

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/18/2022



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

Mémoire présenté pour l'obtention
du diplôme de Master Académique

Par: Benraya Khadidja

Intitulé

**Dénombrement des groupes spatiaux issus de
la classe mmm du réseau C du système
orthorhombique**

Soutenu le / /2022 devant le jury composé de:

Charifi Zoulikha	Université de M'sila	Président
Latelli H'mida	Université de M'sila	Rapporteur
Ghellab Torkia	Université de M'sila	Examineur

Année universitaire : 2021/2022

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, qui malgré ses nombreuses occupations, a dispensé sans compter son temps et ses conseils pour l'élaboration du mémoire. Qu'il veuille bien trouver ici l'expression de mes profondes gratitude et mes admirations.

Je remercie très sincèrement Madame Charifi Zoulikha d'avoir accepté fait l'honneur d'accepter de présider le jury de ce mémoire.

Je très reconnaissante à Madame Ghellab Torkia d'avoir accepté d'examiner ce travail.

Mes remerciements vont également à tous les professeurs du département de physique, université Mohamed Boudiaf-M'sila.

Je remercie mon mari pour son aide et son soutien continu.

Je remercie également tous mes camarades et mes amies et tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

K.Benraya

اهداء

إلى من بلغ الرسالة وأدى الأمانة .. ونصح الأمة .. إلى نبي الرحمة ونور العالمين

سيدنا محمد صلى الله عليه وسلم.

إلى من لا تكفي لا الكلمات ولا العبارات من وصفها .. إلى أحب انسان لقلبي ..

إلى من أهدتني جميع ما تملك بدون مقابل .. إلى من جاهدت و ناضلت في سبيل تربية و تعليم بناتها ..

إلى معنى الحب وإلى رمز الحنان والتفاني .. إلى بسمه الحياة وسر الوجود ..

إلى من كان دعائها سر نجاحي وحنانها بلسم جراحي .. أمي الحبيبة.

إلى شمعة النور التي انطفأت قبل أوانها .. إلى من يسكن الروح و القلب .. إلى من تشتاق العيون لرؤياه ..

إلى روح أبي الطاهرة .. رحمك الله و أسكنك فسيح جناته.

إلى سندي زوجي الغالي زكرياء ..

إلى أمي الثانية والأب الثاني ، والدا زوجي حفظهما الله ..

إلى اللؤلؤتان أختاي فائزة و أمال، وأزواجهما فيصل وهشام أنار الله دريهم ..

إلى رموز البراءة، الكتاكيت: محمد، علي، هيام ،جنة، لجين ..

إلى من سرنا سوياً ونحن نشق الطريق معاً نحو النجاح والإبداع .. إلى جميع زميلاتي وزملائي.

إلى من صاغوا لنا علمهم حروفاً ومن فكرهم منارة تنير لنا سيرة العلم والنجاح.

إلى كل أساتذتي الكرام من الطور الابتدائي الى الطور الجامعي.

Sommaire

Introduction	1
Chapitre I : Notions fondamentales	
I. Notions fondamentales	3
I.1. Le cristal	3
I.2. Réseau ponctuel	3
I.3. Notion de maille	3
I.4. Réseau réciproque	4
I.5. Systèmes cristallins	4
Chapitre II : Opérations et éléments de symétrie	
II. Opérations et éléments de symétrie	7
II .1. Eléments de symétrie	7
Représentation graphique des éléments de symétrie	7
II.2. plans de glissement	8
II.3. Représentation stéréographique des opérateurs	9
Chapitre III : Réseaux de Bravais	
III.1. Les modes de réseaux de Bravais	11
III .2. Les 32 classes de symétrie d'orientations	12
III.3. Dénombrement des modes de réseaux de Bravais du système orthorhombique	13
A. Recherche des modes possibles	13
B. Centrage de la maille orthorhombique et recherche des modes de réseaux de Bravais compatibles avec la symétrie du réseau (mmm)	15
Chapitre IV : Dénombrement des groupes spatiaux	
IV.1. Introduction	18
IV. 2. Directions de symétrie du système orthorhombique	18
IV.3. Dénombrement des groupes spatiaux de système orthorhombique de la classe Cmmm	18
IV. 4. Coordonnées des positions équivalentes	45
Conclusion	46
Référence bibliographique	47

Introduction

Introduction

Les cristaux sont présents un peu partout dans la nature. Ils sont particulièrement abondants dans les formations rocheuses telles que les minéraux (pierres précieuses, graphite, etc. Depuis les temps anciens, les érudits ont été intrigués par la beauté des cristaux, leur forme symétrique ainsi que leur variété de couleurs [1].

En 1611, Johannes Kepler fut le premier à observer les formes symétriques des flocons de neige et devina à partir de là leur structure sous-jacente. Moins de 200 ans plus tard, le minéralogiste français René Just Haüy découvrit les lois géométriques des cristaux [1].

En 1895, les rayons X furent découverts par William Conrad Röntgen. Max Von Laue et ses associés découvrirent ensuite que les rayons X traversant un cristal interagissent avec ce dernier et sont par conséquent diffractés suivant des directions particulières, selon la nature du cristal [1].

En 1913, une autre découverte importante fut celle de l'équipe constituée par William Henri Bragg et son fils William Lawrence Bragg, selon laquelle les rayons X pouvaient être utilisés pour déterminer avec précision les positions des atomes à l'intérieur d'un cristal et ainsi éclairer sur sa structure tridimensionnelle. Cette découverte a largement contribué au développement moderne de toutes les sciences naturelles, car la structure atomique gouverne les propriétés chimiques et biologiques de la matière alors que la structure cristalline gouverne la plupart des propriétés physiques de la matière [1].

Entre 1920 et 1960, la cristallographie aux rayons X a permis d'élucider certains mystères de la structure du vivant ayant un grand impact dans le domaine médical. Ce fut par exemple le cas de Dorothy Hodgkin, qui élucida la structure d'un grand nombre de molécules biologiques telles que le cholestérol (1937), la pénicilline (1946), la vitamine B12 (1956) et l'insuline (1969) [1].

Ces premiers cristallographes se servaient de la géométrie pour étudier la forme des cristaux dans le monde naturel.

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, mais qui demande la compréhension intense de tous les outils de la cristallographie géométrique.

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, en deuxième chapitre, les éléments de symétrie avec leurs différentes représentations: 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.

Dans 3em chapitre 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 exister.

Enfin, au chapitre 4, après avoir rappelé les directions de symétrie du système orthorhombique, nous avons reconstruit les stéréogrammes de toutes les combinaisons possibles de mode C classe mmm qui sont, à priori, au nombre de 64 combinaisons.

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.

Chapitre I

Notions fondamentales

I. Notions fondamentales

I.1. Le cristal : est une forme polyédrique régulière, délimitée par des faces lisses, qui est assumée par un composé chimique, en raison de l'action de ses forces interatomiques, lors du passage, dans des conditions appropriées, de l'état d'un liquide ou d'un gaz à celui d'un solide.

Cristal est constitué de la répétitions tridimensionnelle périodique d'un motif atomique.

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.

I.2. Réseau ponctuel : est une répartition périodique de points. Il est uni- bi ou tridimensionnel.

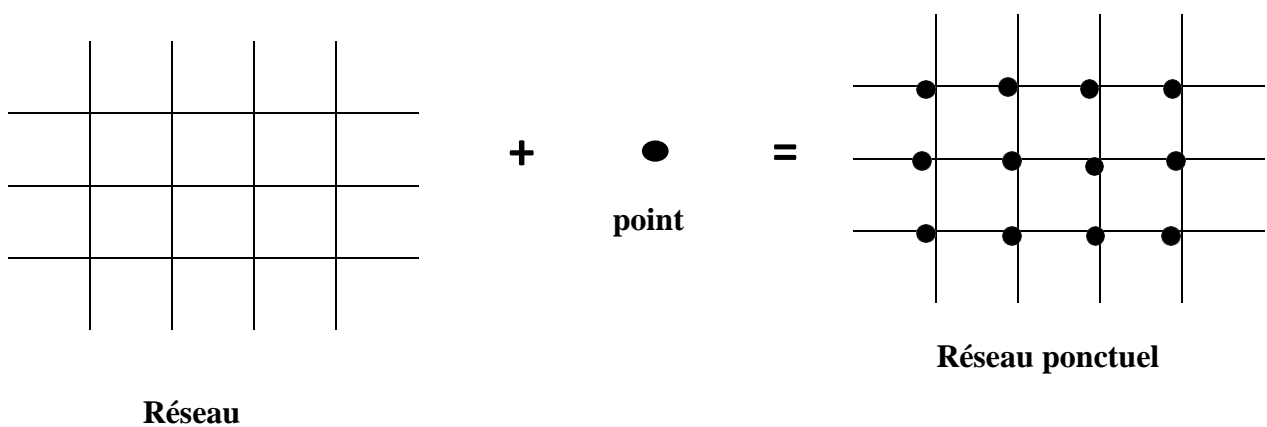


Figure I.1 : Réseau + point = réseau ponctuel.

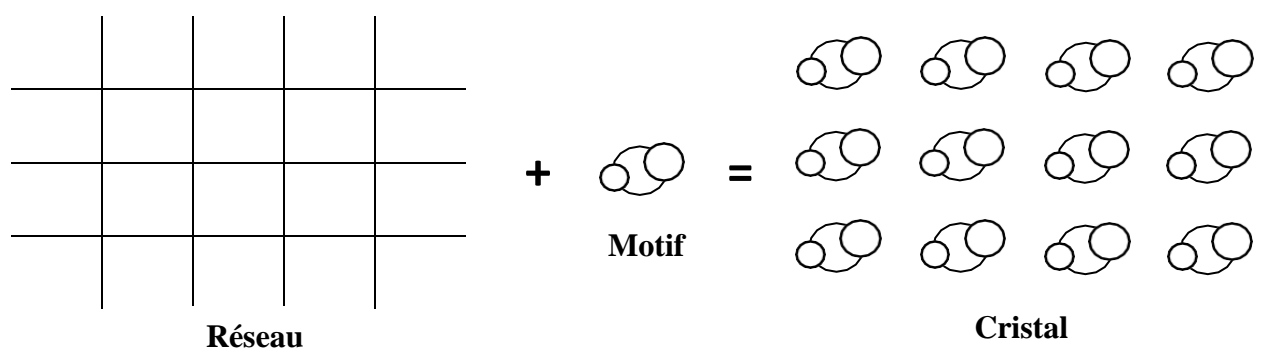


Figure I.2 : Réseau + motif = cristal.

I.3. Notion de 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.

Les vecteurs de base \vec{a} et \vec{b} (ou \vec{a} , \vec{b} et \vec{c} dans le cas tridimensionnel) déterminent un parallélogramme (ou un parallélépipède dans le cas tridimensionnel) appelé maille ou maille élémentaire du réseau.

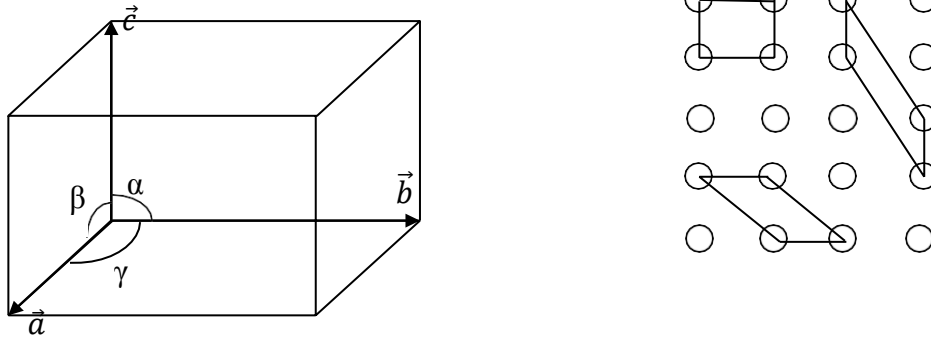


Figure I.3 : mailles élémentaires

I.4. Réseau réciproque : A tout réseau que nous appelons Réseau direct, peut être associé un réseau réciproque. Ce dernier est un réseau imaginaire, introduit par Bravais, sous le nom de réseau polaire, pour simplifier l'étude physique de l'état cristallin [2].

$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$: les vecteurs de base de réseau direct.

$\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*$: les vecteurs de base du réseau réciproque.

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

$\vec{a}^* \cdot \vec{a}^* = \vec{b}^* \cdot \vec{b}^* = \vec{c}^* \cdot \vec{c}^* = n$

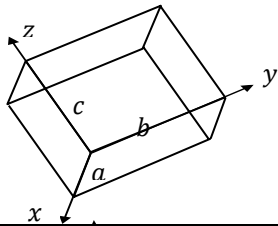
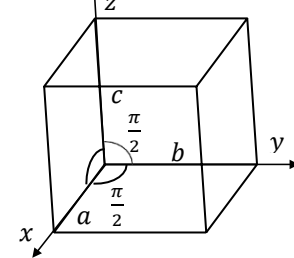
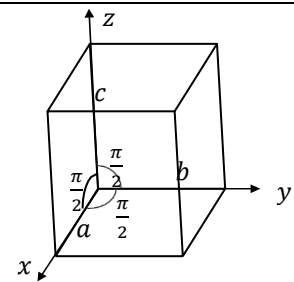
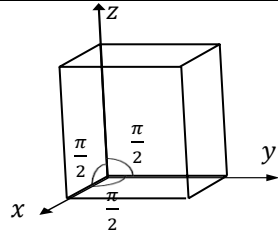
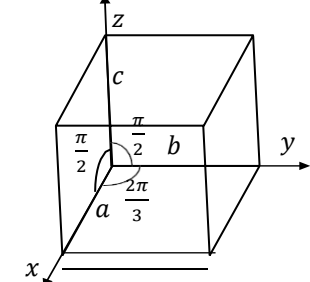
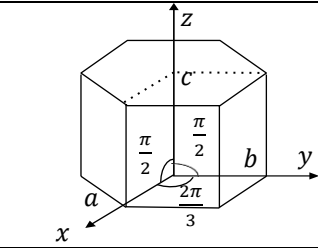
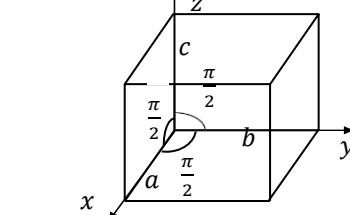
Ou n est une constante précise en général égal à 1 en cristallographie et à 2π en physique de solide.

Figure I.4 : définition du réseau réciproque

I.5. 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 [3].

Les caractéristiques des sept systèmes sont décrites, et leurs formes sont montrées par le tableau ci-dessous:

Système	Forme de la maille élémentaire	Condition sur les paramètres		Formes	Minéraux dans ce système
		Métriques	Angulaires		
Triclinique	Quelconque	Aucune	Aucune		Epidote, Disthène, Axinite, Babingtonite, kaolinite..[4].
Monoclinique	Prisme droit a base quelconque	Aucune	$\alpha = \gamma = \frac{\pi}{2},$ $\beta \neq \frac{\pi}{2}$		Gypse, Augite, Malachite Baumhauerite, Azurite, Fornacite, Orthose, Micas..[4].
Orthorhombique	Prisme droit a base rectangulaire	Aucune	$\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$		Topaze, Soufre, Talc, Stibine, Orpiment, Aragonite, Barytine, Atacamite..[4]
Quadratique	Prisme droit a base carré	$a = b$	$\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$		Apophyllite Wulfénite, Cassitérite, Rutile, Zircon, Leucite.. [4].
Rhomboédrique	Prisme droit a base losange	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq \frac{\pi}{2}$		Quartz, Calcite, Corindon, Bornite, Ilminite...[4].
Hexagonal	Rhomboèdre	$a = b$	$\alpha = \beta = \frac{\pi}{2},$ $\gamma = \frac{2\pi}{3}$		Graphite, Zinkenite Apatite, Béryls, Vanadinite... [4].
Cubique	Cube	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma$		Fluorite, Diamant, Grenats, Galène, Analcime, uraninte, .[4].

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 : $\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}, a \neq b \neq c$.
- Volume de la maille : $V = a \cdot b \cdot c$
- Les minéraux cristallisant dans ce système : soufre, stibine, aragonite, barytine, atacamite, bismuthines, goethite, topaze, talc, etc ...

Exemple : Modèle réel MgB_2C_2

Groupe spatial: Cmca

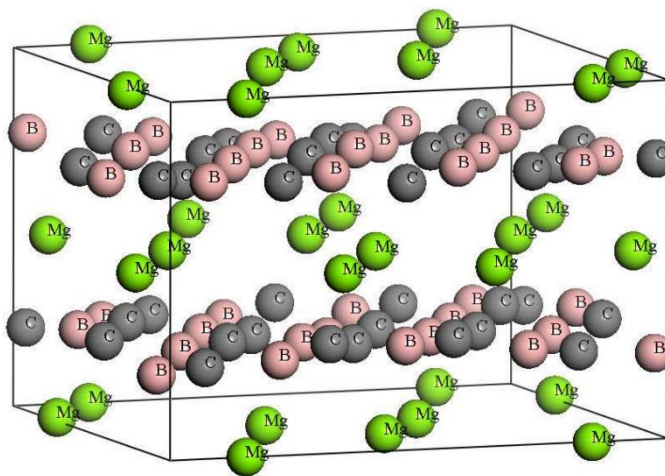


Figure I.5 : structure MgB_2C_2 [5].

Chapitre II

Opérations et éléments de symétrie

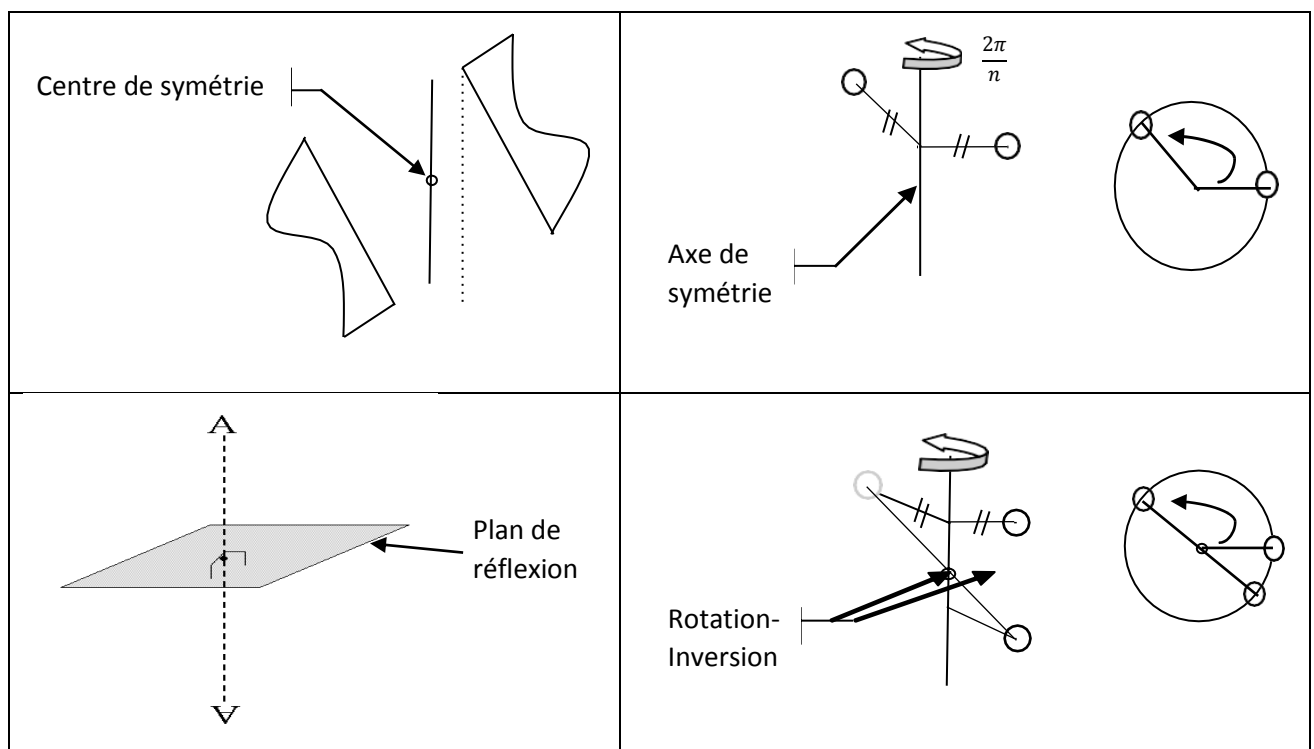
II. Opérations et éléments de symétrie

Une figure est dite "symétrique" si l'on peut trouver une opération qui laisse cette figure invariante. Alors, la figure originale et la figure résultant de l'opération coïncident totalement. Ces opérations sont appelées opérations de symétrie. Les points, droites et plans par rapport auxquels les opérations sont réalisées, sont appelés éléments de symétrie [6].

