

Chapitre 8 : Association et Transformation des opérations de symétrie

8.1 Introduction

Un cristal peut comporter plusieurs opérations de symétrie. Dans ce cas, la disposition, des éléments de symétrie doit rendre les différentes opérations de symétrie mutuellement cohérentes. Lorsque deux opérations de symétrie sont associées, une troisième est créée, lorsque la troisième est associée avec l'une des deux premières une quatrième est éventuellement créée etc... L'ensemble de ces opérations de symétrie qui laissent invariant au moins un point de l'espace forment un groupe ponctuel.

Dans ce chapitre, on s'intéresse à la symétrie ponctuelle du réseau, c'est à dire à l'ensemble des éléments de symétrie qui se coupent sur un nœud. On verra qu'ils se coupent aussi au milieu des translations de réseau.

8.2 Associations d'opérations binaires

On utilise les symboles de la notation internationale ou d'Hermann-Mauguin. Les opérations directes et inverses sont notées :

$$1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 6 \quad \bar{1} = C \quad \bar{2} = m \quad \bar{3} \ \bar{4} \ \bar{6} \quad (\text{m indique un miroir})$$

Pour représenter les associations, on indique en premier la symétrie de l'axe principal ; s'il existe un miroir de normale parallèle à l'axe d'ordre n on le note :

$$\frac{n}{m} \text{ ou } n/m$$

les autres éléments sont écrits à la suite.

8.2.1 Association de deux opérations binaires directes orthogonales

L'association de deux opérations binaires directes autour de deux axes (éléments de symétrie) orthogonaux entraîne une troisième opération binaire directe autour d'un axe perpendiculaire aux deux précédents et passant par leur intersection.

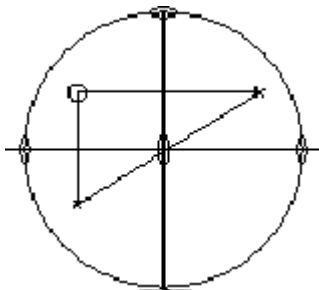


Figure 8.1 - 2 2 entraîne 222

La projection stéréographique des pôles des directions équivalentes déduites par les opérations 2 2 est représentée, Fig. 8.1 : on montre par un raisonnement géométrique

simple que les positions finale et initiale se déduisent l'une de l'autre par une nouvelle opération de symétrie binaire.

8.2.2 Association de deux miroirs orthogonaux

Si deux miroirs se coupent à 90° , leur intersection est un axe binaire. La construction géométrique est immédiate

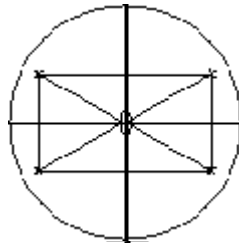


Figure 8.2 - m m entraîne m m 2

8.2.3 Association de deux opérations binaires directes

Si un miroir contient un axe binaire, le plan qui le coupe selon cet axe est aussi miroir

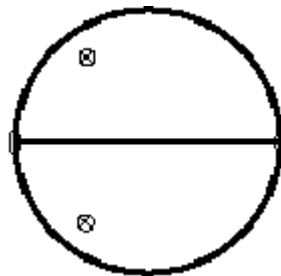


Figure 8.3 - 2 m entraîne 2 m m

Le miroir principal se trouve dans le plan de projection, l'axe de l'opération binaire se trouve aussi dans le plan de projection : en considérant les projections des pôles des directions équivalentes on voit que cette association entraîne un miroir secondaire perpendiculaire au plan de projection et dont la trace est confondue avec l'axe binaire.

Remarque : on aurait pu considérer, Fig. 8.3, le miroir principal normal au plan de projection associé avec un axe binaire confondu avec la trace du miroir. Conséquence : le troisième miroir est confondu avec le plan de projection .

8.2.4 Association d'un miroir et d'un élément binaire normal au plan du miroir

L'association d'un miroir et d'un élément binaire normal au plan du miroir entraîne un centre à leur intersection

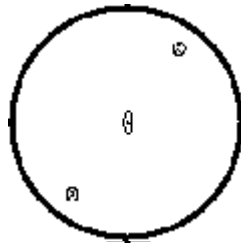


Figure 8.4 - $2/m$ entraîne C

On montre de la même façon que les associations $4/m$ et $6/m$ entraînent un centre à leur intersection

Remarque: on peut retrouver l'ensemble de ces résultats par la méthode matricielle.

8.3 Association d'une opération d'ordre $n > 2$ avec des opérations binaires

L'association d'une rotation directe d'ordre n et d'une rotation binaire autour d'un axe perpendiculaire entraîne n rotations binaires autour d'axe perpendiculaire à l'axe d'ordre n et faisant entre eux des angles égaux à π/n . Et réciproquement.

Remarquons d'abord que les éléments binaires sont soit parallèles soit perpendiculaires à l'axe d'ordre n . En effet, s'ils ne l'étaient pas, chacune de ces rotations donnerait naissance à un autre axe n de direction différente, ce qui est contraire à l'hypothèse de départ.

On effectue, Fig. 8.5, la projection stéréographique des positions équivalentes obtenues par l'association d'un axe ternaire, par exemple, normal au plan de projection et d'un binaire se trouvant dans ce plan.

