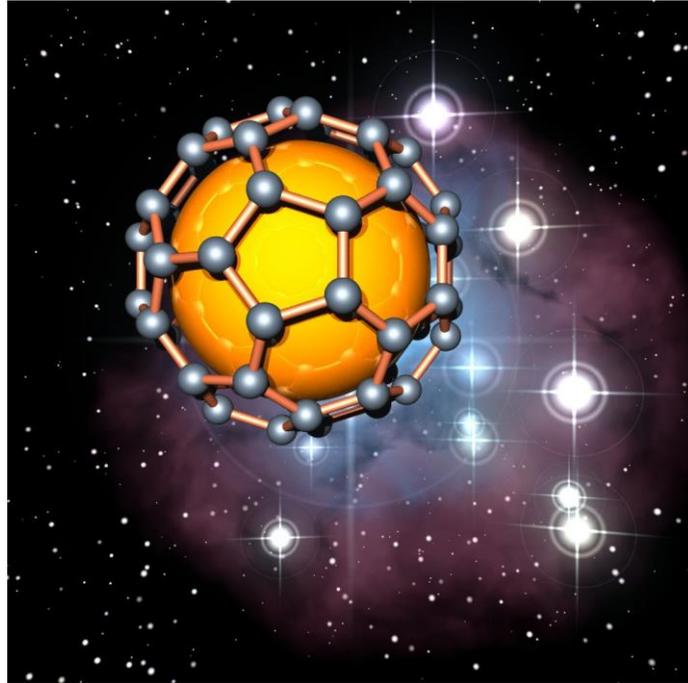


DEPARTEMENT DE CHIMIE



Cristallographie Géométrique

SMP 4

Pr Mohamed EL OMARI

Lcsab@yahoo.fr

WhatsApp 0667280501

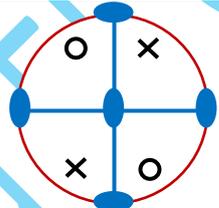
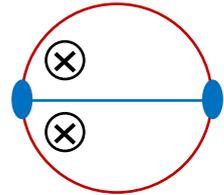
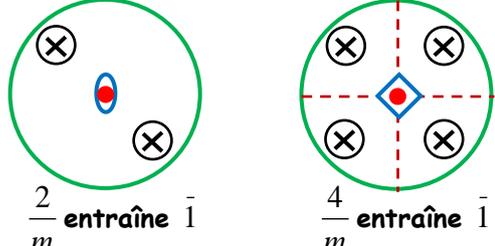
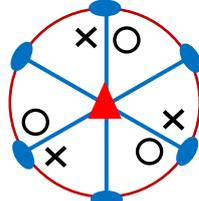
2019 - 2020

Chapitre 4

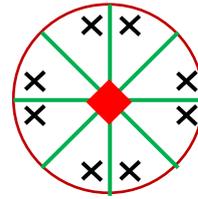
Classes cristallines & Groupes d'espace

I-Association des éléments de symétrie

Un cristal, comme figure finie, peut comporter plusieurs opérations de symétrie. Lorsqu'on associe deux opérations, une troisième apparaît. Lorsque la troisième opération est associée avec l'une des deux premières, une quatrième est éventuellement créée etc. L'ensemble de ces opérations de symétrie forme un groupe ponctuel de symétrie par ce que ces éléments se coupent au moins en un point.

<p>1. L'association de deux axes A_2 orthogonaux entraîne un troisième A_2 perpendiculaire aux deux précédents.</p>	 <p>$2\ 2$ entraîne $2\ 2\ 2$</p>
<p>2- L'association de deux miroirs m orthogonaux, leur intersection est un axe A_2.</p>	 <p>$m\ m$ entraîne $m\ m\ 2$</p>
<p>3- L'association d'un miroir m et d'un axe $A_2 \in m$ entraîne un second miroir m' perpendiculaire à m et le coupe selon l'axe A_2.</p>	 <p>$2\ m$ entraîne $2\ m\ m$</p>
<p>4. L'association d'un miroir m et d'un axe d'ordre paire $A_n \perp m$, l'intersection est un centre d'inversion.</p>	 <p>$\frac{2}{m}$ entraîne $\bar{1}$ $\frac{4}{m}$ entraîne $\bar{1}$</p>
<p>5- L'association d'un axe A_n ($n > 2$) et d'un axe $A_2 \perp A_n$ entraîne $n\ A_2 \perp A_n$ faisant entre eux des angles égaux à $\frac{\pi}{n}$. Et réciproquement.</p>	

6- L'association d'un axe A_n ($n > 2$) et d'un miroir m ($A_n \in m$), entraîne n m faisant entre eux des angles égaux à $\frac{\pi}{n}$ dont A_n constitue leur intersection. Et réciproquement.