Une opération de symétrie chez les cristaux est donc une opération géométrique qui amène en correspondance des sommets, des arêtes ou des faces d'un cristal.

Les opérations de symétries sont :
La rotation, La réflexion, L'inversion, La rotation- inversion.

Les éléments de symétrie correspondants sont dans l'ordre :
Axes de symétrie simple, Plan de symétrie, Centre de symétrie, Axes de symétrie inverse ou axes d'inversion.



II .1. Eléments de symétrie

- Les axes directs (n) d'ordre $n : 1, 2, 3, 4, 6$.
- Les axes inverses (\bar{n}) d'ordre $n : \bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$.

Représentation graphique des éléments de symétrie [2].

Un axe d'ordre n est le plus souvent orienté perpendiculairement au plan de la figure excepté l'axe d'ordre 2 qui est parfois dans le plan de la figure. la nomination ainsi que les symboles de ces opérations sont regroupés dans le tableau(II.3.1)










Axe	Nomination	Symbole graphique	Interprétation
1	Identité	Néant	Rotation de $\frac{2\pi}{1}$
2	Binaire		Rotation de $\frac{2\pi}{2}$
3	Ternaire		Rotation de $\frac{2\pi}{3}$
4	Quatenaire		Rotation de $\frac{2\pi}{4}$
6	Sénaire		Rotation de $\frac{2\pi}{6}$
$\bar{1}$	Centre de symétrie		Inversion
$\bar{2} \equiv m$	Axe inverse d'ordre 2		Rotation de $\frac{2\pi}{2}$ suivie de l'inversion
$\bar{3}$	Axe inverse d'ordre 3		Rotation de $\frac{2\pi}{3}$ suivie de l'inversion
$\bar{4}$	Axe inverse d'ordre 4		Rotation de $\frac{2\pi}{4}$ suivie de l'inversion
$\bar{6}$	Axe inverse d'ordre 6		Rotation de $\frac{2\pi}{6}$ suivie de l'inversion

Tableau II.3.1 : Représentation graphique et symboles des différents éléments de symétrie.

II.2. plans de glissement

L'opération (m, \vec{t}) de symétrie est la réflexion par rapport à un plan (miroir) suivie ou précédée d'une translation \vec{t} parallèle au plan. \vec{t} doit être compatible avec l'état cristallin, c'est donc une fraction de la période dans la direction de \vec{t} , orienté selon une rangée parallèle au plan m [2].






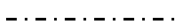

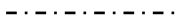

Il y a une stricte limitation des translations possibles, qui est due au caractère périodique du cristal. Ces conditions restreignent fortement le nombre de plans de glissement possibles. On en distingue cinq : a, b, c, n, d .

On désigne les plans de glissement par les symboles a, b, c si le glissement s'effectue le long des axes $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ respectivement et sa grandeur est $\vec{t} = \frac{1}{2}\vec{a}, \frac{1}{2}\vec{b}, \frac{1}{2}\vec{c}$.

Dans le cas où le glissement est dirigé le long de la diagonale du parallélogramme construit sur la base \vec{a} et \vec{b} porté par le plan suivant lequel s'effectue le glissement. Le plan est noté \bar{c} si le transport est égal à la moitié de la longueur de la diagonale du parallélogramme :

$\vec{t} = \frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b}), \frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{c}), \frac{1}{2}(\vec{b} + \vec{c})$ ou $\frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b} + \vec{c})$, il est noté \bar{c} s'il est égal au quart de la diagonale $\vec{t} = \frac{1}{4}(\vec{a} \pm \vec{b}), \frac{1}{4}(\vec{b} \pm \vec{c}), \frac{1}{4}(\vec{c} \pm \vec{a})$ ou $\frac{1}{4}(\pm\vec{a} \pm \vec{b} \pm \vec{c})$.

On a donné dans le tableau II.3.2 toutes les représentations usuelles de plans de glissement adoptés par le système international.

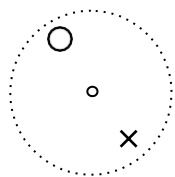
Plan	Symbole graphique		Nature de translation
	Normal au plan de la figure	Parallèle au plan de la figure	
m			Plan ordinaire, sans translation
a, b			$\frac{1}{2}\vec{a}$ le long de x ou $\frac{1}{2}\vec{b}$ le long de y
c		Néant	$\frac{1}{2}\vec{c}$ le long de z , $\frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b} + \vec{c})$ le long de $[111]$
n			$\frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b})$ ou $\frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{c})$ ou $\frac{1}{2}(\vec{b} + \vec{c})$ ou $\frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b} + \vec{c})$
d			$\frac{1}{4}(\vec{a} \pm \vec{b})$ ou $\frac{1}{4}(\vec{b} \pm \vec{c})$ ou $\frac{1}{4}(\vec{c} \pm \vec{a})$ ou $\frac{1}{4}(\pm\vec{a} \pm \vec{b} \pm \vec{c})$.

II.3.2 Symboles et représentations graphiques des plans de glissement [2].

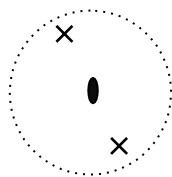
II.3.Représentation stéréographique des opérateurs

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.

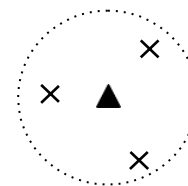
II.3.1. Axes directs



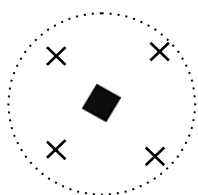
1 : Identité



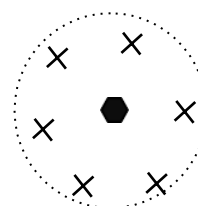
2 : Axe direct d'ordre 2



3 : Axe direct d'ordre 3

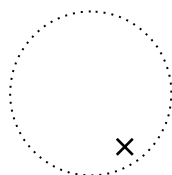


4 : Axe direct d'ordre 4

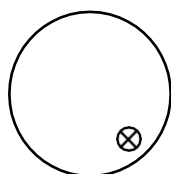


6 : Axe direct d'ordre 6

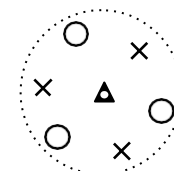
II.3.2. Axes inverses



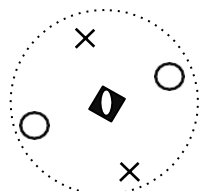
$\bar{1}$: Centre d'inversion



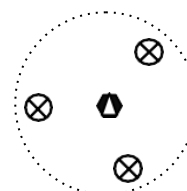
$\bar{2}$: Axe inverse d'ordre 2



$\bar{3}$: Axe inverse d'ordre 3



$\bar{4}$: Axe inverse d'ordre 4



$\bar{6}$: Axe inverse d'ordre 6

Figure II.1: Projections stéréographiques des différents axes de symétrie.

Chapitre III

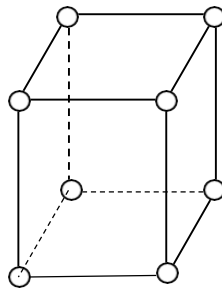
Réseaux de Bravais

III. Réseaux de Bravais

III.1. Les modes de réseaux de Bravais

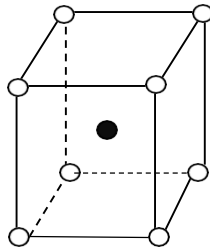
Pour un système cristallin donné, la géométrie de la maille correspondante peut s'adapter à plusieurs réseaux. Ces différents réseaux correspondent à différents agencements de nœuds dans la maille, qui respectent les symétries caractéristiques du système. Ces différents agencements de nœuds s'appellent des modes [7].

Le mode primitif (P) : correspondant aux réseaux définis par une maille caractéristique de ce mode ne possédant des nœuds qu'à ses 8 sommets (soit un seul nœud en propre).



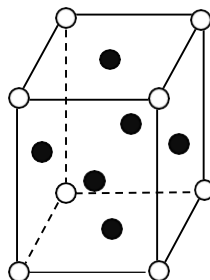
Maille élémentaire primitive, un seul nœud

Le mode centré (ou corps centré) (I) : qui présente un nœud au centre de la maille en plus des nœuds à ses sommets (ce qui lui donne deux nœuds en propre).



Maille élémentaire centrée

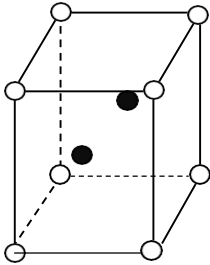
Le mode faces centrées (F) : qui présente un nœud au centre de chaque face de la maille en plus des nœuds à ses sommets (ce qui lui donne quatre nœuds en propre).



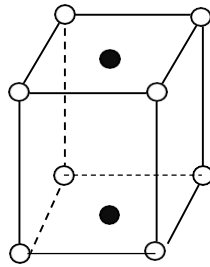
Maille élémentaire dont toutes les faces sont centrées

Mode A, B, C (C)

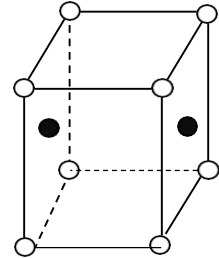
Maille multiple où les motifs sont placés aux sommets, au centre d'une face et au centre de la face opposée.



Mode A



Mode B



Mode C

Maille 2 faces centrées

III .2. 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 cristallin	Groupes ponctuelles	Modes de réseau de Bravais
Triclinique	$1, \bar{1}$	P
Monoclinique	$2, m, 2/m$	P, C
Orthorhombique	$mm2, 222, mmm$	P, C, I, F
Rhomboédrique	$4, \bar{4}, 4/m, 4mm, \bar{4}2m, 422, 4/mmm$	P, I
Quadratique	$3, \bar{3}, 3m, \bar{3}m, 32$	$P \text{ ou } R$
Hexagonale	$6, \bar{6}, 6/m, 6mm, \bar{6}2m, 622; 6/mmm$	P
Cubique	$23, m\bar{3}, \bar{4}3m, 432, m\bar{3}m$	P, I, F

Tableau III.1 : Les 32 classes cristallines [2].

III.3. Dénombrement des modes de réseaux de Bravais du système orthorhombique

A. Recherche des modes possibles

Le système orthorhombique est caractérisé par figure III.1 :

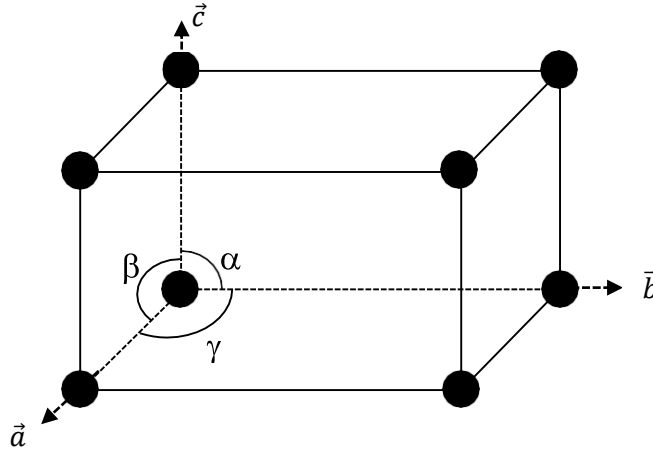


Figure III.1 : Maille du système orthorhombique ($a \neq b \neq c$ et $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$).

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 a 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:

$$\vec{t} = x\vec{a} + y\vec{b} + z\vec{c}, \text{ pour lesquelles } x, y, z \text{ n'est pas entiers [2].}$$

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 III.2 par un miroir (m) dans le plan (\vec{a}, \vec{b}) , par exemple :

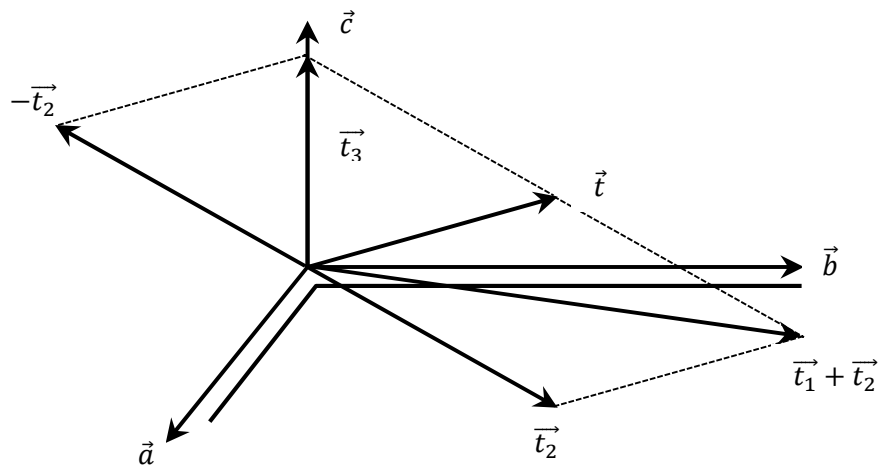


Figure III.2 : Effet d'un miroir (m) dans le plan (\vec{a}, \vec{b}) .

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

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

Le vecteur \vec{t}_1 est le vecteur obtenu à partir de \vec{t} par réflexion de m :

$$\vec{t}_1 = [m]_{xy}\vec{t} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ \bar{z} \end{bmatrix}$$

Formons : $\vec{t} + \vec{t}_1$

$$\vec{t} + \vec{t}_1 = \vec{t} + [m]_{xy}\vec{t} = u\vec{a} + v\vec{b} \quad (u \text{ et } v \text{ les plus petits entiers})$$

Écrivons cette relation en notation matricielle

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

Formons : $\vec{t} - \vec{t}_1$

$$\vec{t} - \vec{t}_1 = \vec{t} - [m]_{xy}\vec{t} = w\vec{c} \quad (w \text{ le plus petit entier})$$

Écrivons cette relation en notation matricielle :

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

Nous obtenons :

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

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

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

D'où :

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

Du fait des hypothèses *sur* u, v et w, x, y et z sont nécessairement des demi-entiers et les seules translations possibles suivant x et y sont illustrées dans le tableau III.2.

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

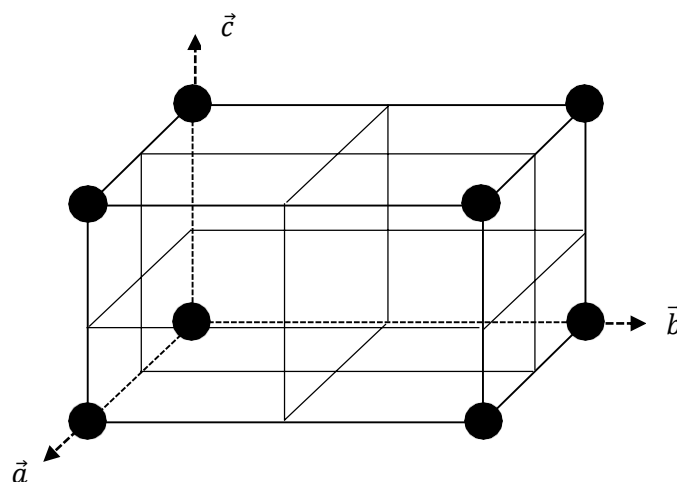
Tableau III.2: Vecteurs de translation dans un réseau tridimensionnel.

Pour : $\vec{t} = \vec{0}$, on obtient le réseau orthorhombique simple qui correspond 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 $\frac{1}{2}(\vec{b} + \vec{c})$ correspond 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.

B. 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 III.3 : Représentation des miroirs mmm .

Le mode P est compatible avec la symétrie du réseau

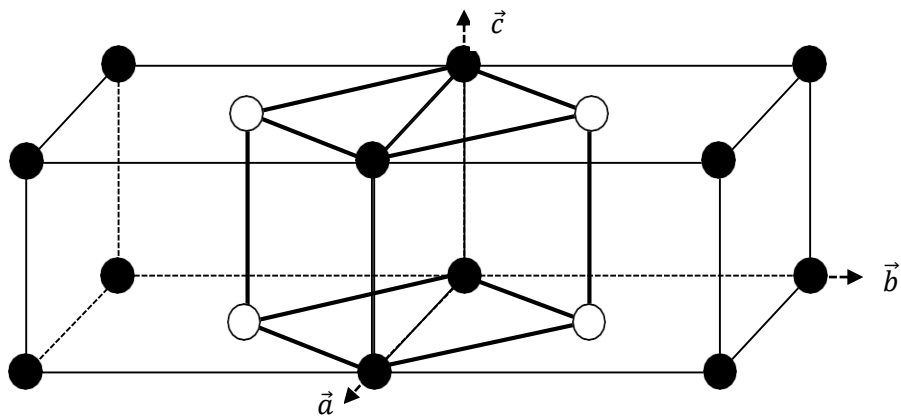
Mode C : centrage des faces C.

Figure III.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.

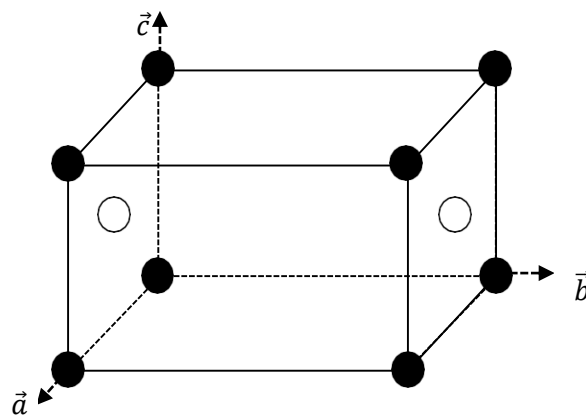
Mode B : centrage des faces B

Figure III.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.

