



ANGD : RECIPROCS 12-13 Novembre 2009



# Résolution d'une macle pseudo-mériédrique

- Quelques définitions
- Cas d'une macle pseudo-mériédrique de iodate de métaux(II)  $M(IO_3)_2$ 
  - Apport de la DRX sur poudre
  - Résolution sur cristal
- Les signes d'une macle!



Isabelle. Gautier-Luneau@grenoble.cnrs.fr



## Quelques définitions

**Macle** est un édifice cristallin constitué par plusieurs individus d'une même espèce cristalline, orientés mutuellement suivant une loi géométrique définie. On passe d'un individu à l'autre par une opération de symétrie spécifique (qui est un élément de macle) n'appartenant pas au groupe spatial dans lequel le composé cristallise.

≠ Agrégats : Cristaux imbriqués les uns dans les autres lors de la croissance

**Classement morphologique des macles** : macle par réflexion / par rotation / inversion

Macle par contact ou accollement : surface de séparation des individus est plane

Macle par pénétration : surface de séparation quelconque

....

**Classement structurale des macles (Friedel)** : relation entre réseau propre à chaque individu et celui commun à l'édifice maculé

macle par mériédrie; macle par pseudo mériédrie;

macle par non- mériédrie

## Genèse des macles

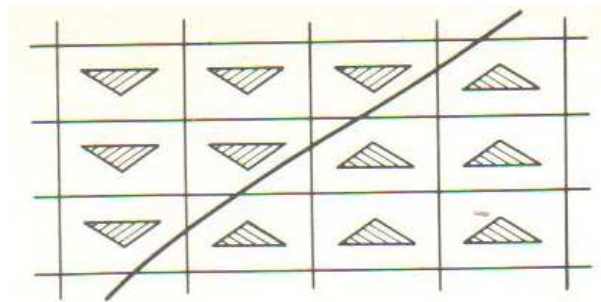
- macles de croissance, qui se forment pendant la croissance cristalline, soit dans les premières étapes, soit par accollement tardif de cristaux ayant déjà atteint une taille considérable.
- macles de transformation, qui se forment suite à une transition de phase dans laquelle la symétrie du cristal baisse. Dans la structure, des domaines de différentes orientations vont se former.
- macles mécaniques, qui se forment suite à une action mécanique, notamment une pression orientée le long d'une direction.

**Macle par mériédrie** : Les réseaux de tous les individus coïncident parfaitement dans l'espace direct et réciproque.

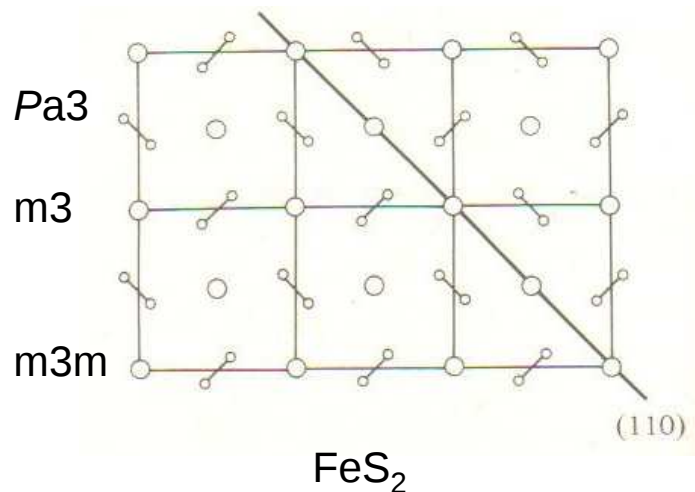
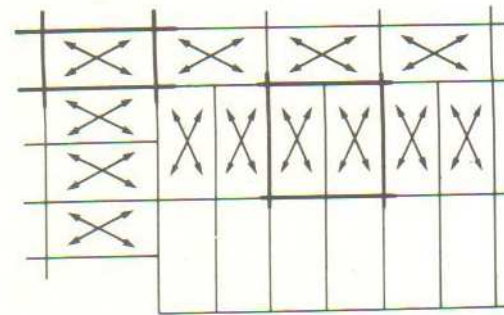
159 des 230 GE font parties des groupes ponctuels mériédriques .

**Mérièdre** : cristal dont la symétrie du motif (groupe ponctuel) est  $<$  symétrie de réseau

**Macle par mériédrie du motif**



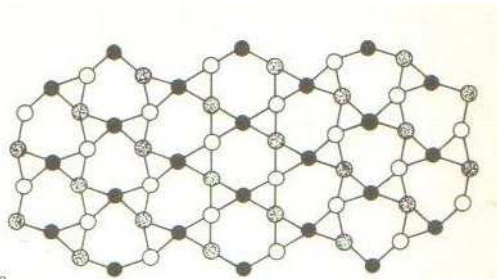
**Macle par mériédrie réticulaire**



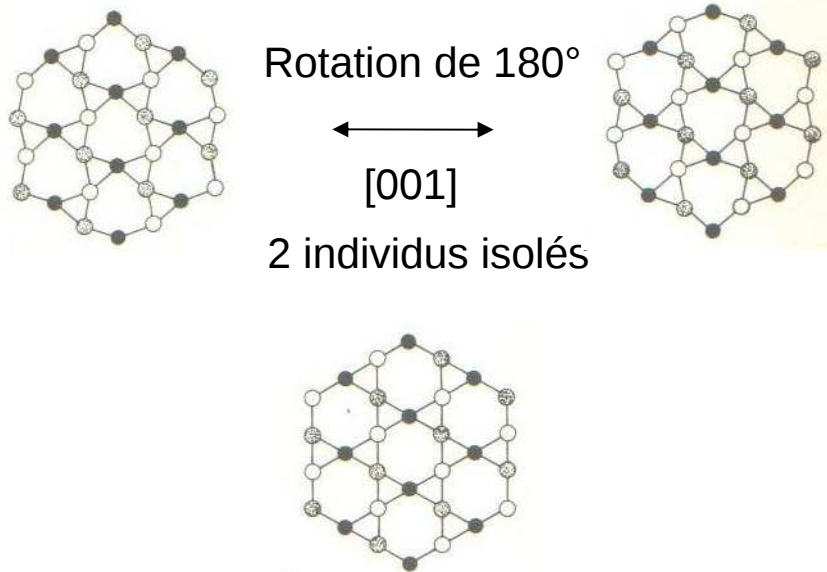
Macle par mériédrie réticulaire : fréquente dans les cristaux de symétrie trigonal, hexagonal et cubique , souvent macle par pénétration

# Macle du Quartz $\alpha$

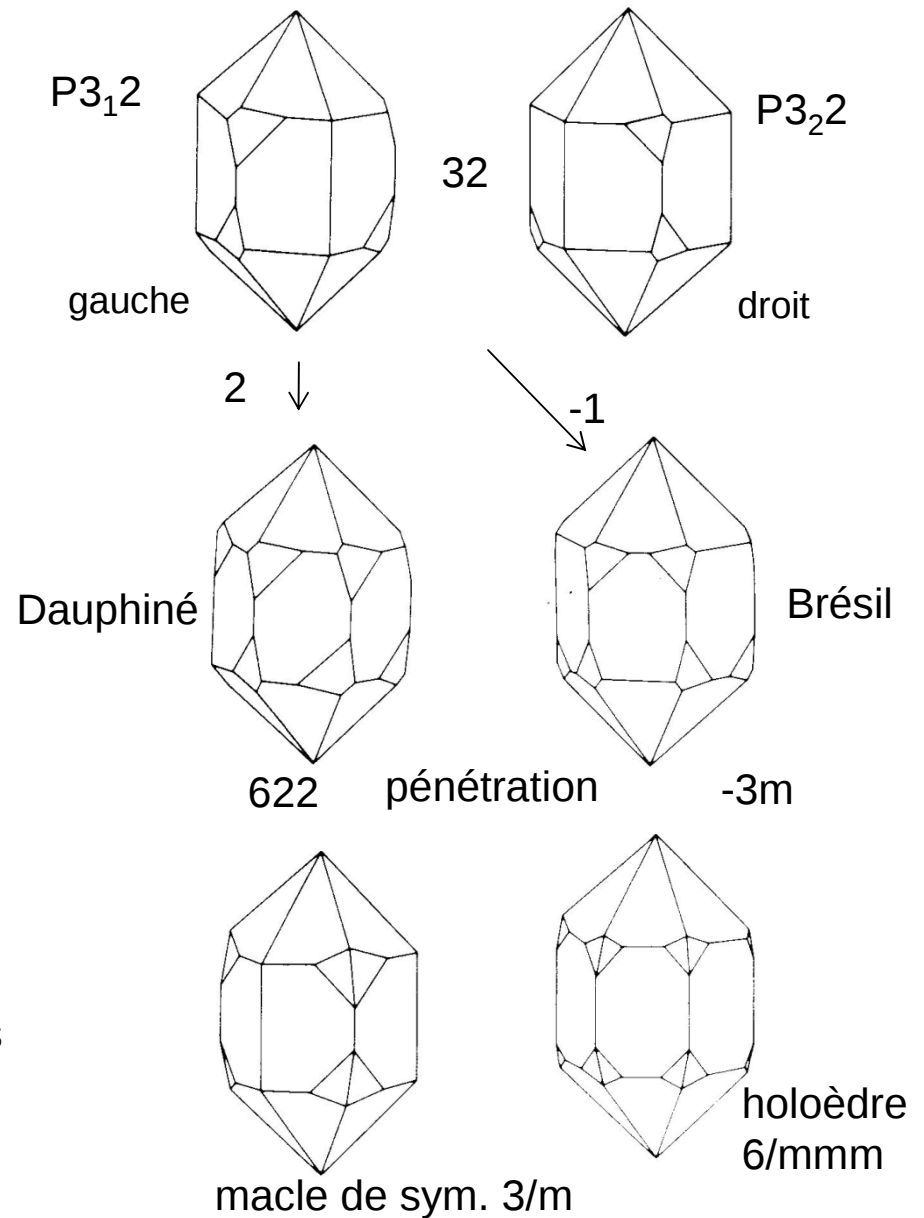
 Si 0  
 Si 1/3  
 Si 2/3



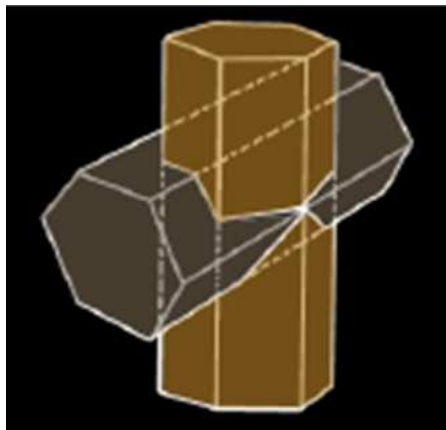
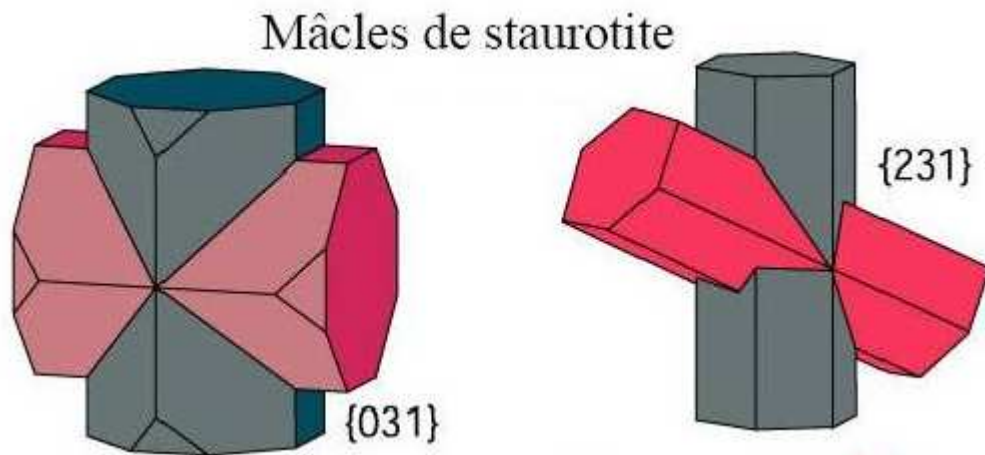
Association de 2 individus en une macle



Dans la macle, le raccord entre les 2 individus se fait par une région de structure hexagonal (quartz  $\beta$ , stable haute température)



## Macle par pénétration : Staurotite $\text{Fe}_2\text{Al}_9\text{Si}_4\text{O}_{22}(\text{OH})_2$

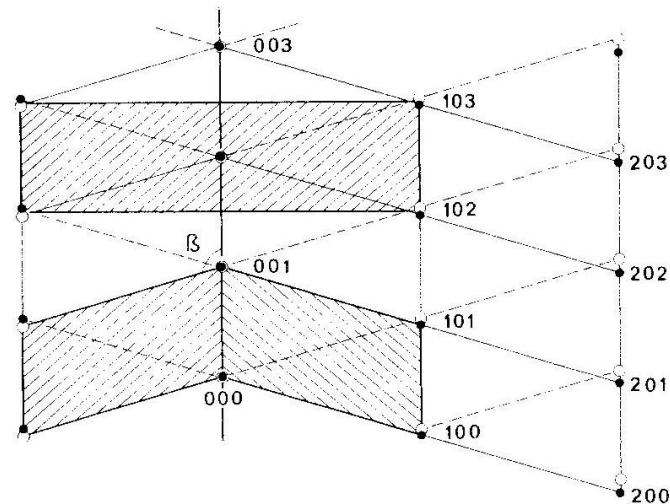
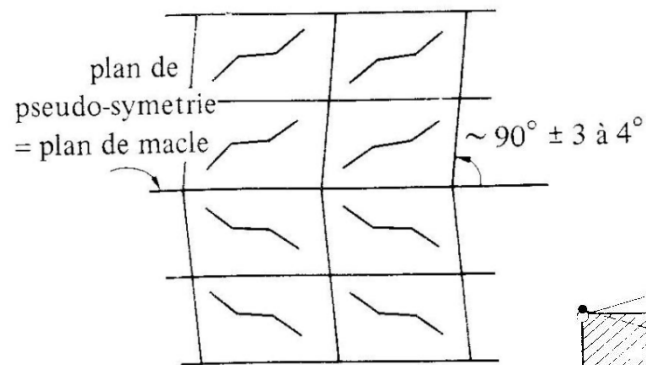


# Macle par pseudo-mériédrie

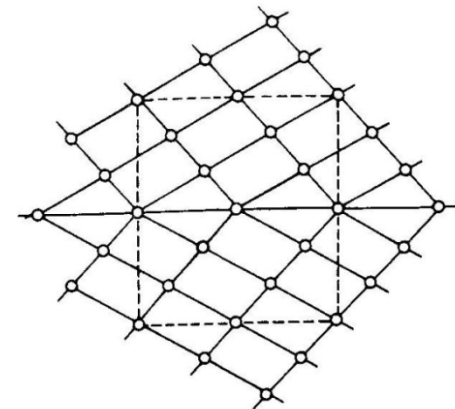
Le réseau commun ne possède pas rigoureusement, mais seulement de manière approchée, la symétrie supérieure à celle des individus homogènes.