Remarque:

Pour les solides cristallins le nombre d'axes de symétrie d'ordre $n > 2$ est limité :

- Il ne peut exister que 0 ou 1 seul axe d'ordre 6.
- Il ne peut exister que 0 ou 1 ou 3 axes d'ordre 4.
- Il ne peut exister que 0 ou 1 ou 4 axes d'ordre 3.

Il y a que peu de manières pour combiner les éléments de symétrie pour en faire des groupes ponctuels (*en sens mathématique*).

II- Groupes ponctuels de symétrie

L'ensemble des opérations de symétrie mettant en coïncidence des orientations équivalentes d'un solide constitue un groupe de symétrie d'orientation dit **groupe ponctuel** par ce que les éléments sont tous concourants en un point qui est le centre de masse d'une figure finie.

L'ensemble des corps qui présentent les mêmes éléments de symétrie constitue une **classe**. Le groupe ponctuel de symétrie correspondant forme donc leur **classe de symétrie**.

En dénombrant les associations possibles entre les opérations de symétrie, on aboutit aux **32 groupes ponctuels cristallographiques** connus sous le nom des **32 classes cristallines**.

Deux types de groupes ponctuels existent :

α - Groupes axiaux

Ils présentent qu'un seul axe A_n d'ordre $n > 2$, celui-ci ne peut être composé qu'avec un centre d'inversion $\bar{1}$, ou avec des axes binaires A_2 et $A_2(m)$ confondus ou perpendiculaires. Ils sont 27 groupes axiaux.

β - Groupes cubiques

Les cinq groupes cubiques sont **23** ; **m3** ; **432** ; **$\bar{4}3m$** et **m3m**. Les symboles sont classés dans l'ordre d'orientation [100], [± 111] et [± 110].

III- Systèmes cristallins

Parmi les 32 classes cristallines, 11 sont **centro-symétriques**, on les appelle **groupes de LAUE**. Parmi ces groupes de LAUE, sept seulement présentent la **symétrie maximale** du réseau ce qui conduit aux **sept systèmes cristallins**.

Les sept systèmes cristallins permettent la description de tous solides cristallins et sont basés sur les sept trièdres fondamentaux, de vecteurs de base \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} , formant entre eux les angles α , β et γ .

Système cristallin	longueurs	angles	Paramètres de maille
Cubique	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$	a
Quadratique	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$	a, c
Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \frac{\pi}{2} ; \gamma = \frac{2\pi}{3}$	a, c
Rhomboédrique	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq \frac{\pi}{2}$	a, α
Orthorhombique	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$	a, b, c
Monoclinique	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = \frac{\pi}{2} ; \beta \neq \frac{\pi}{2}$	a, b, c, β
Triclinique	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \gamma \neq \beta$	$a, b, c, \alpha, \gamma, \beta$

Les mailles élémentaires des sept systèmes cristallins peuvent être soit primitifs (P) avec des nœuds uniquement aux sommets soit multiples avec des nœuds supplémentaires. Les différentes possibilités des distributions des nœuds dans une maille élémentaire constituent les **modes de réseaux**.