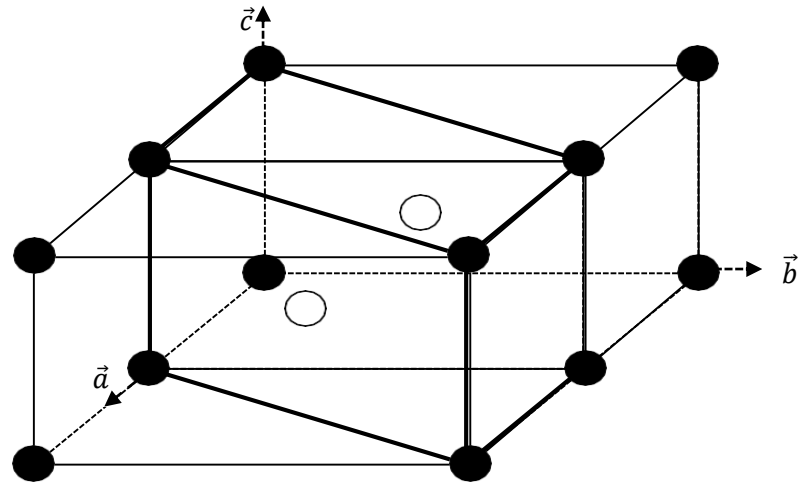
Mode I : centrage de la maille.

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

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

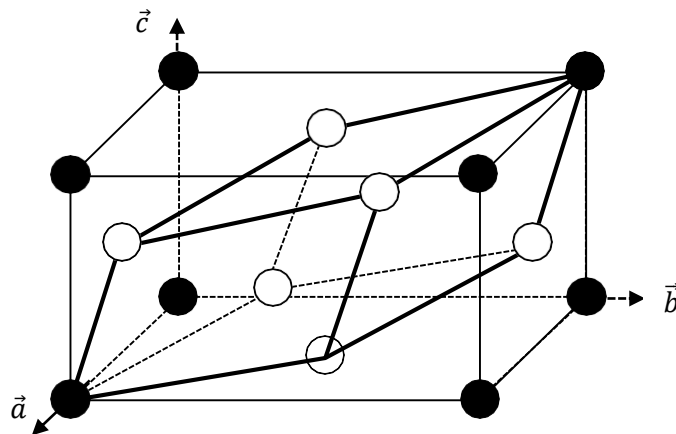
Mode F : centrage de toutes les faces de la maille.

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

Le mode F se transforme en mode P ($V' < V$). Mais 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.

Dans notre travail, nous concentrons sur l'étude du mode C.

Chapitre IV
Dénombrément des groupes
spatiaux

IV. Dénombrement des groupes spatiaux

IV.1. Introduction [7]

Les cristaux sont répartis sur 230 groupes d'espace, répartis à leurs tours, entre 32 classes de symétrie d'orientation dans 7 systèmes cristallins.

Le groupe spatial résulte de la combinaison d'un mode de réseau 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 majuscule P, C, I, F ou R précisant le mode de réseau de Bravais. Ce mode indique bien sur les translations internes de la maille élémentaire.

IV. 2. Directions de symétrie du système orthorhombique

Trois symboles (chiffre ou lettre) relatifs successivement aux trois directions de symétrie \vec{a}, \vec{b} puis \vec{c} .

Dans notre cas (classe mmm), nous avons un miroir (m) ou un plan de glissement (a, b, c, n ou d) relatif à \vec{a} , suivi d'un autre miroir ou d'un autre plan de glissement relatifs à \vec{b} , suivi d'un autre miroir ou d'un autre plan de glissement relatifs à \vec{c} .

IV.3. Dénombrement des groupes spatiaux de système orthorhombique de la classe mmm du réseau C.

Le dénombrement des groupes spatiaux peut se faire à l'aide d'une méthode géométrique.

Ainsi pour la classe mmm du système orthorhombique correspondent le mode C, à priori 216 combinaisons. 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 plan a, b ou c, n'aura donc pas lieu.

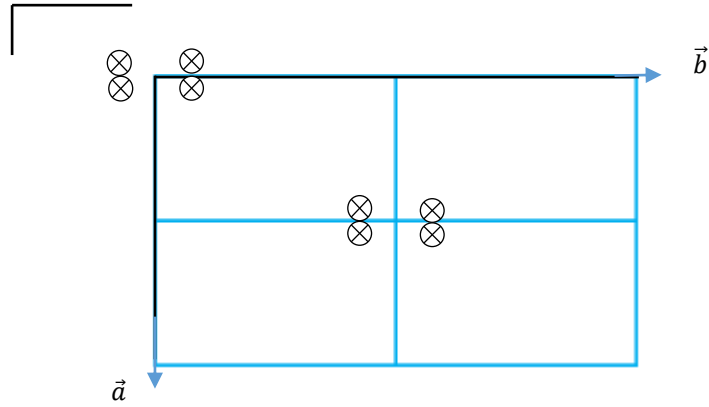
Si les groupes spatiaux contiennent les plans d, la translation n'a pas lieu par ce que les plans d sont propres à la structure du diamant et ne peuvent être observés que dans les groupes spatiaux associés aux réseaux [8].

Donc il reste 64 groupes spatiaux :

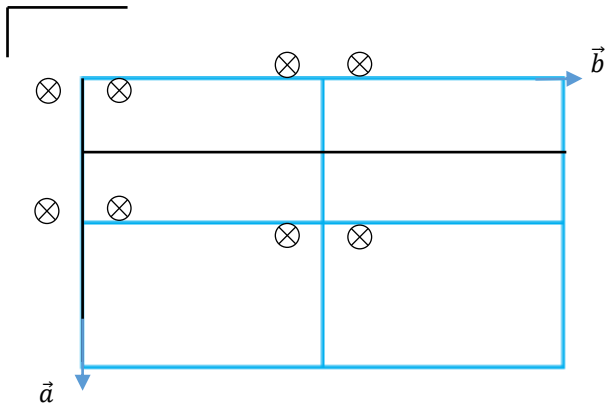
Cmmm , Cmmn , Cmma , Cmmb , Cmmn , Cmna , Cmnb , Cmnn , Cmaa , Cmab , Cman , Cmam , Cmca , Cmcb , Cmcn , Cmcn , Cbmm , Cbmn , Cbma , Cbmb , Cbnm , Cbna , Cbnb , Cbnn , Cbaa , Cbab , Cban , Cbam , Cbca , Cbcb , Cbcn , Cbcm , Cnmm , Cnma , Cnmm , Cnmb , Cnmm , Cnna , Cnmb , Cnmm , Cnaa , Cnab , Cnan , Cnam , Cnca , Cncb , Cncn , Cncm , Ccmm , Ccmm , Ccma , Ccmb , Ccmm , Ccna , Ccnb , Ccnn , Ccaa , Ccab , Ccan , Ccam , Ccca , Cccb , Cccn , Cccm .

Groupes d'espace dérivés de la classe mmm :

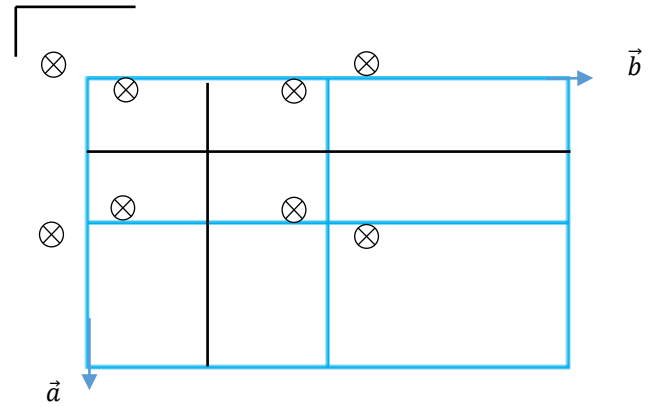
Cmmm



m relatif à \vec{a} à $z = 0$, $2^{\text{ème}}$ m relatif à \vec{b} à $y = 0$ et $3^{\text{ème}}$ m relatif à \vec{c} à $z = 0$.

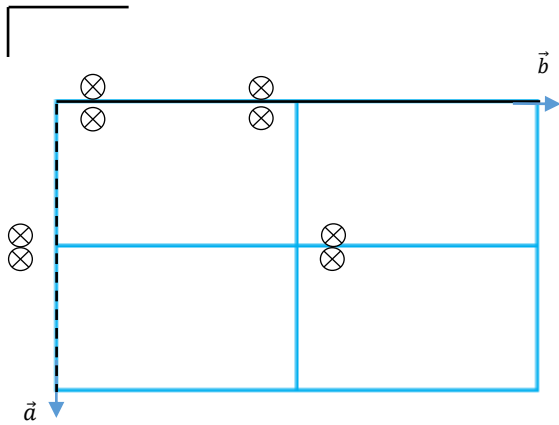


m relatif à \vec{a} à $x = \frac{1}{2}$, $2^{\text{ème}}$ m relatif à \vec{b} à $y = 0$ et $3^{\text{ème}}$ m relatif à \vec{c} à $z = 0$.

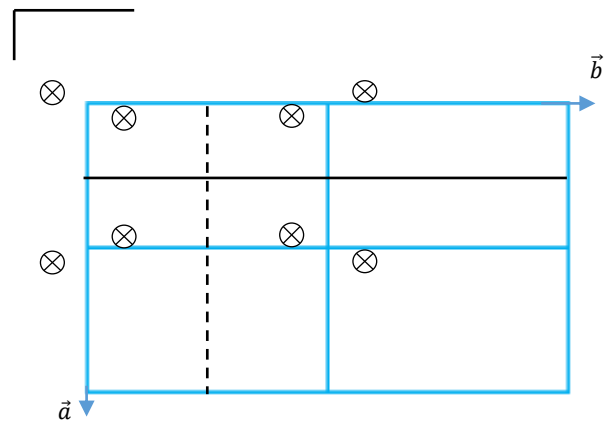


m relatif à \vec{a} à $x = \frac{1}{2}$, $2^{\text{ème}}$ m relatif à \vec{b} à $y = \frac{1}{2}$ et $3^{\text{ème}}$ m relatif à \vec{c} à $z = 0$.

C_{mam}

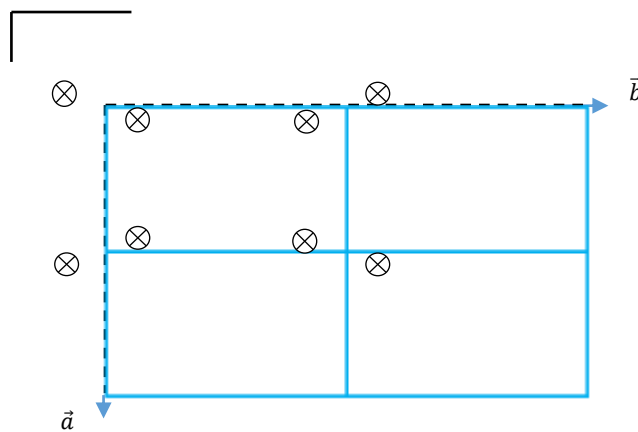


m relatif à \vec{a} à $x = 0$, a relatif à \vec{b} à $y = 0$ et m relatif à \vec{c} à $z = 0$.



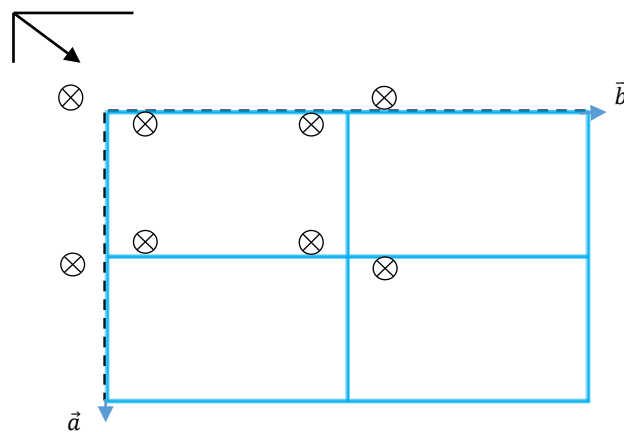
m relatif à \vec{a} à $x = \frac{1}{2}$, a relatif à \vec{b} à $y = \frac{1}{2}$ et m relatif à \vec{c} à $z = 0$.

C_{bam}



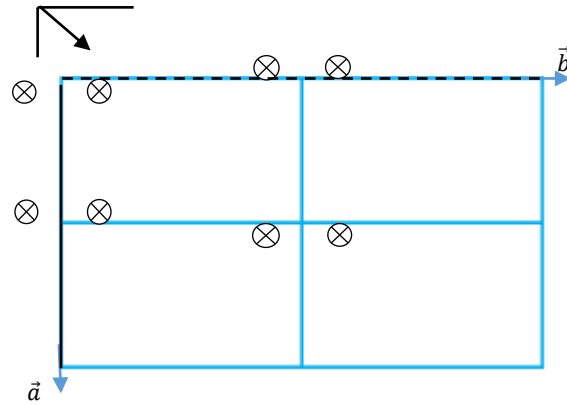
b relatif à \vec{a} à $x = 0$, a relatif à \vec{b} à $y = 0$ et m relatif à \vec{c} à $z = 0$.

C_{ban}



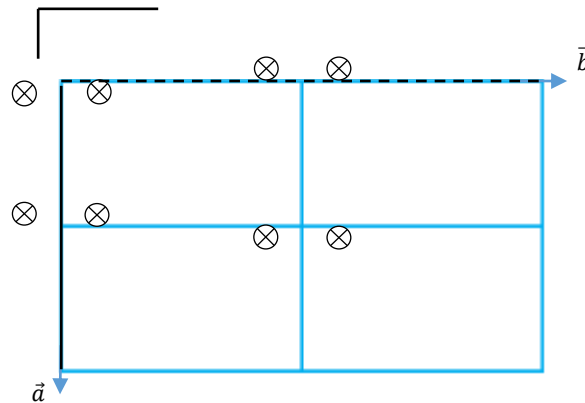
b relatif à \vec{a} à $x = 0$, a relatif à \vec{b} à $y = 0$ et n relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cbmn



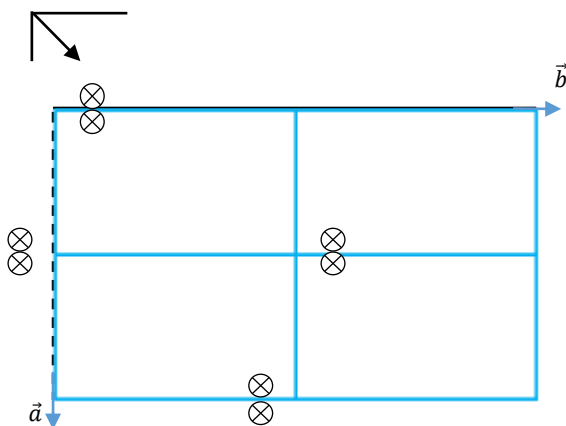
b relatif à \vec{a} à $x = 0$, m relatif à \vec{b} à $y = 0$ et n relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cbmm

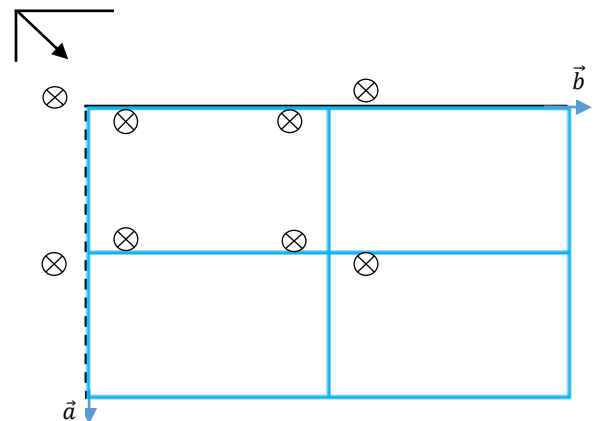


b relatif à \vec{a} à $x = 0$, m relatif à \vec{b} à $y = 0$ et m relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cman

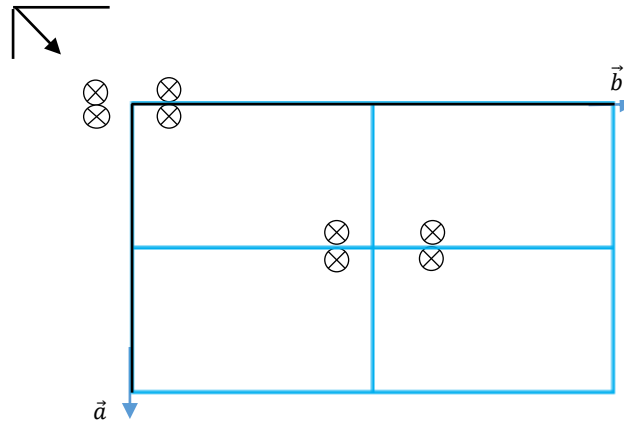


m relatif à \vec{a} à $x = 0$, a relatif à \vec{b} à $y = 0$ et 3^{ème} n relatif à \vec{c} à $z = 0$.



m relatif à \vec{a} à $x = \frac{1}{2}$, a relatif à \vec{b} à $y = 0$ et n relatif à \vec{c} à $z = 0$.

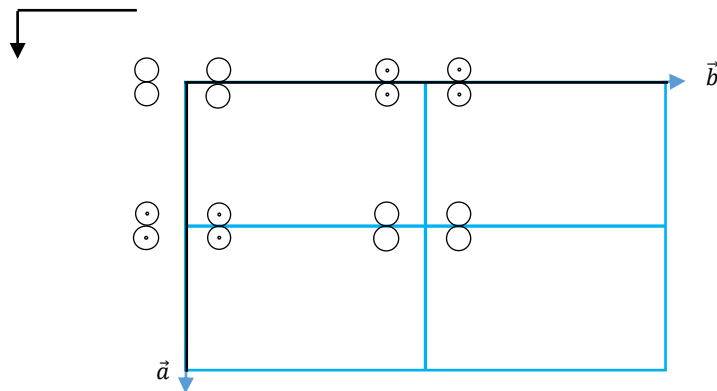
Cmmm



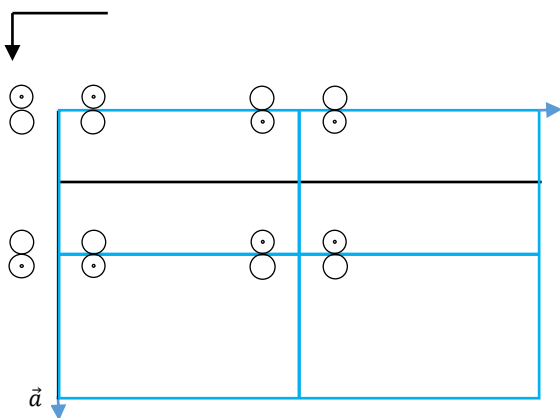
m relatif à \vec{a} à $x = 0$, $2^{\text{ème}}$ m relatif à \vec{b} à $y = 0$ et n relatif à \vec{c} à $z = 0$.

On observe que les groupes Cmmm, Cmam, Cbam, Cban, Cbmn, Cbmm, Cman et Cmmn sont identiques, on choisit le groupe Cmmm.

