

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA

FACULTE DES SCIENCES  
DEPARTEMENT PHYSIQUE N° :  
Ph / MAT / 19 / 2020



DOMAINE : Sciences de la matière  
FILIERE : Physique  
OPTION : Physique des Matériaux

Mémoire présenté pour l'obtention  
Du diplôme de Master Académique

Par: LOUBADI Souaad

Intitulé

**Dénombrement des groupes spatiaux issus de  
la classe  $mm2$  dans le réseau simple du  
système orthorhombique**

Soutenu le 25/09 /2020 devant le jury composé de:

BAAZIZ Hakim	Enseignant	Université de M'sila	Président
LATELLI H'mida	Enseignant	Université de M'sila	Rapporteur
ASSAOUS Boubaker	Enseignant	Université de M'sila	Examineur

Année universitaire : 2019/2020

# **Remerciements**

*Tout d'abord, je tiens à remercier ALLAH qui m'a donné la force de faire ce modeste travail.*

*Je suis très heureuse de témoigner de ma profonde estime à mon encadreur Monsieur H. Latelli, je lui suis très reconnaissante de m'avoir fait bénéficier de ses compétences scientifiques et d'avoir proposer et diriger ce travail.*

*Je remercie très sincèrement Monsieur H. Baâziz professeur de physique à l'Université Mohamed Boudiaf-M'sila, pour m'avoir fait l'honneur d'accepter de présider le jury de ce mémoire.*

*Je suis très reconnaissante à Monsieur B. Assaous, Université Mohamed Boudiaf-M'sila, d'avoir accepté d'examiner ce travail et de m'en honorer par sa présence.*

*Je tiens à exprimer tous mes respects à mes parents, mes sœurs et mes frères qui m'ont toujours encouragé.*

*Mes remerciements vont également à tous les professeurs du département de physique.*

*Je voulais également remercier tous les étudiants de ma promotion en leurs souhaitant bon courage.*

*Je ne saurais aussi oublier de citer mes amis et mes collègues, ainsi que tous ceux qui ont participé de loin ou de près à l'élaboration de ce mémoire.*

**S. Loubadi**

# *Dédicace*

*En signe de respect et de reconnaissance, je dédie ce modeste  
travail à :*

*Ames parents les plus chers au monde qui m'ont tout donné  
encouragement, soutiens et surtout amour, que Dieu le tout  
puissant les protègent.*

*Ainsi qu'à toute ma belle famille.*

*A mes très chères  
sœurs. A mes très chers  
frères.*

*A mon très cher fiancé Hamza.*

*Ames neveux et nièces chacun à son non.*

*Et à tous mes amis de près ou de loin.*

*Loubadi Souaad*

# Sommaire

## Introduction

## Chapitre I : Généralités

I. Introduction .....	01
1. Rappels.....	01
2. Systèmes cristallins.....	02
II. Eléments et opérations de symétrie .....	03
1. Définition de la symétrie .....	03
2. Eléments de symétrie .....	03
3. Les 32 classes de symétrie d'orientations .....	09
4. Combinaison des éléments de symétrie de la classe $mm2$ .....	10

## Chapitre II : Dénombrement des modes de réseaux de Bravais

1. Recherche des modes possibles .....	11
2. Centrage de la maille orthorhombique.....	13
3. Réseau de Bravais pour les sept systèmes cristallins.....	16

## Chapitre III : Dénombrement des groupes spatiaux

1. Directions de symétrie dans le système orthorhombique .....	17
2. Dénombrement des groupes spatiaux .....	17
3. Comparaison des groupes obtenus.....	25
4. Coordonnées des positions équivalentes des groupes obtenus .....	26

<b>Conclusion générale .....</b>	<b>28</b>
----------------------------------	-----------

<b>Références bibliographiques.....</b>	<b>29</b>
---	-----------

## Introduction

---

Un cristal est un solide dont la structure microscopique est caractérisée par une répétition périodique en trois dimensions d'un motif composé d'atomes, donc il possède une structure ordonnée. L'étude de l'ordre et du désordre est la préoccupation centrale de cette science [1].

Il existe 230 groupes de recouvrement, répartis entre 32 classes de symétrie d'orientation dans 7 systèmes cristallins.

Un groupe spatial résulte de la combinaison d'un mode de réseau de Bravais avec une classe de symétrie d'orientation appartenant au même système. A chacune des 32 classes de symétrie vont donc correspondre plusieurs groupes spatiaux, pour les dénombrer on utilise la notation de Hermann et Mauguin.

Cette notation consiste à faire précéder le symbole international de la classe ponctuelle de la lettre X = P, C, I, F ou R précisant le mode de réseau de Bravais.

Le symbole du groupe spatial prendra, dans cette notation, la forme : Xclasse

Le but de ce mémoire est d'aboutir à une meilleure compréhension des méthodes de dénombrement des groupes spatiaux et de pouvoir dénombrer les groupes spatiaux issus de la combinaison d'un mode de réseau de Bravais et d'un groupe ponctuel de symétrie en utilisant une méthode géométrique simple [2– 5], mais qui demande la compréhension intense de tous les outils de la cristallographie géométrique.

Après cette brève introduction, le mémoire s'organise autour de trois chapitres :

Dans le premier chapitre, les notions de base concernant le cristal, à savoir, le réseau ponctuel, le motif et la maille sont abordées. Par la suite, les éléments de symétrie avec leurs différentes représentation : stéréographique, matricielle sont présentés. Ces derniers permettent de vérifier, à partir de la combinaison des éléments principaux, l'existence d'autres éléments de symétrie.

L'acquisition de ces lois et théorèmes incontournables en cristallographie de base, permettront sans doute la compréhension du restant du mémoire.

Le chapitre deux se propose d'étudier le dénombrement des modes de réseaux de Bravais du système orthorhombique en considérant, à priori, tous les modes : P, A, B, C, I et F. Puis, nous procédons par élimination en démontrant que certains modes ne doivent pas existés.

Enfin, au chapitre 3, après avoir rappelé les directions de symétrie du système orthorhombique, nous avons reconstruit les stéréogrammes de toutes les combinaisons possibles (quatre modes et une classe  $mm2$ ) qui sont, à priori, au nombre de 72 combinaisons.

Pour vérifier analytiquement l'existence d'un élément de symétrie, nous avons utilisé les règles d'identification de la partie rotatoire de l'opération [6,7].

Par comparaison des représentations stéréographiques, le groupe spatial résulte de la combinaison d'un mode de réseau avec la classe de symétrie d'orientation appartenant à ce système. Dans notre cas, nous avons choisi la classe  $mm2$ .

## I. Introduction

### 1. Rappel

a) **Réseau ponctuel** : Un réseau ponctuel (réseau de points) est une répartition périodique de points. Il est uni- bi ou tridimensionnel.

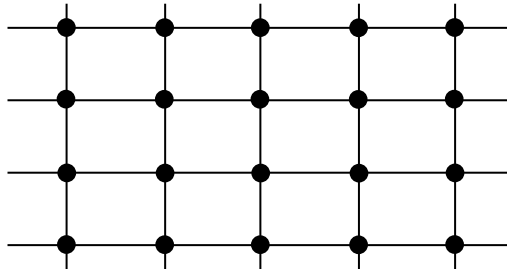


Figure I.1 : Réseau de points ou réseau ponctuel.

b) **Motif** : Le motif est un assemblage, a priori quelconque, d'atomes ou d'ions. Ce peut être un simple atome (cas fréquent pour les métaux) ou un ensemble de molécules ou d'ions.

c) **Cristal** : Un cristal est constitué de la répétition tridimensionnelle périodique d'un motif atomique

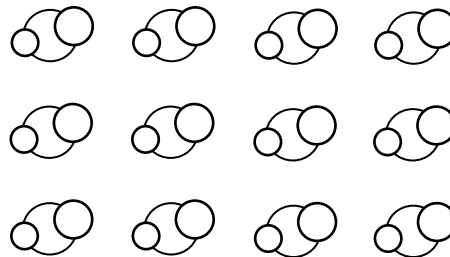


Figure I.2 : Réseau + motif = cristal.

d) **Maille**: On appelle maille la structure géométrique la plus simple qui par translation dans les trois directions de l'espace, permet de générer le réseau dans son ensemble.

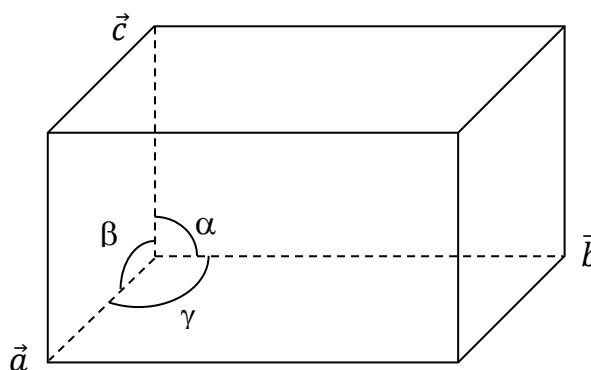
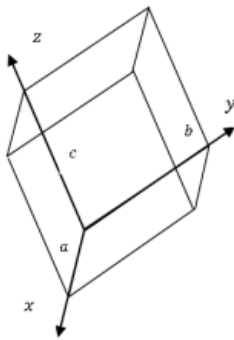


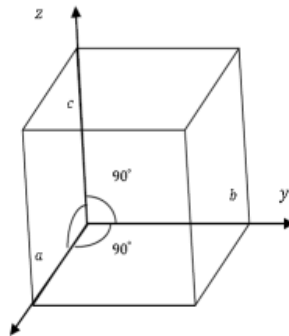
Figure I.3 : Maille élémentaire.

