\tau}|, \sigma = 0, 1, 2, \dots, X - 1 \Rightarrow \sigma = s/X$$

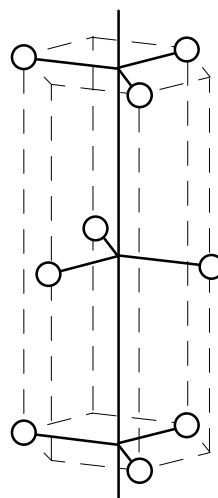
Chiralité d'un axe
hélicoïdal



Axes hélicoïdaux 6_σ

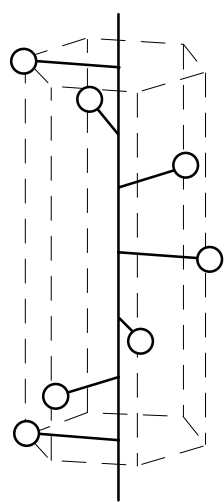


6



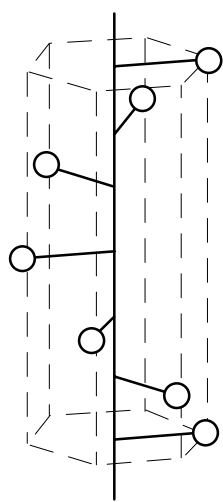
6_3

Axes non
chiraux

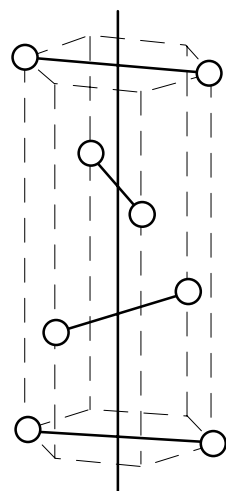


6_1

m

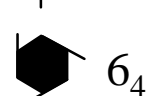
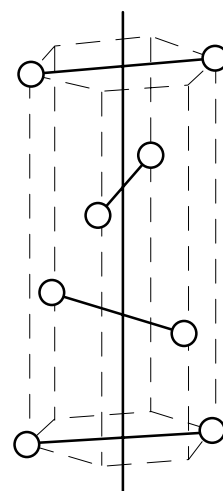