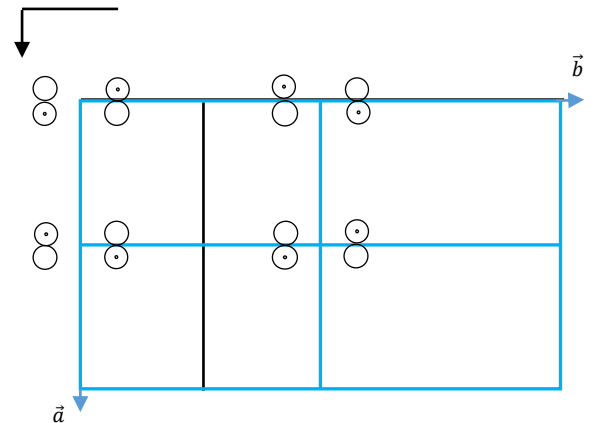
Cmma



m relatif à \vec{a} à $x = 0$, 2^{ème} m relatif à \vec{b} à $y = 0$ et a relatif à \vec{c} à $z = 0$.

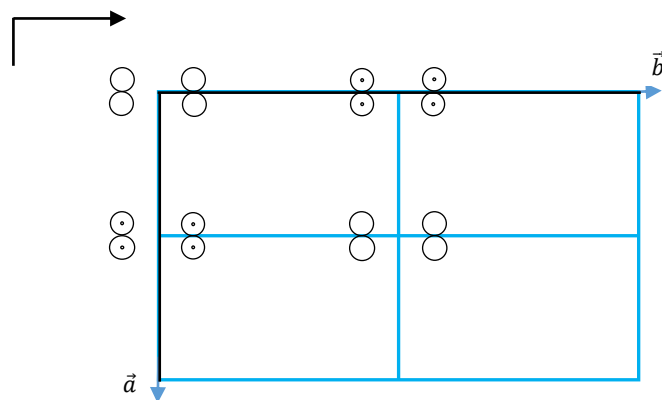


m relatif à \vec{a} à $x = \frac{1}{2}$, 2^{ème} m relatif à \vec{b} à $y = 0$ et n relatif à \vec{c} à $z = 0$.



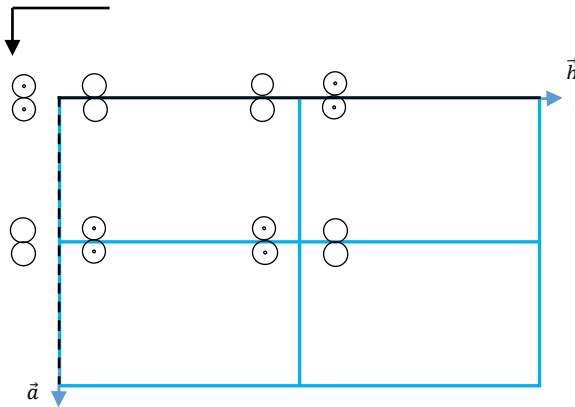
m relatif à \vec{a} à $x = 0$, 2^{ème} m relatif à \vec{b} à $y = \frac{1}{2}$ et n relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cmmb

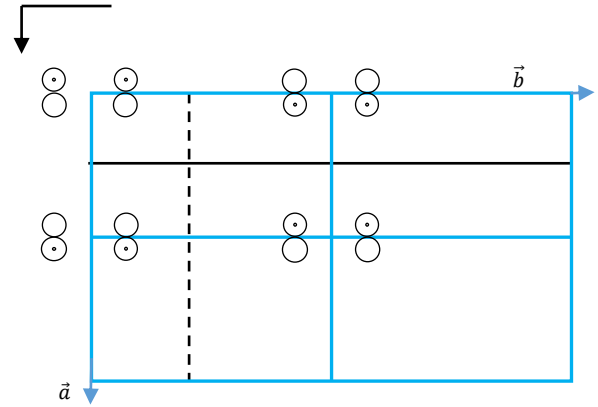


m relatif à \vec{a} à $x = 0$, 2^{ème} m relatif à \vec{b} à $y = 0$ et b relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cmaa

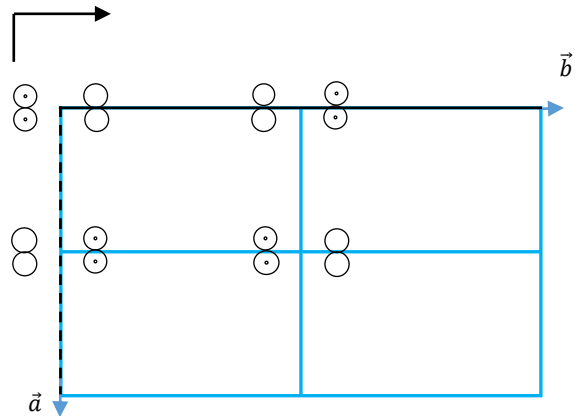


m relatif à \vec{a} à $x = 0$, a relatif à \vec{b} à $y = 0$ et a relatif à \vec{c} à $z = 0$.

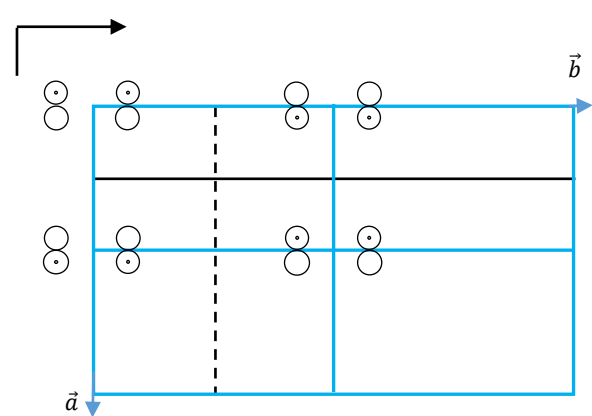


m relatif à \vec{a} à $x = \frac{1}{2}$, a relatif à \vec{b} à $y = \frac{1}{2}$ et a relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cmab

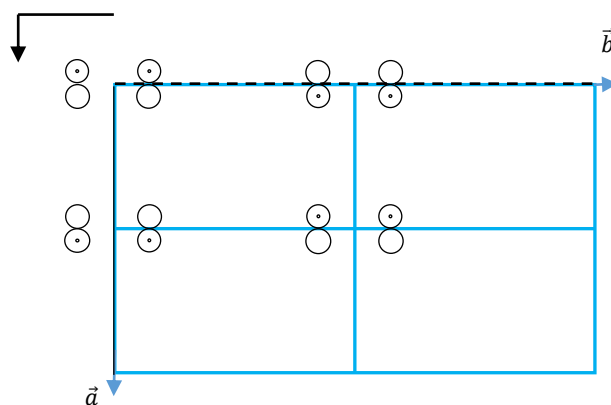


m relatif à \vec{a} à $x = 0$, a relatif à \vec{b} à $y = 0$ et b relatif à \vec{c} à $z = 0$.



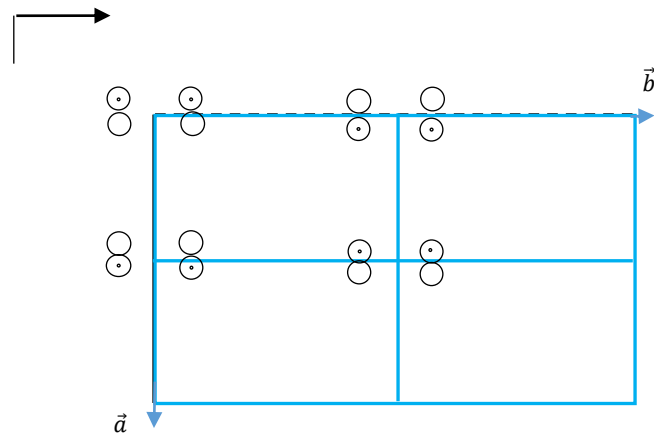
m relatif à \vec{a} à $x = \frac{1}{2}$, a relatif à \vec{b} à $y = \frac{1}{2}$ et b relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cbma



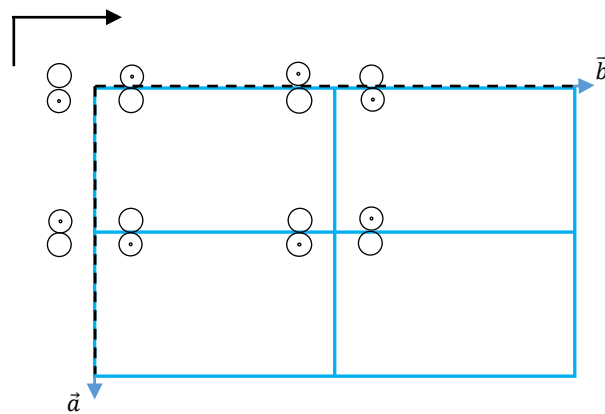
b relatif à \vec{a} à $x = 0$, m relatif à \vec{b} à $y = 0$ et a relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cbmb



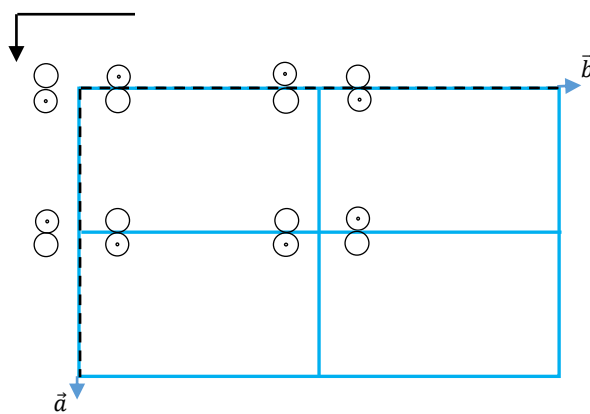
b relatif à \vec{a} à $x = 0$, m relatif à \vec{b} à $y = 0$ et b relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cbab



b relatif à \vec{a} à $x = 0$, a relatif à \vec{b} à $y = 0$ et b relatif à \vec{c} à $z = 0$.

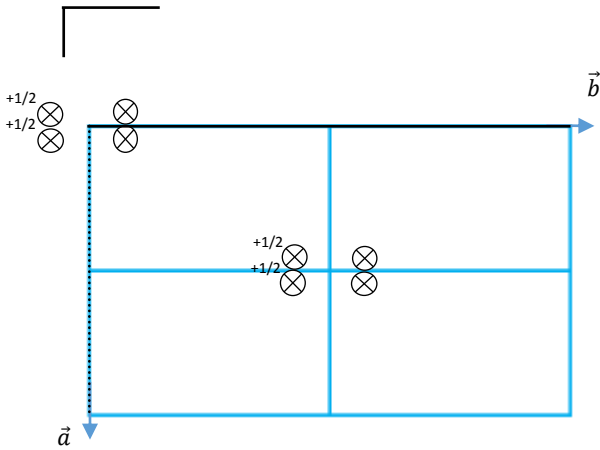
Cbaa



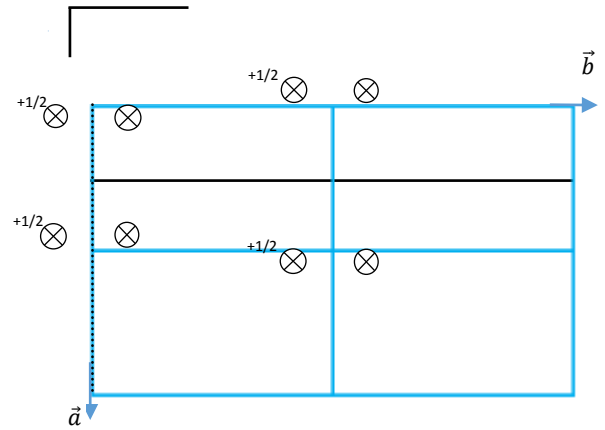
b relatif à \vec{a} à $x = 0$, a relatif à \vec{b} à $y = 0$ et a relatif à \vec{c} à $z = 0$.

On observe que les groupes $Cmma$, $Cmmb$, $Cmaa$, $Cmab$, $Cbma$, $Cbmb$, $Cbaa$ et $Cbab$ sont identiques donc on choisit le groupe $Cmma$.

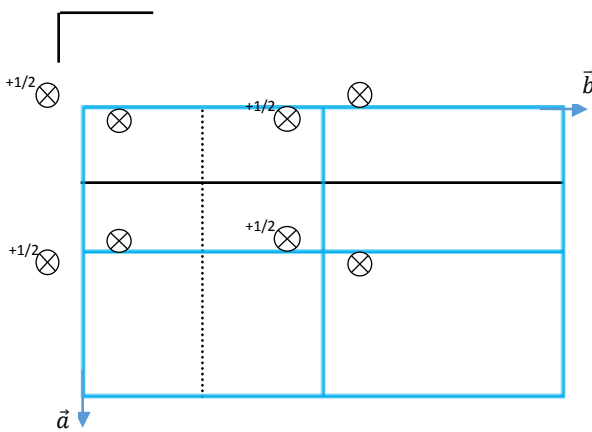
Cmcm



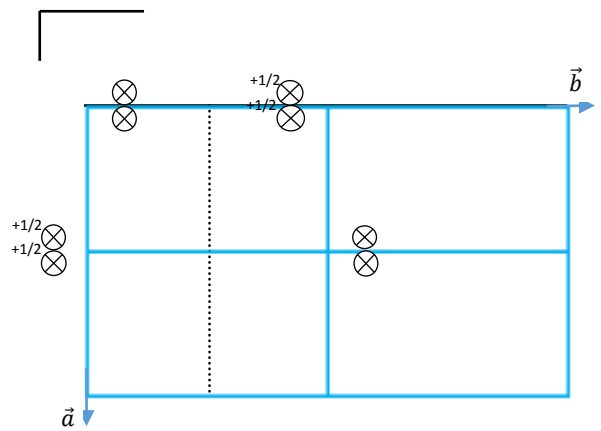
m relatif à \vec{a} à $x = 0$, c relatif à \vec{b}
à $y = 0$ et m relatif à \vec{c} à $z = 0$.



m relatif à \vec{a} à $x = \frac{1}{2}$, c relatif à \vec{b}
à $y = 0$ et m relatif à \vec{c} à $z = 0$.

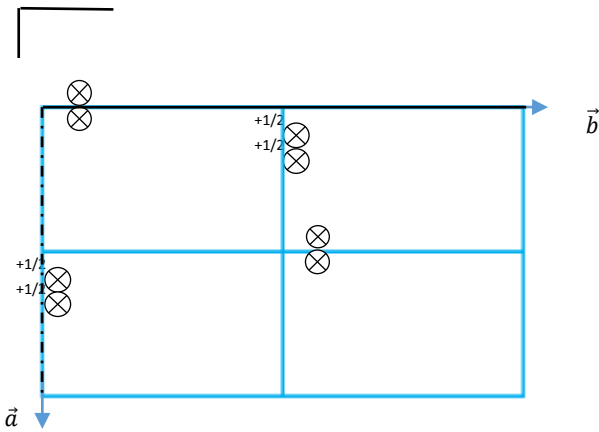


m relatif à \vec{a} à $x = \frac{1}{2}$, c relatif à \vec{b}
à $y = \frac{1}{2}$ et m relatif à \vec{c} à $z = 0$.

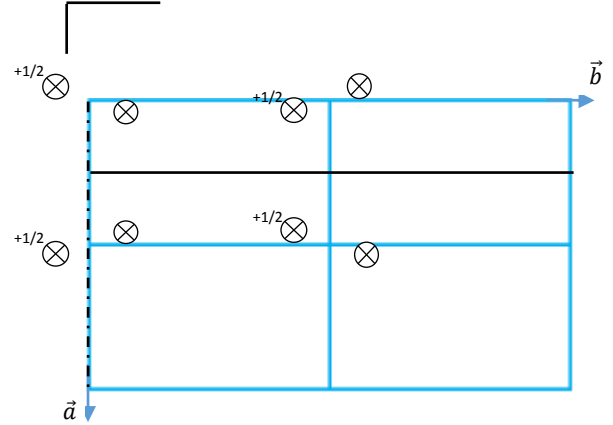


m relatif à \vec{a} à $x = 0$, c relatif à \vec{b}
à $y = \frac{1}{2}$ et 3^{ème} m relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cmmm

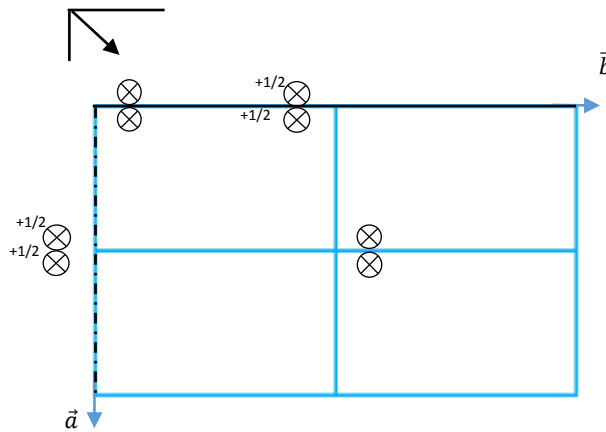


m relatif à \vec{a} à $x = 0$, n relatif à \vec{b}
à $y = 0$ et m relatif à \vec{c} à $z = 0$.