2. Systèmes cristallins

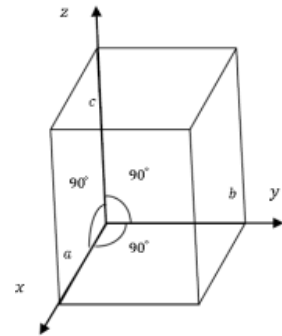
Les cristaux se classent en systèmes cristallins suivant la symétrie de leurs faces, définie par des axes de symétrie autour desquels le cristal peut tourner en présentant toujours le même aspect. Ceci conduit à sept (7) systèmes cristallins tridimensionnels. Ce sont les sept systèmes cristallins : le triclinique, le monoclinique, l'orthorhombique, le quadratique, le rhomboédrique, l'hexagonal et le cubique.



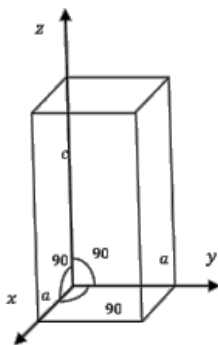
Triclinique



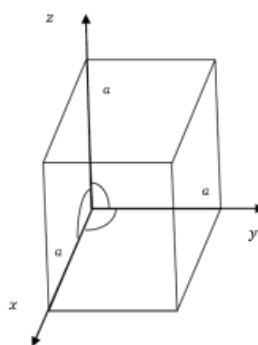
Monoclinique



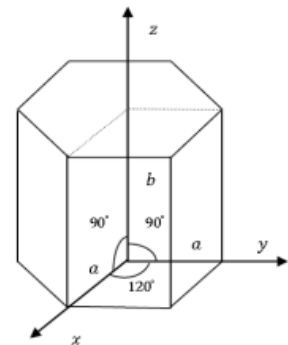
Orthorhombique



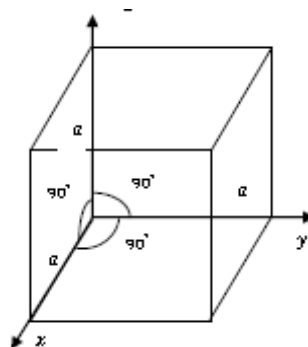
Quadratique



Rhomboédrique



Hexagonal



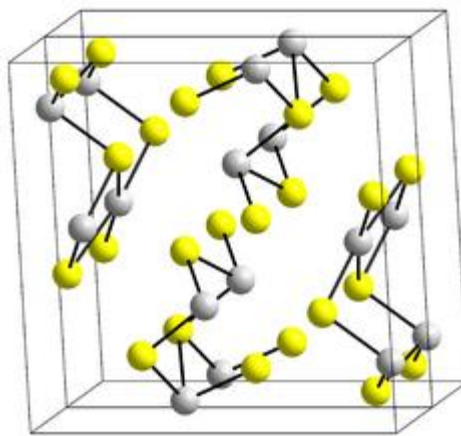
Cubique

Figure I.4 : Les sept systèmes cristallins tridimensionnels.

On s'intéressera, dans cette étude, uniquement au système orthorhombique dont les caractéristiques sont :

- Forme de la maille élémentaire : Prisme droit à base rectangle,
- Conditions sur les paramètres :  $a \neq b \neq c$ ,  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- Volume de la maille :  $V = a \cdot b \cdot c$
- Les minéraux cristallisant dans ce système : soufre, stibine, aragonite, barytine, atacamite, bismuthinite, goethite, topaze, talc, etc ...

Exemple : La bismuthinite.



Structure de la bismuthinite  $\text{Bi}_2\text{S}_3$  en perspective ; en jaune les atomes de soufre, en gris ceux de bismuth dans la maille ;  $a = 11.13 \text{ \AA}$ ,  $b = 11.27 \text{ \AA}$ ,  $c = 3.97 \text{ \AA}$  [8].

Groupe d'espace :  $Pbnm$ .

## II. Eléments et opérations de symétrie

### 1. Définition de la symétrie

Une figure géométrique est dite symétrique s'il est possible de la superposer à elle-même par une opération de symétrie.

### 2. Eléments de symétrie

Deux figures sont dites mutuellement symétriques si on peut les faire coïncider par une opération géométrique (transformation géométrique). Cet opérateur géométrique est appelé "élément de symétrie". Les éléments de symétrie connus sont :

- Axes directs ( $n$ ) : 1, 2, 3, 4, 6 (Figure I.5)

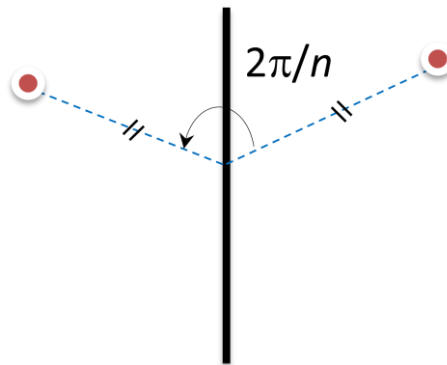


Figure I.5 : Effet d'un axe direct d'ordre  $n$ .

- Axes inverses ( $\bar{n}$ ):  $\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$  (Figure I.6)

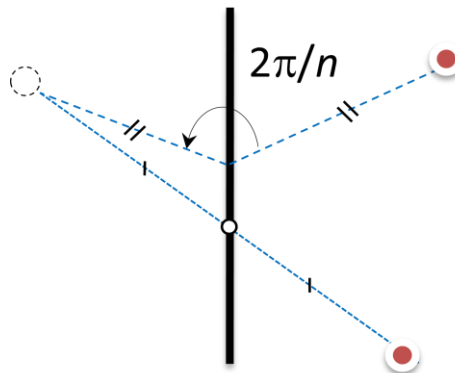


Figure I.6 : Effet d'un axe inverse d'ordre  $n$ .

- Axes hélicoïdaux ( $n_m$ ):  $n_m = \left( n, \frac{m}{n} \vec{t} \right)$ , figure I.7.

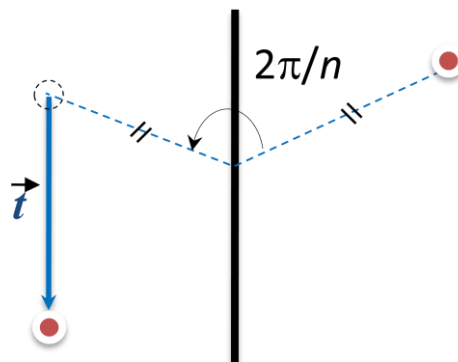


Figure I.7 : Effet d'un hélicoïdal d'ordre  $n$ .

Plans de glissement( $\mathbf{p}$ ):  $\mathbf{p} = (\mathbf{m}, \vec{\mathbf{t}})$ , figure I.8.

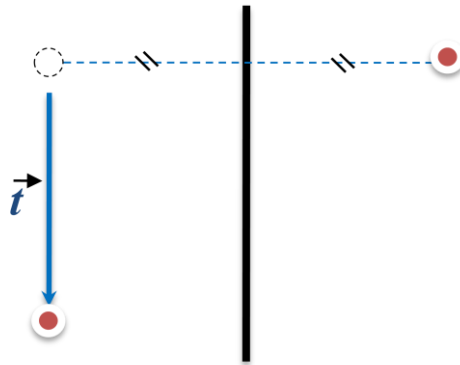


Figure I.8 : Effet d'un plan de glissement.

**a) Représentation graphique des éléments de symétrie**

Un axe d'ordre  $n$  est le plus souvent orienté perpendiculairement au plan de la figure excepté l'axe d'ordre qui est parfois dans le plan de la figure. la nomination ainsi que les symboles des éléments de symétrie qui peuvent intervenir dans la classe  $mm2$  sont regroupés dans le tableau ci-dessous :

Axe	Nomination	Symbole graphique	Interpretation
2	Axe binaire direct	●	Rotation de $\pi$ autour de $\vec{c}$
$2_1$	Axe binaire hélicoïdal	●	Rotation de $\pi$ autour de $\vec{c}$ suivie d'une translation de $\frac{1}{2}\vec{c}$
$m$	Plan miroir	—————	Réflexion par rapport à $m$
$a$		- - - - -	Réflexion par rapport à $m$ , suivie d'une translation de $\frac{1}{2}\vec{a}$
$b$	Plans de glissement	- · - · - ·	Réflexion par rapport à $m$ , suivie d'une translation de $\frac{1}{2}\vec{b}$
$c$		.....	Réflexion par rapport à $m$ , suivie d'une translation de $\frac{1}{2}\vec{c}$
$n$		- · - · - ·	Réflexion par rapport à $m$ , suivie d'une translation de $\frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{c})$ ou $\frac{1}{2}(\vec{b} + \vec{c})$

Tableau I.1 : Représentation graphique de quelques éléments de symétrie.

**b) Représentation stéréographique des éléments de symétrie de la classe mm2**

Lorsqu' il n'existe qu'un seul axe de rotation, direct ou inverse, il est commode de choisir l'axe des pôles selon cette direction. Les figures ci – dessous, donnent la projection stéréographique des positions équivalentes obtenues en appliquant les différents axes de symétrie de la classe mm2.