Les macles par pseudo-mériédrie sont nécessairement des macles par contact

## Macle par pseudo-mériédrie du motif



## Macle par pseudo-mériédrie réticulaire



## Macle par pseudo-mériédrie

Les macles par pseudo mériédrie peuvent se produire quand les cristaux possèdent une symétrie très proche d'une symétrie plus élevée. Les réseaux de ces cristaux possèdent des rangées ou des plans qui sont presque des axes ou des plans de symétrie.

**Triclinique** : avec 2 des 3 angles proches de  $90^\circ$  qui imite la classe monoclinique 2/m

**Monoclinique** : avec  $\beta$  proche de  $90^\circ$  qui imite la classe orthorhombique mmm

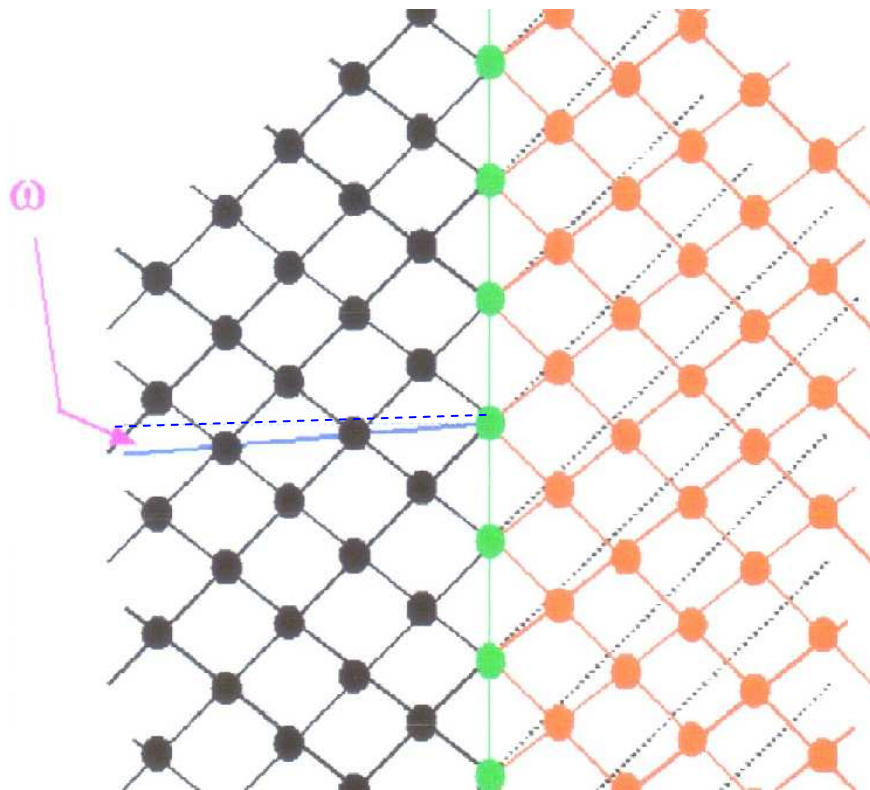
**Monoclinique** : avec  $a \sim c \neq b$ ,  $\beta \sim 120^\circ$  qui imite le système trigonal ou hexagonal

**Monoclinique** : avec  $a \sim c \neq b$ ,  $\beta \sim 90^\circ$  qui imite le système quadratique (4/m)

La réduction de symétrie entre la classe de Laüe simulée et la classe réelle conduit à une possible loi de macle

# Macle par pseudo-mériédrie

Tout plan de pseudo-symétrie est à peu près normal à une rangée ;  
l'écart peut atteindre 3 à 4 °, mais est généralement inférieur;  
Il définit l'obliquité de la macle



Réseau de l'individu dans son orientation original  
est quasi-symétrique / au plan perpendiculaire du  
dessin ●



L'intersection de ces 2 plans, ● qui si il agit comme  
plan de macle, transforme le réseau **noir** en **rouge**



À gauche : seulement le réseau originale

À droite : l'orientation du réseau originale



en pointillée et le réseau maculé en rouge

L'angle de séparation des deux orientations  
des 2 réseaux mis en évidence, est ici exagéré

La séparation augmente avec la distance  
au plan de macle

L'obliquité  $\omega$  est l'angle entre les 2 rangées bleues :

— rangée du réseau et - - - - - rangée perpendiculaire au plan de macle

# Cas d'une macle pseudo-mériédrique de iodate de métaux(II) $M(\text{IO}_3)_2$

Thèse de Delphine Phanon

D. Phanon, B. Bentría, E. Jeanneau, D. Benbortal, A. Mosset, I. Gautier-Luneau

“Crystal structure of  $M(\text{IO}_3)_2$  metal iodates, twinned by pseudo-merohedry,  
with  $M^{\text{II}}$ :  $\text{Mg}^{\text{II}}$ ,  $\text{Mn}^{\text{II}}$ ,  $\text{Co}^{\text{II}}$ ,  $\text{Ni}^{\text{II}}$  and  $\text{Zn}^{\text{II}}$ ”

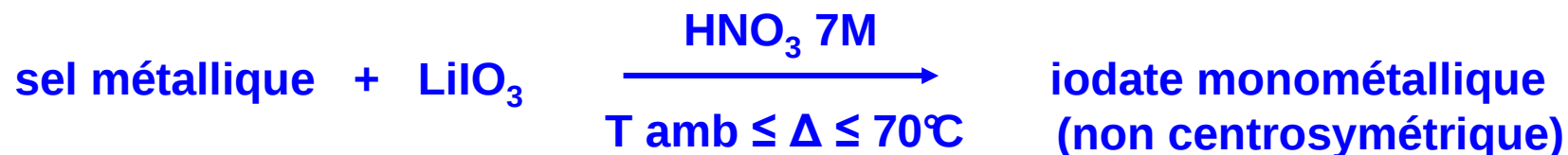
*Z. Kristallogr.* , 221, 635-642, **2006**.

## Données cristallographiques d'études antérieures sur les iodates de métaux (II)

| composé                                     | <i>a</i> (Å) | <i>b</i> (Å) | <i>c</i> (Å) | $\gamma$ (°)  | <i>V</i> (Å <sup>3</sup> ) / <i>Z</i> | groupe<br>d'espace | méthode de<br>diffraction |
|---------------------------------------------|--------------|--------------|--------------|---------------|---------------------------------------|--------------------|---------------------------|
| $\alpha$ -LiIO <sub>3</sub>                 | 5,478        | 5,478        | 5,170        | 120           | 134,36 / 2                            | $P6_3$             | monocristal               |
| Zn(IO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>           | 5,469        | 10,938       | 5,116        | 120           | 265,03 / 2                            | $P112_1$           | poudre                    |
| Mg(IO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>           | 5,478        | 5,478        | 5,128        | 120           | 133,3 / 1                             | $P6_3$             | poudre                    |
| Mg(IO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>           | 10,943       | 10,943       | 5,163        | 120           | 535,5 / 4                             | $P6_3$             | poudre                    |
| Co(IO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>           | 10,960       | 10,960       | 5,077        | 120           | 528,2 / 4                             | $P3$               | monocristal               |
| Mn(IO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>           | 11,178       | 11,178       | 5,035        | 120           | 544,7 / 4                             | $P3$               | poudre                    |
| $\alpha$ -Cu(IO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> | 5,569        | 5,111        | 9,269        | $\beta$ 95,82 | 262,5 / 2                             | $P2_1$             | monocristal               |

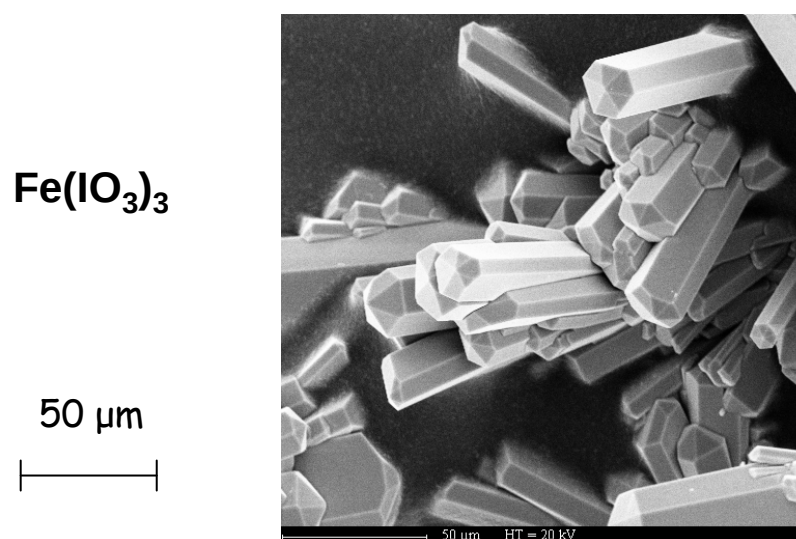
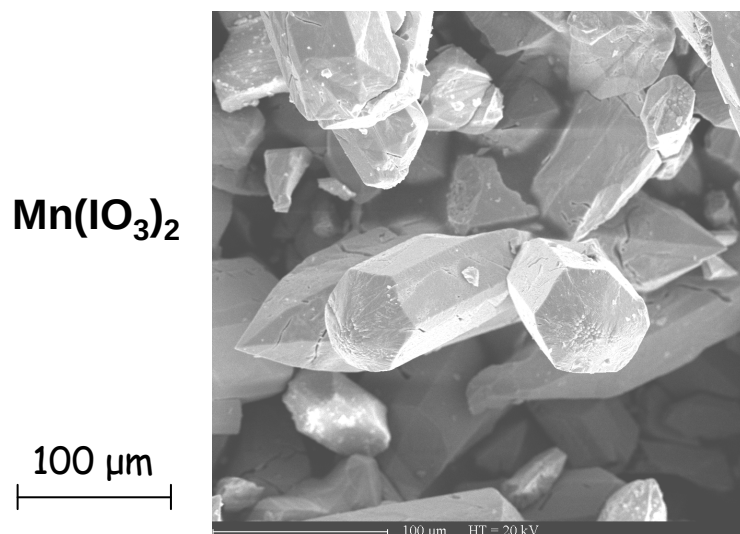
# Synthèse des iodates $M(\text{IO}_3)_2$ et $M(\text{IO}_3)_3$

$M^{\text{II}} = \text{Mg}, \text{Mn}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Zn}$ ;  $M^{\text{III}} = \text{Fe}, \text{Ga}, \text{In}$



(paramètres de synthèses : [métal]/[iodate] ;  $[\text{HNO}_3]$  ; source d'iodate ;  $T^\circ$  ; ... )

Les iodates métalliques sont obtenus sous formes de baguettes à section hexagonale.