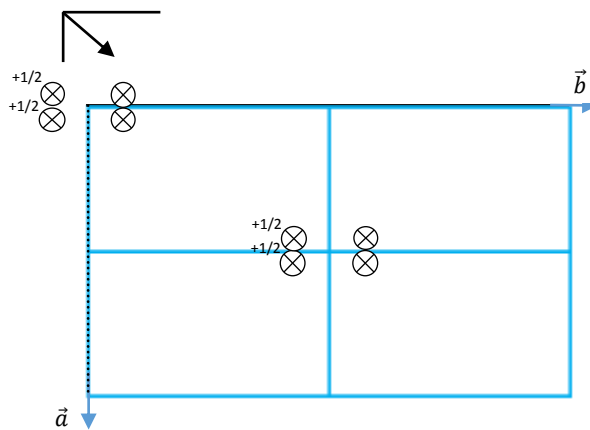
m relatif à \vec{a} à $x = \frac{1}{2}$, n relatif à \vec{b}
à $y = 0$ et m relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cmnn



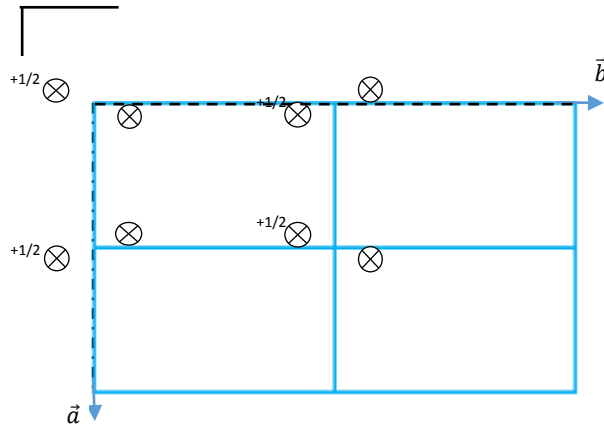
m relatif à \vec{a} à $x = 0$, n relatif à \vec{b} à $y = 0$ et n relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cmnc



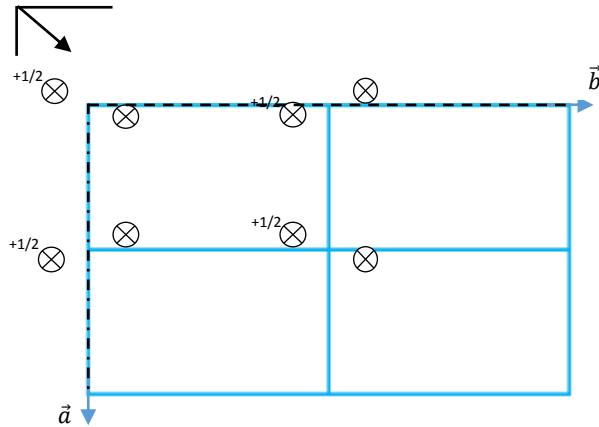
m relatif à \vec{a} à $x = 0$, c relatif à \vec{b} à $y = 0$ et n relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cbnm



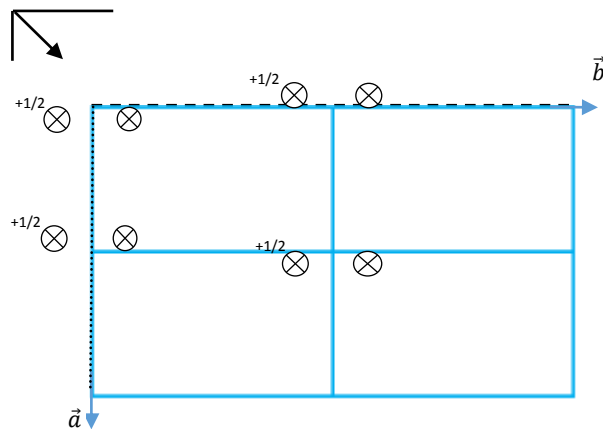
c relatif à \vec{a} à $x = 0$, n relatif à \vec{b} à $y = 0$ et m relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cbnn



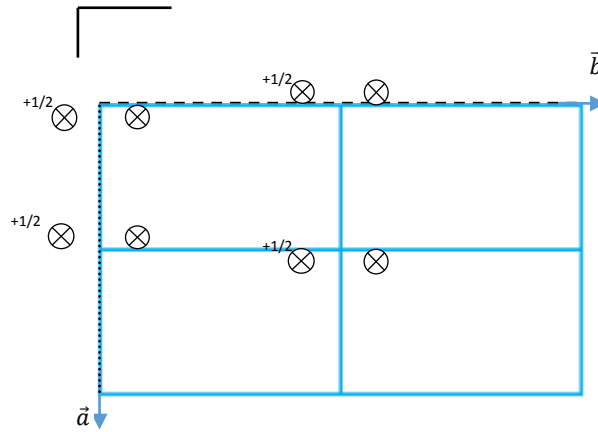
b relatif à \vec{a} à $x = 0$, n relatif à \vec{b} à $y = 0$ et n relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cbcn



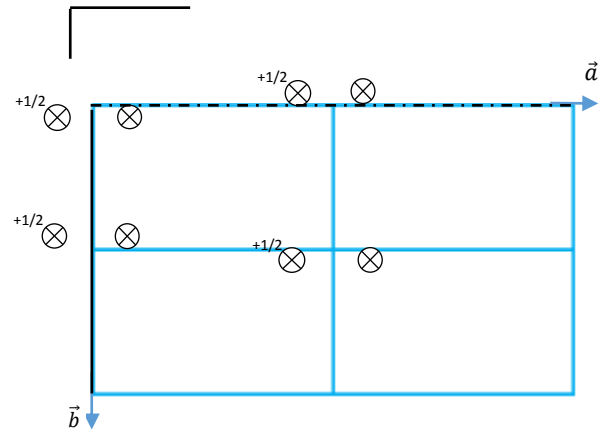
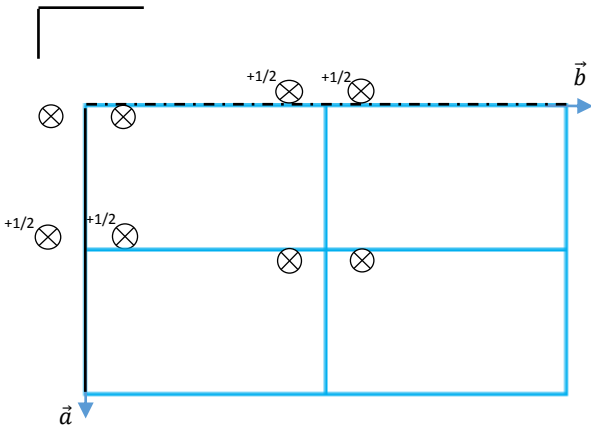
b relatif à \vec{a} à $x = 0$, c relatif à \vec{b} à $y = 0$ et n relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cbcm



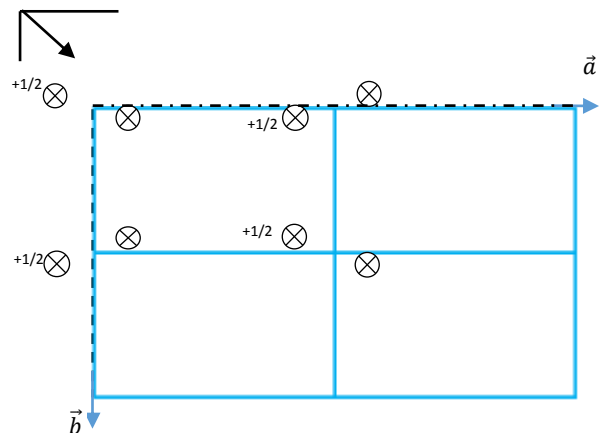
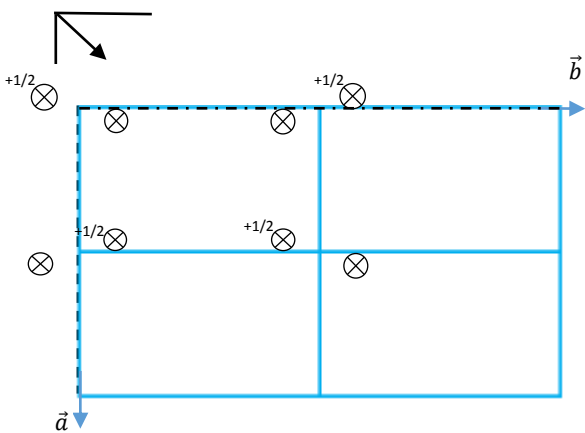
b relatif à \vec{a} à $x = 0$, c relatif à \vec{b} à $y = 0$ et m relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cnmm



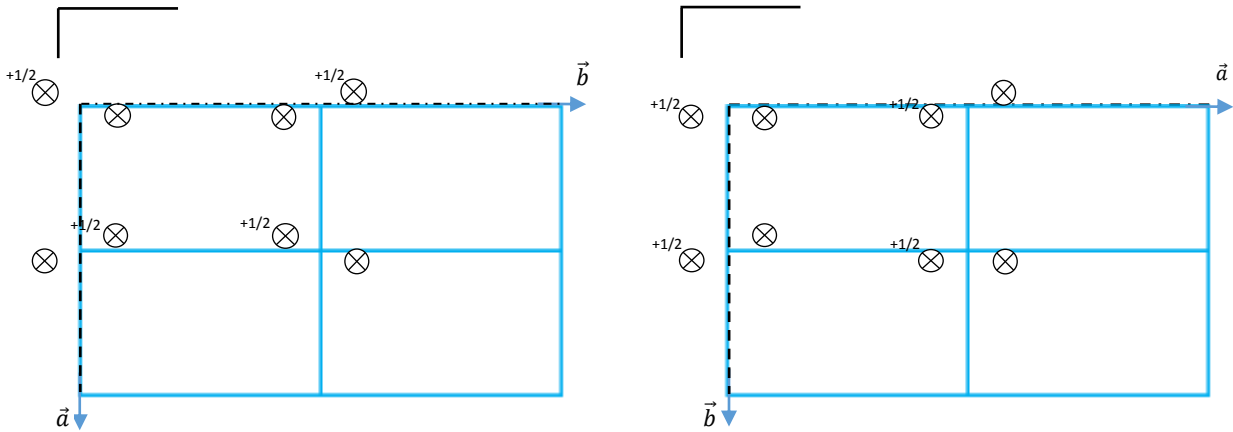
n relatif à \vec{a} à $x = 0$, m relatif à \vec{b} à $y = 0$ et m relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cnan



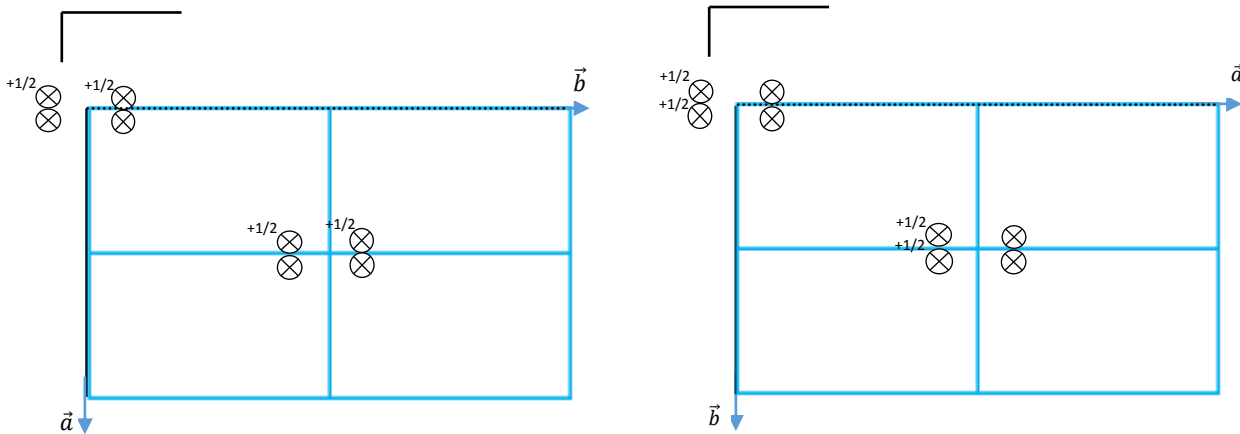
n relatif à \vec{a} à $x = 0$, a relatif à \vec{b} à $y = 0$ et n relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cnam



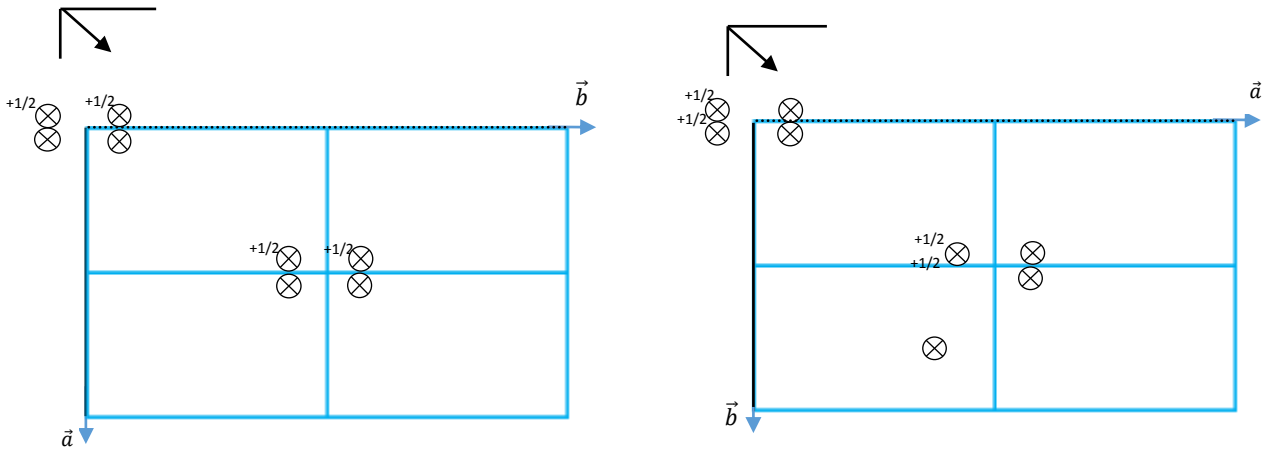
n relatif à \vec{a} à $x = 0$, a relatif à \vec{b} à $y = 0$ et m relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Ccmm



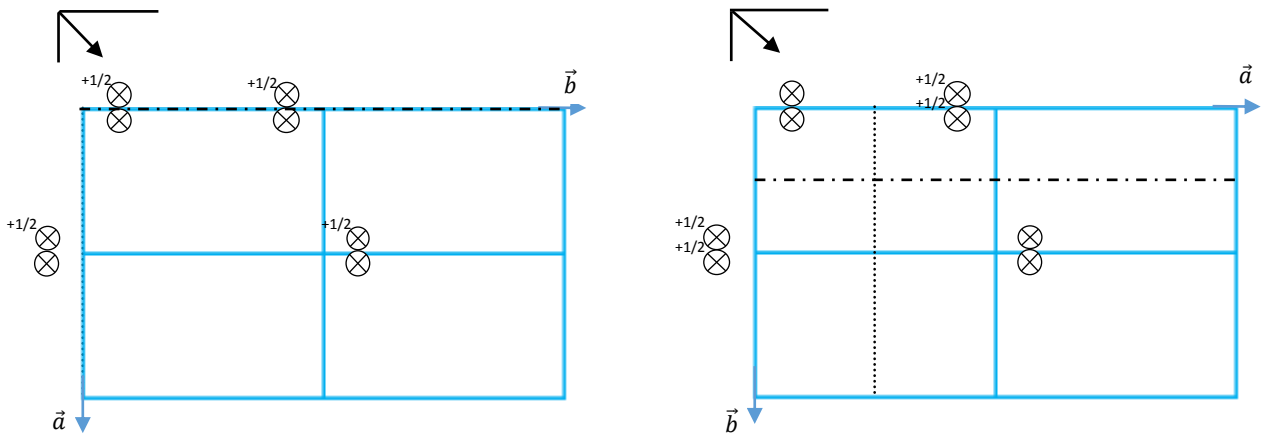
C relatif à \vec{a} à $x = 0$, m relatif à \vec{b} à $y = \frac{1}{2}$ et m relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Ccmm



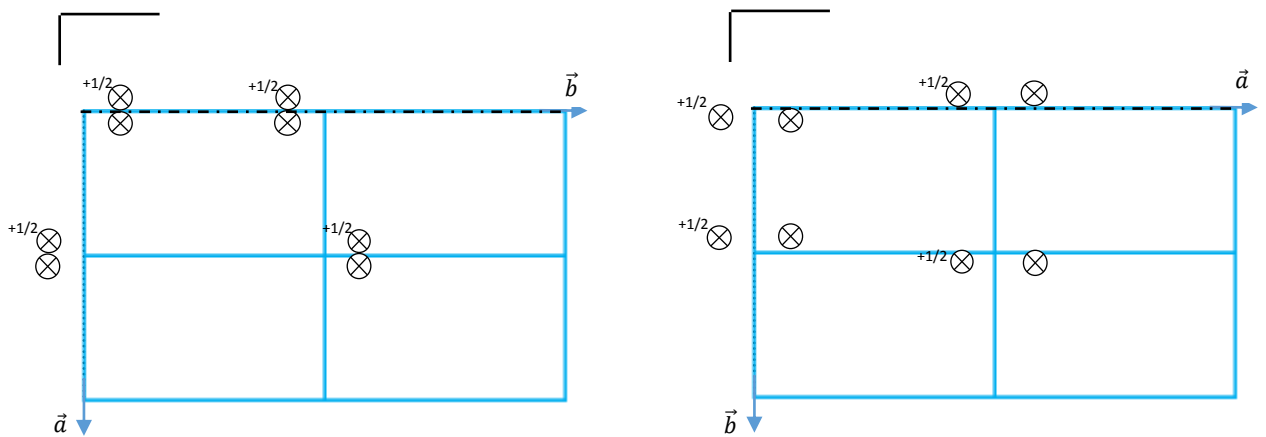
c relatif à \vec{a} à $x = 0$, m relatif à \vec{b} à $y = 0$ et n relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Ccan



c relatif à \vec{a} à $x = 0$, a relatif à \vec{b} à $y = 0$ et n relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Ccam



c relatif à \vec{a} à $x = 0$, a relatif à \vec{b} à $y = 0$ et m relatif à \vec{c} à $z = 0$.

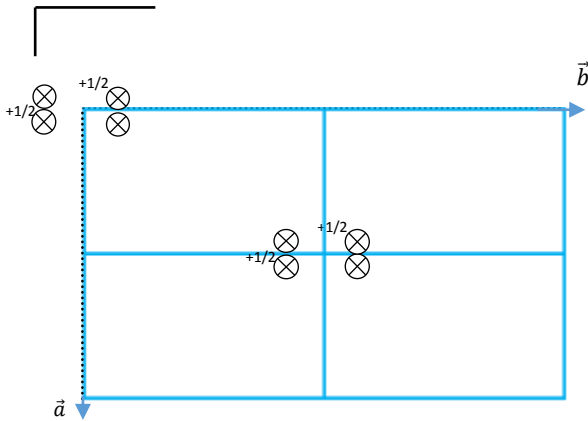
c relatif à \vec{a} à $x = 0$, a relatif à \vec{b} à $y = 0$ et m relatif à \vec{c} à $z = 0$.

On observe que les groupes Cmcn, Cmam, Cmnm, Cmnn, Cmcn, Cbnm, Cbnn, Cbcn et Cbcm sont identiques.

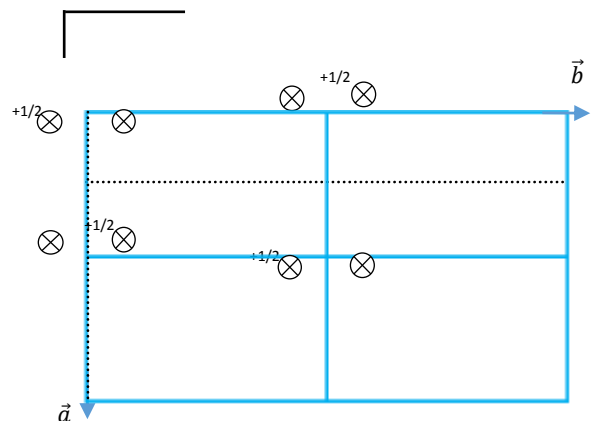
Par une permutation des axes \vec{a} et \vec{b} on transforme : Cnmm en Cmcn, Cnan en Cmcn, Cnam en Cmcn, Ccmm en Cmcn, Ccmn en Cmcn, Ccan en Cmcn et Ccam en mcm..

Alors, on choisit le groupe Cmcn.

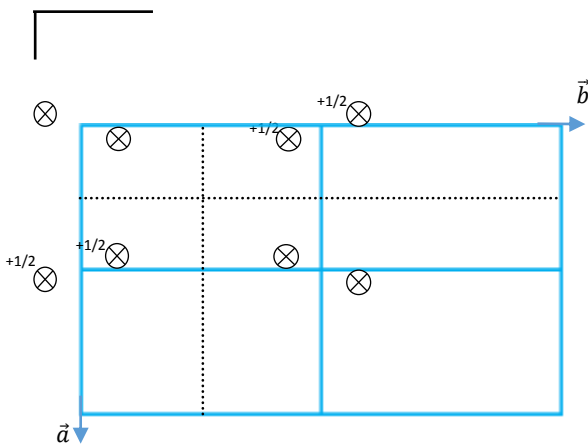
Cccm



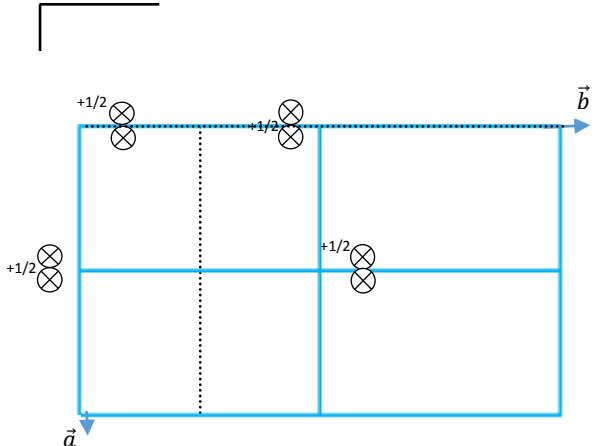
c relatif à \vec{a} à $x = 0$, c relatif à \vec{b} à $y = 0$ et m relatif à \vec{c} à $z = 0$.



c relatif à \vec{a} à $x = \frac{1}{2}$, c relatif à \vec{b} à $y = 0$ et m relatif à \vec{c} à $z = 0$.