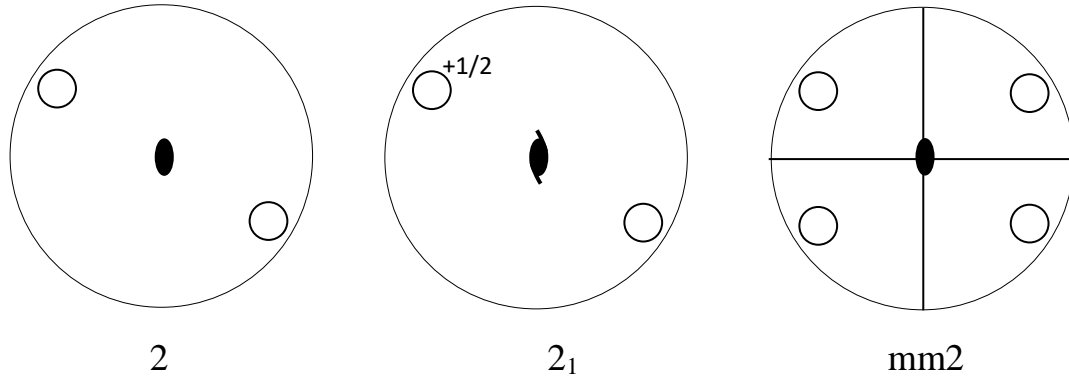


Figure I.9 : Représentation stéréographique des éléments de symétrie de la classe mm2.

**c) Représentation matricielle et positions équivalentes des éléments de symétrie de la classe mm2**

- Opération 2 : 2 //  $\vec{c}$

$$[2]_c = \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [2] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ z \end{bmatrix}$$

$$x, y, z \xrightarrow{2 // \vec{c}} \bar{x}, \bar{y}, z$$

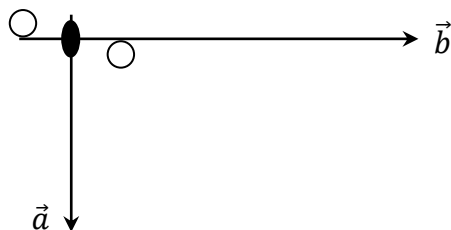
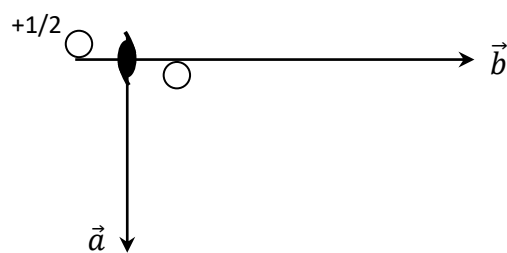


Figure I.10 : Effet d'un axe 2 selon  $\vec{c}$ .

- Opération  $2_1 : 2_1 // \vec{c}$

$$[2_1]_c \rightarrow \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{bmatrix}$$

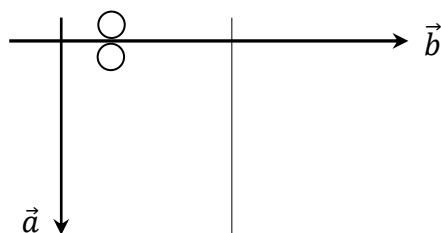
$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{2}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ 1/2 + z \end{bmatrix}$$

Figure I.11 : Effet d'un axe  $2_1$  selon  $\vec{c}$ .

- Opération  $m = (m, \vec{0}) : b$  dans le plan  $(\vec{b}, \vec{c})$

$$[m]_{bc} \rightarrow \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{m}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

Figure I.12 : Effet d'un miroir  $m$  dans le plan  $(\vec{b}, \vec{c})$ .

- Opération  $a = (m, 1/2 \vec{a}) : a$  dans le plan  $(\vec{a}, \vec{c})$

$$[a]_{ac} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1/2 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{m}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1/2 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1/2 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/2 + x \\ \bar{y} \\ z \end{bmatrix}$$

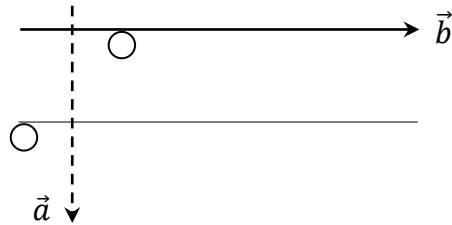


Figure I.13 : Effet d'un plan  $a$  dans le plan  $(\vec{a}, \vec{c})$ .

- **Opération  $b = (m, 1/2 \vec{b})$  :  $b$  dans le plan  $(\vec{b}, \vec{c})$**

$$[b]_{bc} \rightarrow \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{m}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ 1/2 + y \\ z \end{bmatrix}$$

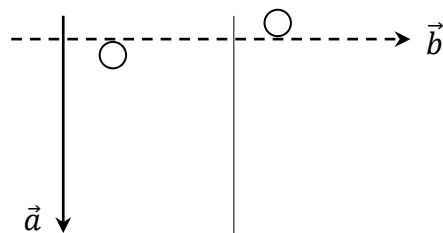
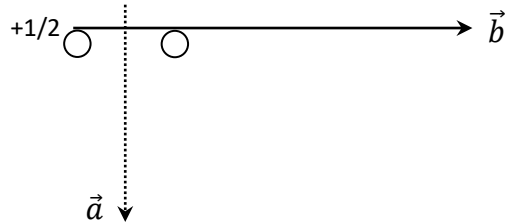


Figure I.14 : Effet d'un plan  $b$  dans le plan  $(\vec{b}, \vec{c})$ .

- **Opération  $c = (m, 1/2 \vec{c})$  :  $c$  dans le plan  $(\vec{a}, \vec{c})$**

$$[c]_{ac} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{bmatrix}$$

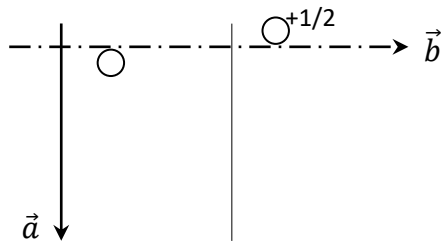
$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{m}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ \bar{y} \\ 1/2 + z \end{bmatrix}$$

Figure I.15 : Effet d'un plan  $c$  dans le plan  $(\vec{a}, \vec{c})$ .

- **Opération  $n = (m, \frac{1}{2}\vec{b} + \frac{1}{2}\vec{c})$  :  $n$  dans le plan  $(\vec{b}, \vec{c})$**

$$[n]_{bc} \rightarrow \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{m}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ 1/2 + y \\ 1/2 + z \end{bmatrix}$$

Figure I.16 : Effet d'un plan  $n$  dans le plan  $(\vec{b}, \vec{c})$ .

### 3. Les 32 classes de symétrie d'orientations

Les différentes associations possibles entre les éléments de symétrie ponctuelle, conduisent à l'établissement de 32 groupes ponctuels de symétrie. Répartis sur les 7 systèmes cristallins comme suit :

Système	Groupes ponctuels (classes cristallines)
Triclinique	$1, \bar{1}$
Monoclinique	$2, m, 2/m$
Orthorhombique	$222, 2mm, mmm$
Rhomboédrique	$3, \bar{3}, 32, 3m, 3m$
Quadratique	$4, \bar{4}, 4/m, 4mm, 422, \bar{4}2m, 4/mmm$
Héxagonal	$6, \bar{6}, 6/m, 6mm, 622, \bar{6}2m, 6/mmm$
Cubique	$23, m\bar{3}, 432, \bar{4}3m, m\bar{3}m$

Tableau I.2 : Les 32 classes cristallines dans le système.

#### 4. Combinaison des éléments de symétrie de la classe $mm2$

Effectuons le produit  $[m]_{ac} \times [m]_{bc}$ :

$$[m]_{ac} \times [m]_{bc} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

La matrice résultante représente un axe direct d'ordre 2 selon la direction  $\vec{c}$ .

Si nous effectuons, maintenant, le produit  $[m]_{ac} \times [b]_{bc}$  nous obtenons la matrice :

$$\begin{aligned} [m]_{ac} \times [b]_{bc} &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 0 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Le résultat représente la matrice d'un axe hélicoïdal  $2_1$  selon la direction  $\vec{b}$ .

## II. Dénombrement des modes de réseaux de Bravais du système orthorhombique

### 1. Recherche des modes possibles

Le système orthorhombique est caractérisé par, figure II.1 :

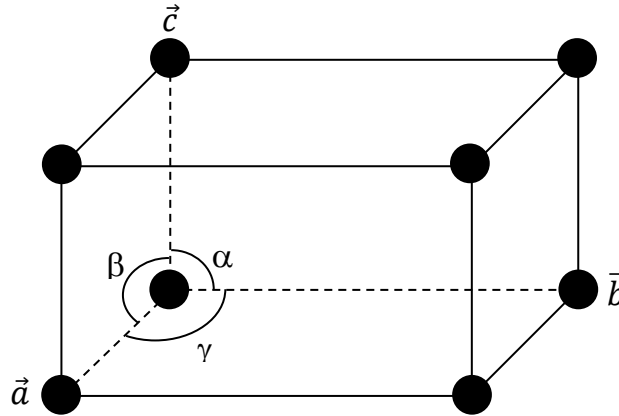


Figure II.1 : Maille du système orthorhombique,  $a \neq b \neq c$  et  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ .

Les classes de symétrie d'orientation dans ce système sont :

$$222, mm2, mmm$$

Les classes appartenant à ce système comprennent plus d'un axe d'ordre 2 ou plus d'un miroir.

Dont  $mmm$  est la classe holoèdre, c'est-à-dire, la classe qui à le plus haut degré de symétrie. On l'appelle aussi la symétrie du réseau.

Lorsque la maille élémentaire utilisée n'est pas primitive, il existe des translations de type :  $\vec{t} = x\vec{a} + y\vec{b} + z\vec{c}$ , pour lesquelles  $x, y, z$  ne sont pas entiers.

Sachant que tous les réseaux (excepté le triclinique) possèdent des miroirs passant par les nœuds du réseau.