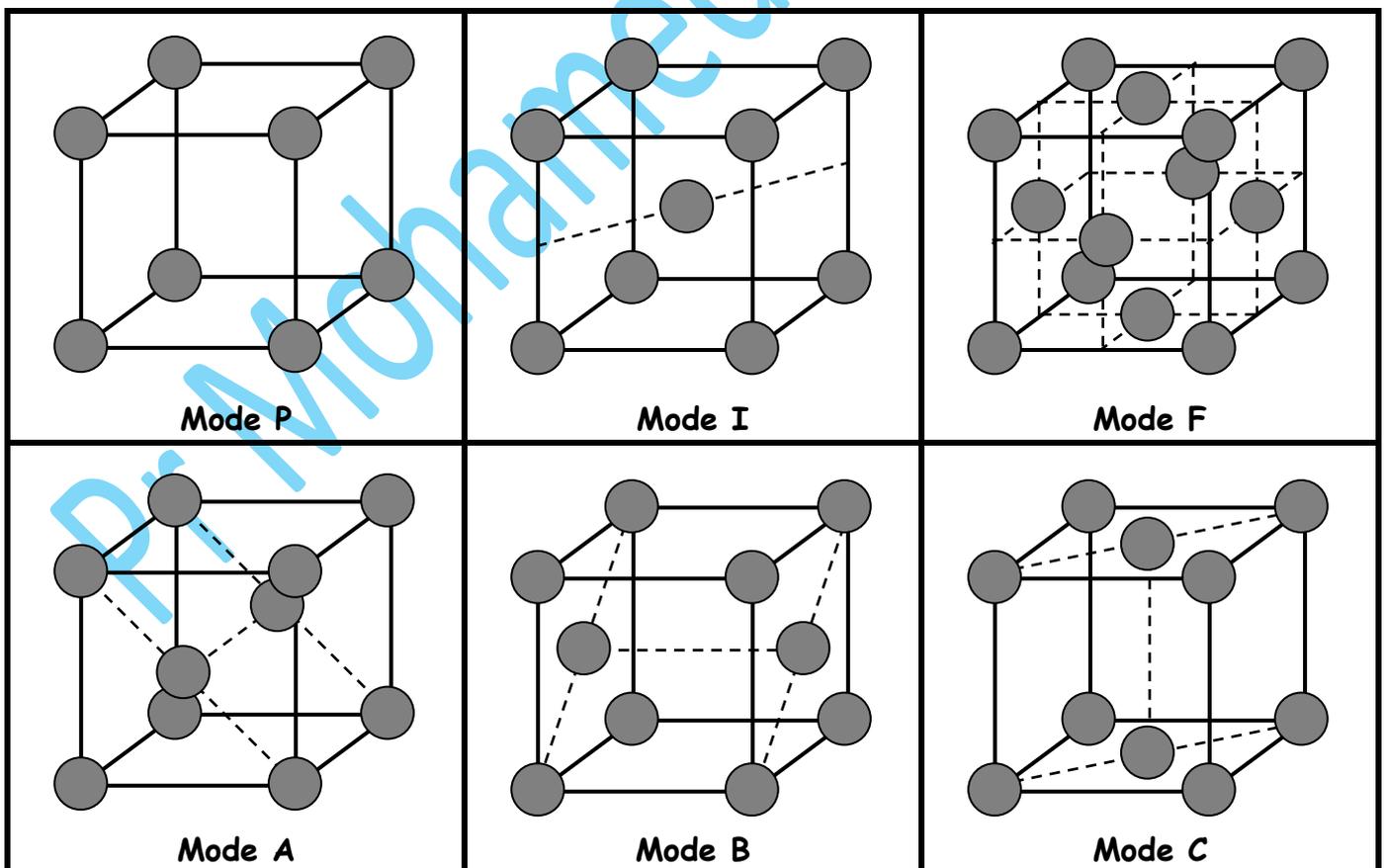
IV- Modes de réseaux

Les mailles multiples dérivent de la maille primitive en ajoutant des nœuds soit au centre (**mode I**), soit à deux faces opposées (**modes A, B et C**), soit à toutes les faces de la maille (**mode F**). Les nœuds supplémentaires se déduisent du nœud au sommet (pris comme origine) en appliquant des translations demi-entières (voir tableau).

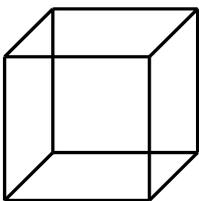
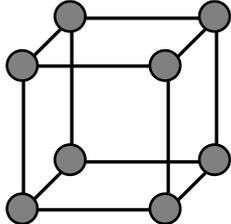
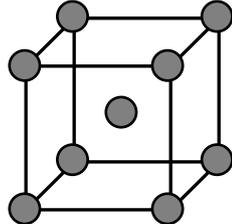
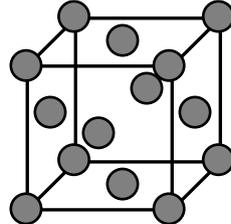
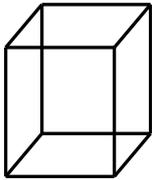
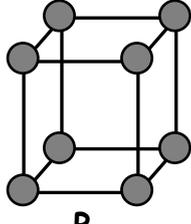
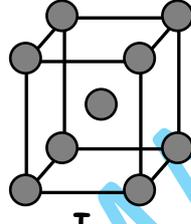
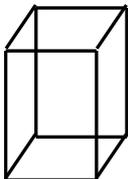
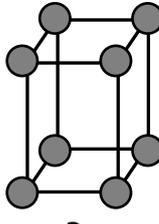
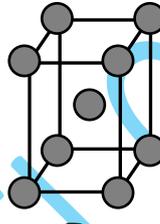
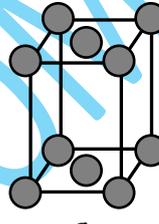
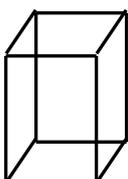
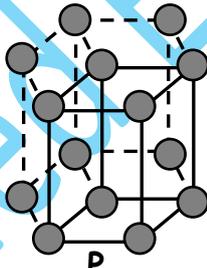
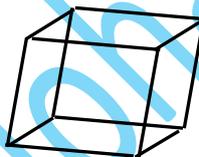
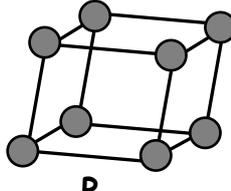
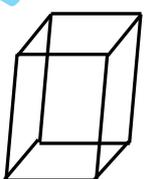
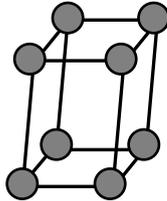
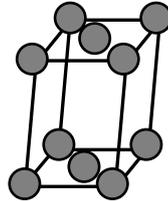
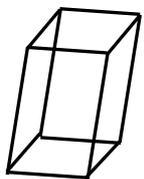
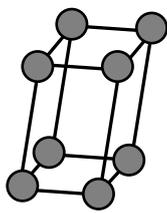
Maille élémentaire	Mode de réseau	Translations supplémentaires	Z
Primitive	P	---	1
Centrée	I	$T = \frac{\bar{a} + \bar{b} + \bar{c}}{2}$	2
Base centrée	A	$T = \frac{\bar{b} + \bar{c}}{2}$	2
Base centrée	B	$T = \frac{\bar{a} + \bar{c}}{2}$	2
Base centrée	C	$T = \frac{\bar{a} + \bar{b}}{2}$	2
Faces centrées	F	$T_1 = \frac{\bar{b} + \bar{c}}{2}$; $T_2 = \frac{\bar{a} + \bar{c}}{2}$; $T_3 = \frac{\bar{a} + \bar{b}}{2}$	4