## Etude sur Monocristal de $\text{Zn}(\text{IO}_3)_2$

Syst. Monoclinique

$$\begin{aligned} a &= 10.931 \text{ \AA} \\ b &= 5.126 \text{ \AA} \\ c &= 10.923 \text{ \AA} \\ \beta &= 119.95^\circ \\ V &= 530.61 \text{ \AA}^3 \end{aligned}$$

Syst. Hexagonal

$$\begin{aligned} a &= b = 10.930 \text{ \AA} \\ c &= 5.125 \text{ \AA} \\ \gamma &= 120^\circ \\ V &= 530.2 \text{ \AA}^3 \end{aligned}$$

Syst. Orthorhombique

$$\begin{aligned} a &= 18.904 \text{ \AA} \\ b &= 5.12 \text{ \AA} \\ c &= 10.905 \text{ \AA} \\ V &= 1055.4 \text{ \AA}^3 \end{aligned}$$

**Relations entre les paramètres de maille :  $a \sim c \neq b$ ,  $\beta \sim 120^\circ$**

Extinctions particulières

$$hkl \quad h+l = 2n$$

$$0kl \quad l = 2n$$

$$h0l \quad h+l = 2n$$

$$hk0 \quad h = 2n$$

$$\mathbf{0k0 \quad k=2n \quad / \quad \text{ou} \quad 00l \quad l=2n}$$

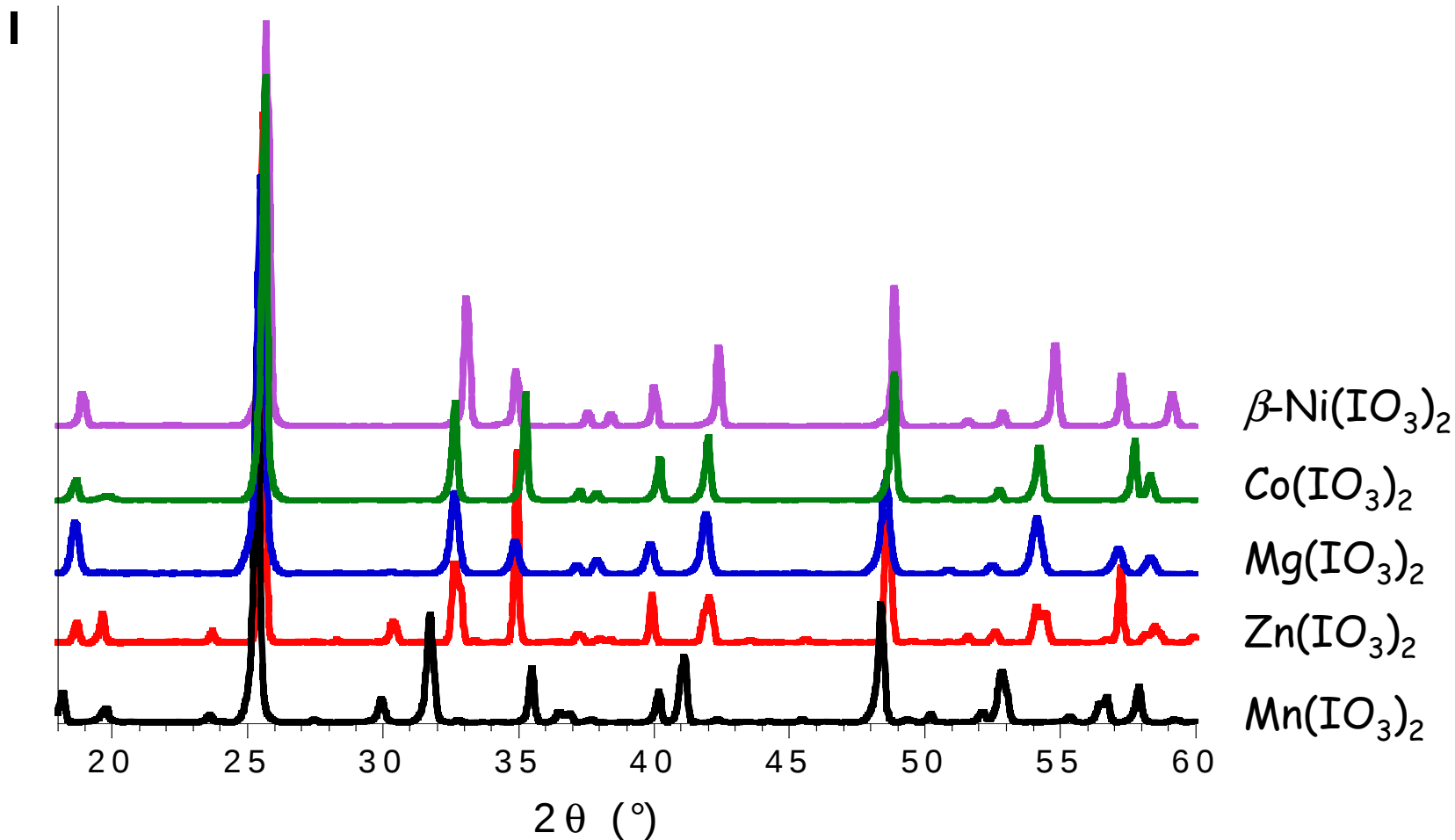
Axe  $2_1$  /ou  $6_3$

$$00l \quad l = 2n$$

$$h00 \quad h = 2n$$

$$B \quad 2 \quad 2_1 \quad 2$$

## Diffraction des rayons X sur poudre des iodates de métaux (II)

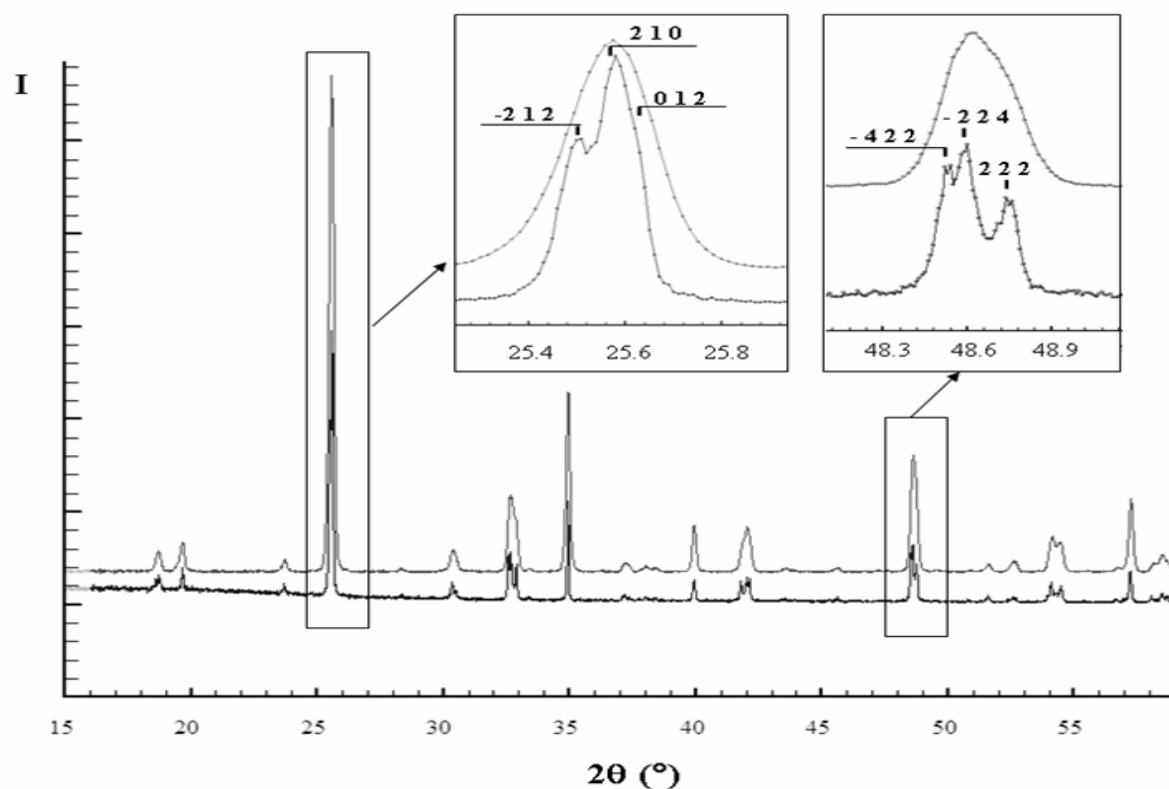


Siemens, D5000,  $\lambda_{\text{CuK}\alpha 1} = 1,5406 \text{ \AA}$  :

Indexation possible en hexagonal  $P6_3$ , trigonal  $P3$  et monoclinique  $P2_1$

# Système monoclinique ou hexagonal?

Zn(IO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> ( $\lambda_{\text{CuK}\alpha 1}$ ):



Syst. Monoclinique

$a = 10.946(2) \text{ \AA}$

$b = 5.131(1) \text{ \AA}$

$c = 10.883(1) \text{ \AA}$

$\beta = 119.62(1)^\circ$

$V = 531.4 \text{ \AA}^3$

Syst. hexagonal

$a = b = 10.930(2) \text{ \AA}$

$c = 5.131(1) \text{ \AA}$

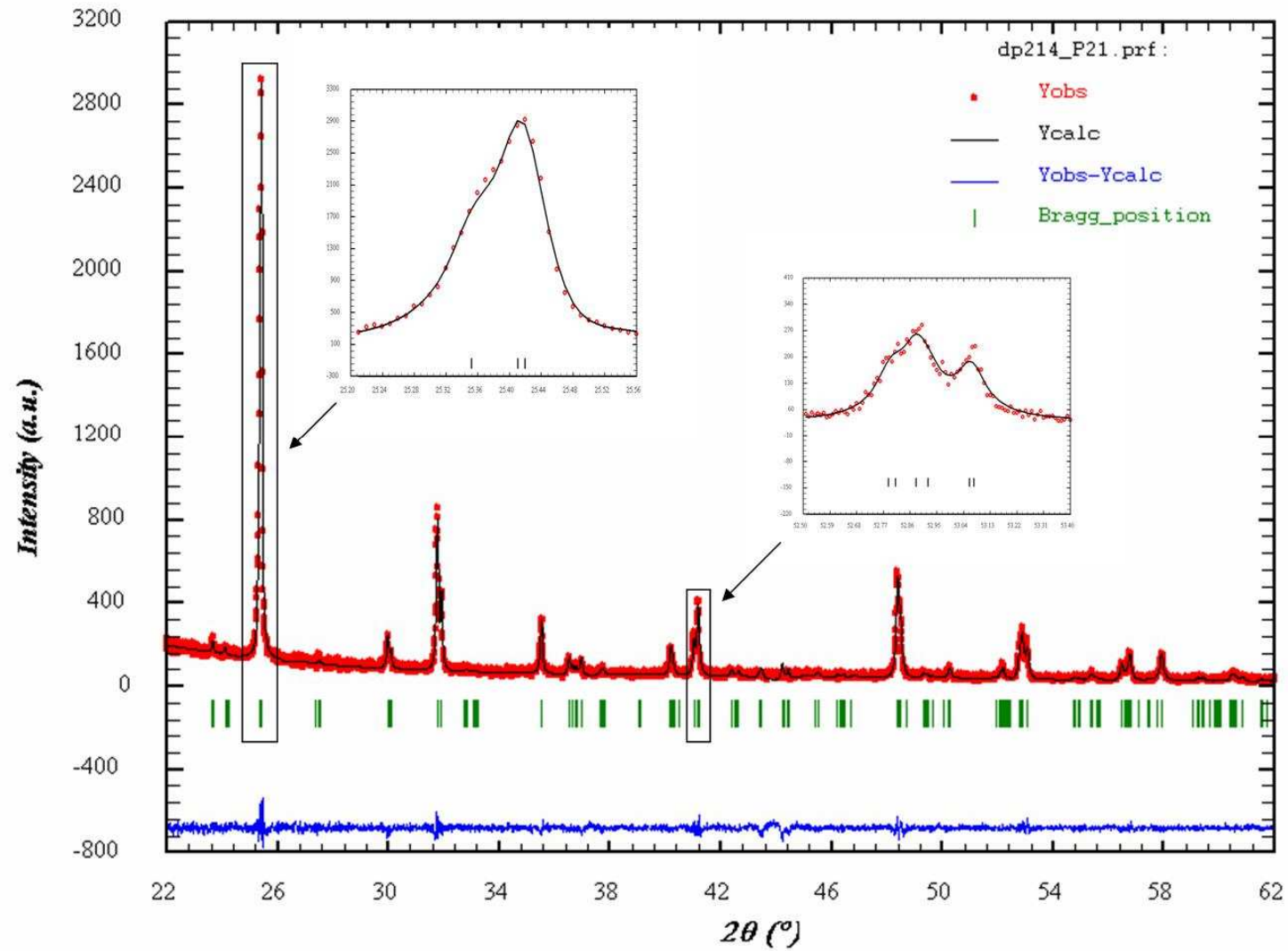
$\gamma = 120^\circ$

$V = 530.6 \text{ \AA}^3$

X-ray powder diffraction patterns of Zn(IO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> recorded on the D5000 (top) and the high-resolution D8 (bottom) diffractometers.