On peut illustrer ce fait, sur la figure II.2 par un miroir ( $m$ ) dans le plan  $(\vec{a}, \vec{b})$ , par exemple :

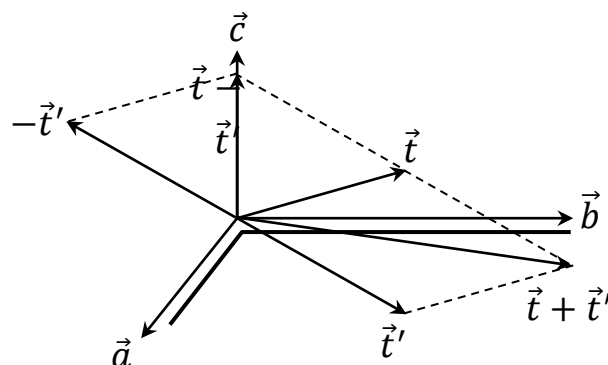


Figure II.2 : Effet d'un miroir ( $m$ ) dans le plan ( $\vec{a}, \vec{b}$ ).

Soit  $\vec{t}$  une translation simple de réseau.

$$\vec{t} = x\vec{a} + y\vec{b} + z\vec{c}$$

Le vecteur  $\vec{t}'$  est le vecteur obtenu à partir de  $\vec{t}$  par réflexion de  $m$  :

$$\vec{t}' = [m]_{xy}\vec{t} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ \bar{z} \end{bmatrix}$$

Formons :  $\vec{t} + \vec{t}'$  et  $\vec{t} - \vec{t}'$ .

$$\vec{t} + \vec{t}' = \vec{t} + [m]_{xy}\vec{t} = u\vec{a} + v\vec{b} \quad (u \text{ et } v \text{ les plus petits entiers})$$

$$\vec{t} - \vec{t}' = \vec{t} - [m]_{xy}\vec{t} = w\vec{c} \quad (w \text{ le plus petit entier})$$

Écrivons ces deux relations en notation matricielle :

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} x \\ y \\ \bar{z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2x \\ 2y \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u \\ v \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} x \\ y \\ \bar{z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 2z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ w \end{bmatrix}$$

Nous obtenons :

$$x = \frac{1}{2}u$$

$$y = \frac{1}{2}v$$

$$z = \frac{1}{2}w$$

D'où :

$$\vec{t} = \frac{1}{2}(u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c})$$

Du fait des hypothèses sur  $u$ ,  $v$  et  $w$ ,  $x$ ,  $y$  et  $z$  sont nécessairement des demi\_entiers et les seules translations possibles suivant xet y sont illustrées dans le tableau II.1.

$u$	$v$	$w$	$\vec{t}$
0	0	0	$\vec{0}$
1	0	0	$\frac{1}{2}\vec{b}$
0	1	0	$\frac{1}{2}\vec{b}$
0	0	1	$\frac{1}{2}\vec{c}$
1	1	0	$\frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b})$
1	0	1	$\frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{c})$
0	1	1	$\frac{1}{2}(\vec{b} + \vec{c})$
1	1	1	$\frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b} + \vec{c})$

Tableau II.1: Vecteurs de translation dans un réseau tridimensionnel.

Pour :  $\vec{t} = \vec{0}$ , on obtient le réseau orthorhombique simple qui corresponde au mode  $P$  ; les translations  $\frac{1}{2}\vec{a}$  ou  $\frac{1}{2}\vec{b}$  correspondent à des solutions contraires aux hypothèses de départ. La solution  $\frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b})$ ;  $\frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{c})$  ou  $\frac{1}{2}(\vec{b} + \vec{c})$  correspondent aux modes de réseau  $C$ ,  $A$ ,  $B$  respectivement. La dernière solution  $\vec{t} = \frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b} + \vec{c})$  correspond à une maille centrée  $I$ .

Dans le cas où toutes les faces sont centrées : c'est le mode  $F$ .

On distingue quatre types de mailles selon la disposition des atomes (et donc des nœuds du réseau) dans la maille tableau II.2.

Disposition des atomes dans le parallélépipède	Nom de la maille
Aux huit sommets seulement	Simple ou primitive ( $P$ )
Aux huit sommets et au centre	Centrée ( $I$ )
Aux huit sommets et au centre des faces	À faces centrées ( $F$ )
Aux huit sommets et aux centres de deux faces parallèles	À bases centrées ( $A$ , $B$ ou $C$ )

Tableau II.2: Différents types de mailles.

**2. Centrage de la maille orthorhombique et recherche des modes de réseaux de Bravais compatibles avec la symétrie du réseau ( $mmm$ )**

**Mode P** : sans centrage.

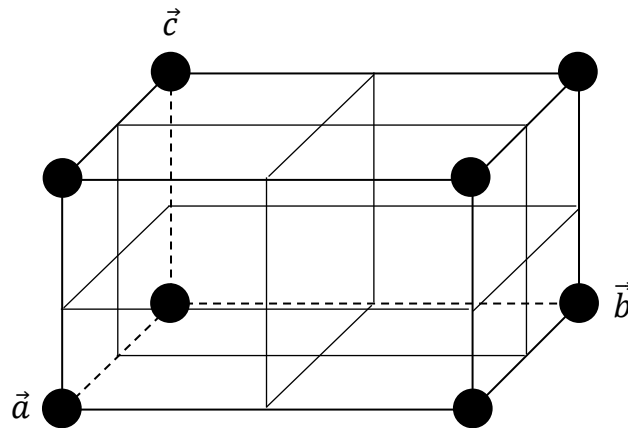


Figure II.3 : Représentation des miroirs  $mmm$ .  
Le mode P est compatible avec la symétrie du réseau.

**Mode C** : centrage des faces C.

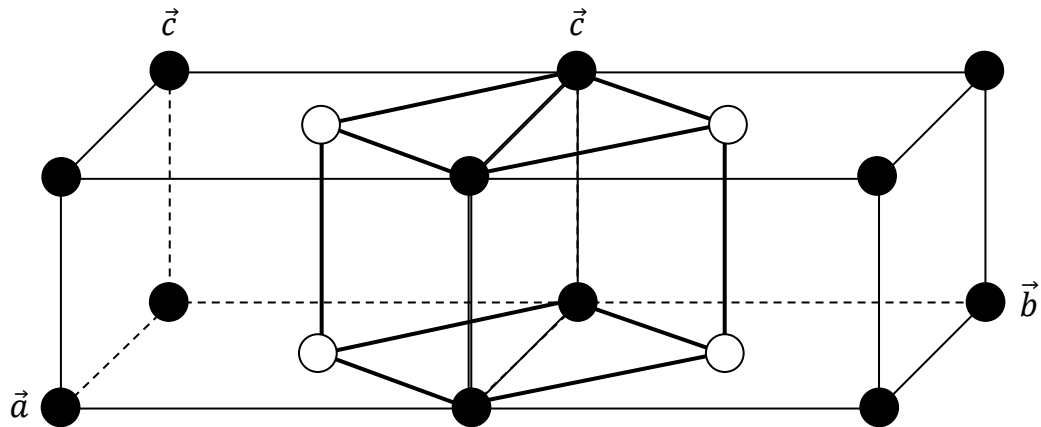


Figure II.4 : Centrage de la face C et duplication de la maille.

La nouvelle maille (en gras) primitive (mode P) n'est pas compatible avec la symétrie du réseau. En effet, les angles ne sont plus droits, on retourne alors au mode C qui est compatible avec la symétrie du réseau.

**Mode B** : centrage des faces B.

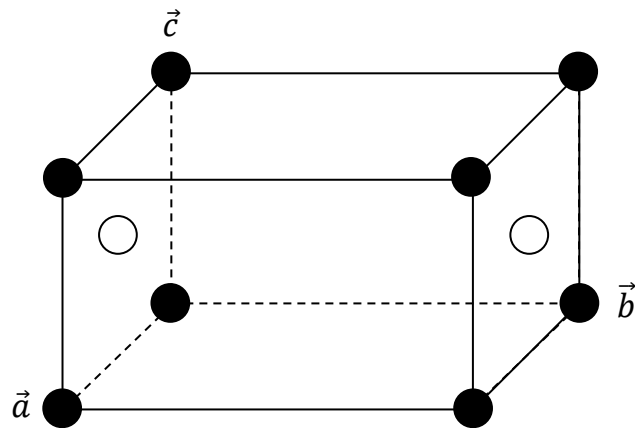


Figure II.5 : Centrage de la face B.

En échangeant les axes  $\vec{b}$  et  $\vec{c}$ , le mode B se transforme en mode C.

**Mode A** : Il en est de même pour le mode A, en échangeant les axes  $\vec{a}$  et  $\vec{c}$ , le mode A se transforme également en mode C.

**Mode I** : centrage de la maille.

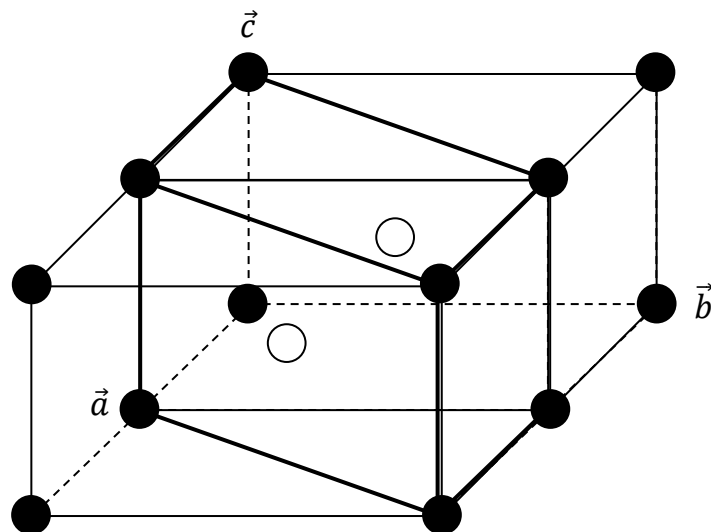


Figure II.6 : Centrage et duplication de la maille.