6_5



6_2

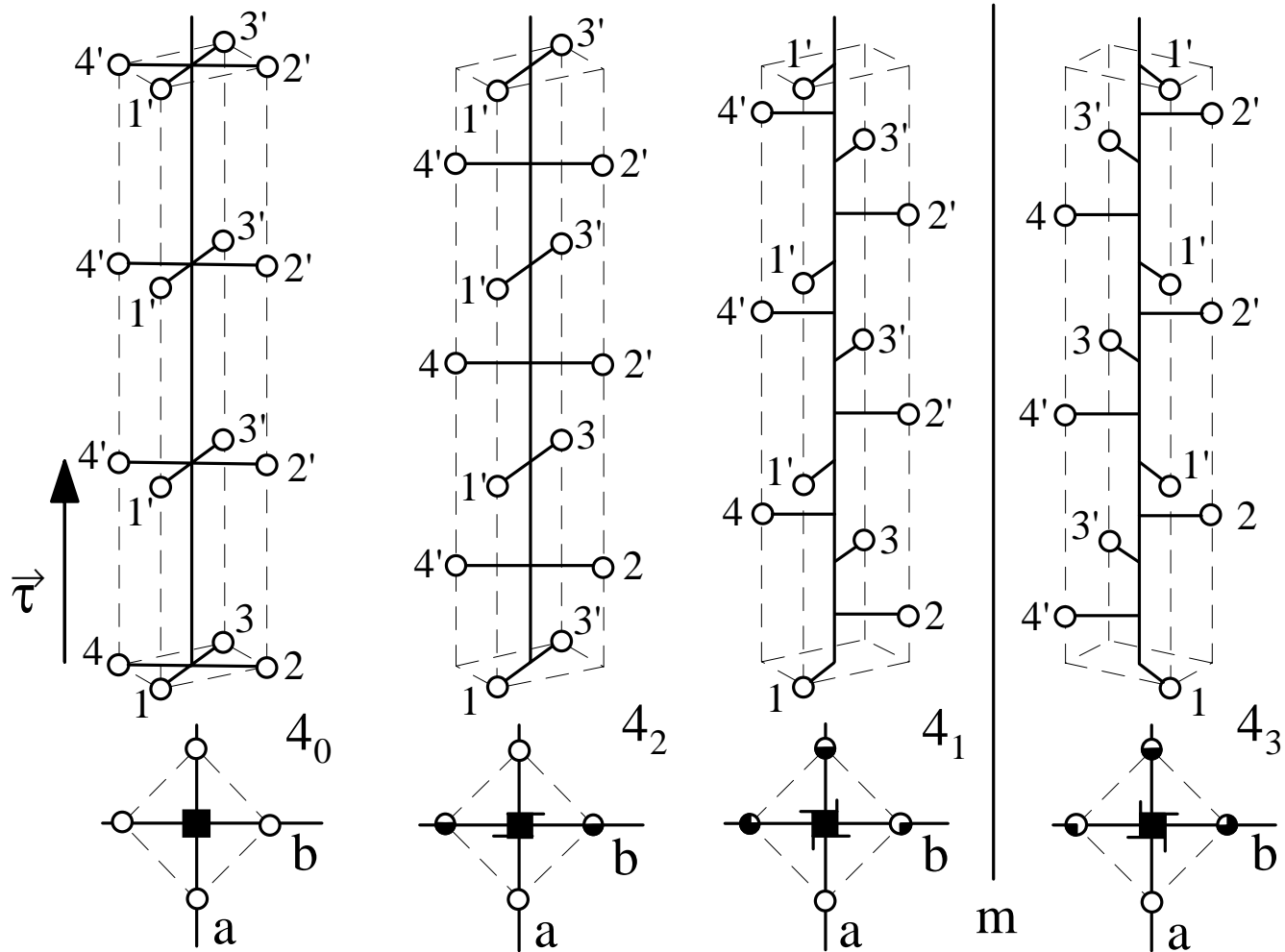
m



6_4

Axes chiraux

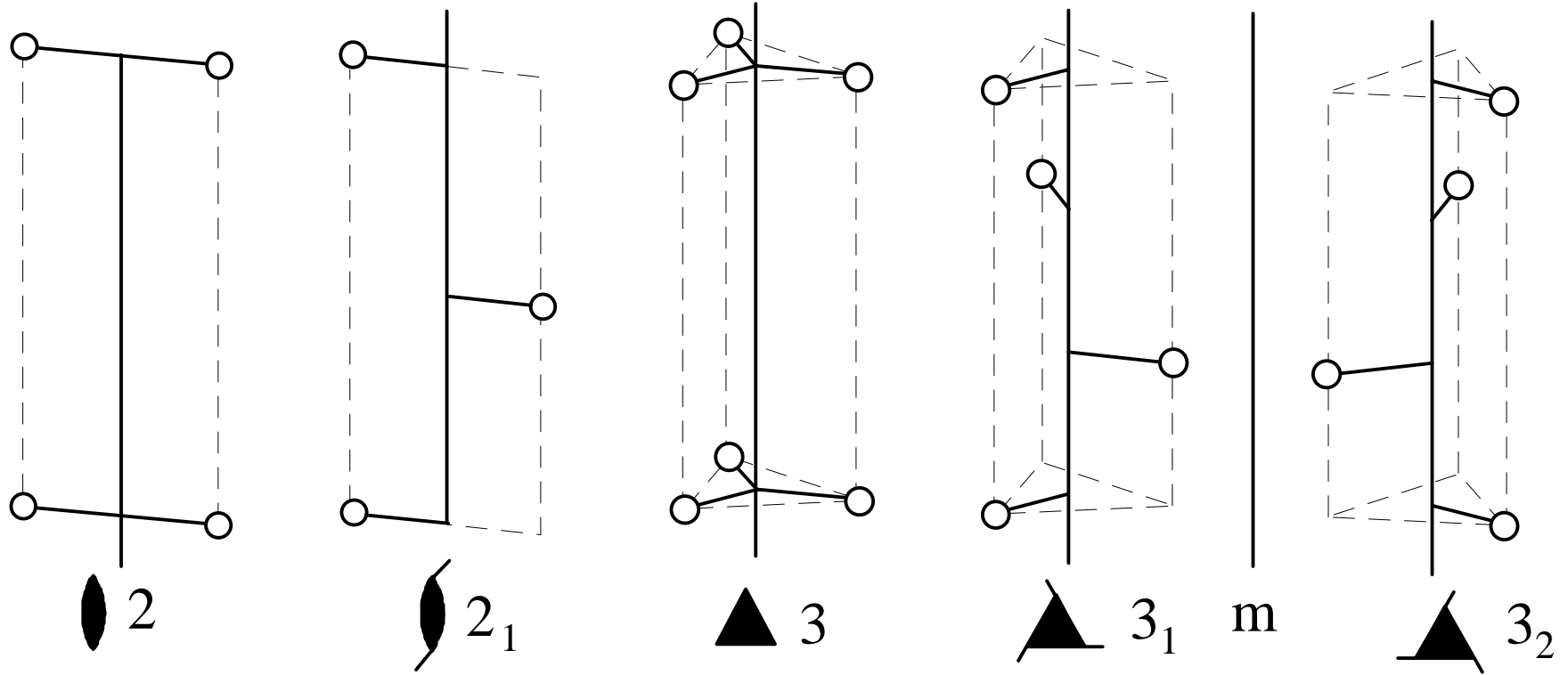
Axes hélicoïdaux 4_σ



Non chiraux

Chiraux

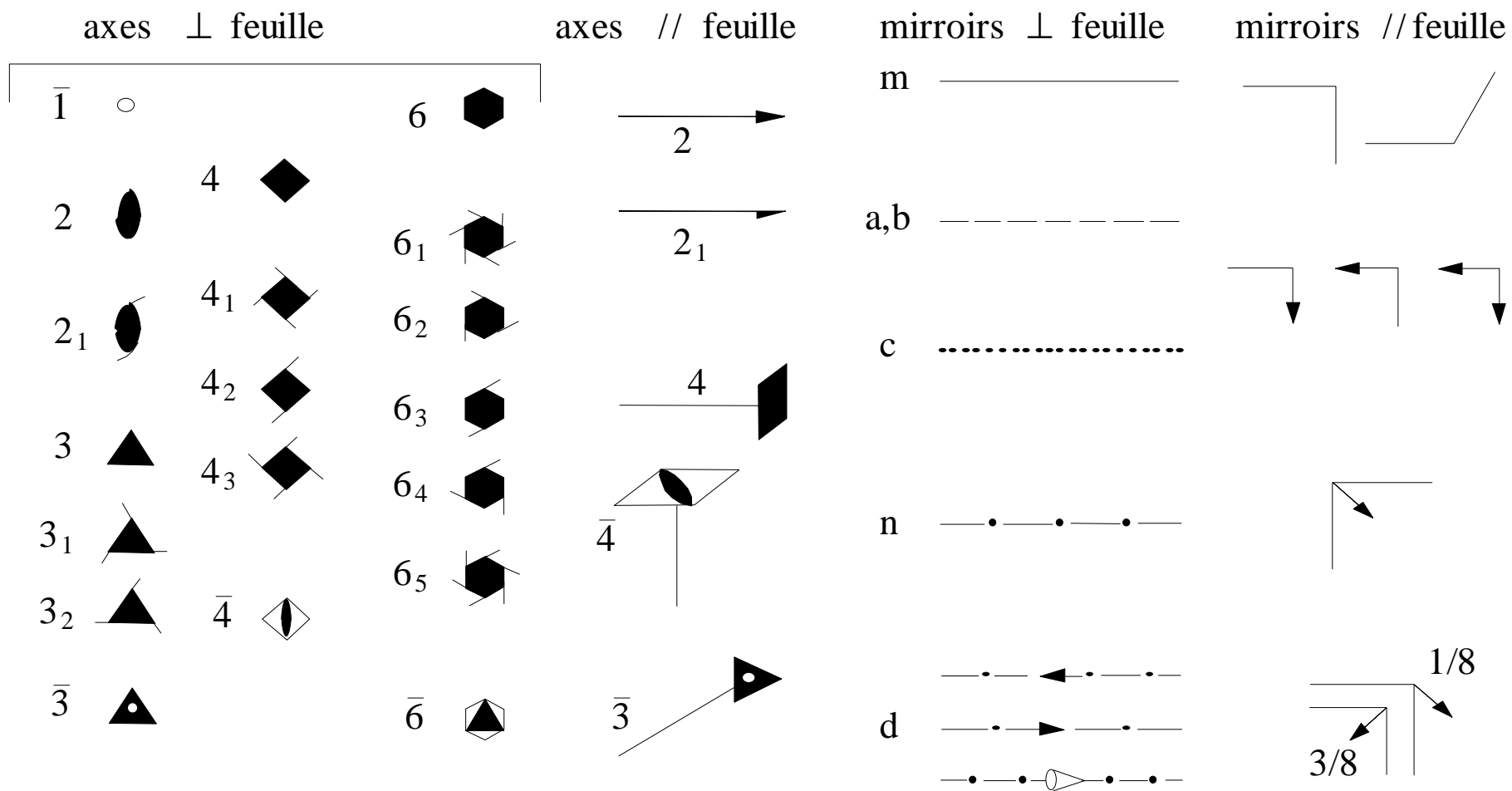
Axes hélicoïdaux 2_σ et 3_σ



Non chiraux

Chiraux

Notation graphique des éléments de symétrie



32 classes cristallines et 230 groupes d'espace

→ Règles de substitution:

$$2 \leftarrow 2_1$$

$$3 \leftarrow 3_1, 3_2$$

$$4 \leftarrow 4_1, 4_2, 4_3$$

$$6 \leftarrow 6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5$$

$$m \leftarrow a, b, c, n, d$$

Modes: P, A, B, C, I et F

Triclinique 2

Monoclinique 13

Orthorhombique 59

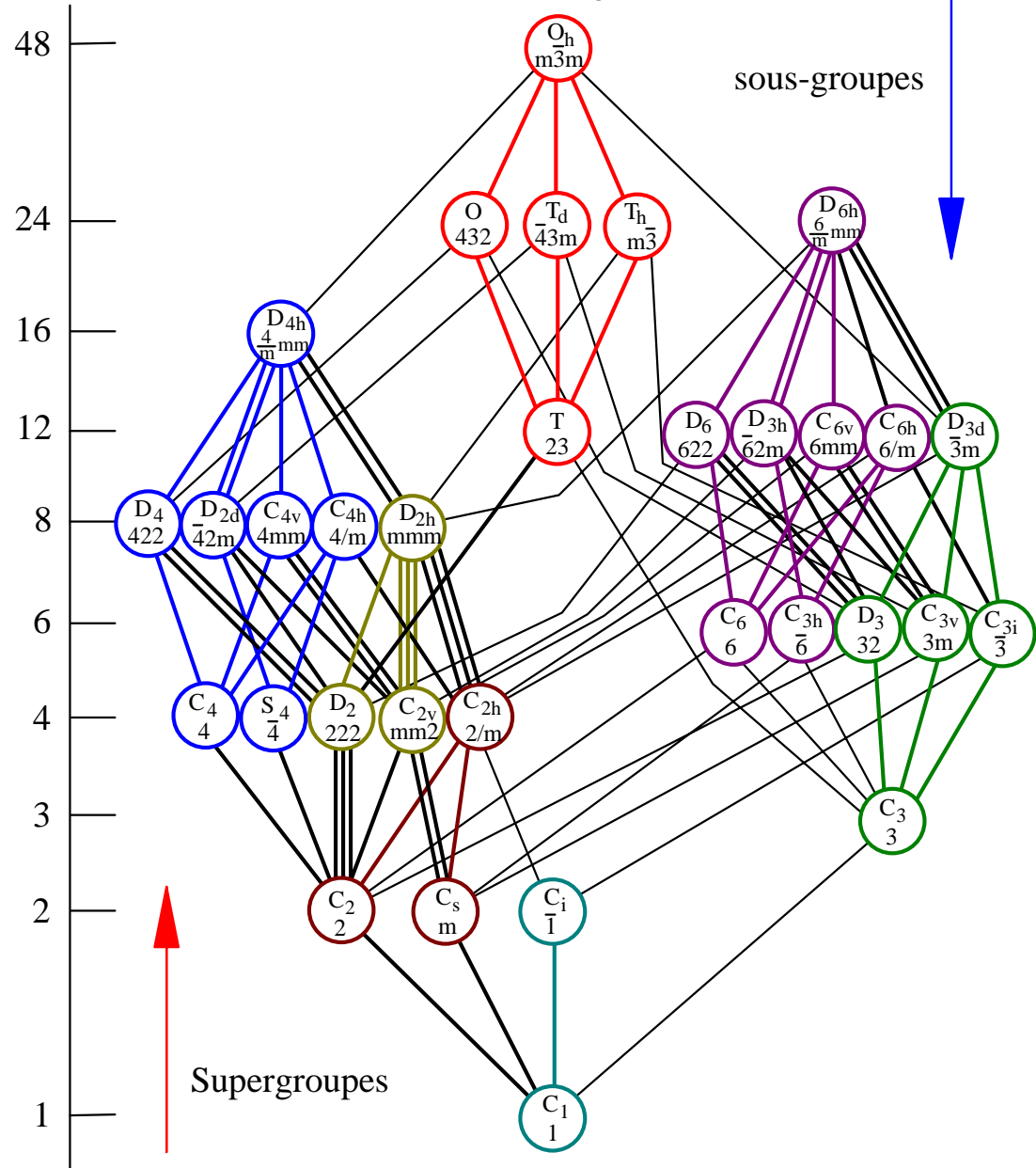
Tétragonal 68

Trigonal 25

Hexagonal 27

Cubique 36

Nombre de faces dans forme cristalline générale



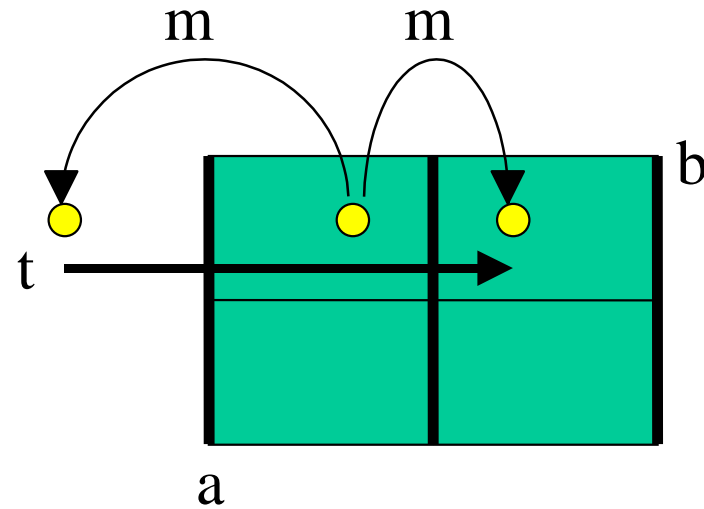
Sous-groupes normaux (gras) et conjugués (simple)

Systeme monoclinique: 13 groupes spatiaux

Groupes ponctuels	Groupes spatiaux
2/m	P2/m et C2/m P2 ₁ /m (C2 ₁ /m = C2/m) P2/c et C2/c P2 ₁ /c (C2 ₁ /c = C2/c)
m	Pm et Cm Pc et Cc
2	P2 et C2 P2 ₁ (C2 ₁ = C2)