**Indexation moins bonne dans les groupes d'espaces  $P3$  et  $P6_3$ .**

## Full pattern matching : monoclinique $P2_1$

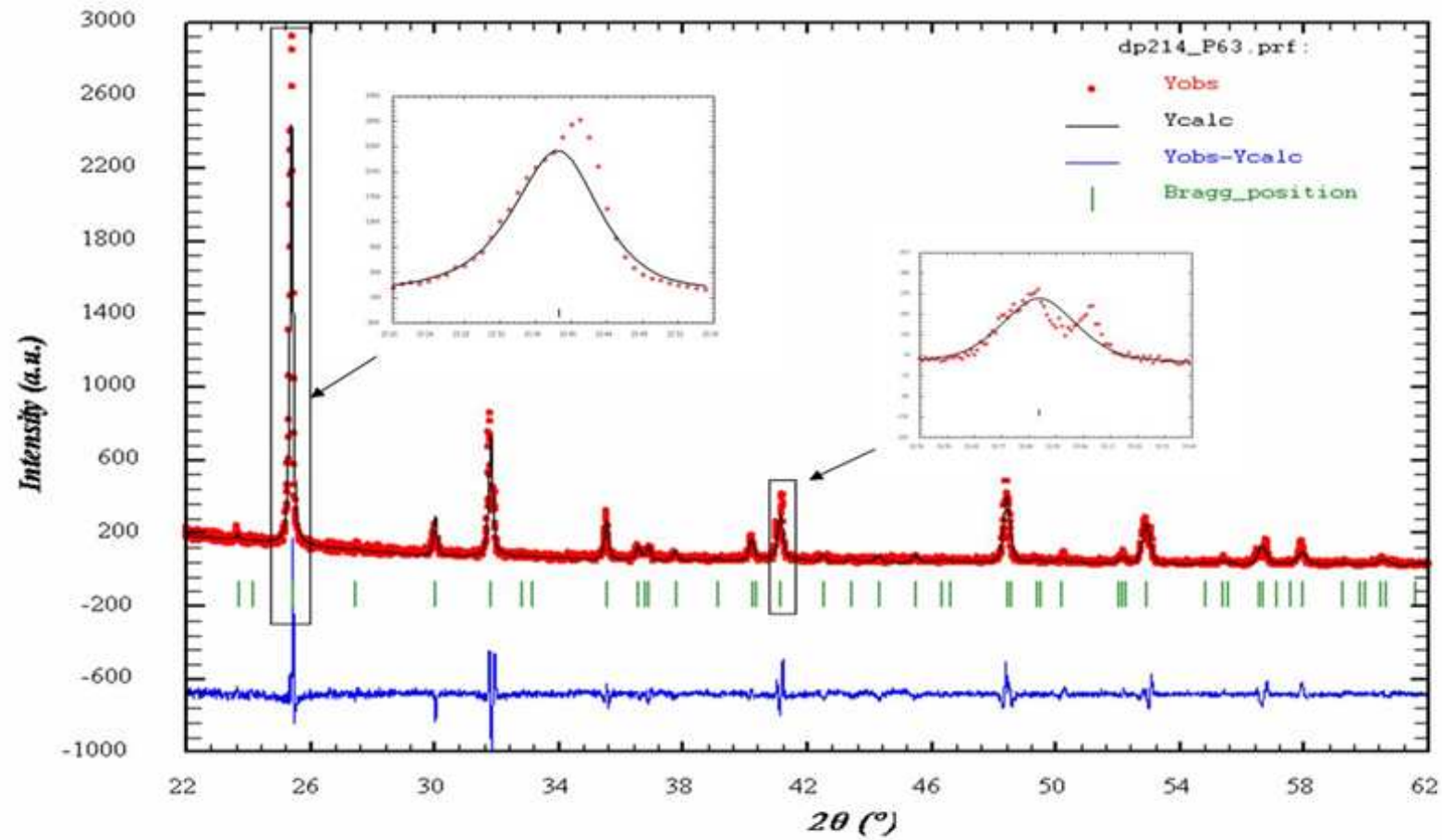


$$R_p = 7.87$$

$$R_{wp} = 11.4$$

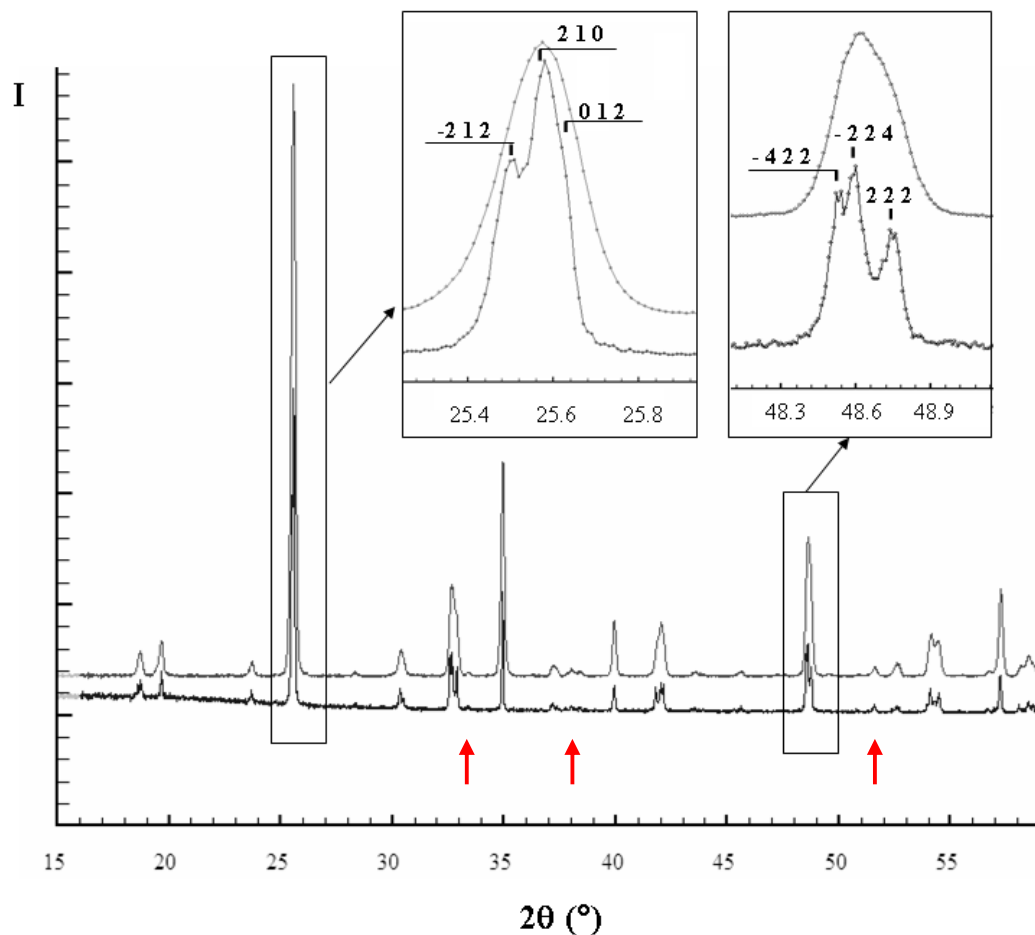
$$\chi^2 = 1.23$$

## Full pattern matching : hexagonal $P6_3$



$$\begin{aligned} R_p &= 10.8 \\ R_{wp} &= 15.6 \\ \chi^2 &= 2.3 \end{aligned}$$

# Système monoclinique, avec quel volume?



Syst. Monoclinique

$a = 10.946(2) \text{ \AA}$

$b = 5.131(1) \text{ \AA}$

$c = 10.883(1) \text{ \AA}$

$\beta = 119.62(1)^\circ$

$V = 531.4 \text{ \AA}^3$

$a = 5.473(1) \text{ \AA}$

$b = 5.131(1) \text{ \AA}$

$c = 9.461(1) \text{ \AA}$

$\beta = 89.43(1)^\circ$

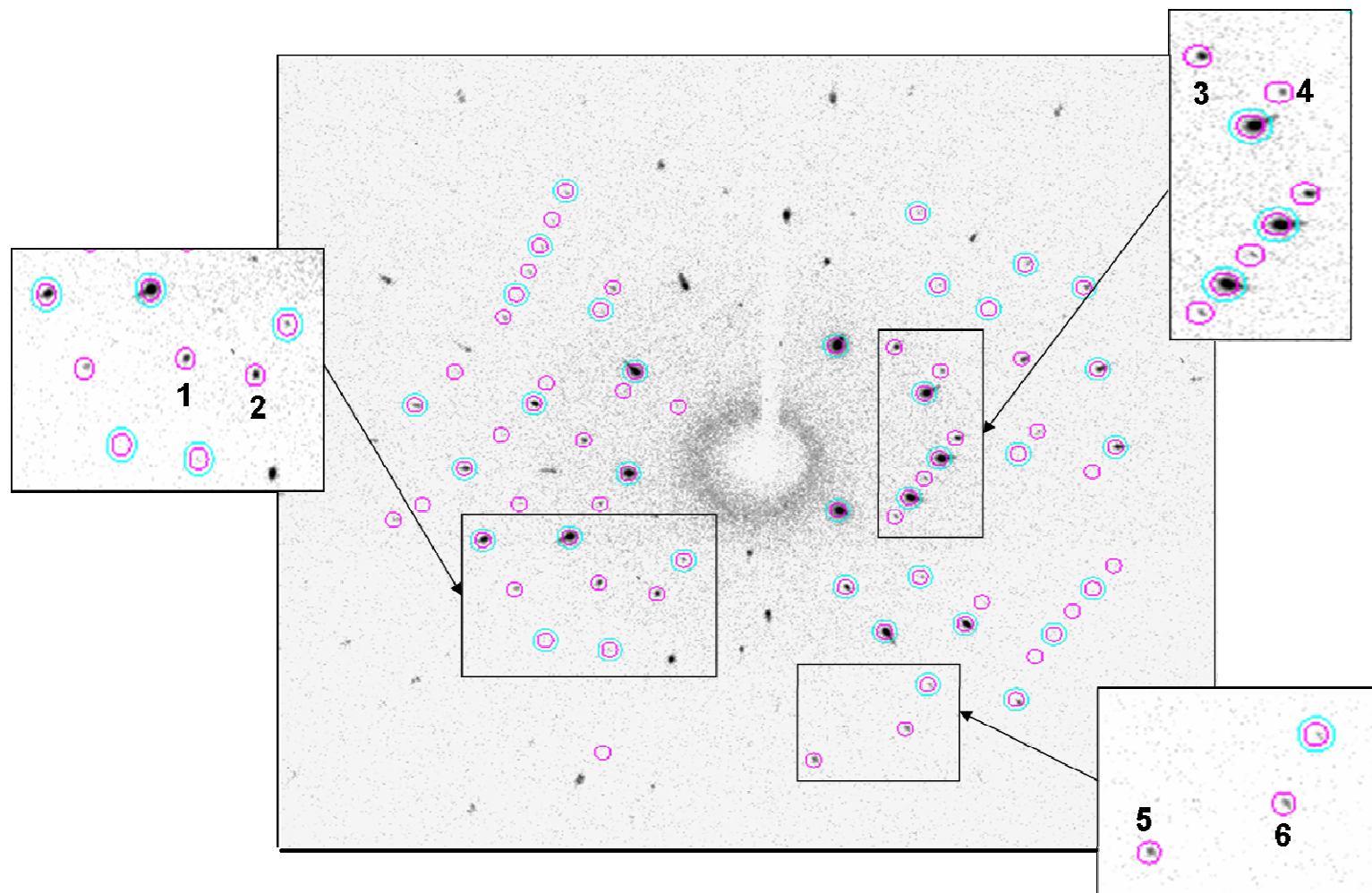
$V = 265.7 \text{ \AA}^3$

(33.4°, 2.2%)

(38.4°, 1.7%)

(51.6°, 3.5%)

X-ray powder diffraction patterns of  $\text{Zn}(\text{IO}_3)_2$  recorded on the D5000 (top) and the high-resolution D8 (bottom) diffractometers.



maille de volume  $266 \text{ \AA}^3$  - cercles bleus  
maille de volume double  $531 \text{ \AA}^3$  - cercles roses

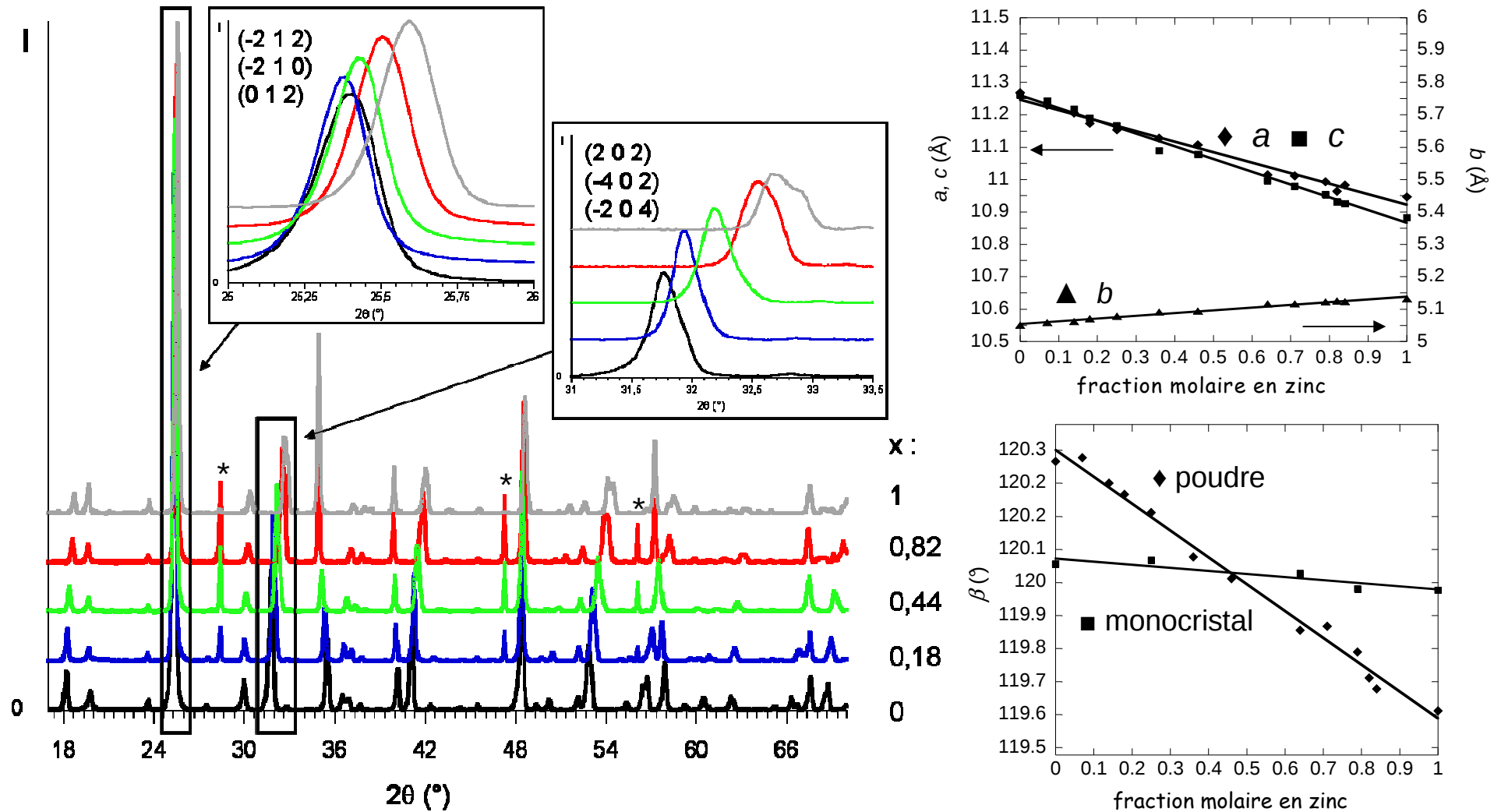
## Paramètres de maille affinés sur poudre