Si chaque système cristallin présente la possibilité d'avoir les six modes de réseaux, on aura au total 42 modes de réseaux. Ainsi, et pour des raisons de symétrie, certains modes se déduisent les uns des autres pour donner finalement que 14 modes de réseaux indépendants appelés les **14 réseaux de Bravais**.

Les 14 réseaux de Bravais engendrent la totalité des états solides cristallins. Chacun de ces réseaux est caractérisé par des symétries et des classes cristallines particulières.



Les modes de réseaux possibles pour un système cristallin

Système cristallin		Réseaux de Bravais		
Cubique $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$				
Quadratique $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$				
Orthorhombique $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$				
Hexagonal $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \frac{\pi}{2}; \gamma = \frac{2\pi}{3}$				
Rhomboédrique $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq \frac{\pi}{2}$				
Monoclinique $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = \frac{\pi}{2}; \beta \neq \frac{\pi}{2}$				
Triclinique $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \gamma \neq \beta$				

Système cristallin	Paramètres	Réseaux de Bravais	Classes	Classe système
Cubique	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$	P ; I ; F	$23 ; m\bar{3}^* ; 432 ; \bar{4}3m ; m\bar{3}m^*$	$m\bar{3}m$
Quadratique	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$	P ; I	$4 ; \bar{4} ; 4/m^* ; 4mm ; 422 ; \bar{4}2m ; 4/mmm^*$	$4/mmm$
Hexagonal	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \frac{\pi}{2} ; \gamma = \frac{2\pi}{3}$	P	$6 ; \bar{6} ; 6/m^* ; 6mm ; 622 ; \bar{6}2m ; 6/mmm^*$	$6/mmm$
Rhomboédrique	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq \frac{\pi}{2}$	R ou P	$3 ; \bar{3}^* ; 3m ; 32 ; \bar{3}m^*$	$\bar{3}m$
Orthorhombique	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$	P ; F ; I ; C	$222 ; mm2 ; mmm^*$	mmm
Monoclinique	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = \frac{\pi}{2} ; \beta \neq \frac{\pi}{2}$	P ; C	$2 ; m ; 2/m^*$	$2/m$
Triclinique	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \gamma \neq \beta$	P	$1 ; \bar{1}^*$	$\bar{1}$

* groupe de LAUE (centro-symétrique).

V-Groupes spatiaux

Un groupe d'espace est l'ensemble des opérations de symétrie indépendantes d'une structure cristalline triplement périodique. La recherche des groupes d'espace consiste à déterminer toutes les combinaisons possibles entre les éléments de symétrie suivants :

- Opérations directes 2, 3, 4, 6 et hélicoïdales correspondantes,
- Roto-inversions $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$ et plans de glissement,
- Translations demi-entières caractérisant le réseau de Bravais.

Il en résulte au total 230 groupes d'espace

Parmi les 230 groupes spatiaux, 73 sont **symorphiques** obtenus en associant des opérations de symétrie pures avec les translations de réseau. Les autres sont dits **non-symorphiques**.

α- Notation des groupes spatiaux

Un groupe d'espace est noté $Xefg$, dont X est le mode de réseau et e, f et g sont des éléments de symétrie avec ou sans translations. La procédure à suivre pour déterminer les groupes d'espace est comme suite :

- type de réseau de Bravais X
- éléments de symétrie sans translation (**classe cristalline**)
- éléments de symétrie avec translation

Exemples :

- **Triclinique** : $X = P$; classes : 1 et $\bar{1}$
 \Rightarrow les combinaisons possibles sont : $P1$ et $P\bar{1}$
- **Monoclinique** : $X = P$ ou C ; classes : 2 ; m et $2/m$ avec les translations conduisent aux combinaisons suivantes

$$\begin{array}{cccc}
 2 & 2_1 & & \\
 m & a & c & n \quad (\text{pas de } b \text{ par ce que } m \perp b) \\
 2/m & 2/a & 2/c & 2/n \\
 2_1/m & 2_1/a & 2_1/c & 2_1/n
 \end{array}$$