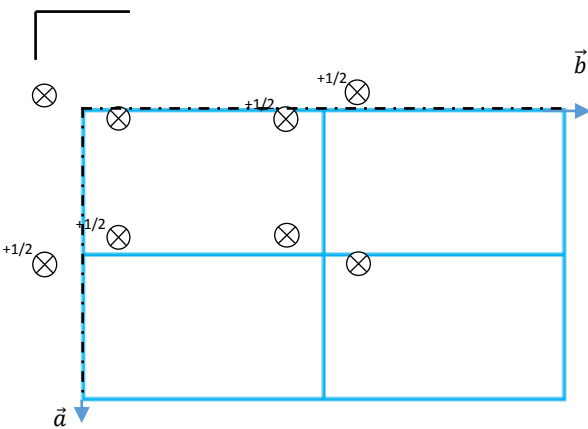


c relatif à \vec{a} à $x = \frac{1}{2}$, c relatif à \vec{b} à $y = \frac{1}{2}$ et m relatif à \vec{c} à $z = 0$.

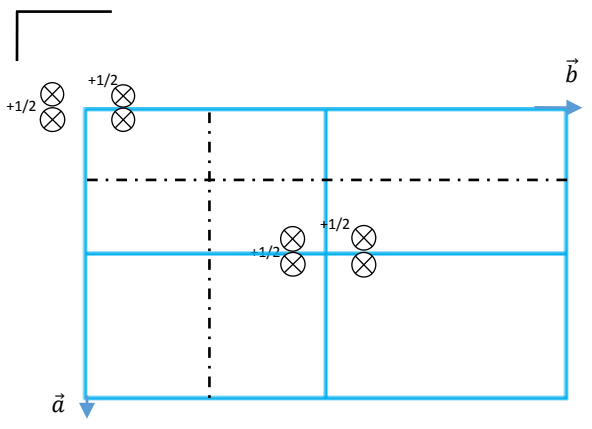


c relatif à \vec{a} à $x = 0$, c relatif à \vec{b} à $y = \frac{1}{2}$ et m relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cnm

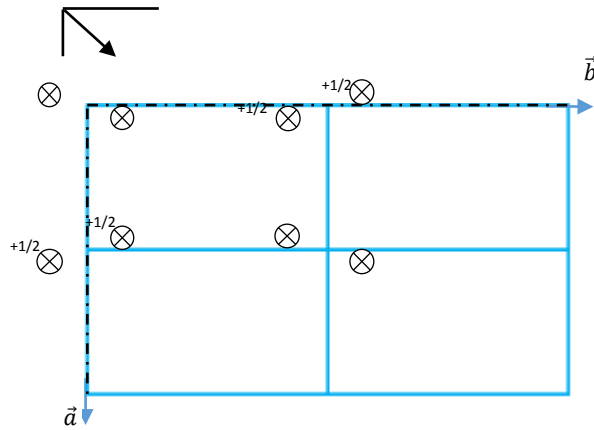


n relatif à \vec{a} à $x = 0$, n relatif à \vec{b} à $y = 0$ et m relatif à \vec{c} à $z = 0$.



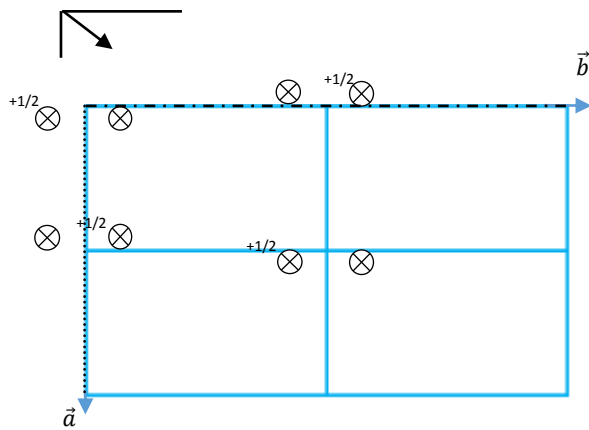
n relatif à \vec{a} à $x = \frac{1}{2}$, c relatif à \vec{b} à $y = \frac{1}{2}$ et m relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cnnn



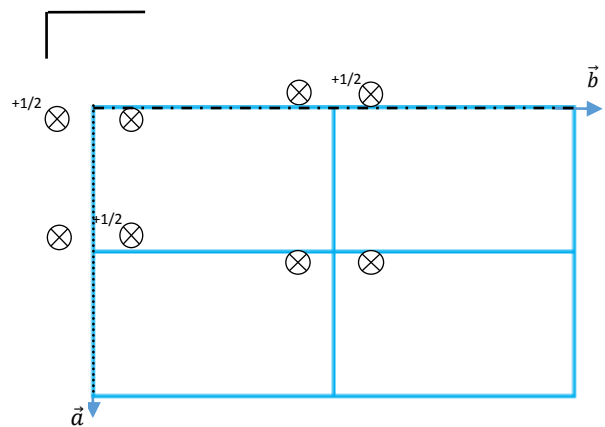
c relatif à \vec{a} à $x = 0$, n relatif à \vec{b} à $y = 0$ et n relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cncn



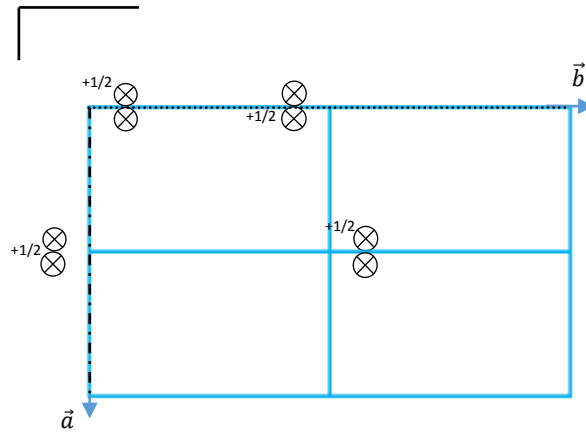
c relatif à \vec{a} à $x = 0$, n relatif à \vec{b} à $y = 0$ et c relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cncm



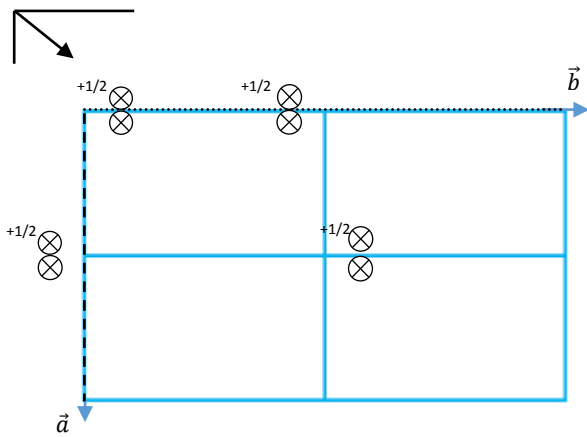
n relatif à \vec{a} à $x = 0$, c relatif à \vec{b} à $y = 0$ n et relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Ccmm

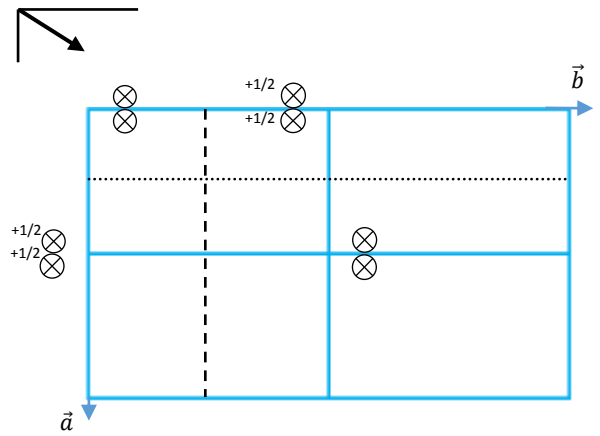


c relatif à \vec{a} à $x = 0$, n relatif à \vec{b} à $y = 0$ et m relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Ccnc

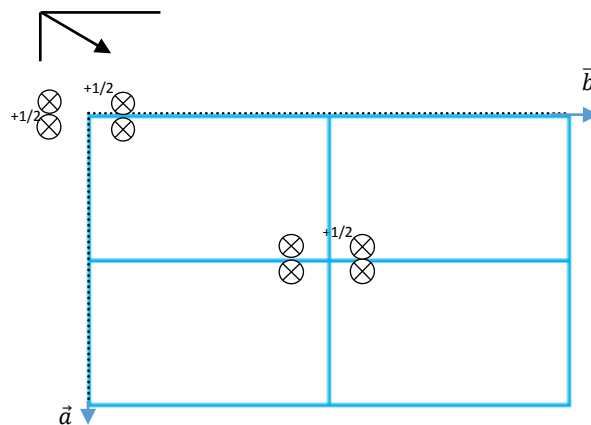


c relatif à \vec{a} à $x = 0$, a relatif à \vec{b} à $y = 0$ et n relatif à \vec{c} à $z = 0$.



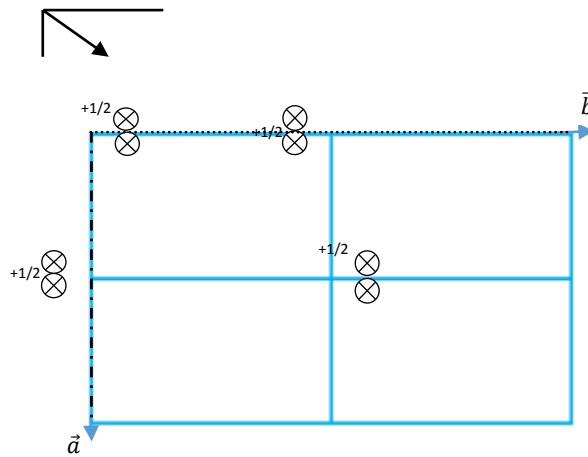
c relatif à \vec{a} à $x = 0$, a relatif à \vec{b} à $y = 0$ et n relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cccn



c relatif à \vec{a} à $x = 0$, c relatif à \vec{b} à $y = 0$ et n relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Ccnn



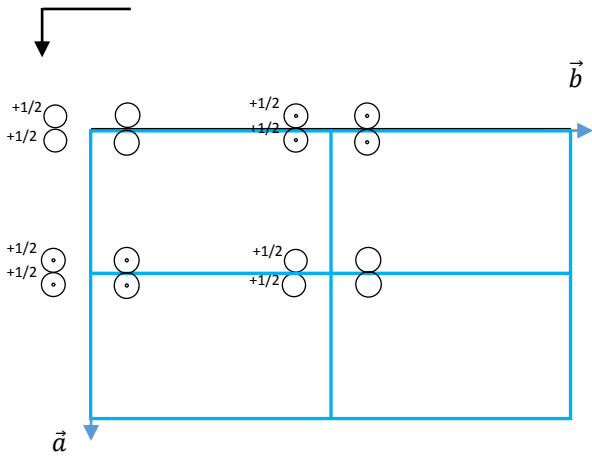
c relatif à \vec{a} à $x = 0$, n relatif à \vec{b} à $y = 0$ et n relatif à \vec{c} à $z = 0$.

On observe que les groupes Cccm, Cnmm, Cnnn, Cncn, Cncm, Ccnm, Cccn et Ccnn sont identiques.

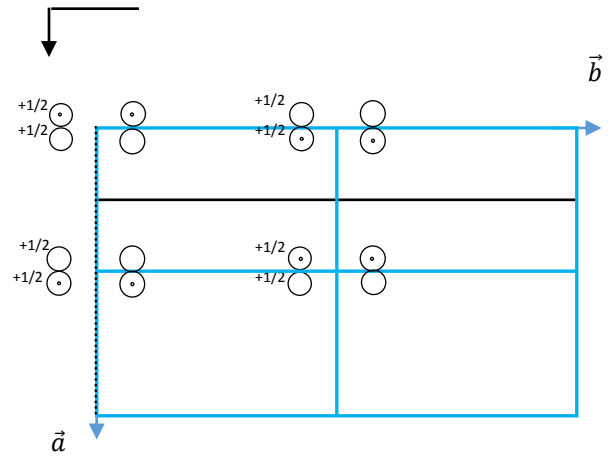
Par une permutation des axes \vec{a} et \vec{b} on transforme : Ccan en Cccm

Donc On choisit le groupe Cccm.

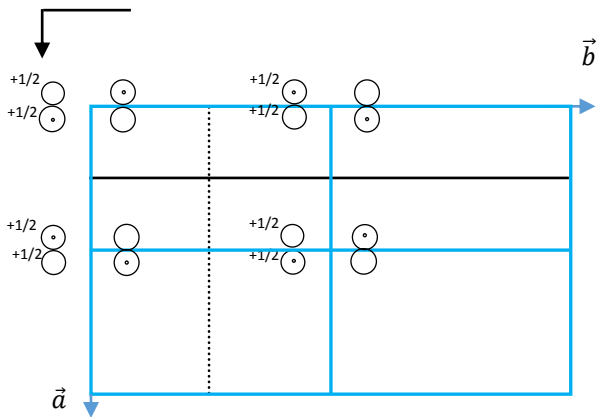
Cmca



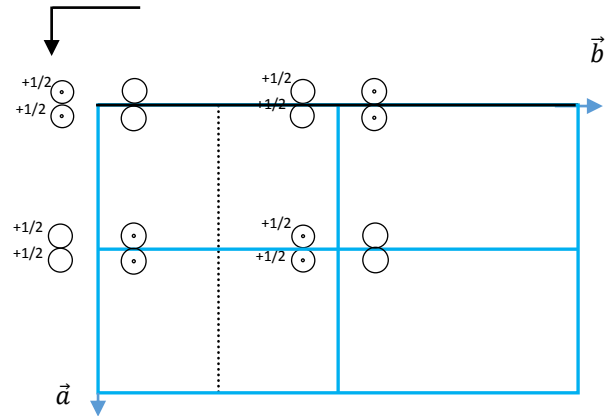
m relatif à \vec{a} à $x = 0$, c relatif à \vec{b} à $y = 0$
et a relatif à \vec{c} à $z = 0$.



m relatif à \vec{a} à $x = \frac{1}{2}$, c relatif à \vec{b}
à $y = 0$ et n relatif à \vec{c} à $z = 0$.

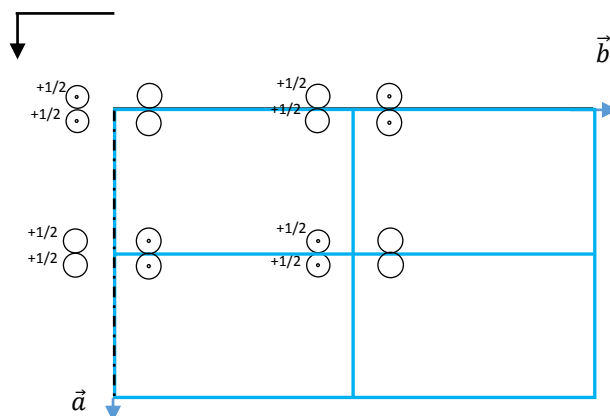


m relatif à \vec{a} à $x = \frac{1}{2}$, c relatif à \vec{b}
à $y = \frac{1}{2}$ et n relatif à \vec{c} à $z = 0$.



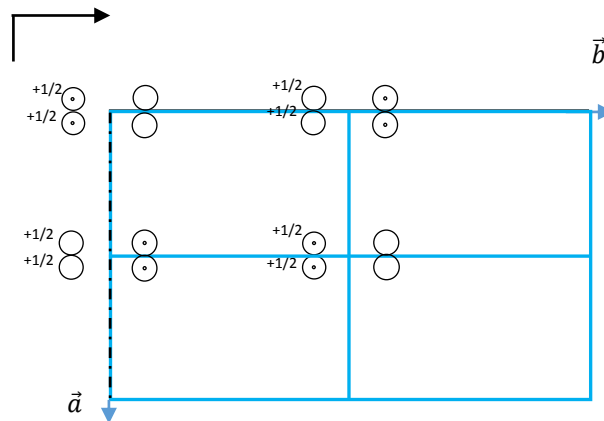
m relatif à \vec{a} à $x = 0$, c relatif à \vec{b}
à $y = \frac{1}{2}$ et c relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cmna



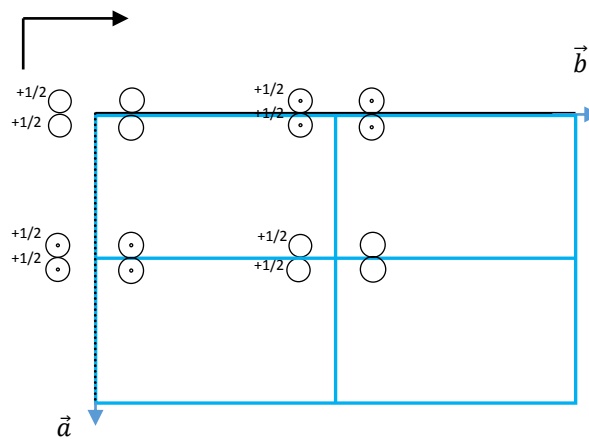
m relatif à \vec{a} à $x = 0$, n relatif à \vec{b} à $y = 0$ et a relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cmnb



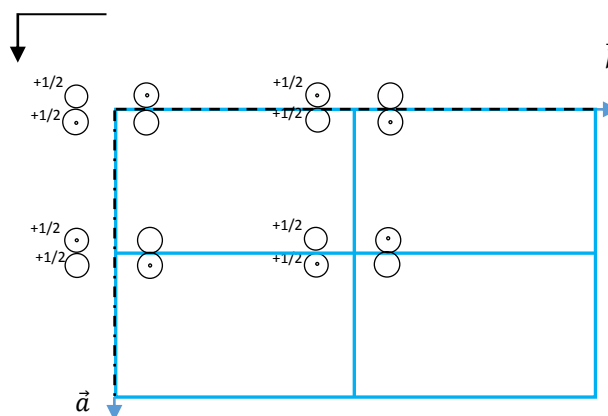
m relatif à \vec{a} à $x = 0$, n relatif à \vec{b} à $y = 0$ et b relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cmcb



m relatif à \vec{a} à $x = 0$, c relatif à \vec{b} à $y = 0$ et b relatif à \vec{c} à $z = 0$.