Système monoclinique, groupe d'espace  $P2_1$

| composé                | $a$ (Å) | $b$ (Å) | $c$ (Å) | $\beta$ (°) | $V$ (Å <sup>3</sup> ) / $Z$ |
|------------------------|---------|---------|---------|-------------|-----------------------------|
| $Mg(IO_3)_2$           | 10,947  | 5,135   | 10,967  | 120,00      | 533,9 / 4                   |
| $Mn(IO_3)_2$           | 11,268  | 5,050   | 11,261  | 120,34      | 553,0 / 4                   |
| $Co(IO_3)_2$           | 10,939  | 5,086   | 10,933  | 119,93      | 527,1 / 4                   |
| $\beta$ - $Ni(IO_3)_2$ | 10,807  | 5,139   | 10,812  | 120,06      | 519,7 / 4                   |
| $Zn(IO_3)_2$           | 10,946  | 5,131   | 10,883  | 119,62      | 531,4 / 4                   |

Les iodates de métaux (II) sont isostructuraux :  
synthèses de composés bimétalliques de métaux (II) possibles

# Etude de la solution solide $\text{Mn}_{1-x}\text{Zn}_x(\text{IO}_3)_2$



Solution solide dans  $P2_1$  sur l'ensemble du domaine de composition

Pas de solution possible en  $P6_3$

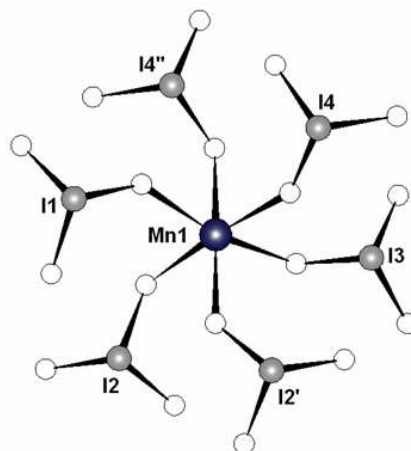
Résolution en  $P2_1$

**Atomes affinés en isotrope :**

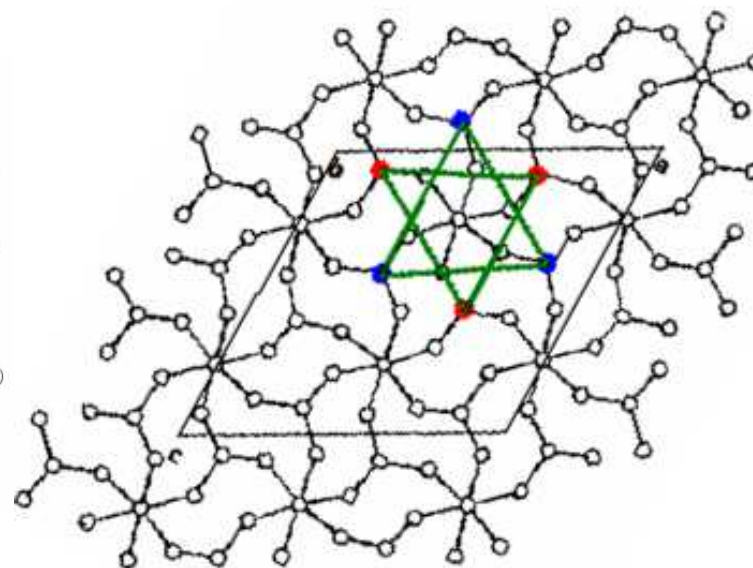
- $R_1 = 0,14$  ;  $wR_2 = 0,31$
- problèmes de distances et angles
- facteurs d'agitation thermique très faibles
- pics de densité électronique résiduels élevés  $+21,66 \text{ e}/\text{\AA}^3$  ;  $-21,53 \text{ e}/\text{\AA}^3$

## Résolution en $P2_1$

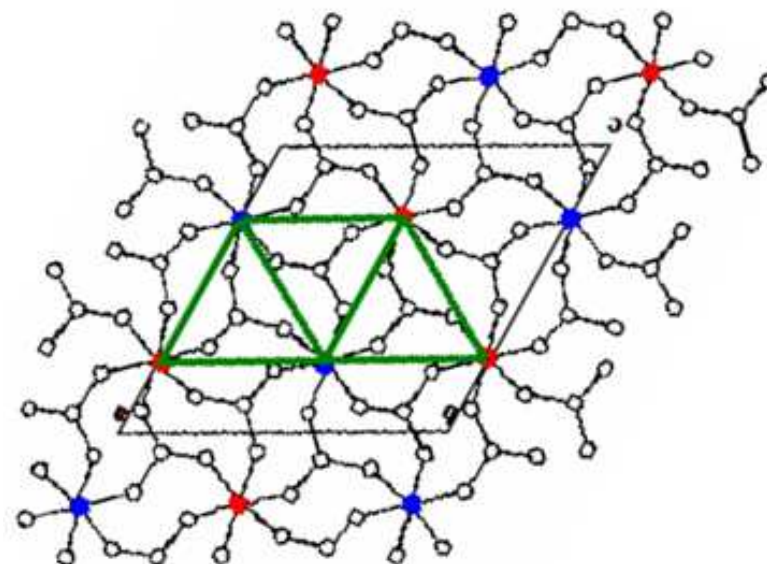
pseudo axe  $6_3$  autour des M  
 3 I à la cote y et  
 3 I à la cote y+1/2



pseudo axe 3 autour des I  
 2 M à la cote y et  
 1 M à la cote y+1/2  
 ou inversement



|     |        |               |        |
|-----|--------|---------------|--------|
| Mn1 | 0,4906 | <b>0,316</b>  | 0,2454 |
| Mn2 | 0,0111 | <b>0,816</b>  | 0,2546 |
| I1  | 0,1682 | <b>0,7330</b> | 0,0684 |
| I2  | 0,3340 | <b>0,2300</b> | 0,4329 |
| I3  | 0,8361 | <b>0,2413</b> | 0,4052 |
| I4  | 0,6659 | <b>0,7405</b> | 0,0967 |



## Macle par pseudo méridie "imitant" une symétrie hexagonale.

Loi de macle: axe 3 
$$\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & \bar{1} \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
 groupe ponctuel de la macle = 6<sup>(3)</sup>

TWIN    -1 0 -1 0 1 0 1 0 0 3  
BASF    0.33 0.33

Atomes lourds (M et I) affinés en anisotrope mais O en isotrope

$R_1 = 0,031$ ;  $wR_2 = 0,055$   
pics résiduels +2,93 e/Å<sup>3</sup> ; -2,09 e/Å<sup>3</sup>

## Données cristallographiques sur cristal

| Formule                                                    | Zn(IO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> | Mn(IO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> | Co(IO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> | Mg(IO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> |
|------------------------------------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|
| <i>a</i> (Å)                                               | 10,931(1)                         | 11,247(1)                         | 10,939(1)                         | 10,952(1)                         |
| <i>b</i> (Å)                                               | 5,126(1)                          | 5,045(1)                          | 5,071(1)                          | 5,117(1)                          |
| <i>c</i> (Å)                                               | 10,929(1)                         | 11,246(1)                         | 10,936(1)                         | 10,959(1)                         |
| $\beta$ (°)                                                | <b>119,95(1)</b>                  | <b>120,02(1)</b>                  | <b>119,945(7)</b>                 | <b>120,01(1)</b>                  |
| <i>V</i> (Å <sup>3</sup> )                                 | 530,61(4)                         | 552,51(13)                        | 525,65(12)                        | 531,85(12)                        |
| R <sub>int</sub>                                           | <b>0,085</b>                      | <b>0,068</b>                      | <b>0,13</b>                       | <b>0,045</b>                      |
| R <sub>1</sub>                                             | 0,042                             | 0,032                             | 0,0775                            | 0,0355                            |
| $\omega R_2$                                               | 0,086                             | 0,049                             | 0,1221                            | 0,0623                            |
| Goodness of fit S                                          | 1,06                              | 1,02                              | 1,074                             | 1,072                             |
| Contributions des 3 domaines                               | <b>0,366(1)/0,267(1)/0,367(1)</b> | <b>0,360(1)/0,307(1)/0,333(1)</b> | <b>0,325(3)/0,327(3)/0,348(3)</b> | <b>0,332(3)/0,336(3)/0,332(3)</b> |
| <b>obliquité <math>\omega</math> (°)</b>                   | <b>0,38</b>                       | <b>0,34</b>                       | <b>0,07</b>                       | <b>0,02</b>                       |
| Paramètre de Flack                                         | -0,03(6)                          | 0,00(7)                           | -0,1(2)                           | -0,03(8)                          |
| $\Delta\rho_{\max}/\Delta\rho_{\min}$ (e.Å <sup>-3</sup> ) | 2,316/-2,904                      | 2,94/-2,125                       | 6,157/-3,955                      | 1,286/-1.251                      |

# Etudes structurales des iodates de métaux (II)

*Monoclinique,  $P2_1$*

$a = 11,247(1) \text{ \AA}$

$b = 5,045(1) \text{ \AA}$

$c = 11,246(1) \text{ \AA}$

$\beta = 120,02(1)^\circ$

$V = 552,51(13) \text{ \AA}^3$

$Z = 4$

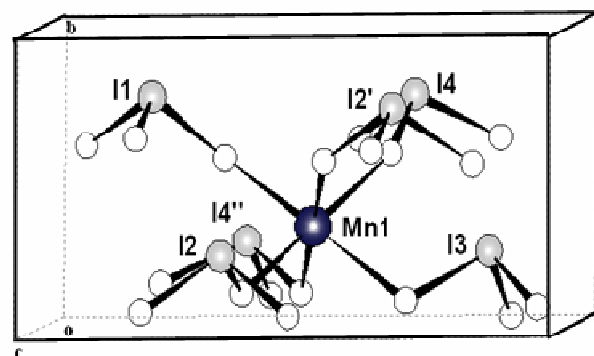
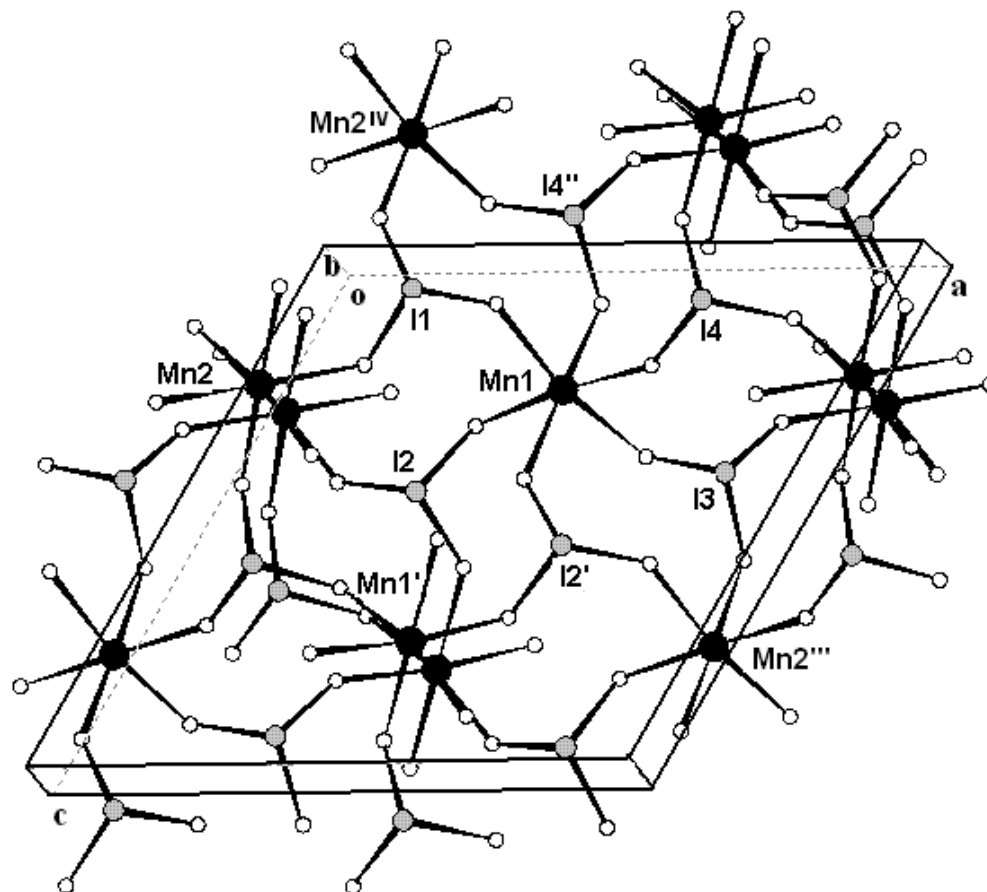
Coordonnées atomiques