Théoriquement il y a 28 possibilités de groupes spatiaux pour le monoclinique. En tenant compte du fait que :

$$\begin{aligned}
 Pa &\equiv Pc \text{ et } Pn \equiv Pc \\
 C2_1 &\equiv C2 ; C2_1/c \equiv C2/c ; C2_1/m \equiv C2/m
 \end{aligned}$$

On aura pour le monoclinique uniquement 13 groupes d'espace :

2	:	P2	P2 ₁	C2			
m	:	Pm	Pc	Cm	Cc		
2/m	:	P2/m	P2 ₁ /m	C2/m	P2/c	P2 ₁ /c	C2/c

Remarques :

- La classe cristalline d'un groupe d'espace peut être obtenue en :
 - supprimant la lettre X représentative du mode de réseau,
 - changeant toutes les lettres indiquant les plans de symétrie par m ,
 - supprimant les indices des axes de symétrie.
- Lorsqu'on a plusieurs éléments de symétrie selon une même direction, généralement il y a un ordre de priorité. Pour les systèmes orthorhombique et monoclinique on a :
 - $m > a > b > c > n$
 - $2 > 2_1$

Le tableau ci-dessous regroupe les orientations cristallographiques des éléments de symétrie des classes et groupes d'espace.

Systèmes cristallins	Classes	Orientations Cristallographiques
Cubique	$23 ; m\bar{3} ; 432 ; \bar{4}3m ; m\bar{3}m$	$[100], [111], [110]$
Quadratique	$4 ; \bar{4} ; 4/m ; 4mm ; 422 ; \bar{4}2m ; 4/mmm$	$[001], [100], [110]$
Hexagonal	$6 ; \bar{6} ; 6/m ; 6mm ; 622 ; \bar{6}2m ; 6/mmm$	$[001], [110], [120]$
Orthorhombique	$222 ; mm2 ; mmm$	$[100], [010], [001]$
Monoclinique	$2 ; m ; 2/m$	$[010]$

Exemples :

- Groupe d'espace $Pna2_1 \Rightarrow$ classe $mm2$ $\left\{ \begin{array}{l} n \text{ devient } m \\ a \text{ devient } m \\ 2_1 \text{ devient } 2 \end{array} \right.$

\Rightarrow système cristallin orthorhombique
 $n \perp [100] ; a \perp [010] ; 2_1 // [001]$
- Groupe d'espace $I4_1cd \Rightarrow$ classe $4mm$ $\left\{ \begin{array}{l} 4_1 \text{ devient } 4 \\ c \text{ devient } m \\ d \text{ devient } m \end{array} \right.$

\Rightarrow système cristallin quadratique
 $4_1 // [001] ; c \perp [100] ; d \perp [11\bar{0}]$
- Groupe d'espace $F\bar{4}3c \Rightarrow$ classe $\bar{4}3m$ $\left\{ \begin{array}{l} \bar{4} \text{ reste } \bar{4} \\ 3 \text{ reste } 3 \\ c \text{ devient } m \end{array} \right.$

\Rightarrow système cristallin cubique
 $\bar{4} // [100] ; 3 // [111] ; c \perp [110]$

β- Représentation géométrique

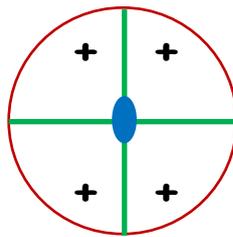
Elle consiste à faire une projection de la maille élémentaire avec la représentation graphique de ces éléments de symétrie. On y ajoute souvent les positions équivalentes obtenus à partir d'une position **générale** de départ (x, y, z) appelée unité asymétrique.

On dit aussi position **spéciale** si le centre du motif coïncide avec un élément de symétrie sans glissement.