$C2/m \equiv C2(2_1)/m(c)$ et $C2/c \equiv C2(2_1)/c(n)$

Groupe spatial $Pm \equiv P1.m.1$

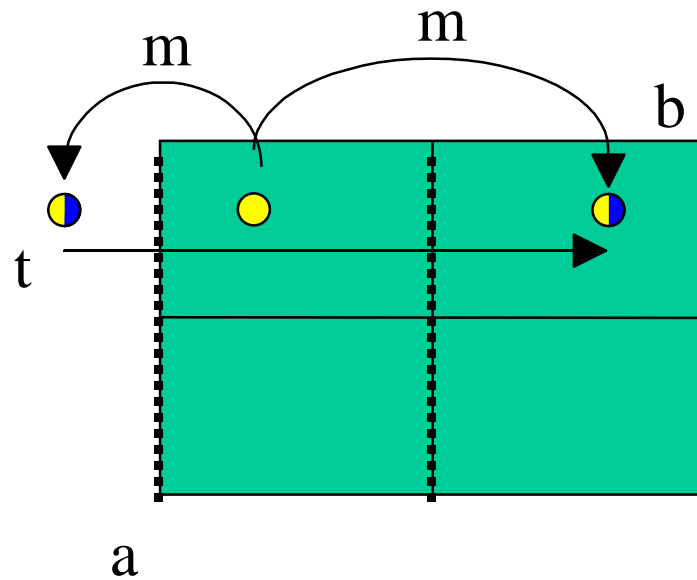


$$\text{Miroir } m \perp b \Leftrightarrow (x, y, z) \rightarrow (x, -y, z)$$

$$\text{Translation } // b : (x, -y, z) \rightarrow (x, 1-y, z)$$

$$(x, 1-y, z) \Leftrightarrow \text{Miroir } m \text{ } x, 1/2, z$$

Groupe spatial $Pc \equiv P1.c.1$

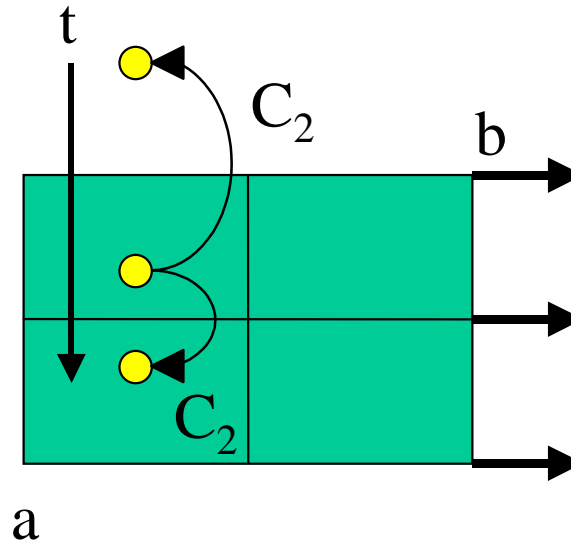


$$\text{Miroir } c \perp b \Leftrightarrow (x, y, z) \rightarrow (x, -y, 1/2+z)$$

$$\text{Translation } // b : (x, -y, z) \rightarrow (x, 1-y, 1/2+z)$$

$$(x, 1-y, 1/2+z) \Leftrightarrow \text{Miroir } c \text{ } x, 1/2, z$$

Groupe spatial P2 \equiv P1.2.1

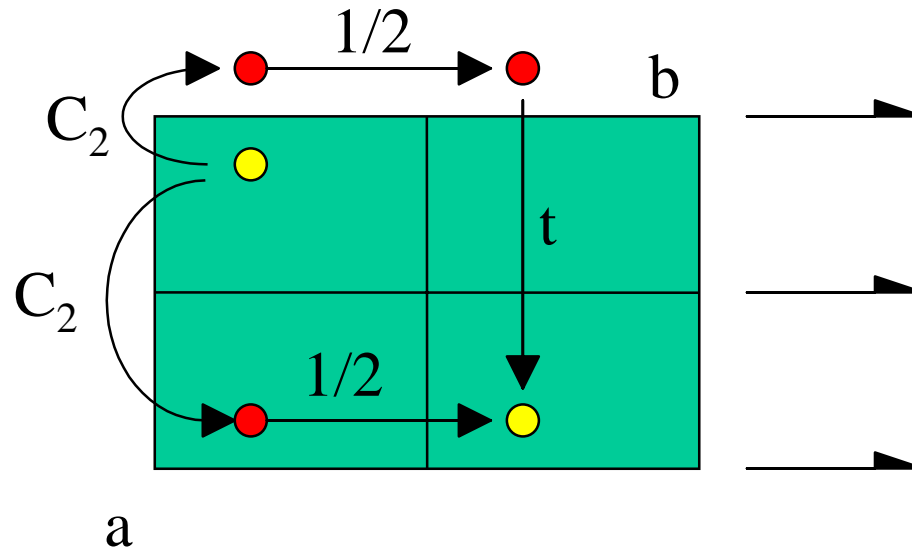


$$\text{Axe 2 // } b \Leftrightarrow (x, y, z) \rightarrow (-x, y, -z)$$

$$\text{Translation // } a : (-x, y, -z) \rightarrow (1-x, y, -z)$$

$$(1-x, y, -z) \Leftrightarrow \text{Axe 2 } 1/2, y, 0$$

Groupe spatial $P2_1 \equiv P1.2_1.1$

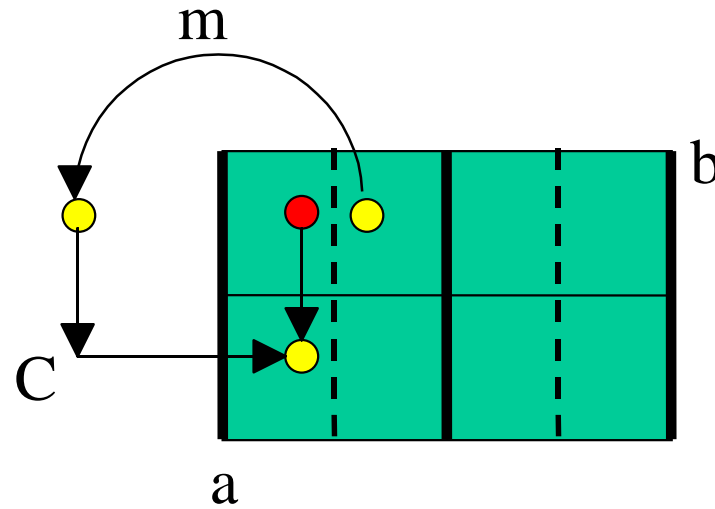


$$\text{Axe } 2_1 // b \Leftrightarrow (x, y, z) \rightarrow (-x, 1/2+y, -z)$$

$$\text{Translation // a : } (-x, 1/2+y, -z) \rightarrow (1-x, 1/2+y, -z)$$

$$(1-x, 1/2+y, -z) \Leftrightarrow \text{Axe } 2_1 \quad 1/2, y, 0$$

Groupe spatial C_m ou $C_a \equiv C1.m(a).1$

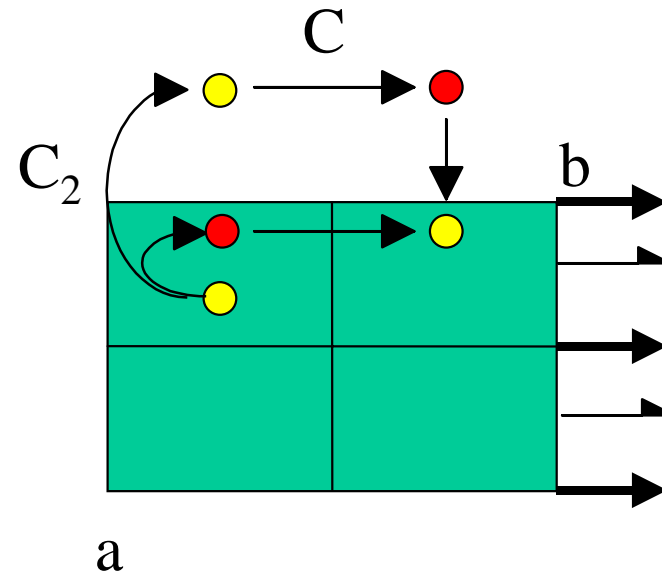


$$\text{Miroir } m \perp b \Leftrightarrow (x, y, z) \rightarrow (x, -y, z)$$

$$\text{Centrage } c : (x, -y, z) \rightarrow (1/2+x, 1/2-y, z)$$

$$(1/2+x, 1/2-y, z) \Leftrightarrow \text{Miroir } a \text{ } x, 1/4, z$$

Groupe spatial C2 ou $C2_1 \equiv C1.2(2_1).1$

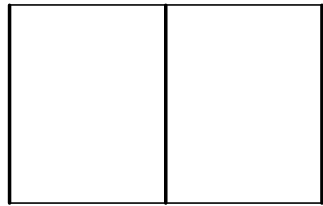


Axe 2 // b $\Leftrightarrow (x, y, z) \rightarrow (-x, y, -z)$

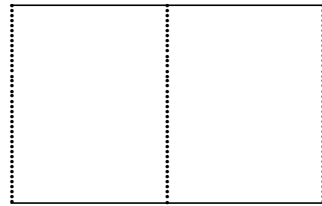
Centrage C : $(1/2-x, 1/2+y, -z) \rightarrow (1/2-x, 1/2+y, -z)$