Le mode I se transforme en mode A. Mais, attention !, la nouvelle maille n'est pas compatible avec la typologie du système (les angles ne sont plus droits), on revient alors au mode I.

**Mode F** : centrage de toutes les faces de la maille.

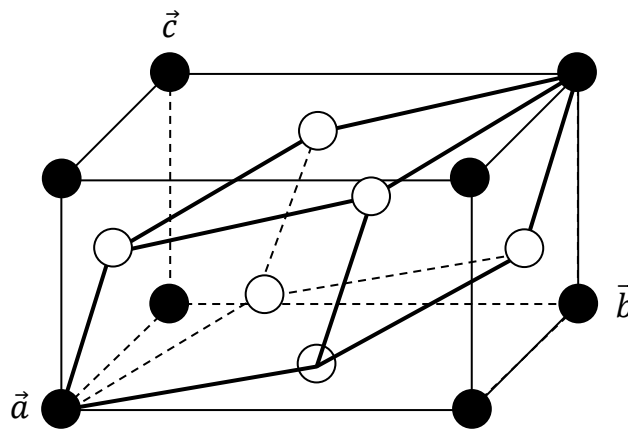


Figure II.7 : Centrage de toutes les faces de la maille.

Le mode F se transforme en mode P ( $V' < V$ ). Mais, attention !, cette nouvelle maille n'est pas compatible avec la typologie du système. On revient alors au mode F.

**Résultat** : Les modes des réseaux de Bravais pour le système orthorhombique est : P, C, I et F.

### 3. Réseau de Bravais pour les sept systèmes cristallins

Le tableau II.3 donne les 14 réseaux de Bravais pour les sept systèmes cristallins.

Système	Mode
Triclinique	P
Monoclinique	P, C
Orthorhombique	P, C, F, I
Quadratique	P, I
Rhomboédrique	P ou R
Hexagonal	P
Cubique	P, I, F

Tableau II.3: Les différents types de mailles.

### III. Dénombrement des groupes spatiaux issus de la classe $mm2$ du système orthorhombique

#### 1. Directions de symétrie dans système orthorhombique

Le groupe spatial sera donc composé de la lettre majuscule : le mode P(C,I,F), suivi de :

- **Chiffre** ou **lettre** relatifs à  $\vec{a}$  :

Si chiffre (axe 2 ou  $2_1$ ) selon  $\vec{a}$ ,

Si lettre (miroir m ou plan de glissement : a, b, c, d, n ou d) dont la normale est selon  $\vec{a}$ ,

- **Chiffre** ou **lettre** relatifs à  $\vec{b}$  :

Si chiffre (axe 2 ou  $2_1$ ) selon  $\vec{b}$ ,

Si lettre (miroir m ou plan de glissement : a, b, c, d, n ou d) dont la normale est selon  $\vec{b}$ ,

- **Chiffre** ou **lettre** relatifs à  $\vec{c}$  :

Si chiffre (axe 2 ou  $2_1$ ) selon  $\vec{c}$ ,

Si lettre (miroir m ou plan de glissement : a, b, c, d, n ou d) dont la normale est selon  $\vec{c}$ .

Dans notre cas d'étude : la classe  $mm2$  :

Dans notre cas (classe  $mm2$ ), nous avons un miroir (m) ou un plan de glissement (a, b, c, n ou d) relatifs à  $\vec{a}$ , suivi d'un autre miroir ou d'un autre plan de glissement relatifs à  $\vec{b}$ , suivi d'un autre axe direct d'ordre 2 ou d'un axe hélicoïdal  $2_1$  relatifs à  $\vec{c}$ .

#### 2. Dénombrement des groupes spatiaux

Le dénombrement des groupes spatiaux peut se faire à l'aide d'une méthode géométrique dont le principe est :

On construit, dans un premier temps, les groupes avec les deux premiers éléments de la classe, puis, nous essayerons de voir s'il y a un axe 2 ou  $2_1$  qui est généré à partir de la combinaison des deux premiers éléments. Nous garderons seulement les groupes possibles. Plusieurs groupes spatiaux peuvent être présentés par le même stéréogramme, nous choisissons, dans ce cas, les groupes qui sont dans les *I.T.C* (International Tables of Crystallography).

Ainsi, à la classe  $mm2$ , devraient correspondre, à priori, **72** combinaisons pour le mode P. En effet :

$Paa2, Paa2_1, Pab2, Pab2_1, Pac2, Pac2_1, Pad2, Pad2_1, Pan2, Pan2_1, Pam2,$   
 $Pam2_1, Pba2, Pba2_1, Pbb2, Pbb2_1, Pbc2, Pbc2_1, Pbd2, Pbd2_1, Pbn2, Pbn2_1, Pbm2,$   
 $Pbm2_1, Pca2, Pca2_1, Pcb2, Pcb2_1, Pcc2, Pcc2_1, Pcd2, Pcd2_1, Pcn2, Pcn2_1, Pcm2,$

$Pcm2_1, Pda2, Pda2_1, Pdb2, Pdb2_1, Pdc2, Pdc2_1, Pdd2, Pdd2_1, Pdn2, Pdn2_1, Pdm2, Pdm2_1, Pna2, Pna2_1, Pnb2, Pnb2_1, Pnc2, Pnc2_1, Pnd2, Pnd2_1, Pnn2, Pnn2_1, Pnm2, Pnm2_1, Pma2, Pma2_1, Pmb2, Pmb2_1, Pmc2, Pmc2_1, Pmd2, Pmd2_1, Pmn2, Pmn2_1, Pmm2, Pmm2_1.$

Sauf que certains de ces groupes ne sont pas réalisables géométriquement. En effet :

Il est géométriquement impossible de considérer les groupes spatiaux contenant des plans de glissement a, b ou c relatifs aux directions  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  ou  $\vec{c}$ , respectivement, puisque la normale de chacun de ces plans doit être parallèle à la direction  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  ou  $\vec{c}$ , respectivement, et la translation  $\frac{1}{2}\vec{a}$ ,  $\frac{1}{2}\vec{b}$  ou  $\frac{1}{2}\vec{c}$  propre au plans a, b ou c, n'aura donc pas lieu.

Alors il ya 20 groupes qui sont concernés par cette restriction :

$,Paa2_1, Pab2, Pab2_1, Pac2, Pac2_1, Pan2, Pan2_1, Pam2, Pam2_1, Paa2$   
 $, Pbb2_1, Pcb2, Pcb2_1, Pdb2, Pdb2_1, Pnb2, Pnb2_1, Pmb2, Pmb2_1, Pbb2$

Il en reste 52 groupes spatiaux.

Si les groupes spatiaux contiennent les plans d, la translation n'a pas lieu. Par ce que les plans d sont propres a la structure du diamant et ne peuvent être observés que dans les groupes spatiaux associés aux réseaux [7] :

$Fm\bar{3}m, I4/m\bar{3}m, Im\bar{3}m$  et  $Fm\bar{3}m.$

20 groupes spatiaux y sont concernés :

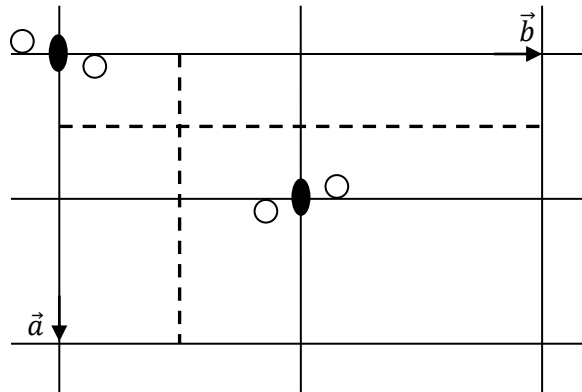
$Pad2, Pad2_1, Pbd2, Pbd2_1, Pcd2, Pcd2_1, Pda2, Pda2_1, Pdc2, Pdc2_1, Pdd2, Pdd2_1,$   
 $Pdn2, Pdn2_1, Pdm2, Pdm2_1, Pnd2, Pnd2_1, Pmd2, Pmd2_1.$

Donc il reste 32 groupes spatiaux :

$Pba2, Pba2_1, Pbc2, Pbc2_1, Pbn2, Pbn2_1, Pbm2, Pbm2_1$   
 $Pca2, Pca2_1, Pcc2, Pcc2_1, Pcn2, Pcn2_1, Pcm2, Pcm2_1$   
 $Pna2, Pna2_1, Pnc2, Pnc2_1, Pnn2, Pnn2_1, Pnm2, Pnm2_1$   
 $Pma2, Pma2_1, Pmc2, Pmc2_1, Pmn2, Pmn2_1, Pmm2, Pmm2_1$

**Les groupes : Pba2 et Pba2<sub>1</sub>**

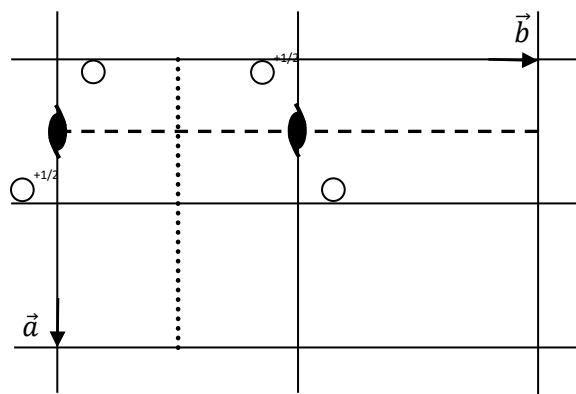
Les plans de glissement b et a relatifs, respectivement, à  $\vec{a}$  et  $\vec{b}$  génèrent un axe direct d'ordre 2 selon  $\vec{c}$ . Le groupe Pba2<sub>1</sub> qui a un axe hélicoïdal selon  $\vec{c}$  n'aura donc pas lieu. Le groupe possible (**Pba2**) est représenté sur la figure suivante :