Exemple : le groupe d'espace $Cmc2_1$

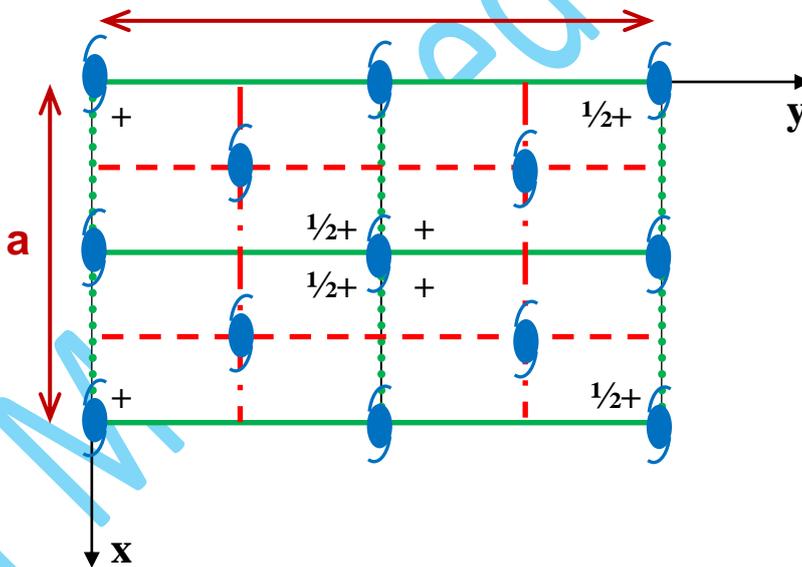
La classe est $mm2$

Le nombre d'équivalents = 4



mode **C** \Rightarrow le nombre de positions équivalentes $2 \times 4 = 8$

Le système cristallin est orthorhombique, le seul compatible avec la classe $mm2$.



Projection géométrique du groupe d'espace $Cmc2_1$ sur le plan (001)

Constatations :

- les éléments de symétrie se répètent toutes les demi-périodes.
- Il apparaît d'autres éléments de symétrie : **b**, **n** et 2_1 .

γ - Les tables internationales

Le dénombrement de tous les groupes d'espace possibles est dû aux travaux de **Fedorov** (Russe) et **Schönflies** (Allemand). Ils sont désignés par des symboles répertoriés dans des **Tables Internationales de Cristallographie**.

Quels sont les renseignements qu'elles contiennent ?

- 1- le système cristallin,
- 2- le numéro du groupe d'espace,
- 3- sa dénomination en notation d'Hermann-Mauguin (symétrie cristalline),
- 4- sa dénomination en notation de Schönflies-Fedorov (symétrie moléculaire)
- 5- la classe cristalline,
- 6- les représentations des éléments de symétrie du groupe,
- 7- les informations permettant de positionner tous les atomes contenus dans la maille (on utilise les notations de Wyckoff)
 Υ au centre, les positions équivalentes induites par le mode de réseau.
 Υ en dessous, les positions équivalentes des atomes. Cette liste va toujours d'un site situé en position générale au site situé sur le plus d'éléments de symétrie.

Exemple : Table internationale du groupe d'espace $I4mm$ (N°107).

Tetragonal	$4mm$	$I4mm$	No. 107	$I4mm$ C_{4v}^9
Origin on $4mm$				
Number of positions Wyckoff notation and point symmetry			Co-ordinates of equivalent positions	Conditions limiting possible reflections
			$(0,0,0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})^+$	
16	e	1	$x,y,z; \bar{x}, \bar{y}, z; \bar{x}, y, z; x, \bar{y}, z;$ $y, x, z; \bar{y}, \bar{x}, z; y, \bar{x}, z; \bar{y}, x, z.$	General $hkl : h+k+l = 2n$ $0kl : k+l = 2n$ $hhl : l = 2n$
8	d	m	$x,0,z; \bar{x}, 0,z; 0,x,z; 0, \bar{x}, z.$	} no extra conditions
8	c	m	$x,x,z; \bar{x}, \bar{x}, z; \bar{x}, x,z; x, \bar{x}, z.$	
4	b	mm	$0, \frac{1}{2}, z; \frac{1}{2}, 0, z.$	$hkl : l = 2n ; h+k = 2n$
2	a	$4mm$	$0,0,z.$	no extra conditions

La lecture de la table internationale du groupe d'espace $I4mm$ (N° 107)

Tetragonal système cristallin	$4mm$ Classe cristalline	$I4mm$ Notation Hermann-Mauguin	N° 107 N° de groupe	$I4mm$ Notation Schönflies-Fedorov C_{4v}^9
		<p>Origin on $4mm$ Origine de la maille</p>		
<p>Number of positions Wyckoff notation and point symmetry</p>		<p>Co-ordinates of equivalent positions</p> <p>$(0,0,0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})+$</p>		<p>Conditions limiting possible reflections</p>
<p>Symboles des éléments de symétrie</p>		<p>Translation de mode de réseau</p>		<p>General</p> <p>$hkl : h+k+l = 2n$</p> <p>$OkI : k+l = 2n$</p> <p>$hhl : l = 2n$</p>
<p>positions générales</p>	<p>16 e</p> <p>multiplicité du site</p>	<p>1</p>	<p>$x,y,z \quad \bar{x}, \bar{y}, z \quad \bar{x}, y, z \quad x, \bar{y}, z$</p> <p>$y, x, z \quad \bar{y}, \bar{x}, z \quad y, \bar{x}, z \quad \bar{y}, x, z$</p> <p>positions de Wyckoff</p>	<p>Special : as above, plus</p>
<p>positions particulières</p>	<p>8 d</p> <p>8 c</p> <p>4 b</p> <p>2 a</p> <p>lettres de discernement</p>	<p>m</p> <p>m</p> <p>mm</p> <p>4mm</p>	<p>$x,0,z; \quad \bar{x}, 0,z; \quad 0,x,z \quad 0, \bar{x}, z.$</p> <p>$x,x,z; \quad \bar{x}, \bar{x}, z; \quad \bar{x}, x,z \quad x, \bar{x}, z.$</p> <p>$0, \frac{1}{2}, z; \quad \frac{1}{2}, 0, z.$</p> <p>$0,0,z.$</p>	<p>no extra conditions</p> <p>$hkl : l = 2n ; h+k = 2n$</p> <p>no extra conditions</p>