Mn1 0,0102 0,8194 0,2547

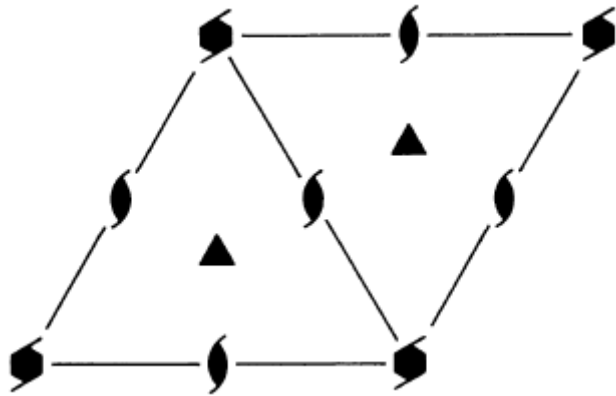
Mn2 0,4896 0,3183 0,2454

Mn-O 2,04(2)-2,33(4)  $\text{\AA}$

Mn...Mn 5,44(2)-6,17(2)  $\text{\AA}$

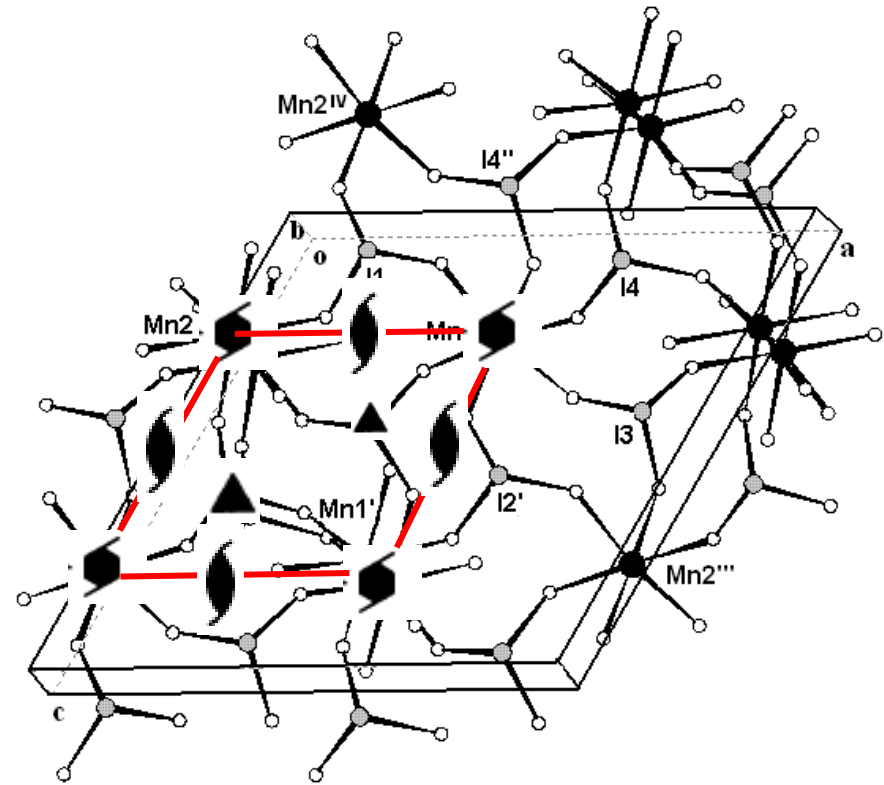


## Pas de solution possible en $P_6$



$$2 \quad b \quad 3 \dots \quad \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \mathbb{Z} \quad \frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \mathbb{Z} + \frac{1}{2}$$

$$2 \quad a \quad 3 \dots \quad 0, 0, z \quad 0, 0, z + \frac{1}{2}$$



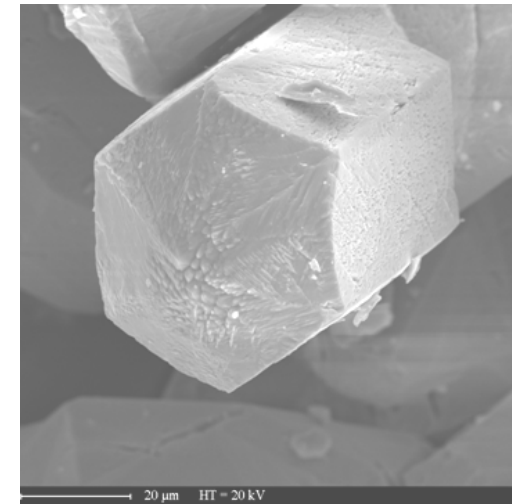
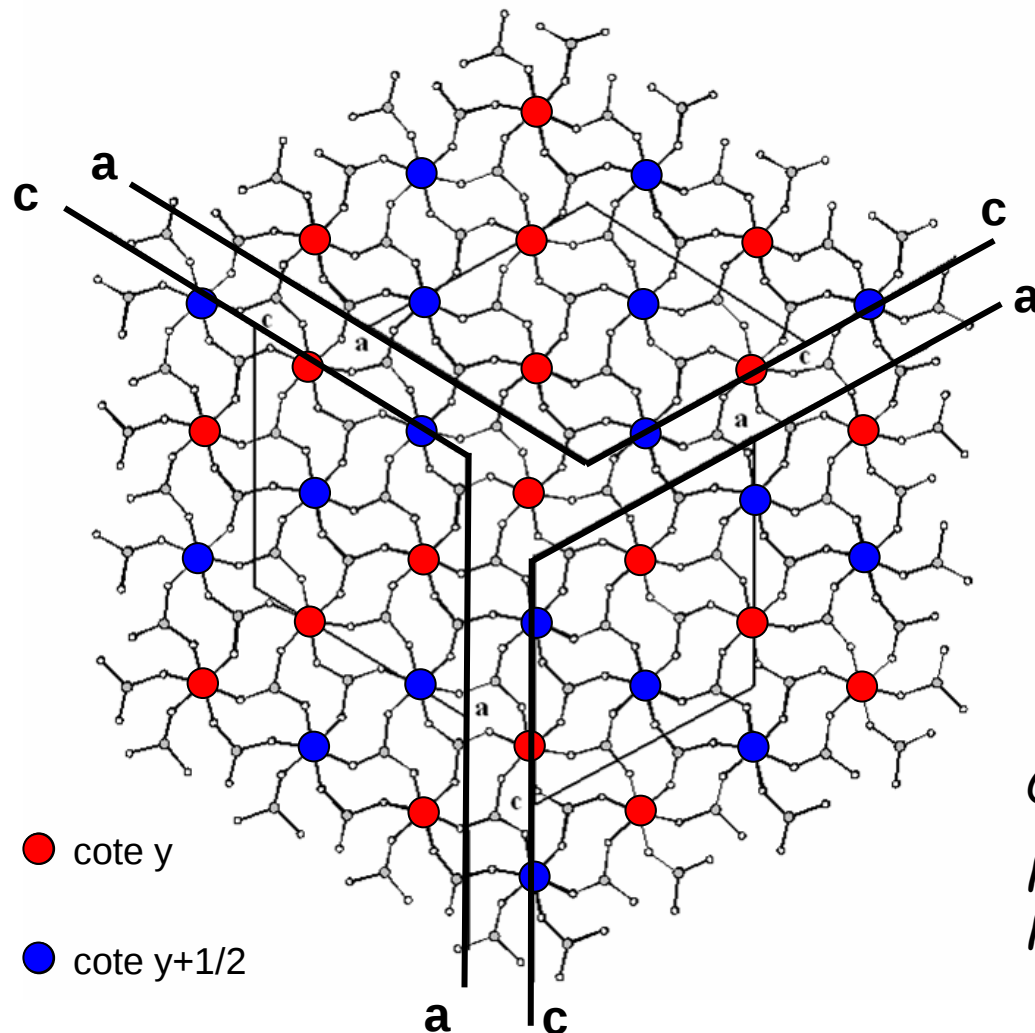
Maille 4 fois plus petite avec un taux d'occupation de 0.5 pour le métal

# Description de la macle

Macle par pseudo méridrie hexagonale

trois individus: 0,360(1)/0,307(1)/0,333(1)

opération de macle = axe 3, groupe ponctuel de la macle =  $6^{(3)}$



20 μm

Coordonnées atomiques

Mn1 0,0102 0,8194 0,2547

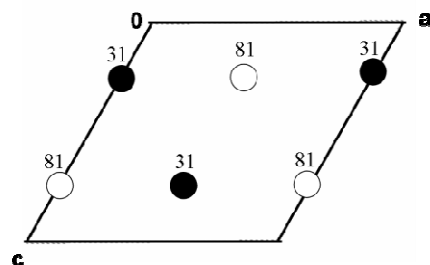
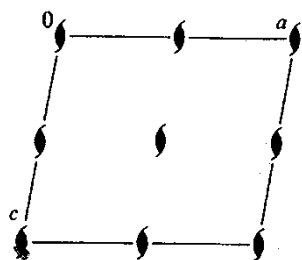
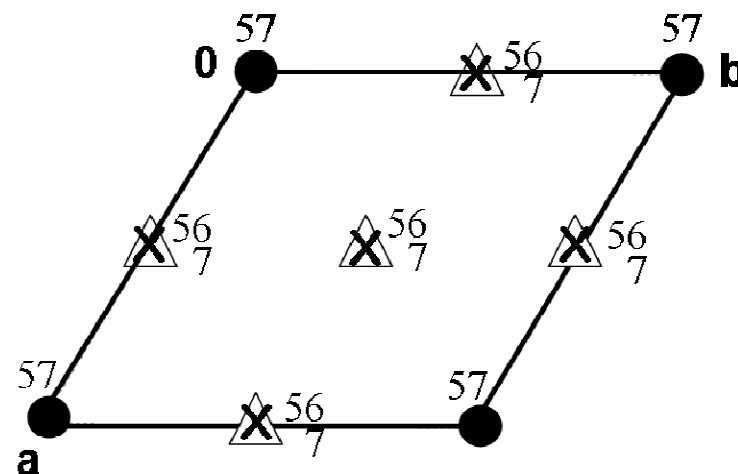
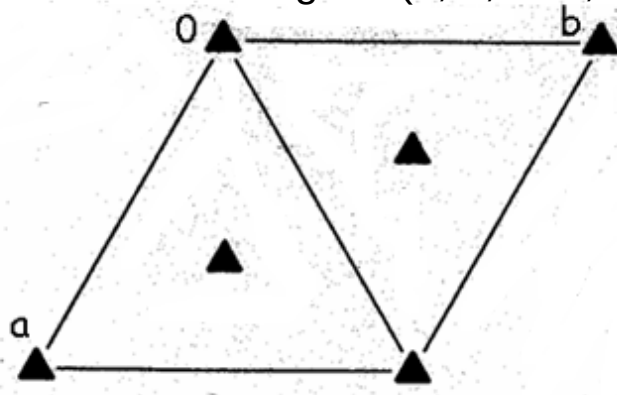
Mn2 0,4896 0,3183 0,2454

## Cas de $\text{Co}(\text{IO}_3)_2$ résolu en $P3$

$P3$  :  $a = b = 10,9597(1) \text{ \AA}$ ,  $c = 5,0774(1) \text{ \AA}$ ,  $\gamma = 120^\circ$   $R1 = 0,05$

$P2_1$  :  $a = 10,939(1) \text{ \AA}$ ,  $b = 5,071(1) \text{ \AA}$ ,  $c = 10,936(1) \text{ \AA}$ ,  $\beta = 119,95(1)^\circ$ .