*Pba2*

**Les groupes : Pbc2 et Pbc2<sub>1</sub>**

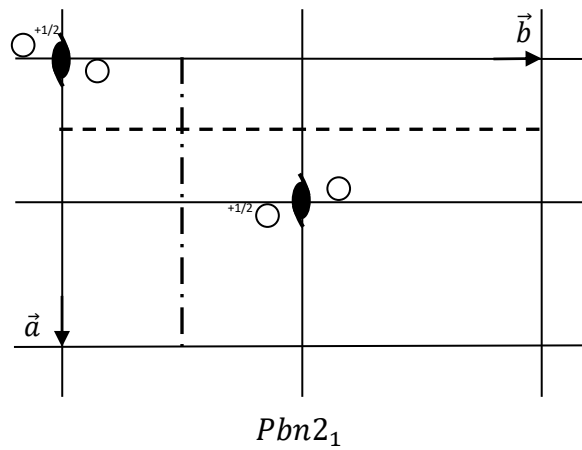
Les plans de glissement b et c relatifs, respectivement, à  $\vec{a}$  et  $\vec{b}$  génèrent un axe hélicoïdal 2<sub>1</sub> selon  $\vec{c}$ . Le groupe Pbc2 qui a un axe direct selon  $\vec{c}$  n'aura donc pas lieu. Le groupe possible (**Pbc2<sub>1</sub>**) est représenté sur la figure suivante :



*Pbc2<sub>1</sub>*

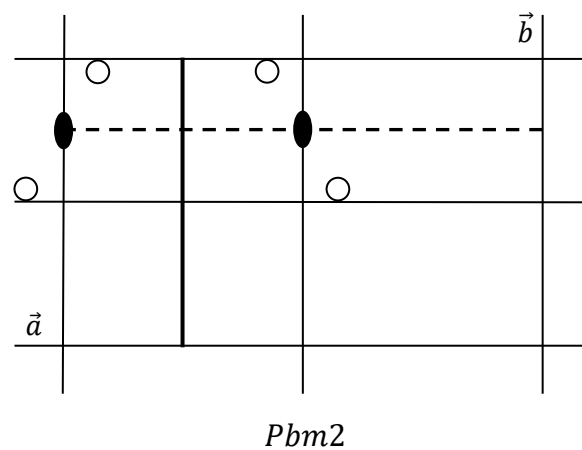
**Les groupes : Pbn2 et Pbn2<sub>1</sub>**

Les plans de glissement b et n relatifs, respectivement, à  $\vec{a}$  et  $\vec{b}$  génèrent un axe hélicoïdal 2<sub>1</sub> selon  $\vec{c}$ . Le groupe Pbn2 qui a un axe direct selon  $\vec{c}$  n'aura donc pas lieu. Le groupe possible (**Pbn2<sub>1</sub>**) est représenté sur la figure suivante :



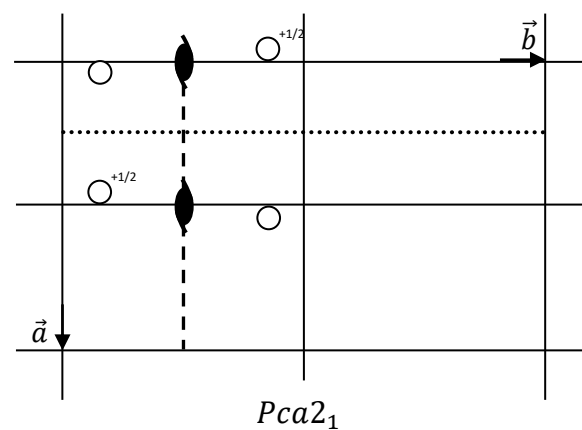
**Les groupes : Pbm2 et Pbm2<sub>1</sub>**

Les plans de glissement b et m relatifs, respectivement, à  $\vec{a}$  et  $\vec{b}$  génèrent un axe direct d'ordre 2 selon  $\vec{c}$ . Le groupe  $Pbm2_1$  qui a un axe hélicoïdal selon  $\vec{c}$  n'aura donc pas lieu. Le groupe possible (**Pbm2**) est représenté sur la figure suivante :



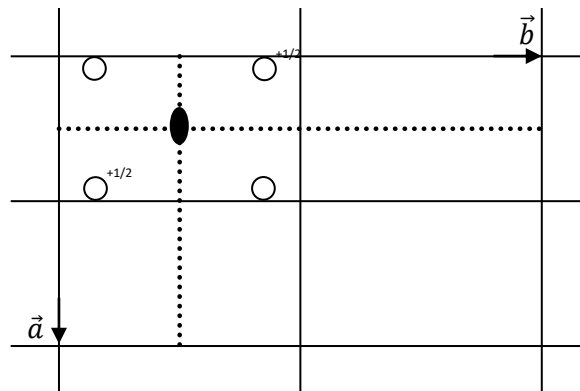
**Les groupes : Pca2 et Pca2<sub>1</sub>**

Les plans de glissement c et a relatifs, respectivement, à  $\vec{a}$  et  $\vec{b}$  génèrent un axe hélicoïdal  $2_1$  selon  $\vec{c}$ . Le groupe  $Pca2$  qui a un axe direct selon  $\vec{c}$  n'aura donc pas lieu. Le groupe possible (**Pca2<sub>1</sub>**) est représenté sur la figure suivante :



**Les groupes : Pcc2 et Pcc2<sub>1</sub>**

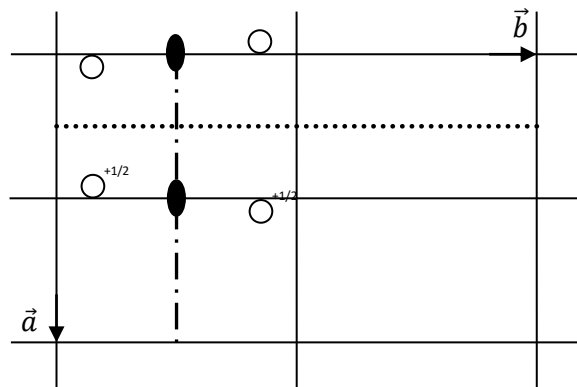
Les deux plans de glissement c, le premier relatif à  $\vec{a}$  et le second relatif à  $\vec{b}$  génèrent un axe direct d'ordre 2 selon  $\vec{c}$ . Le groupe Pcc2<sub>1</sub> qui a un axe hélicoïdal selon  $\vec{c}$  n'aura donc pas lieu. Le groupe possible (**Pcc2**) est représenté sur la figure suivante :



Pcc2

**Les groupes : Pcn2 et Pcn2<sub>1</sub>**

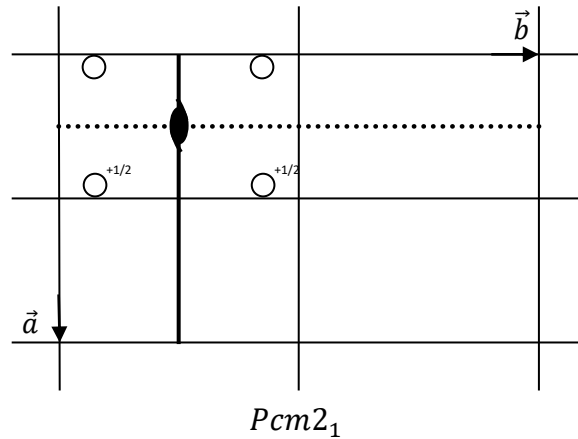
Les plans de glissement c et n relatifs, respectivement, à  $\vec{a}$  et  $\vec{b}$  génèrent un axe direct d'ordre 2 selon  $\vec{c}$ . Le groupe Pcn2<sub>1</sub> qui a un axe hélicoïdal selon  $\vec{c}$  n'aura donc pas lieu. Le groupe possible (**Pcn2**) est représenté sur la figure suivante :



Pcn2

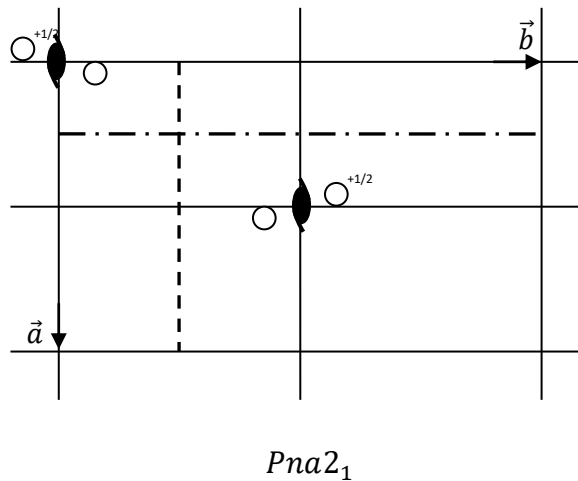
**Les groupes : Pcm2 et Pcm2<sub>1</sub>**

Le plan de glissement c et le plan miroir m relatifs, respectivement, à  $\vec{a}$  et  $\vec{b}$  génèrent un axe hélicoïdal 2<sub>1</sub> selon  $\vec{c}$ . Le groupe Pcm2 qui a un axe direct selon  $\vec{c}$  n'aura donc pas lieu. Le groupe possible (**Pcm2<sub>1</sub>**) est représenté sur la figure suivante :