1- c'est un groupe de mode I donc à tout atome correspondra un autre atome par translation de réseau $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$.

} on double le nombre d'atomes rien que par la translation.

2- on a un axe d'ordre 4 selon c.

} à tout atome en position x,y,z correspondent 3 atomes en positions :

$$-y,x,z \quad -x,-y,z \quad y,-x,z$$

3- on a deux miroirs.

} miroir selon $(x+y,z)$: à tout atome en position x,y,z correspond 1 atome en positions y,x,z .

} miroir selon (x,z) en côte $y = 0$: à tout atome en position x,y,z correspond 1 atome en positions $x,-y,z$.

VI- Notions de radiocristallographie

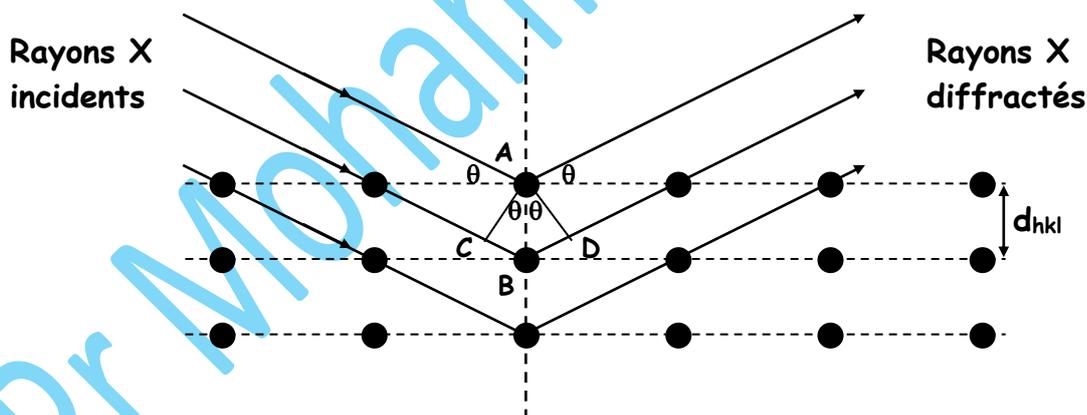
La radiocristallographie est une technique de diffraction des rayonnements par un cristal. Il s'agit d'un phénomène de **diffusion** des radiations par les constituants du solide. Ce phénomène a été exploité, pour la première fois par **LAUE en 1912**, en utilisant les **rayons X** afin de déterminer les structures cristallines. La longueur d'onde d'un rayon X, voisine de 1 \AA , est en effet de même ordre de grandeur que les distances interatomiques.

La radiocristallographie permet de déterminer les paramètres de mailles, la symétrie cristalline et la nature des constituants du solide.

L'exploitation des résultats d'une expérience de diffraction des rayons X fait appel nécessairement à des connaissances mathématiques tel que le réseau réciproque.

1-Diffraction des rayons X

La diffraction des rayons X par un solide cristallin peut être assimilée à un phénomène de **réflexion** de ces rayons par les plans réticulaires. En fait, lorsqu'on envoie un rayonnement monochromatique de longueur d'onde λ sur un cristal tout se passe comme si chaque famille de plans réticulaires $(h \ k \ l)$ **réfléchissait** le rayonnement dans une direction bien définie θ .



Après diffraction, la différence de marche δ entre deux rayons consécutifs est :

$$\delta = CB + BD = d \cdot \sin(\theta) + d \cdot \sin(\theta) = 2d \cdot \sin(\theta)$$

Un maximum d'intensité diffractée est obtenu lorsque $\delta = k \cdot \lambda$ (avec k entier positif). On aura donc la relation :