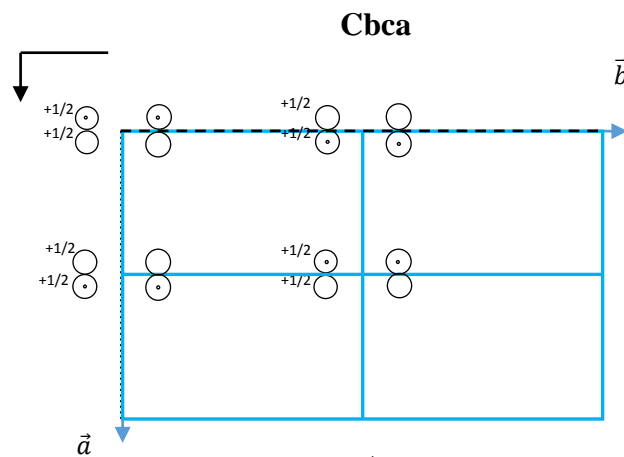
Cbna



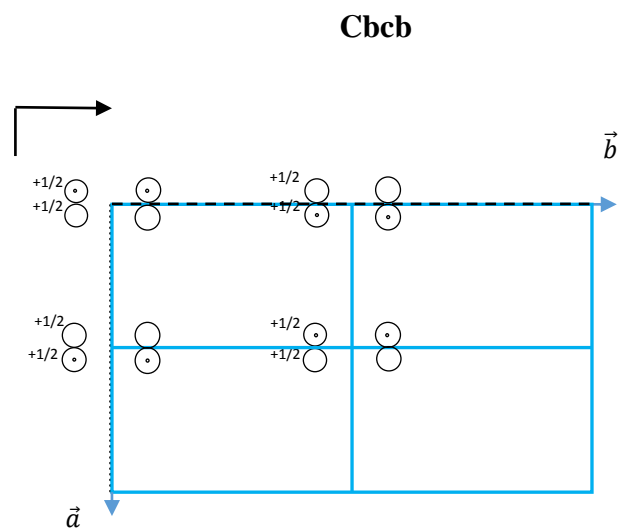
b relatif à \vec{a} à $x = 0$, n relatif à \vec{b} à $y = 0$ et a relatif à \vec{c} à $z = 0$.



b relatif à \vec{a} à $x = 0$, n relatif à \vec{b} à $y = 0$ et b relatif à \vec{c} à $z = 0$.

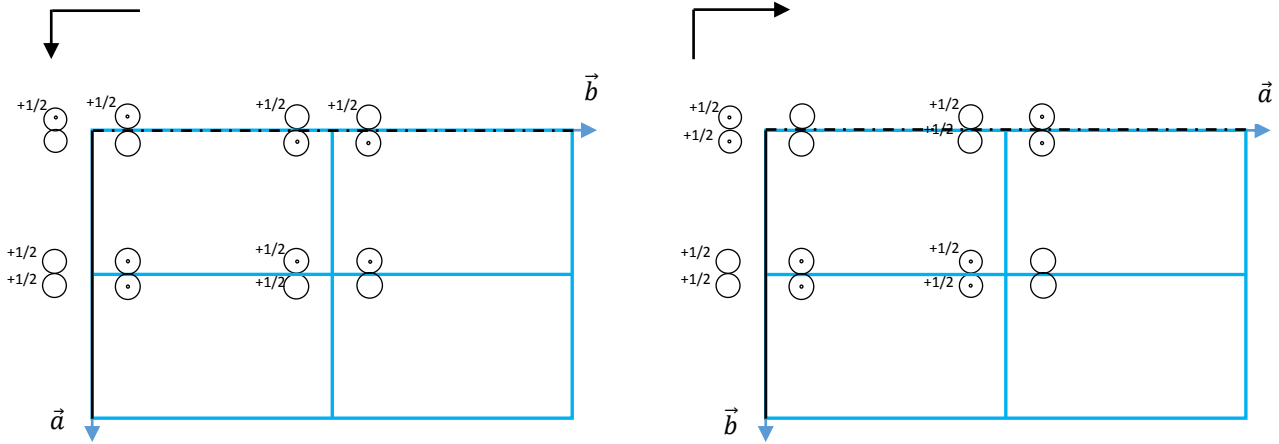


b relatif à \vec{a} à $x = 0$, c relatif à \vec{b} à $y = 0$ et a relatif à \vec{c} à $z = 0$.



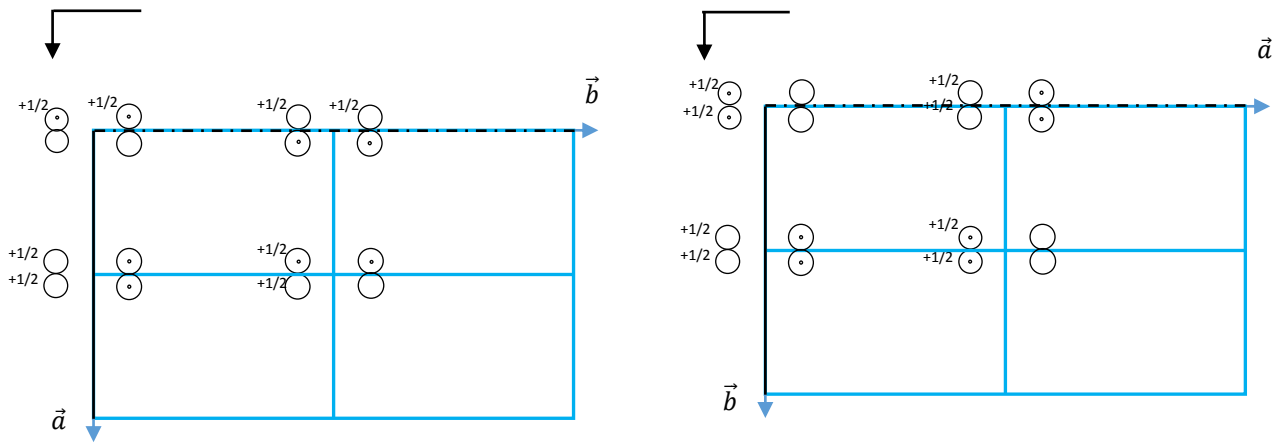
b relatif à \vec{a} à $x = 0$, c relatif à \vec{b} à $y = 0$ et b relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cnma



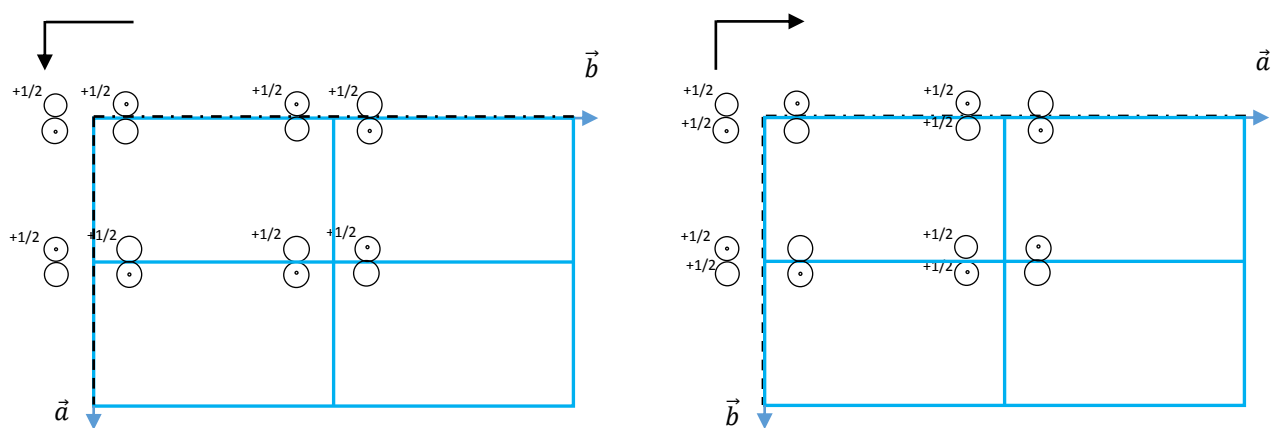
n relatif à \vec{a} à $x = 0$, m relatif à \vec{b} à $y = 0$ et a relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cnmb



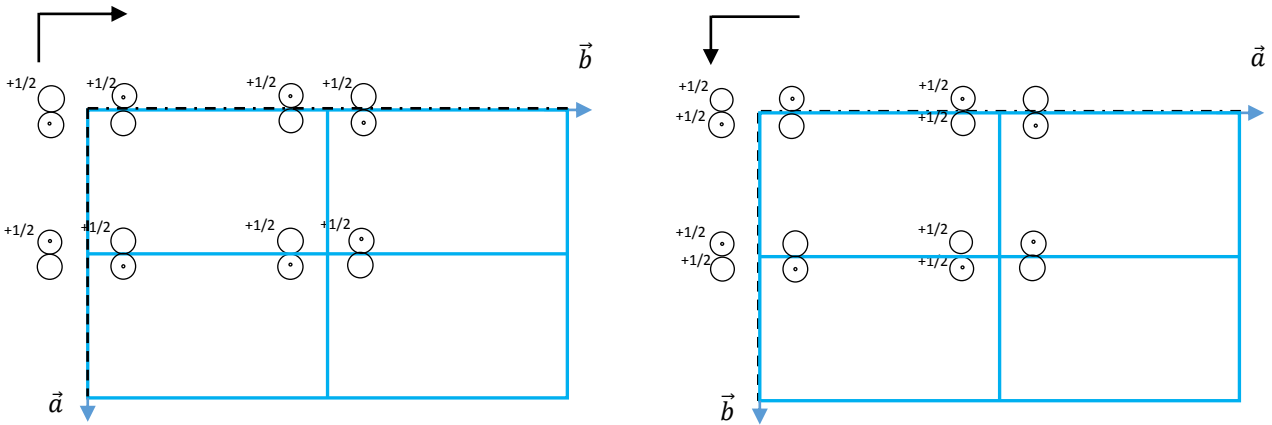
n relatif à \vec{a} à $x = 0$, m relatif à \vec{b} à $y = 0$ et b relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cnaa



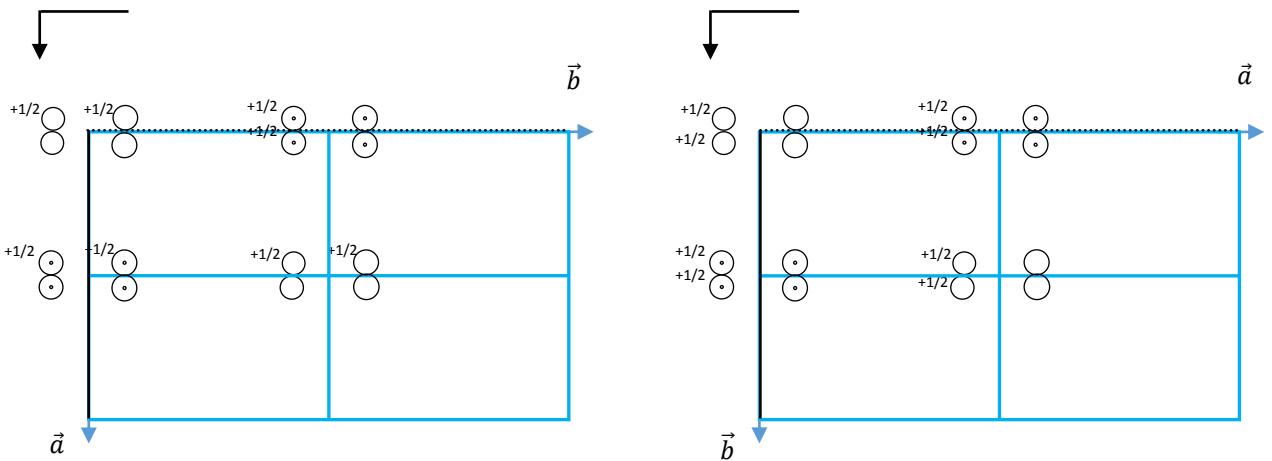
n relatif à \vec{a} à $x = 0$, a relatif à \vec{b} à $y = 0$ et a relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cnab



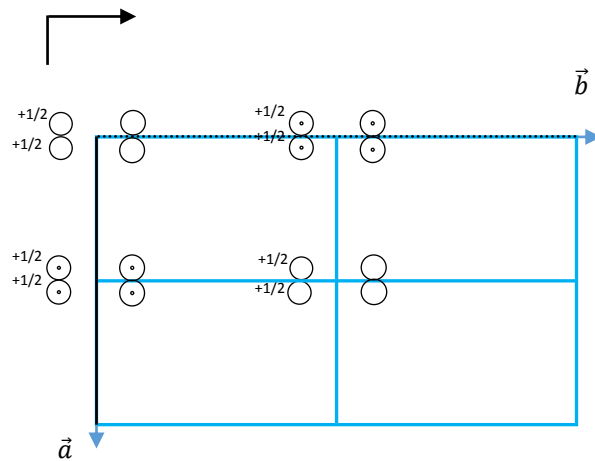
n relatif à \vec{a} à $x = 0$, a relatif à \vec{b} à $y = 0$ et b relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Ccma



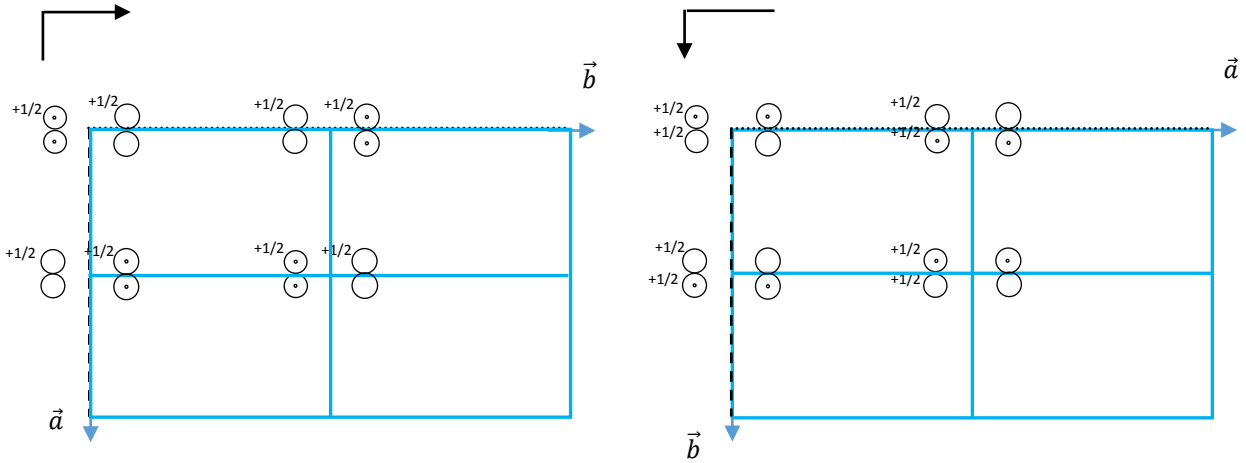
c relatif à \vec{a} à $x = 0$, m relatif à \vec{b} à $y = 0$ et a relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Ccmb



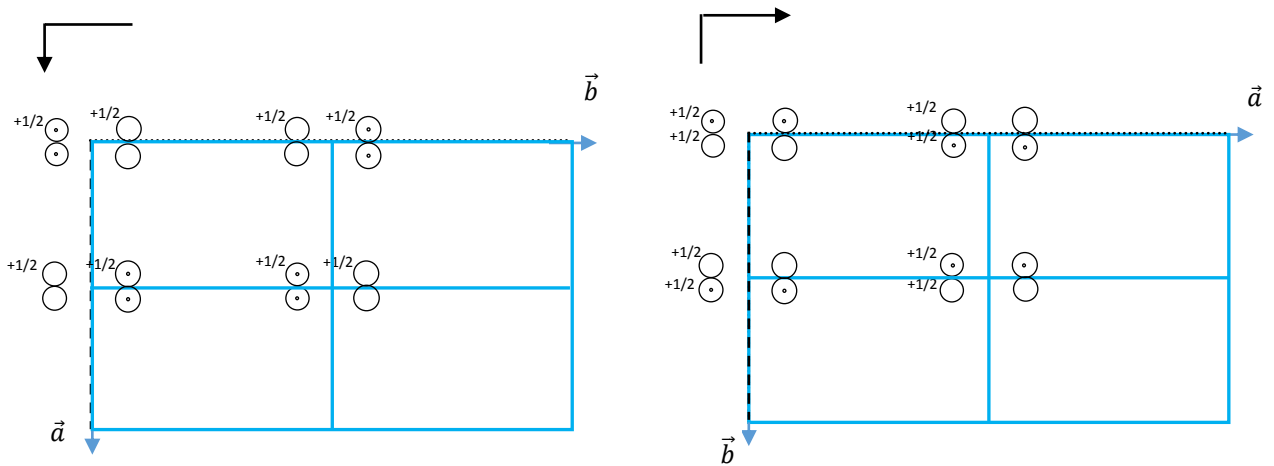
c relatif à \vec{a} à $x = 0$, m relatif à \vec{b} à $y = 0$ et b relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Ccab



c relatif à \vec{a} à $x = 0$, a relatif à \vec{b} à $y = 0$ et b relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Ccaa



c relatif à \vec{a} à $x = 0$, a relatif à \vec{b} à $y = 0$ et a relatif à \vec{c} à $z = 0$.

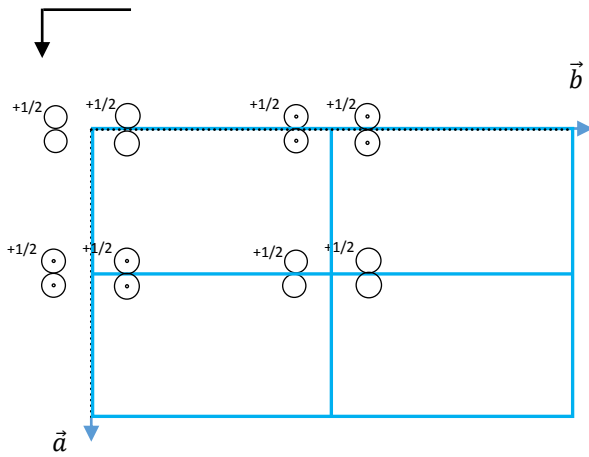
Les groupes Cmca, Cmcb, Cmna, Cbna, Cmnb, Cbnb, Cbca, Cbcb et Ccmb sont identiques.

Par une permutation des axes \vec{a} et \vec{b} on transforme :

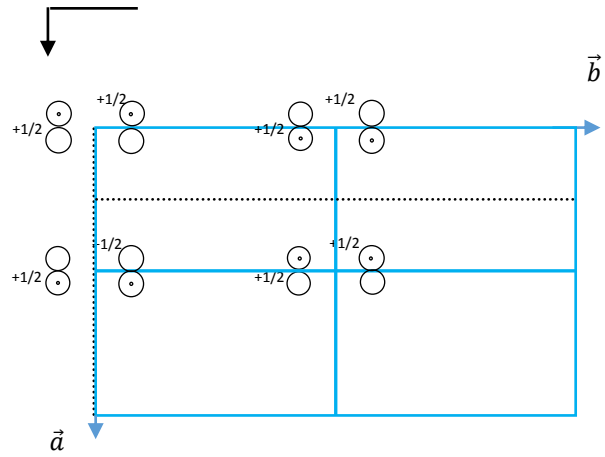
- Cnma en Cmca.
- Cnmb en Cmca.
- Cnaa en Cmca.
- Cnab en Cmca,
- Ccma en Cmca.
- Ccab en Cmca.
- Ccaa en Cmca

Donc on choisit le groupe Cmca.