$(1/2-x, 1/2+y, -z) \Leftrightarrow$ Axe 2_1 $1/4, y, 0$

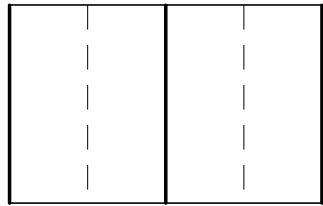
Groupes spatiaux monocliniques projetés sur x,y,0



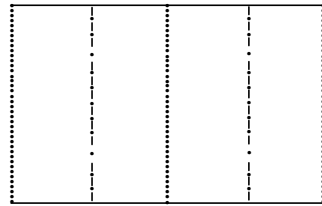
Pm



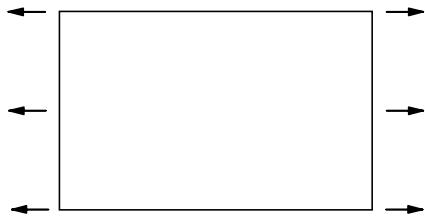
Pc



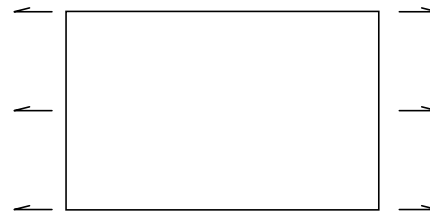
Cm



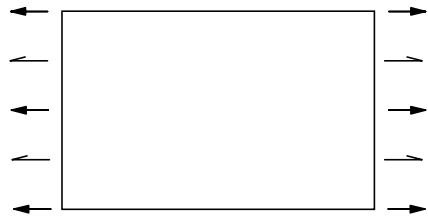
Cc



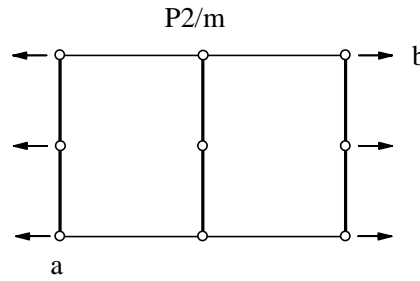
P2



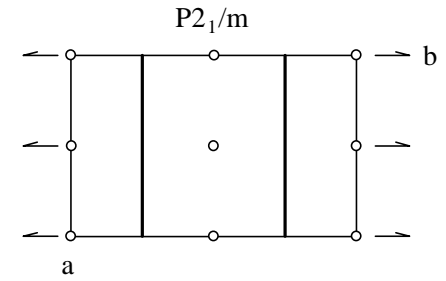
P2₁



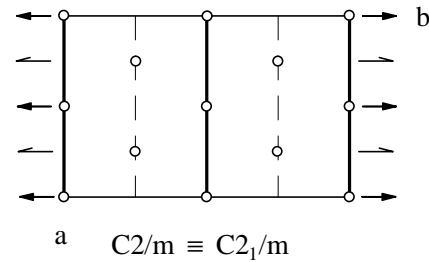
C2 ≡ C2₁



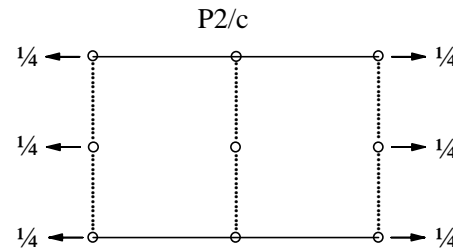
P2/m



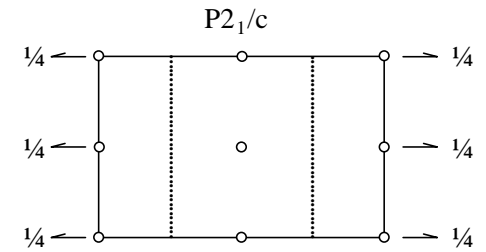
P2₁/m



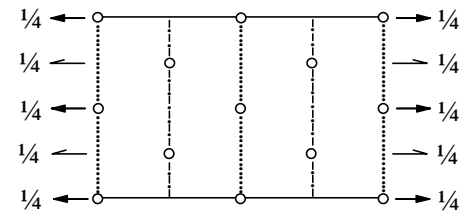
C2/m ≡ C2₁/m



P2/c

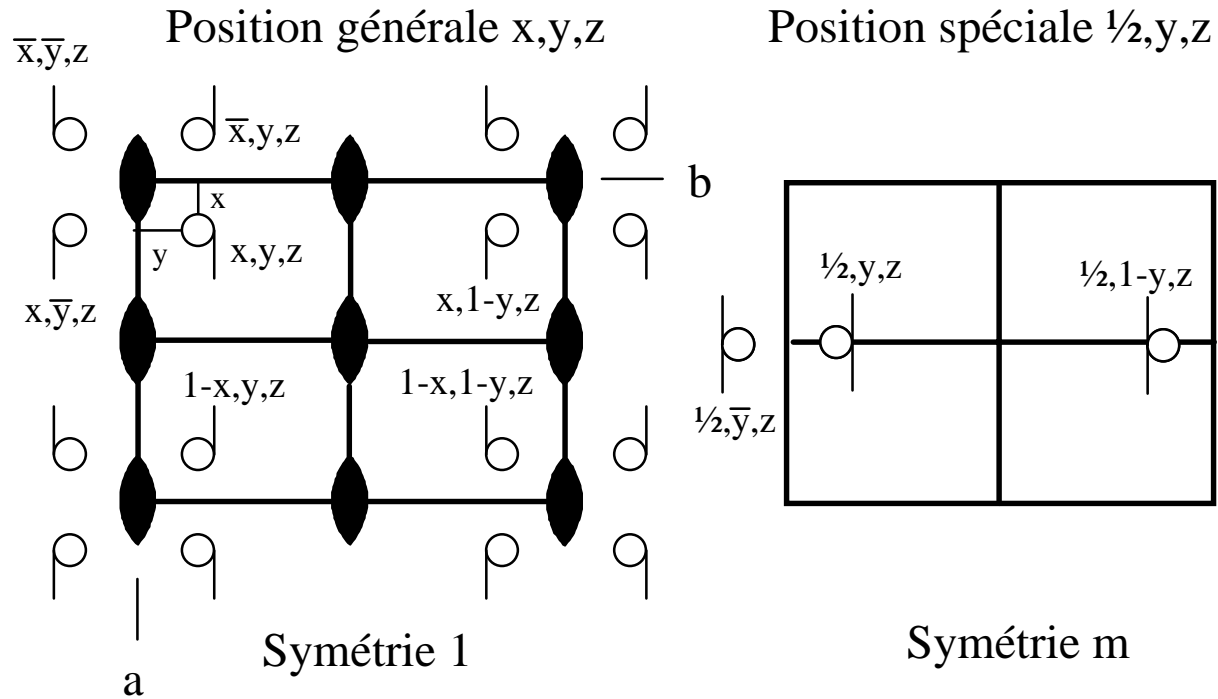


P2₁/c

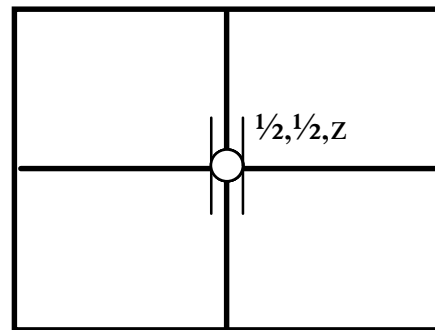