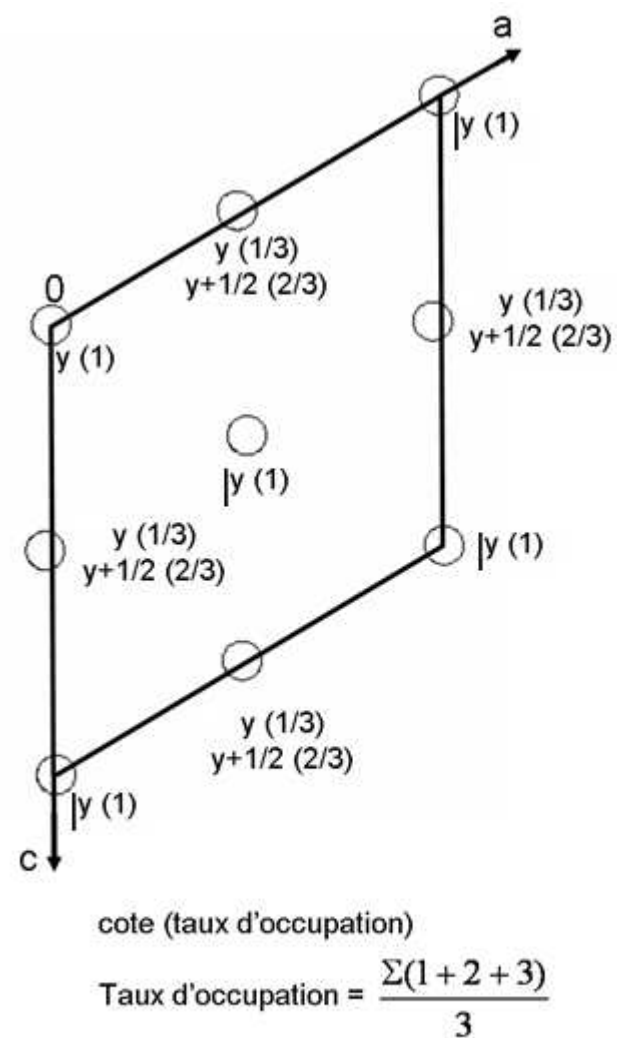
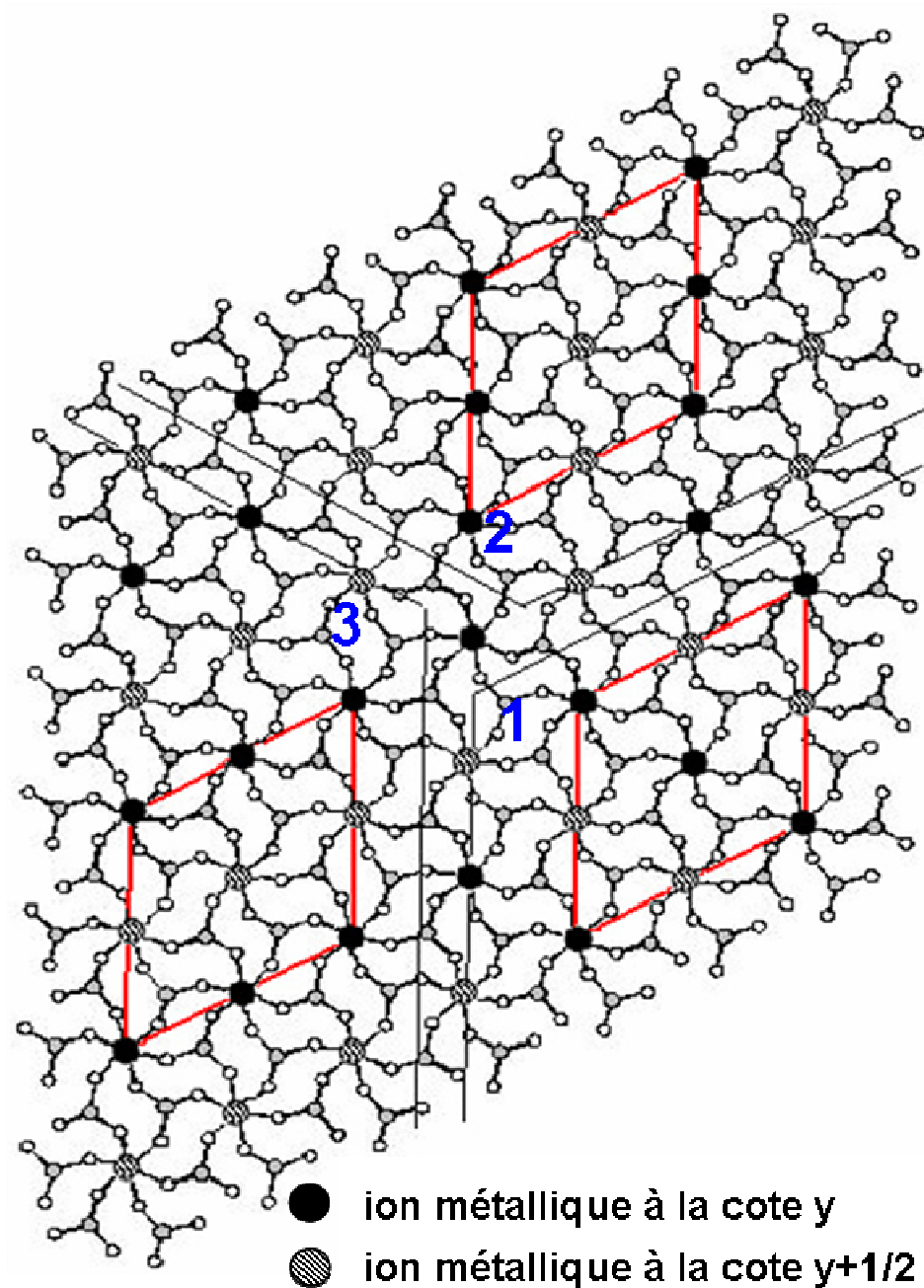
translation de l'origine  $(0, 0, \sim -0,25)$



|   |              |           |           |           |       |
|---|--------------|-----------|-----------|-----------|-------|
| ● | <b>Co(1)</b> | 0         | 0         | 0,5716(9) | (1)   |
| △ | <b>Co(2)</b> | 0,5057(3) | 0,9967(3) | 0,0758(9) | (2/3) |
| × | <b>Co(3)</b> | 0,5019(3) | 0,9971(7) | 0,5593(9) | (1/3) |

s.o.f.

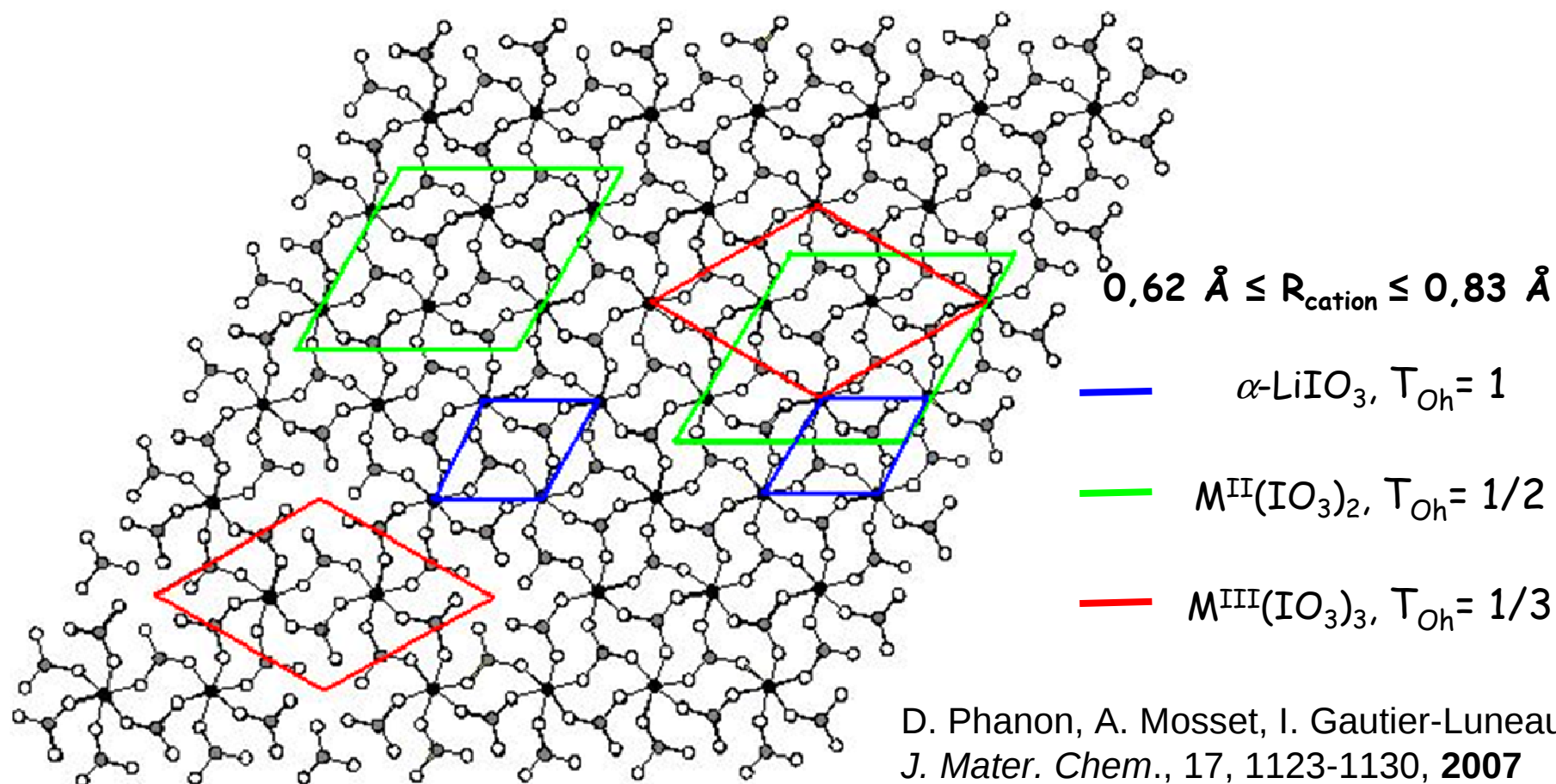
Svensson et al. *J. Solid State Chem.* **36** (1981) 195-204



## Analogie structurale avec $\alpha$ -LiIO<sub>3</sub>

$M(\text{IO}_3)_2$  : monoclinique,  $P2_1$ ,  $V = 530 \text{ \AA}^3$ ,       $M(\text{IO}_3)_3$  hexagonal,  $P6_3$ ,  $V = 390 \text{ \AA}^3$   
 $\alpha$ -LiIO<sub>3</sub> hexagonal,  $P6_3$ ,  $V = 134,5 \text{ \AA}^3$

Arrangement hexagonal pseudo compact d'iodates où les cations occupent les sites octaédriques avec un taux d'occupation variable ( $T_{\text{Oh}}$ )

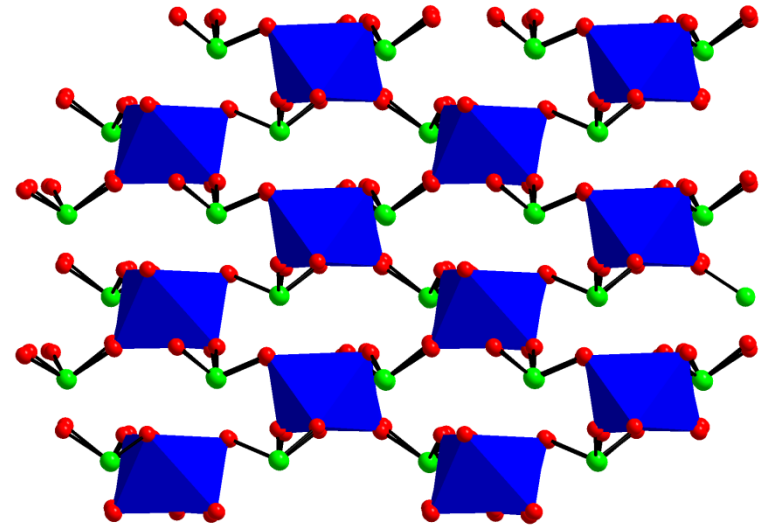
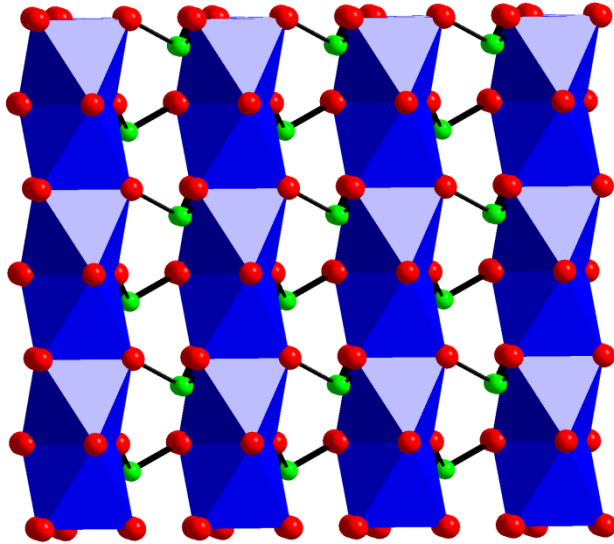