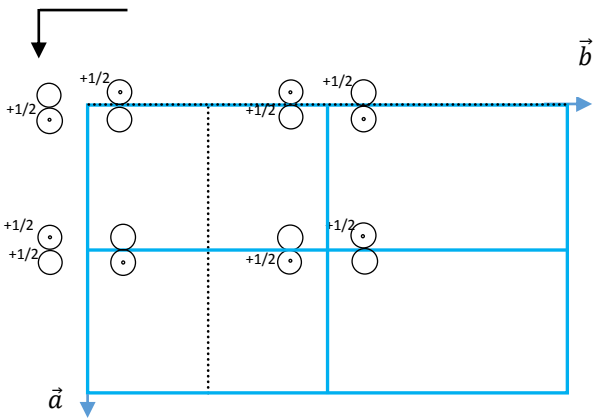
Ccca



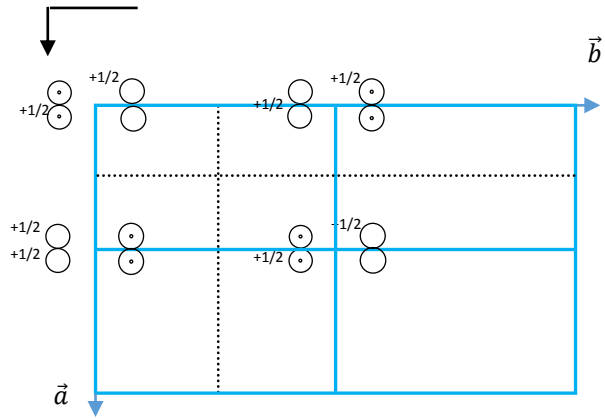
c relatif à \vec{a} à $x = 0$, c relatif à \vec{b}
à $y = 0$ et a relatif à \vec{c} à $z = 0$.



c relatif à \vec{a} à $x = \frac{1}{2}$, c relatif à \vec{b}
à $y = 0$ et a relatif à \vec{c} à $z = 0$.

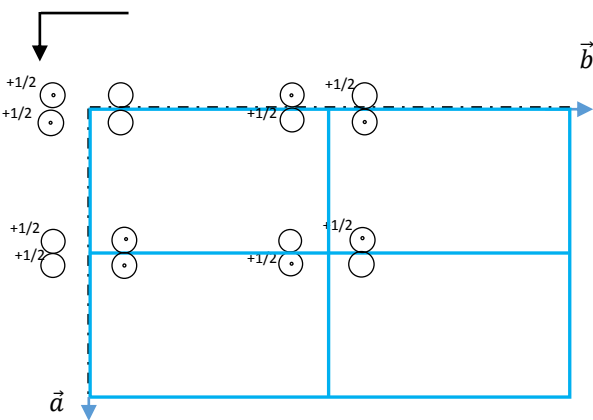


c relatif à \vec{a} à $x = 0$ c relatif à \vec{b}
à $y = \frac{1}{2}$ et a relatif à \vec{c} à $z = 0$.

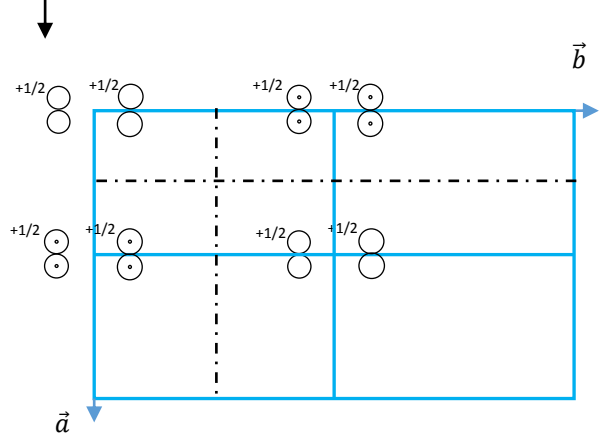


c relatif à \vec{a} à $x = \frac{1}{2}$, c relatif à \vec{b}
à $y = \frac{1}{2}$ et a relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cnna

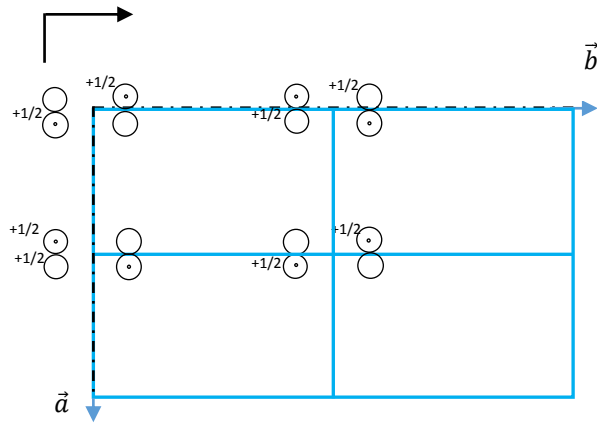


n relatif à \vec{a} à $x = 0$, n relatif à \vec{b}
à $y = 0$ et a relatif à \vec{c} à $z = 0$.



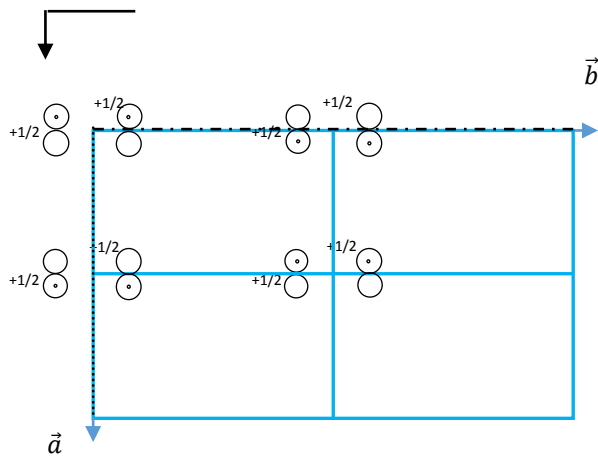
n relatif à \vec{a} à $x = \frac{1}{2}$, n relatif à \vec{b}
à $y = \frac{1}{2}$ et a relatif à \vec{c} à $z = 0$.

C_{nv}b



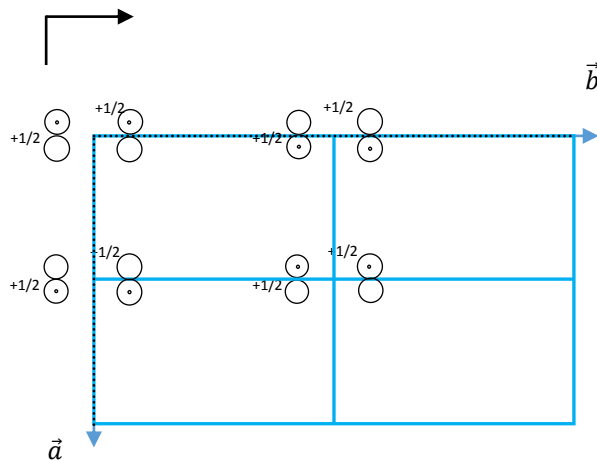
n relatif à \vec{a} à $x = 0$, n relatif à \vec{b} à $y = 0$ et b relatif à \vec{c} à $z = 0$.

C_{nv}a



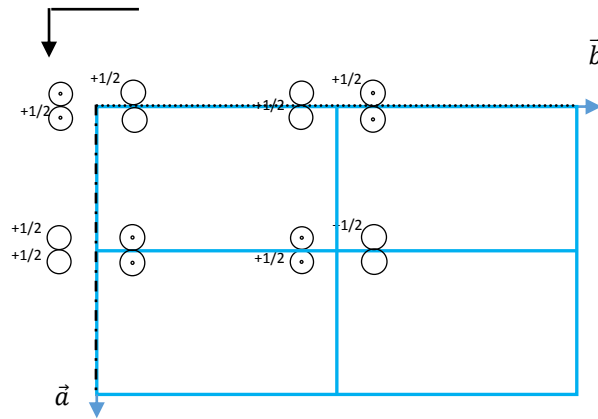
n relatif à \vec{a} à $x = 0$, c relatif à \vec{b} à $y = 0$ et a relatif à \vec{c} à $z = 0$.

C_{nv}b



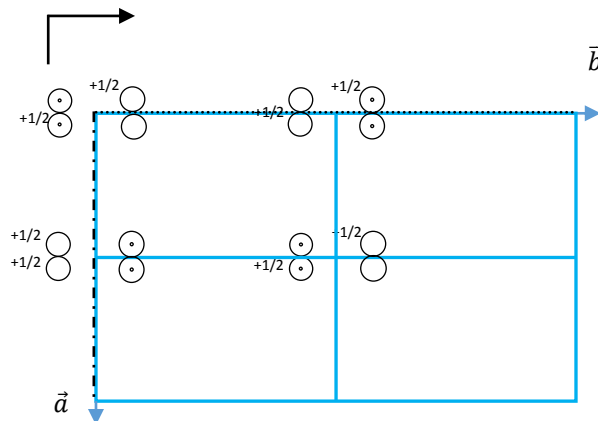
n relatif à \vec{a} à $x = 0$, c relatif à \vec{b} à $y = 0$ et b relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Ccna



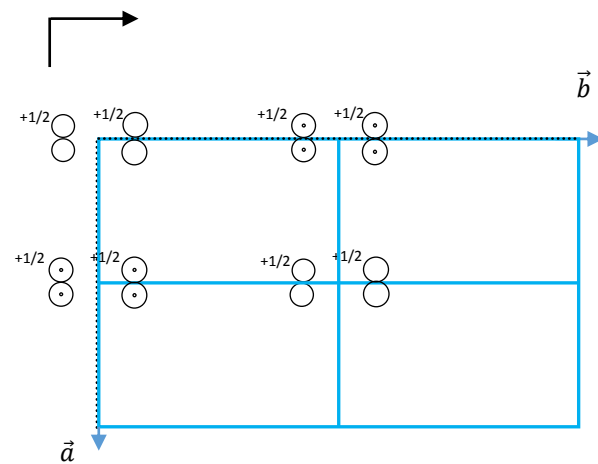
c relatif à \vec{a} à $x = 0$, n relatif à \vec{b} à $y = 0$ et a relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Ccnb



c relatif à \vec{a} à $x = 0$, n relatif à \vec{b} à $y = 0$ et b relatif à \vec{c} à $z = 0$.

Cccb



c relatif à \vec{a} à $x = 0$, c relatif à \vec{b} à $y = 0$ et b relatif à \vec{c} à $z = 0$.

On observe que les groupes Ccca, Ccna, Ccnb, Cnca, Cncb, Ccna, Ccnb et Cccb sont identiques, on choisit le groupe Ccca.

Donc, on peut conclure que les groupes issus de la classe *mmm* avec le mode C du réseau de Bravais sont :

$$Cmmm, Cmma, Cmcm, Cccm, Cmca, Ccca$$

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

IV. 4. Coordonnés des positions équivalentes

Groupe	Coordonnés des positions équivalentes
Cmmm	$x, y, z ; \bar{x}, y, z ; x, \bar{y}, z ; x, y, \bar{z} ; \bar{x}, \bar{y}, z ; \bar{x}, y, \bar{z} ; x, \bar{y}, \bar{z} ; \bar{x}, \bar{y}, \bar{z}.$
	$\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + y, z ; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, z ; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y, z ; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} - y, z ;$ $\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + y, \bar{z} ; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, \bar{z} ; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y, \bar{z} ; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} - y, \bar{z}.$
Cmma	$x, y, z ; \bar{x}, y, z ; x, \bar{y}, z ; \bar{x}, \bar{y}, z ; , y, \bar{z} ; \frac{1}{2} - x, y, \bar{z} ; \frac{1}{2} + x, \bar{y}, \bar{z} ; \frac{1}{2} - x, y, \bar{z}.$
	$\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + y, z ; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, z ; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y, z ; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} - y, z ;$ $x, \frac{1}{2} + y, \bar{z} ; \bar{x}, \frac{1}{2} + y, \bar{z} ; x, \frac{1}{2} - y, \bar{z} ; \bar{x}, \frac{1}{2} - y, \bar{z}.$
Cmcm	$x, y, z ; \bar{x}, y, z ; x, y, \bar{z} ; \bar{x}, \bar{y}, \bar{z} ; x, \bar{y}, \frac{1}{2} + z ; \bar{x}, \bar{y}, \frac{1}{2} + z ; x, \bar{y}, \frac{1}{2} - z ; \bar{x}, \bar{y}, \frac{1}{2} - z.$
	$\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + y, z ; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, z ; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} + z ; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + y, \bar{z} ;$ $\frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - z ; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} - z.$
Cccm	$x, y, z ; \bar{x}, y, \frac{1}{2} + z ; x, y, \bar{z} ; \bar{x}, y, \frac{1}{2} - z ; x, \bar{y}, \frac{1}{2} + z ; \bar{x}, \bar{y}, \frac{1}{2} - z ;$ $x, \bar{y}, \frac{1}{2} - z ; \bar{x}, \bar{y}, \frac{1}{2} + z.$
	$\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + y, z ; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} + z ; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} + z ; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + y, \bar{z} ;$ $\frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - z ; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y, \bar{z} ; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} - z .$
Cmca	$x, y, z ; \bar{x}, y, z ; x, \bar{y}, \frac{1}{2} + z ; \bar{x}, \bar{y}, \frac{1}{2} + z ; \frac{1}{2} - x, y, \bar{z} ; \frac{1}{2} + x, \bar{y}, \frac{1}{2} - z ;$ $\frac{1}{2} + x, y, \bar{z} ; \frac{1}{2} - x, \bar{y}, \frac{1}{2} - z.$
	$\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + y, z ; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, z ; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} + z ; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} + z ; x, \frac{1}{2} +$ $y, \bar{z} ; \bar{x}, \frac{1}{2} + y, \bar{z} ; \bar{x}, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} - z ; x, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} - z.$
Ccca	$x, y, z ; \bar{x}, y, \frac{1}{2} + z ; x, \bar{y}, \frac{1}{2} + z ; \bar{x}, \bar{y}, z ; \frac{1}{2} + x, y, \bar{z} ; \frac{1}{2} - x, y, \bar{z} ; \frac{1}{2} + x, \bar{y}, \frac{1}{2} -$ $z ; \frac{1}{2} - x, \bar{y}, \bar{z}.$
	$\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + y, z ; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} + z ; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} + z ; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} - y, z ;$ $x, \frac{1}{2} + y, \bar{z} ; \bar{x}, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - z ; x, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} - z ; \bar{x}, \frac{1}{2} - y, \bar{z}.$

Conclusion

Conclusion

Le but essentiel de ce travail était, bien entendu, l'initiation à cette technique simple et très pratique de dénombrement des groupes spatiaux. Dans notre cas, nous avons considéré la classe mmm du réseau C du système orthorhombique.

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 C, d'une part et la classe mmm d'autre part, les plans a, b, c, d, n, ou m, nous avons compté 64 groupes.

En comparant les stéréogrammes des 64 groupes du départ entre eux, nous avons trouvé que seulement 6 sont distincts.

Références bibliographiques

Références bibliographique

- [1] Susan Schneegans, Crystallography matters! , Année internationale de la cristallographie 2014, Publié par l'Organisation des Nations Unies pour l'éducation, la science et la culture 7, place de Fontenoy, 75352 Paris 07 SP, France.
- [2] H.lатели, Eléments de cristallographie géométrique, OPU ,2011.
- [3] S.Loubadi, Mémoire de Master, Université de M'sila, Algérie, 2020.
- [4] Liste minéraux par système cristallin [en ligne].25 mai 2021. Disponible sur (https://www.geowiki.fr/index.php?title=Liste_min%C3%A9raux_par_syst%C3%A8me_cristallin&fbclid=IwAR2DSwUY7Ht0nAnnTi__GbwNPHMgvXCa5kPwwlHuesAgXIVen3d2mpIKX84).
- [5] Crystal Lattice*Structures [en ligne].8 May 2001,21 oct. 2004. Disponible sur (<https://www.atomic-scale-physics.de/lattice/struk/mgb2c2.html>).
- [6] CHABOU Moulley Charaf, Cours de géologie [en ligne] 2011, 2022. Disponible sur (<https://coursgeologie.com/les-operations-de-symetrie-244/>).
- [7] O.Bennaoui, Mémoire Mater, Université de M'sila, Algérie, 2014.
- [8] A. Verbaere, 'Cours de cristallographie géométrique', Univ. Nantes, 1986.

ملخص

نظرا لأهمية البلورات في حياتنا، اخترنا دراسة جانب منها والمتمثل في تعداد المجموعات الفضائية الناتجة عن فئة mmm في الشبكة C لنظام معيني متعامد المحاور بطريقة هندسية بسيطة.

أولا تطرقنا الى المفاهيم الأساسية لعلم البلورات الهندسية : الشبكة البلورية و الخلية الأولية وخصائص مختلف الأنظمة البلورية.

ثم في الفصل الثاني ذكرنا عناصر و عمليات التناظر.

مررنا كذلك بتعداد شبكات برافيس وقمنا بإثبات وجود أربعة أنماط للنظام معيني متعامد المحاور في الفصل الثالث.

وأخيرا قمنا بتعداد المجموعات الفضائية الناتجة عن فئة mmm للنمط C في الشبكة البسيطة لنظام معيني متعامد المحاور في الفصل الرابع.

الكلمات الرئيسية: مجموعات فضائية، شبكة C ، فئة mmm ، نظام معيني متعامد المحاور، تناظر، شبكات برافيس.

Résumé

En raison de l'importance des cristaux dans notre vie, nous avons choisi d'étudier un aspect qui est le dénombrement des groupes spatiaux issus de la classe mmm de réseau C du système orthorhombique à l'aide d'une méthode géométrique simple.

Dans un premier temps, nous avons abordé les notions fondamentales de la cristallographie géométrique : réseau cristallin, maille élémentaire et les caractéristiques des différents systèmes cristallins.

Puis dans le chapitre 2, nous avons évoqué les éléments et les opérateurs de symétrie.

Nous avons également parcouru les modes de réseaux de Bravais. Nous avons, bien évidemment, démontré l'existence de quatre modes pour le système orthorhombique dans le chapitre 3.

Enfin, nous avons pu dénombrer les groupes spatiaux issus de la classe mmm de réseau C du système orthorhombique dans le quatrième chapitre.

Mots clés: groupes spatiaux, réseau C , classe mmm , système orthorhombique, symétrie, réseaux de Bravais.

Abstract

Due to the importance of crystals in our life, we have chosen to study an aspect which is the enumeration of spatial groups the class mmm of lattice C of the orthorhombic system using a simple geometric method.

First, we discussed the fundamental notions of geometric crystallography: crystal lattice, unit cell and the characteristics of the different crystal systems.

Then in chapter 2, we mentioned the elements and the symmetry operators.

We also went through the Bravais lattice modes. We have, obviously, demonstrated the existence of four modes for the orthorhombic system in the 3rd chapter.

Finally, we could count the spatial groups the class mmm of lattice C for the orthorhombic system in the fourth chapter.

Keywords: spatial groups, lattice C , class mmm , orthorhombic system, symmetry, Bravais lattice modes.