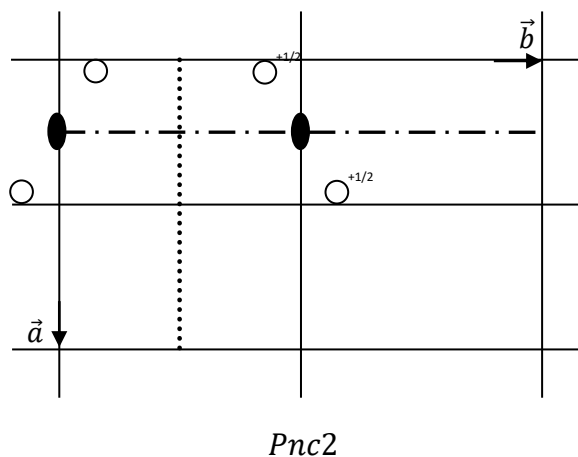
**Les groupes : Pna2 et Pna2<sub>1</sub>**

Les plans de glissement n et a relatifs, respectivement, à  $\vec{a}$  et  $\vec{b}$  génèrent un axe hélicoïdal  $2_1$  selon  $\vec{c}$ . Le groupe Pna2 qui a un axe direct selon  $\vec{c}$  n'aura donc pas lieu. Le groupe possible (**Pna2<sub>1</sub>**) est représenté sur la figure suivante :



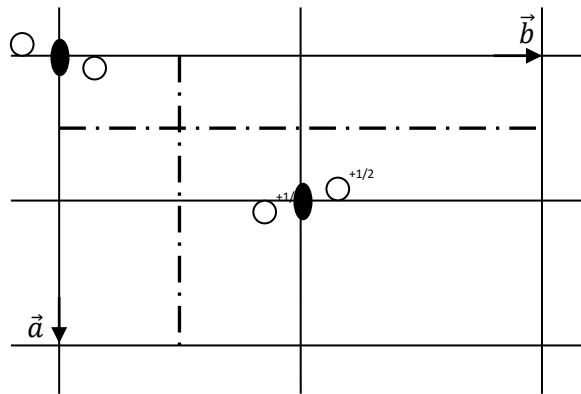
**Les groupes : Pnc2 et Pnc2<sub>1</sub>**

Les plans de glissement n et c relatifs, respectivement, à  $\vec{a}$  et  $\vec{b}$  génèrent un axe direct d'ordre 2 selon  $\vec{c}$ . Le groupe Pnc2<sub>1</sub> qui a un axe hélicoïdal selon  $\vec{c}$  n'aura donc pas lieu. Le groupe possible (**Pnc2**) est représenté sur la figure suivante :



**Les groupes : Pnn2 et Pnn2<sub>1</sub>**

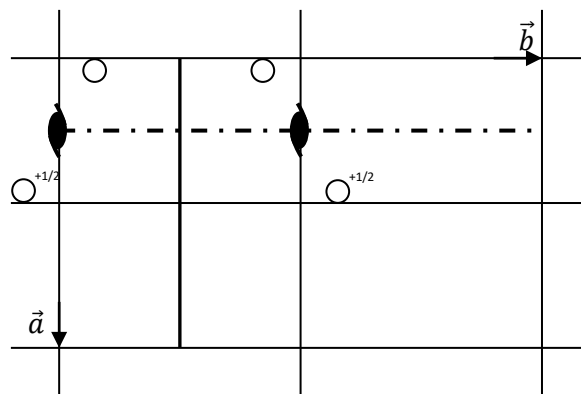
Les deux plans de glissement de type n, le premier relatif à  $\vec{a}$  et le second relatif à  $\vec{b}$  génèrent un axe direct d'ordre 2 selon  $\vec{c}$ . Le groupe Pnn2<sub>1</sub> qui a un axe hélicoïdal selon  $\vec{c}$  n'aura donc pas lieu. Le groupe possible (**Pnn2**) est représenté sur la figure suivante :



*Pnn2*

**Les groupes : Pnm2 et Pnm2<sub>1</sub>**

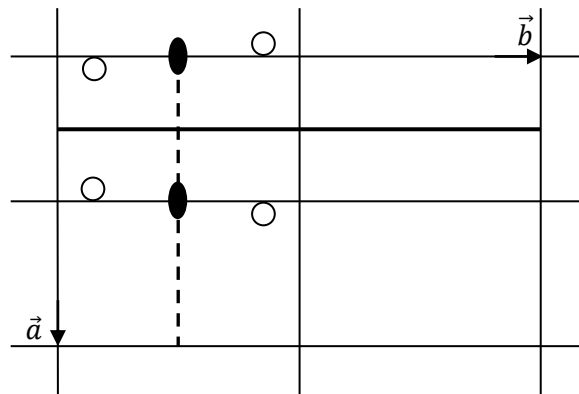
Le plan de glissement n et le plan miroir m relatifs, respectivement, à  $\vec{a}$  et  $\vec{b}$  génèrent un axe hélicoïdal 2<sub>1</sub> selon  $\vec{c}$ . Le groupe Pnm2 qui a un axe direct selon  $\vec{c}$  n'aura donc pas lieu. Le groupe possible (**Pnm2<sub>1</sub>**) est représenté sur la figure suivante :



*Pnm2<sub>1</sub>*

**Les groupes : Pma2 et Pma2<sub>1</sub>**

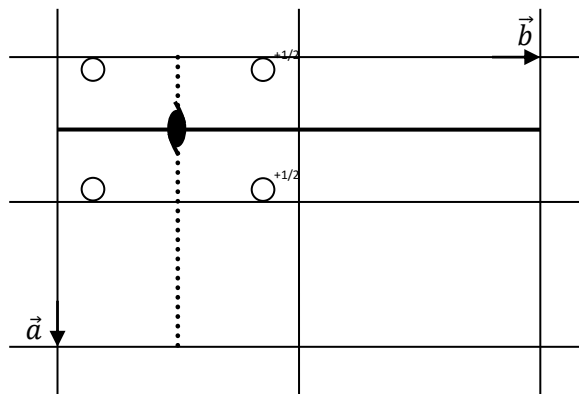
Le plan miroir m et le plan de glissement a relatifs, respectivement, à  $\vec{a}$  et  $\vec{b}$  génèrent un axe direct d'ordre 2 selon  $\vec{c}$ . Le groupe Pma2<sub>1</sub> qui a un axe hélicoïdal selon  $\vec{c}$  n'aura donc pas lieu. Le groupe possible (**Pma2**) est représenté sur la figure suivante :



*Pma*<sub>2</sub>

**Les groupes : Pmc2 et Pmc2<sub>1</sub>**

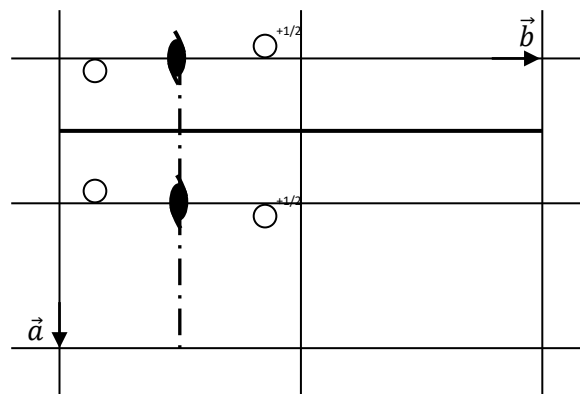
Le plan miroir *m* et le plan de glissement *c* relatifs, respectivement, à  $\vec{a}$  et  $\vec{b}$  génèrent un axe 2<sub>1</sub> selon  $\vec{c}$ . Le groupe Pmc2 qui a un axe direct selon  $\vec{c}$  n'aura donc pas lieu. Le groupe possible (**Pmc2<sub>1</sub>**) est représenté sur la figure suivante :



*Pmc*<sub>2<sub>1</sub></sub>

**Les groupes : Pmn2 et Pmn2<sub>1</sub>**

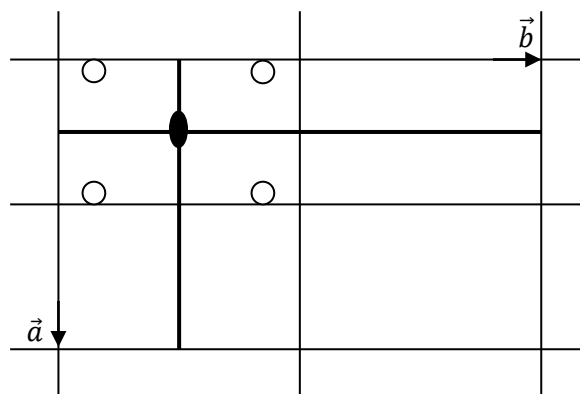
Le plan miroir *m* et le plan de glissement *n* relatifs, respectivement, à  $\vec{a}$  et  $\vec{b}$  génèrent un axe 2<sub>1</sub> selon  $\vec{c}$ . Le groupe Pmn2 qui a un axe direct selon  $\vec{c}$  n'aura donc pas lieu. Le groupe possible (**Pmn2<sub>1</sub>**) est représenté sur la figure suivante :



$Pmn2_1$

**Les groupes : Pmm2 et Pmm2<sub>1</sub>**

Les deux plans m, le premier relatif à  $\vec{a}$  et le second relatif à  $\vec{b}$  génèrent un axe direct d'ordre 2 selon  $\vec{c}$ . Le groupe Pmm2<sub>1</sub> qui a un axe hélicoïdal selon  $\vec{c}$  n'aura donc pas lieu. Le groupe possible (**Pmm2**) est représenté sur la figure suivante :



$Pmm2$

**3. Comparaison des groupes obtenus**

On peut observer que la projection des positions équivalentes du groupe **Pbc2<sub>1</sub>** dans le plan  $(\vec{a}, \vec{b})$  est la même que celle du groupe **Pca2<sub>1</sub>** dans le plan  $\vec{b}, \vec{a}$ , étant donné que les axes  $\vec{a}$  et  $\vec{b}$  sont interchangeables. Les groupes **Pbc2<sub>1</sub>** et **Pca2<sub>1</sub>** sont donc équivalents :

$$Pbc2_1(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}) \equiv Pca2_1(\vec{b}, \vec{a}, \vec{c})$$

Il en est de même pour les groupes :

$$Pbn2_1, Pbm2, Pcn2, Pcm2_1, Pnm2_1$$

qui se confondent, respectivement, avec les groupes :

$$Pna2_1, Pma2, Pnc2, Pmc2_1, Pmn2_1$$

si nous effectuons la même permutation des axes.