D. Phanon, A. Mosset, I. Gautier-Luneau  
*J. Mater. Chem.*, 17, 1123-1130, **2007**

# Analogie structurale avec $\alpha\text{-LiIO}_3$

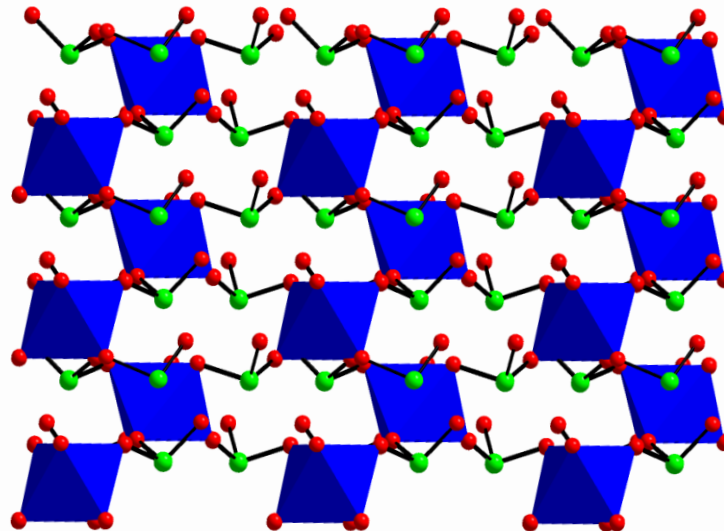
Projection parallèle à l'axe polaire

$\alpha\text{-LiIO}_3$   
 $T_{\text{Oh}} = 1$



$M(\text{IO}_3)_2$   
( $M = \text{Mg, Mn, Co, Ni, Zn}$ )  
 $T_{\text{Oh}} = 1/2$

$M(\text{IO}_3)_3$   
( $M = \text{Fe, Ga, In}$ )  
 $T_{\text{Oh}} = 1/3$



-  environnement octaédrique des cations
-  iode
-  oxygène

# Signes d'une macle!

## Macle pseudo-mériédrique

- La symétrie de Laüe ne colle pas à la métrique du réseau
- $R_{\text{int}}$  d'une classe de symétrie de Laüe plus élevée n'est que légèrement plus haut à celui d'une classe de symétrie de Laüe inférieure
- La valeur  $|E^2-1|$  sur la statistique des réflexions est diminuée  
centrosymétrique  $\sim 0.8$ , non centrosymétrique  $\sim 0.6$
- Les conditions d'existences des réflexions ne sont pas consistantes avec un groupe d'espace
- La structure ne peut être résolue
- La fonction de Patterson est physiquement impossible
- Modèle approché de la structure; valeurs de distances et angles aberrantes
- Facteurs d'agitations thermiques sont faibles ou « non-positive »
- densité électronique résiduelle élevée

# Signes d'une macle!

## Macle non mériédrique

- Le spécimen ne s'indexe pas avec les programmes standards. Si une majeure partie des réflexions sont indexées, beaucoup ne le sont pas et peuvent avoir des indices  $h$ ,  $k$  et  $l$  non entier.
- Le spécimen s'indexe, mais le volume de la maille est très important compte tenu du motif chimique, imposant un  $Z$  trop élevé par rapport à celui du système cristallin.
- Le volume de la maille est correct, mais la symétrie de Laüe n'est pas confirmée dans les premiers stades de l'analyse; le maclage rendant le  $R_{int}$  beaucoup plus important que le  $R1$ .
- La valeur  $|E^2-1|$  sur la statistique des réflexions est diminuée  
centrosymétrique  $\sim 0.8$ , non centrosymétrique  $\sim 0.6$
- Dans la liste des « 50 plus mauvaises » les réflexions avec  $F_o^2 \gg F_c^2$  peuvent correspondre à des combinaisons systématiques des indices  $h, k$  et/ou  $l$ .

# Bibliographie

Friedel, G., Leçons de cristallographie, Ed. Berger-Levrault Nancy, Paris, Strasbourg, (1926)

M. Van Merssche , J. Feneau- Dupont « Introduction à la cristallographie et à la chimie structurale » (Ed. Peeters)

Parsons; Introduction to twinning *Acta Cryst.* (2003). D59, 1995-2003

Nespolo, M.; Ferraris, G; *Z. Kristallogr.* **218** (2003) 178-181.

Copper, R. et al ;. *J. Appl. Cryst.* **35** (2002) 168-174.

Nespolo, M; *Z. Kristallogr.* **219** (2004) 57-71.

Herbst-Irmer, R.; Sheldrick, G. M; *Acta Cryst.* **B54** (1998) 443-449

Le Page, Y.; *J. Appl. Cryst.* **35** (2002) 175-181.

G. Friedel; E. Mallard; M.J. Buerger; G. Donnay; J.D.H. Donnay; H. Curien  
Y. Le Corre; Choubnikov...

International Table for Crystallography; Volume A, Volume D

### 3.3. THE 32 THREE-DIMENSIONAL POINT GROUPS

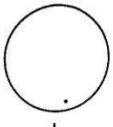
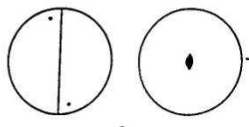
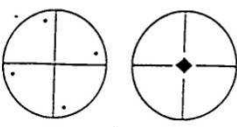
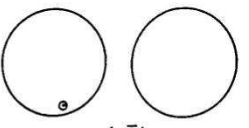
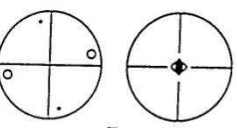
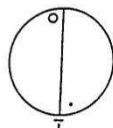
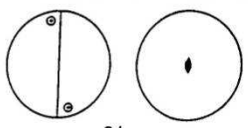
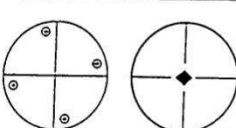
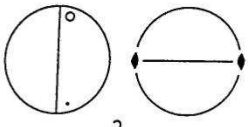
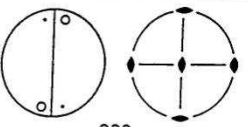
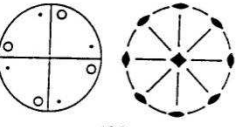
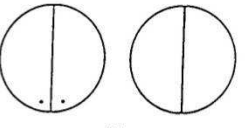
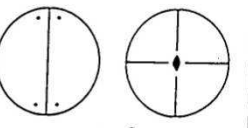
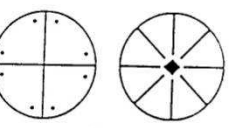
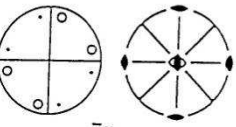
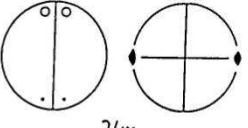
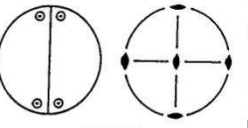
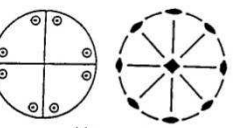
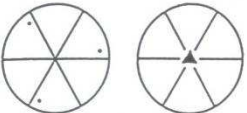
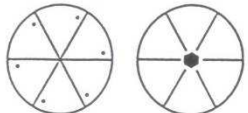
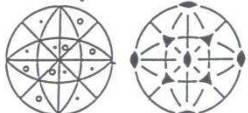
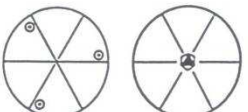
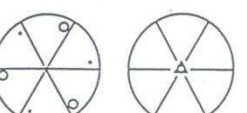
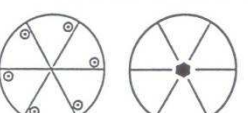
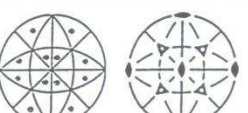
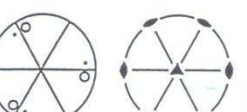
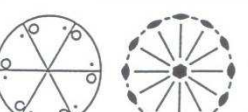
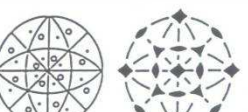
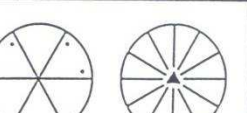
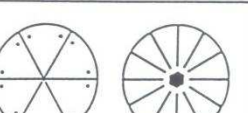
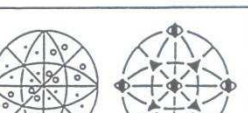
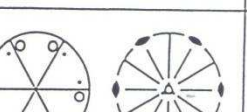
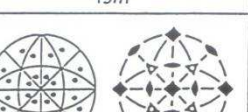
|                                                                    | Triclinic                                                                                    | Monoclinic (1st setting)                                                                            | Tetragonal                                                                                           |
|--------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $X$                                                                | <br>1       | <br>2             | <br>4             |
| $\bar{X}$<br>(even)                                                | —                                                                                            | <br>$m(-\bar{2})$ | <br>$\bar{4}$     |
| $X$<br>(even)<br>plus<br>centre<br>and<br>$\bar{X}$<br>(odd)       | <br>1       | <br>$2/m$         | <br>$4/m$         |
|                                                                    | Monoclinic (2nd setting)                                                                     | Orthorhombic                                                                                        |                                                                                                      |
| $X2$                                                               | <br>2       | <br>222           | <br>422           |
| $Xm$                                                               | <br>$m$    | <br>$mm2$        | <br>$4mm$        |
| $\bar{X}2$<br>(even)<br>or<br>$\bar{X}m$<br>(even)                 | —                                                                                            | —                                                                                                   | <br>$\bar{4}2m$ |
| $X2$<br>or<br>$Xm$<br>plus<br>centre<br>and<br>$\bar{X}m$<br>(odd) | <br>$2/m$ | <br>$mmm$       | <br>$4/mmm$     |

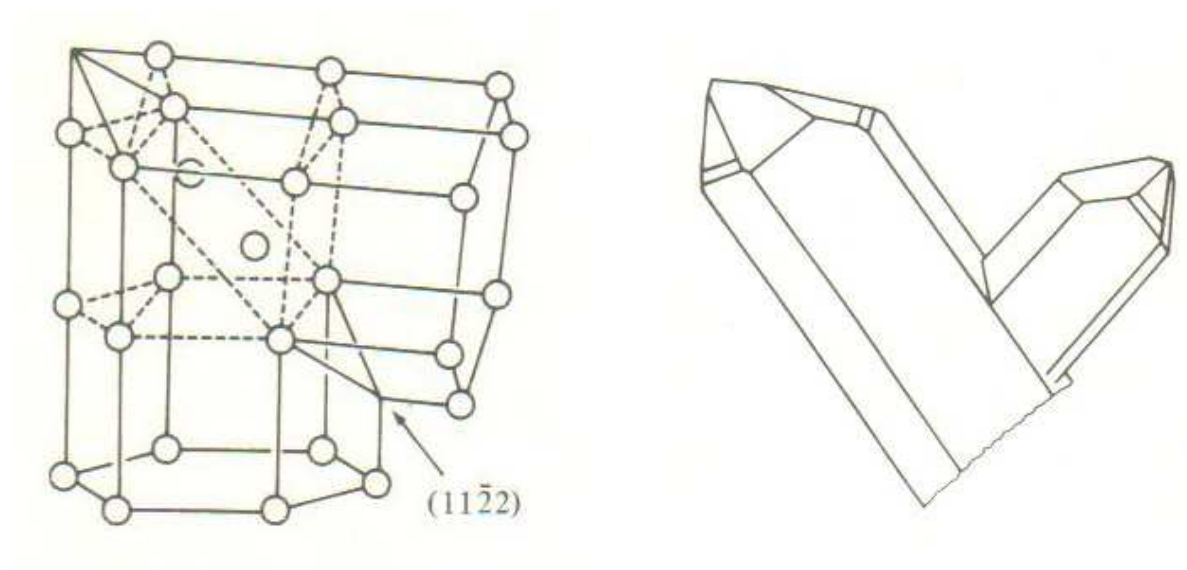
Fig. 3.3.1. Stereograms of poles of general equivalent directions, and symmetry

### 3.3. THE 32 THREE-DIMENSIONAL POINT GROUPS

| Trigonal                                                                                          | Hexagonal                                                                                            | Cubic                                                                                                |                                                                                |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------|
| <br>3            | <br>6             | <br>23            | $\chi$                                                                         |
| —                                                                                                 | <br>$\bar{6}$     | —                                                                                                    | $\bar{\chi}$<br>(even)                                                         |
| <br>$\bar{3}$    | <br>6/m           | <br>m3            | $\chi$<br>(even)<br>plus<br>centre<br>and<br>$\bar{\chi}$<br>(odd)             |
| <br>32           | <br>622           | <br>432           | $\chi^2$                                                                       |
| <br>3m          | <br>6mm          | —                                                                                                    | $\chi m$                                                                       |
| —                                                                                                 | <br>$\bar{6}m2$ | <br>$\bar{4}3m$ | $\bar{\chi}^2$<br>(even)<br>or<br>$\bar{\chi} m$<br>(even)                     |
| <br>$\bar{3}m$ | <br>6/mmm       | <br>m3m         | $\chi^2$<br>or<br>$\chi m$<br>plus<br>centre<br>and<br>$\bar{\chi} m$<br>(odd) |

elements of each of the 32 point groups (z-axis normal to the paper in all drawings)

## Macle du Quartz $\alpha$ par pseudo-méridrie



Macle du Japon ou de la Gardette (par accollement)

Classification en système réticulaire et système cristallin du quartz- $\alpha$ , quartz- $\beta$  et calcite

| Cristal                                        | Groupe d'espace                          | Groupe ponctuel | Système réticulaire | Système cristallin |
|------------------------------------------------|------------------------------------------|-----------------|---------------------|--------------------|
| Quartz de basse température (quartz $\alpha$ ) | $P3_121$ (gauche)<br>ou $P3_221$ (droit) | 321             | Hexagonal           | Trigonal           |
| Quartz de haute température (quartz $\beta$ )  | $P6_422$ (gauche)<br>ou $P6_222$ (droit) | 622             | Hexagonal           | Hexagonal          |
| Calcite                                        | $R-3c$                                   | $-3m$           | Rhomboédrique       | Trigonal           |