C2/c ≡ C2₁/c

Propriétés du groupe spatial Pmm2



Position spéciale $1/2,1/2,z$



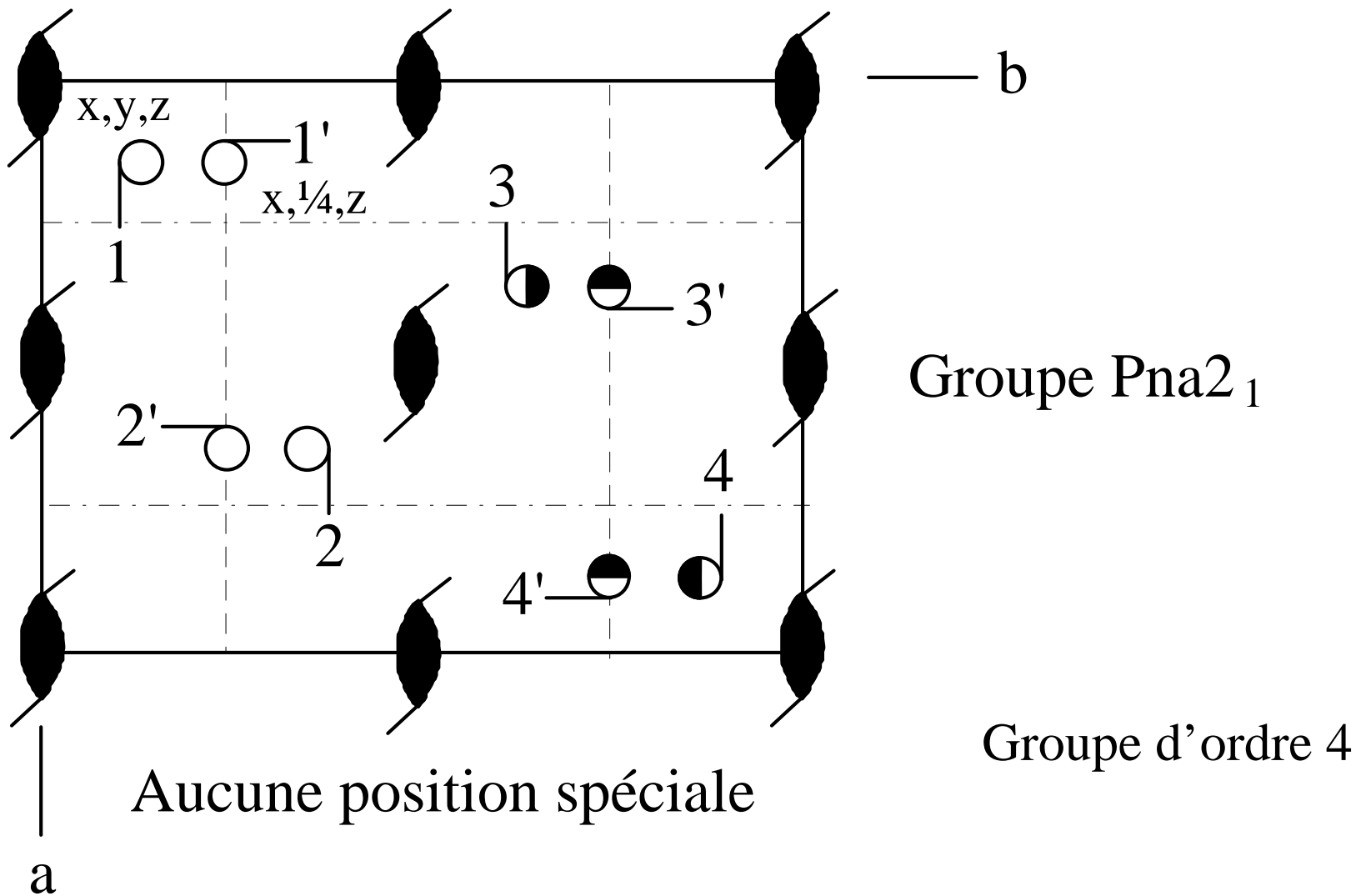
Symétrie mm2

Multiplicité du groupe =
nombre de points équivalents
dans la maille élémentaire

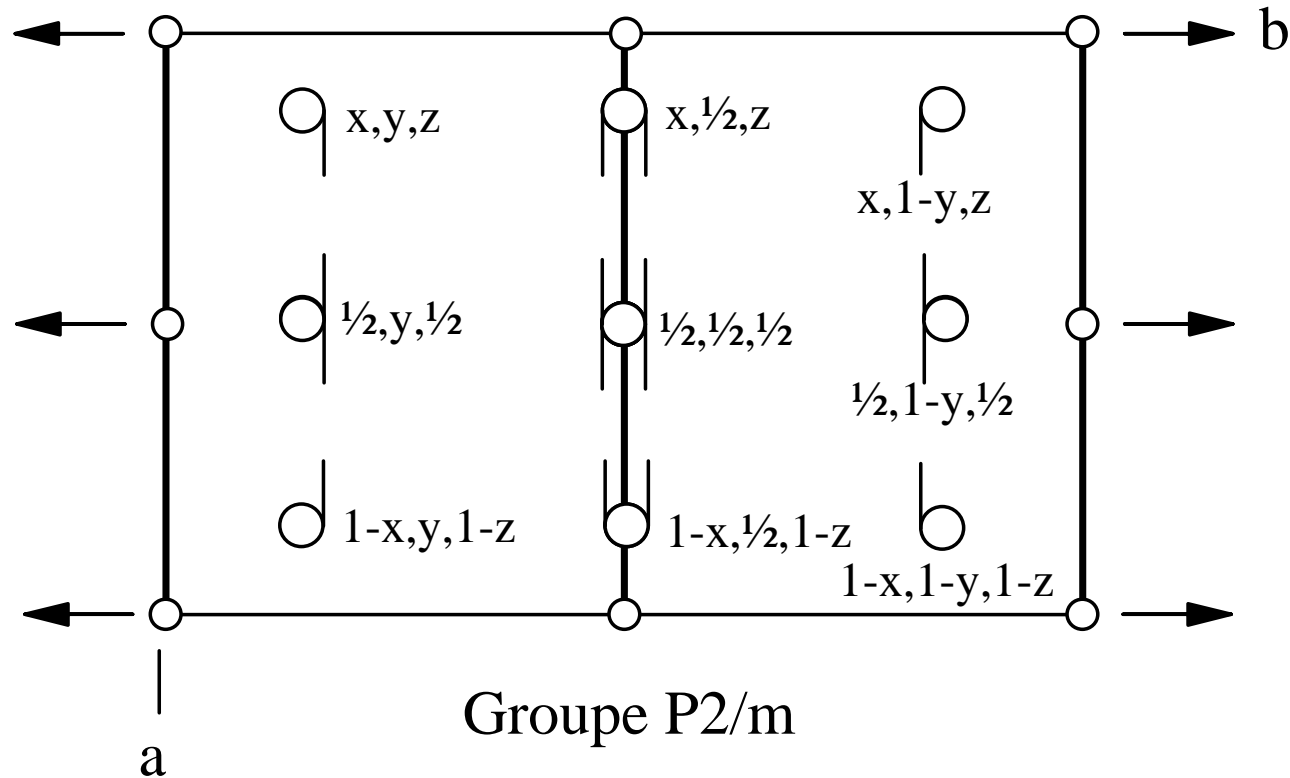
Pmm2 groupe d'ordre 4

Axes hélicoïdaux et miroirs translatoires

ne font pas varier la multiplicité d'un site



Les centres de symétrie sont des positions spéciales
sans degré de liberté



Maille asymétrique pour les groupes P2/m ou Pmm2

$$0 \leq x \leq 1/2$$

$$0 \leq y \leq 1/2$$

$$0 \leq z \leq 1$$

$$V_{\text{asym}} = 1/4 V_{\text{maille}}$$

→ Maille asymétrique \equiv plus petit volume à partir duquel la maille complète peut être reconstruite en appliquant toutes les opérations de symétrie.