$$2d_{hkl} \cdot \sin(\theta) = k \cdot \lambda$$

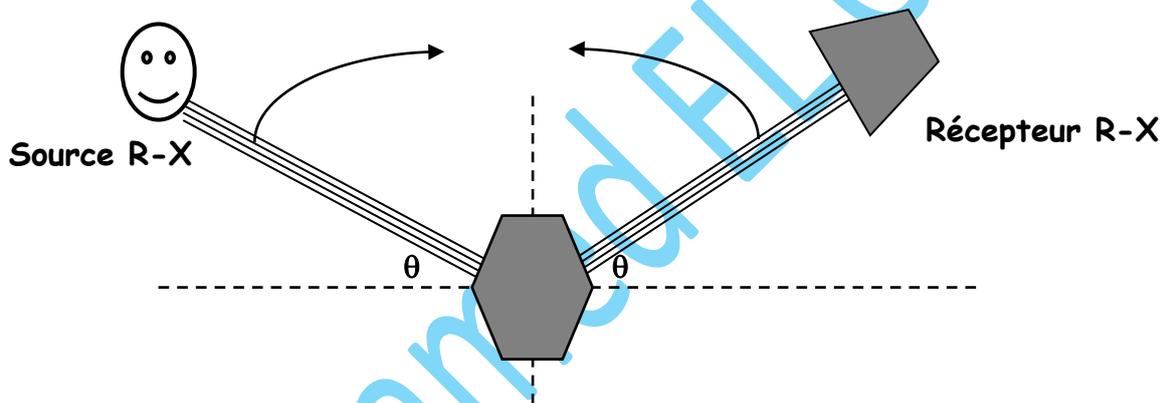
Cette relation est connue sous le nom : **la première loi de Bragg**. K étant l'ordre de diffraction.

En pratique, on s'intéresse uniquement à la diffraction du premier ordre ($K = 1$).

2- Technique de diffraction des rayons X

L'analyse par diffraction des rayons X consiste à faire varier l'angle incident θ et enregistrer l'intensité des raies de diffraction. Les valeurs particulières de θ pour lesquelles on observe des raies de diffraction sont caractéristiques des plans réticulaires constitutifs du solide.

Ainsi, chaque famille de plans réticulaires caractérisée par une distance interréticulaire bien définie peut donner naissance à un ou plusieurs faisceaux diffractés, lorsque la première loi de Bragg est vérifiée.



Parmi les objectifs essentiels de la radiocristallographie la détermination des paramètres de maille ($a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$) et la caractérisation de sa multiplicité (Z). Il était impératif d'établir des relations entre les paramètres de maille et les résultats expérimentaux de diffraction rayons X ($h, k, l, d_{hkl}...$).

La résolution du problème, recherche de relations, dans un référentiel lié au solide (**réseau direct**) est très compliqué et épineuse. Ainsi un concept purement géométrique a été introduit par **Ewald en 1921**, il consiste à faire correspondre à chaque réseau direct un réseau dit **réciproque** qui n'a pas la signification physique réelle du réseau structural. Par conséquent, toutes les relations possibles entre les paramètres de maille, les distances réticulaires et les indices de Miller sont rendues possibles à l'aide de ce concept.

2-Réseau réciproque

A- Définition

A chaque réseau direct $(a, b, c, \alpha, \beta, \gamma)$, on peut lui correspondre un réseau réciproque $(a^*, b^*, c^*, \alpha^*, \beta^*, \gamma^*)$ tels que :

- Les vecteurs de bases \vec{a}^* , \vec{b}^* et \vec{c}^* du réseau réciproque sont perpendiculaires respectivement aux plans (b, c) , (a, c) et (a, b) du réseau direct. On aura donc :

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

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

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

- Les modules des vecteurs de bases \vec{a}^* , \vec{b}^* et \vec{c}^* sont pris égaux respectivement aux inverses des distances réticulaires des plans principaux $(1\ 0\ 0)$, $(0\ 1\ 0)$ et $(0\ 0\ 1)$. On aura donc :

$$\vec{a} \cdot \vec{a}^* = \vec{b} \cdot \vec{b}^* = \vec{c} \cdot \vec{c}^* = 1$$

- Les angles α^* , β^* et γ^* du réseau réciproques sont complémentaires à ceux du réseau direct α , β et γ :

$$\alpha + \alpha^* = \beta + \beta^* = \gamma + \gamma^* = \pi$$

B-Propriétés du réseau réciproque

- Les réseaux direct et réciproque présentent **la même symétrie**.
- Toute rangée $[h\ k\ l]^*$ du réseau réciproque est **perpendiculaire** à la famille de plans réticulaires $(h\ k\ l)$ du réseau direct. Cette relation entre les deux réseaux se traduit par la relation suivante :

$$|\vec{r}_{hkl}^*| = \frac{1}{d_{hkl}}$$

où \vec{r}_{hkl}^* est le vecteur unitaire de la rangée $[h\ k\ l]^* = h \cdot \vec{a}^* + k \cdot \vec{b}^* + l \cdot \vec{c}^*$

C-Les paramètres de mailles

- Cubique $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$
- Quadratique $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+(\frac{a}{c})^2 \cdot l^2}}$
- Orthorhombique $d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{(\frac{h}{a})^2+(\frac{k}{b})^2+(\frac{l}{c})^2}}$
- Hexagonal $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2+k^2+hk)+(\frac{a}{c})^2 \cdot l^2}}$