On obtient, par conséquent, dix (10) groupes de recouvrement distincts dérivant de la classe de symétrie d'orientation mm2 pour le réseau simple (P) :

$$Pba2, Pna2_1, Pca2_1, Pcc2, Pnc2,$$

$$Pnn2, Pma2, Pmc2_1, Pmn2_1, Pmm2$$

Il est à signaler, qu'entre deux groupes identiques, nous avons choisi celui des ITC (International Tables of Crystallography) [9].

#### 4. Coordonnées des positions équivalentes des groupes obtenus

##### Groupe Pba2 :

$$, y, z ; \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}+y, z ; \frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-y, z ; \bar{x}, \bar{y}, z$$

##### Groupe Pna2<sub>1</sub> :

$$, y, z ; \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}+z ; \frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-y, z ; \bar{x}, \bar{y}, \frac{1}{2}+z$$

##### Groupe Pca2<sub>1</sub> :

$$, y, z ; \frac{1}{2}-x, y, z ; \frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-y, z ; \bar{x}, \frac{1}{2}-y, z$$

##### Groupe Pcc2 :

$$, y, z ; \frac{1}{2}-x, y, \frac{1}{2}+z ; x, \frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}+z ; \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-y, z$$

##### Groupe Pnc2 :

$$, y, z ; \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}+z ; x, \frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}+z ; \frac{1}{2}-x, \bar{y}, z$$

##### Groupe Pnn2 :

$$, y, z ; \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}+z ; \frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}+z ; \bar{x}, \bar{y}, z$$

##### Groupe Pma2 :

$$, y, z ; \frac{1}{2}-x, y, z ; \frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-y, z ; \bar{x}, \frac{1}{2}-y, z$$

##### Groupe Pmc2<sub>1</sub> :

$$, y, z ; \frac{1}{2}-x, y, z ; x, \frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}+z ; \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}+z$$

**Groupe Pmn2<sub>1</sub> :**

$$, y, z ; \frac{1}{2}-x, y, z ; \frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}+z ; \bar{x}, \frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}+zx$$

**Groupe Pmm2 :**

$$, y, z ; \frac{1}{2}-x, y, z ; x, \frac{1}{2}-y, z ; \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-y, zx$$

Dans ce mémoire, nous avons utilisé une méthode géométrique pour dénombrer les groupes spatiaux (ou groupes de recouvrement) issus de la classe  $mm2$  du système orthorhombique.

Le but essentiel de ce travail était, bien entendu, l'initiation à cette technique-simple et très pratique de dénombrement des groupes spatiaux issus des différentes classes de symétrie pour les différents systèmes cristallins.

Dans un premier temps, nous avons d'abord commencé à dénombrer les modes de réseau de Bravais pour le système orthorhombique. Nous avons trouvé qu'il en possède quatre : P, C, I et F.

Puis nous avons considéré, à priori, toutes les combinaisons possibles pour le mode P, d'une part et la classe  $mm2$  d'autre part, en sachant que l'axe 2 peut être 2 ou  $2_1$  ou bien les plans a, b, c, d, n, ou m, nous avons compté 72 groupes.

Nous avons, donc, été amené à étudier les groupes spatiaux issus de la classe **mm2**. En comparant les stéréogrammes des 72 groupes du départ entre eux, nous avons trouvé que seulement 10 sont distincts. Il est à signaler, qu'entre deux groupes identiques, nous avons choisi celui des *ITC* (International Tables of Crystallography).

**Références :**

- [1] S. Dieter, C. Gervais. 'Cristallographie', Presses polytechniques et universitaires romandes, Lausanne, 2006.
- [2] O. Bennoui, 'Dénombrement des groupes spatiaux issus de la classe 4/m du système quadratique', Master 2, Univ. de M'sila, juin 2014.
- [3] D. Redaoui, 'Dénombrement des groupes spatiaux dans le système monoclinique', Master 2, Univ. de M'sila, juin 2015.
- [4] Ferahtia Souaad, 'Dénombrement des groupes spatiaux issus de la classe 222 du système orthorhombique', Master 2, Univ. de M'sila, juin 2016.
- [5] S. Naamoune, 'Dénombrement des groupes spatiaux issus de la classe 422 du système quadratique', Master 2, Univ. de M'sila, juin 2018.
- [6] H. Latelli, 'Eléments de cristallographie géométrique', Ed. OPU, 2011.
- [7] A. Verbaere, 'Cours de cristallographie géométrique', Univ. Nantes, 1986.
- [8] K. Bent, H. Nielsen, "Experimental S isotope fractionation studies between coexisting bismuthinite (Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub>) and sulfur (S<sup>0</sup>)", *Earth and Planetary Science Letters*, Volume 59, Issue 1, June 1982, pp 18-20
- [9] *International Tables for Crystallography*, vol. A: Space-group symmetry, Theo Hahn, Kluwer Academic Publishers, 2005, [En ligne].  
<http://chembaby.com/wp-content/uploads/2019/02/Hann-Theo-International-Tables-For-Crystallography.-Volume-A.-Space-group-Symmetry..pdf>  
(Pages consultées le 15/07/2020 ).

**Ouvrages consultés :**

1. Jean-Jacques Rousseau et Alain Gibaud, 'Cristallographie géométrique et radiocristallographie : avec exercices corrigés ', Dunod, Paris, mars 2007.
2. C. Malgrange, C. Ricolleau, F. Lefauchaux, 'Symétrie et propriétés physiques des cristaux', Edition EDP Sciences, 2011.
3. A. Belfar, 'Cours et exercices de cristallographie', USTO-MB , 2014/2015.
4. Jean Sivardière, 'La symétrie', Presses Universitaires de Grenoble, 1995.
5. K. D. Phan, 'Cours de Minéralogie', Ecole des Mines de Paris, 1990.

6.

### ملخص

لقد اخترنا، هذا العام في إطار مشروعنا، تعداد المجموعات الفضائية الناتجة عن الفئة  $mm2$  في الشبكة البسيطة لنظام معيني متعامد المحاور باستخدام طريقة هندسية بسيطة للغاية.

في الفصل الأول، قمنا بتذكير بعض المفاهيم الأساسية لعلم البلورات الهندسية التي نعتبرها ضرورية لفهم ما تبقى من المذكرة: الشبكة البلورية، الخلية الأولية و خصائص مختلف الأنظمة البلورية.

في نفس الفصل، قمنا بعرض الأسس اللازمة: تأثير مختلف عمليات التناظر قبل أن نتطرق، في الفصل الرابع إلى المجموعات الفضائية يستخدم هذا الجزء من المذكرة إلى أساسيات الحسابات المصفوفاتية.

ناقشنا، في الفصل الثاني، أوضاع شبكات برا فيس و تعدادها من وجهة نظر هندسية بحثة قمنا بإثبات وجود أربعة أنماط للنظام معيني متعامد المحاور.

و أخيراً، في الفصل الثالث، قمنا بتعداد المجموعات الفضائية الناتجة عن الفئة من نظام معيني متعامد المحاور.

**كلمات مفتاحية :** عنصر التناظر، شبكة برا فيس، الفئة  $mm2$  ، المجموعة الفضائية.

### Résumé

Nous avons choisi cette année, dans le cadre de notre projet, de dénombrer les groupes spatiaux issus de la classe  $mm2$  dans le réseau primitif du système orthorhombique en utilisant une méthode géométrique très simple.

Nous avons rappelé, dans le premier chapitre, quelques notions fondamentales de la cristallographie géométrique que nous estimons nécessaires pour la compréhension du restant du mémoire : réseau cristallin, maille élémentaire et les caractéristiques des différents systèmes cristallins.

Dans ce même chapitre, nous avons exposé les bases nécessaires : effets des opérations de symétries qui peuvent intervenir dans notre cas d'étude, avant d'aborder— au chapitre 3— les groupes spatiaux. Il n'est fait appel dans cette partie du mémoire qu'à des notions élémentaires de calculs matriciels.

Dans le chapitre 2, nous avons exposé les modes de réseaux de Bravais et leur dénombrement d'un point de vue purement géométrique. Nous avons, bien entendu, démontré l'existence de quatre modes pour le système orthorhombique.

Enfin, le chapitre 3 est consacré au dénombrement des groupes spatiaux issus de la classe  $mm2$  du système orthorhombique.

**Mots clés :** Eléments de symétrie, réseaux de Bravais, classe  $mm2$ , groupes spatiaux.

### Abstract

We have chosen this year, within the framework of our project, to enumerate the space groups resulting from the class  $mm2$  in the primitive network of the orthorhombic system using a very simple geometric method.

We recalled, in the first chapter, some fundamental notions of geometric crystallography that we consider necessary for the understanding of the remainder of the memory: crystal lattice, elementary lattice and the characteristics of the different crystal systems.

In this same chapter, we have exposed the necessary basics: effects of the operations of symmetries that can occur in our study case, before tackling - in chapter 3 - space groups. This part of the memory only uses elementary notions of matrix calculations.

In Chapter 2, we discussed the modes of Bravais lattices and their enumeration from a purely geometric method of view. We have, of course, demonstrated the existence of four modes for the orthorhombic system.

Finally, chapter 3 is devoted to the enumeration of space groups resulting from the  $mm2$  class of the orthorhombic system.

**Keywords:** Elements of symmetry, Bravais networks, class  $mm2$ , space groups.