$$V_{asym} = \frac{V_{maille}}{\text{Multiplicité du groupe}}$$

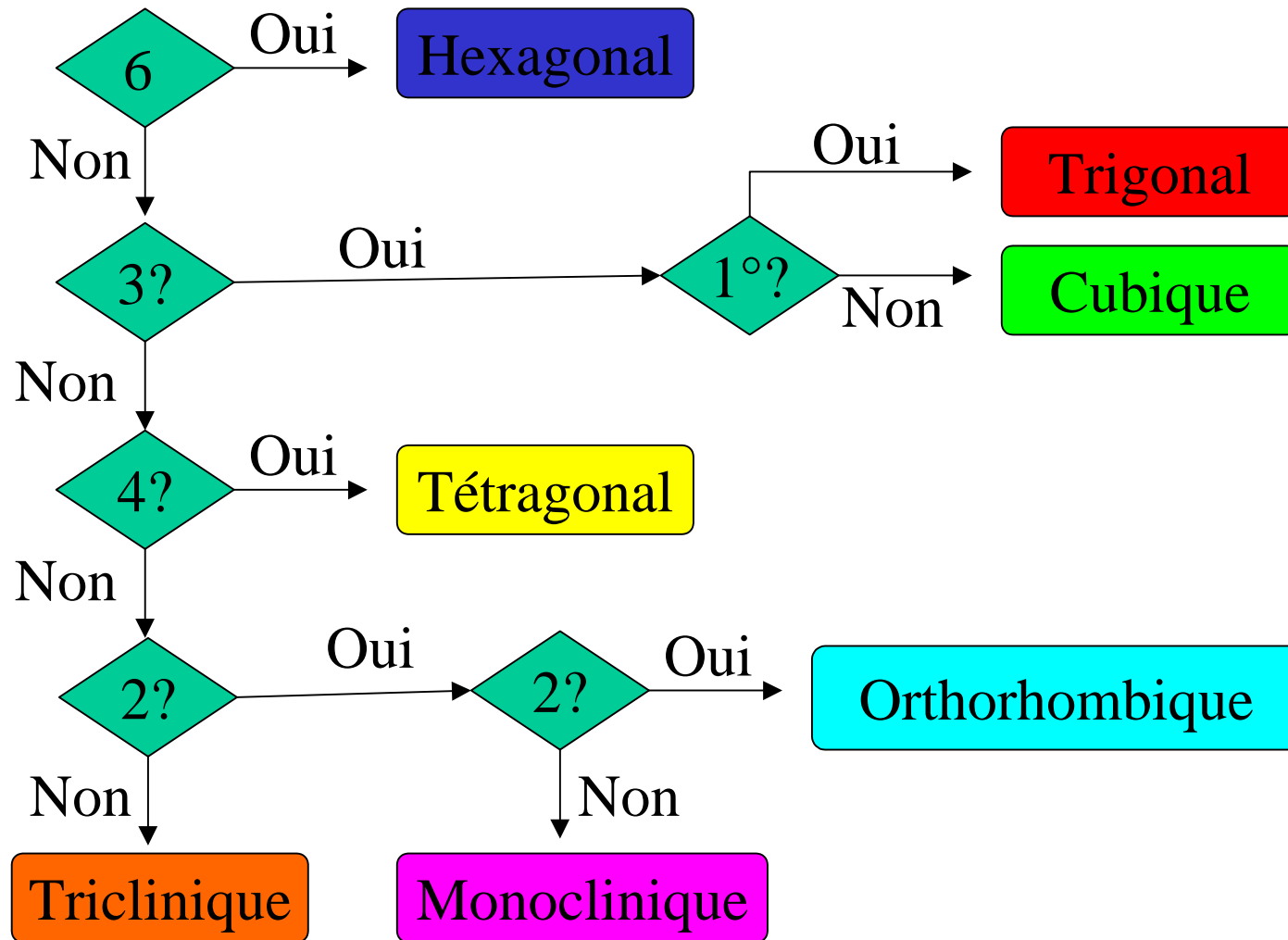
→ La maille asymétrique contient toutes les informations nécessaires à la description de la structure cristalline

→ Maille asymétrique du groupe $P4_2/mnm$

$$\begin{array}{l} \text{Multiplicité} = 4 \times 2 \times 2 = 16 \\ 0 \leq x \leq 1/2 \quad 0 \leq y \leq 1/2 \quad 0 \leq z \leq 1/2 \quad x \leq y \\ V_{asym} = V_{maille}/16 \end{array}$$

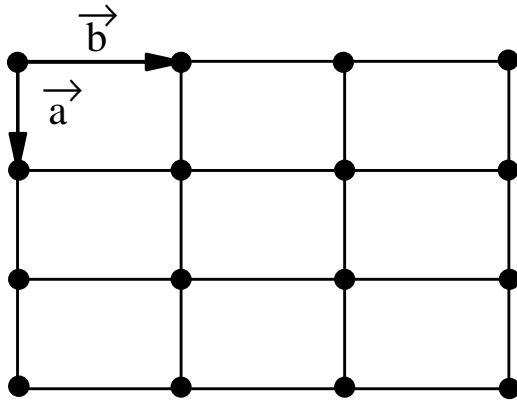
Reconnaissance du système cristallin à partir du symbole spatial

$(a, b, c, d, n, m) \rightarrow 2$ $(-N, N_k) \rightarrow N$ enlever 1^o lettre et tout /x

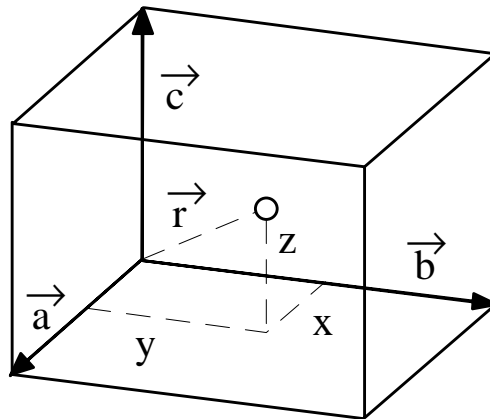
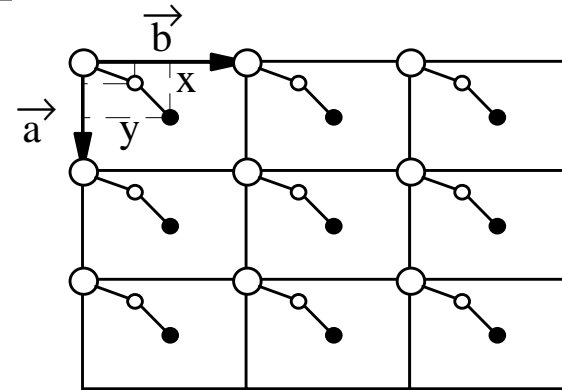
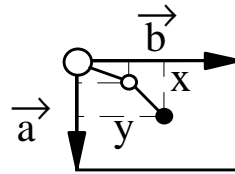


Notion de structure cristalline

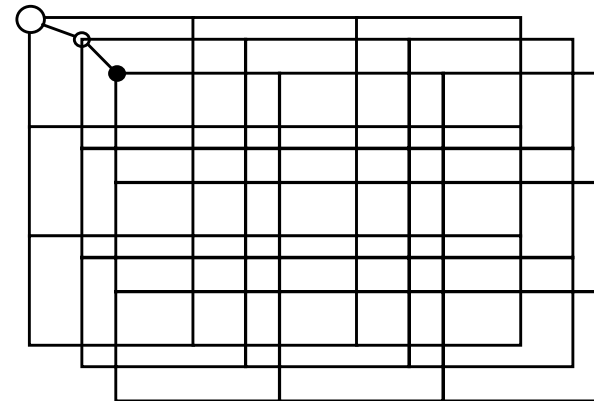
Réseau



+ Base Atomique = Structure cristalline



Coordonnées atomiques

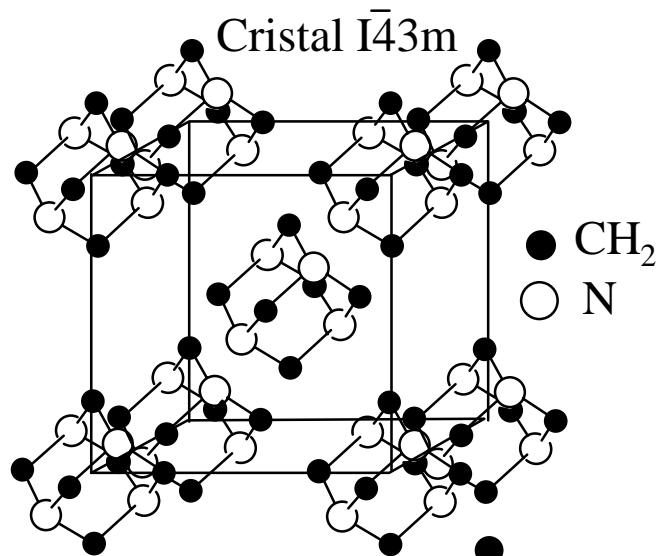


Réseaux congruents

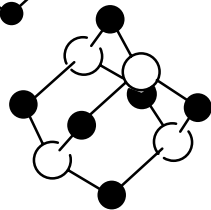
Symétrie ponctuelles et symétrie cristalline

Liaisons fortes \Rightarrow symétries ponctuelles

Hexaméthylène tétramine $C_6H_{12}N_4$



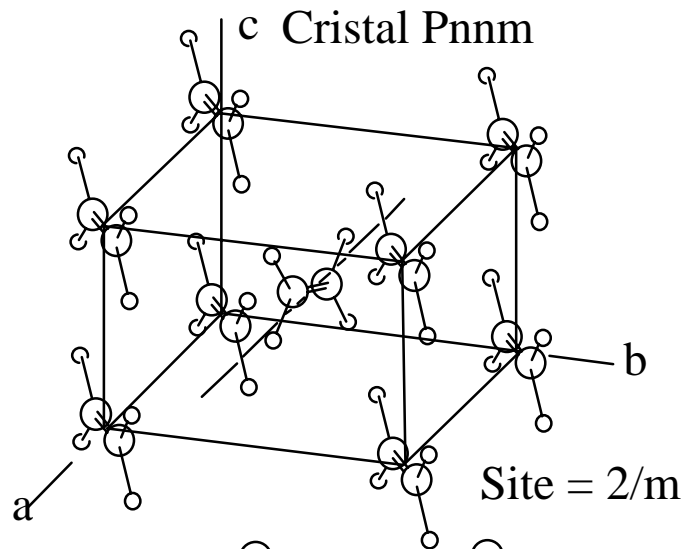
Molécule: $\bar{4}3m$



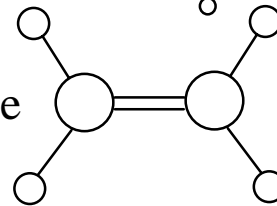
C_6H_6 ($6/mmm$) \rightarrow $Pbca$

C_{60} ($m\bar{3}5$) \rightarrow $Pa\bar{3}$

Éthylène C_2H_4

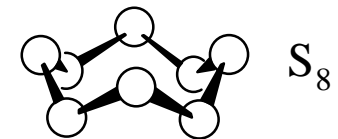
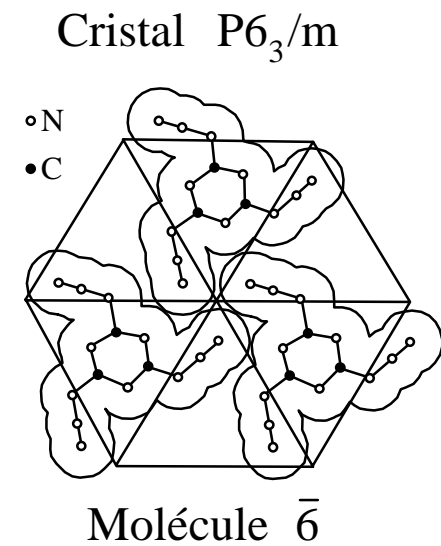


Molécule mmm



S_8 ($\bar{8}2m$) \rightarrow $Fddd$ et $P2/c$

Acide triazidecyanurique C_3N_{12}



Les 12 groupes d'espace Φ les plus fréquemment rencontrés en chimie

Φ	Inorganiques	Organiques	Toutes structures
$C_1^1 - P\bar{1}$	1%	5%	3%
$C_2^2 - P2_1$	-	8%	3%
$C_{2h}^5 - P2_1 / c$	5%	26%	13%
$C_{2h}^6 - C2 / c$	4%	7%	5%
$D_2^4 - P2_12_12_1$	-	13%	5%
$D_{2h}^{15} - Pbca$	-	3%	1%
$D_{2h}^{16} - Pnma$	7%	-	5%
$D_{3d}^5 - R\bar{3}m$	4%	-	2%
$D_{6h}^4 - P6_3 / mmc$	4%	-	3%
$O_h^1 - Pm\bar{3}m$	4%	-	3%
$O_h^5 - Fm\bar{3}m$	9%	-	6%
$O_h^7 - Fd\bar{3}m$	5%	-	3%

Centre d'inversion présent dans 74% des composés
(inorg = 82% et org = 60%)