- soit p_1 la projection d'un pôle, l'axe ternaire en associe 2 autres, p_2 et p_3
- soit p'_1 l'image de p_1 par l'opération binaire, l'axe ternaire en associe 2 autres et p'_2 et p'_3

On peut voir, Fig. 8.5, que p_1 et p'_2 se déduisent l'un de l'autre par une opération binaire ayant son axe à 60° du premier. Idem pour ($p_2 ; p'_2$.)

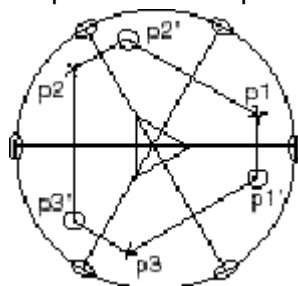


Figure 8.5

Un A_3 et A_2 perpendiculaire entraîne 3 A_2 à $180^\circ/3$.

On peut aussi utiliser la méthode matricielle pour vérifier la règle d'association.

Considérons une maille quadratique et une opération d'ordre 4 autour de l'axe z . On lui associe une opération binaire autour de x , le résultat est l'opération représentée par le produit matriciel : $(A) = (2_x)(4_z)$

L'opération d'ordre 4_z est effectuée en premier (multiplication à gauche) :

$$(A) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$\det(A) = 1$, Trace $(A) = -1$: c'est une opération binaire directe.

On trouve la position de l'élément de symétrie associé en déterminant la direction propre correspondant à la valeur propre +1.

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} = +1 \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix}$$

On trouve : $v_z = 0$ $v_x = -v_y$. L'élément de symétrie associé à l'opération binaire est bien orthogonal à l'axe 4_z , il est dirigé suivant la direction $[1 \ -1 \ 0]$, à $\pi/4$ de l'axe 2_x . L'association de ce nouvel axe binaire avec l'axe 4_z entraîne un nouvel axe binaire à $\pi/4$. Etc...

On vérifiera de la même façon que :

L'association d'une rotation directe d'ordre n et d'un miroir de normale perpendiculaire à l'axe direct entraîne n miroirs de normale perpendiculaire à l'axe d'ordre n et faisant entre eux des angles égaux à π/n . Et réciproquement.

D'une manière plus générale, considérons deux axes binaires A_2 et A'_2 faisant entre eux un angle égal à π/n :

- s'ils se **coupent**, l'axe A_n qui leur perpendiculaire est un axe ordinaire,
- s'ils **ne se coupent pas**, l'axe A_n qui leur est perpendiculaire est un axe hélicoïdal

$$A_{nm} \text{ tel que } \vec{t} = \frac{m}{2n} \vec{c}$$

\vec{t} est le vecteur qui séparent les axes binaires le long de leur normale commune, \vec{c} est la période de translation suivant cette normale. En effet les axes A_2 et A'_2 se répétant avec une période $2\vec{t}$ le long de leur normale commune, le pas de l'axe hélicoïdal est égal à $2\vec{t}$. Si \vec{c} est la translation élémentaire le long de l'axe de rotation on a (cf. Chap. 11.4.1) :

$$2\vec{t} = \frac{m}{n} \vec{c} \quad \text{avec} \quad n = 1, 2, \dots, n-1$$

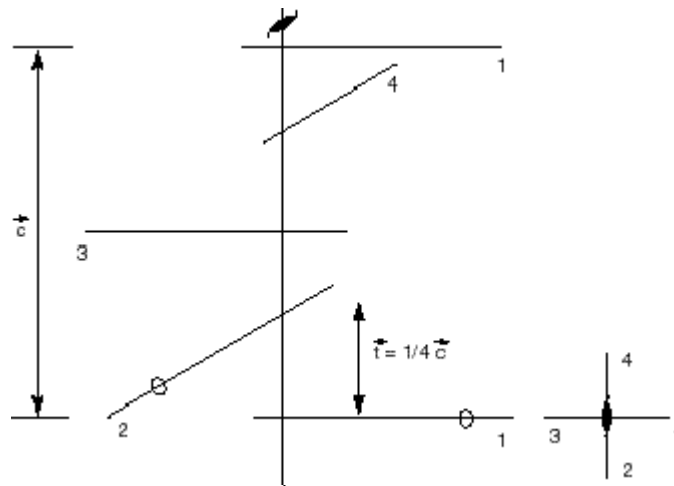


Figure 8.6 - Axes binaires parallèles à 1-3 et 2-4 ne se coupent pas.

Réciproquement, s'il existe un axe hélicoïdal A_{nm} et un binaire A_2 perpendiculaires, il existe une seconde familles d'axes binaires A'_2 faisant un angle égal à π / n avec la première et séparée de celle-ci d'un vecteur $\frac{m}{n} \vec{c}$, c étant la période le long de l'axe hélicoïdal.

8.4 Existence des opérations de symétrie d'ordre $n > 1$

On admettra que les axes d'ordre $n > 1$ satisfont, dans un système triplement périodique, aux théorèmes d'existence suivants

8.4.1 Existence des opérations d'ordre 6

Il ne peut exister que 0 ou 1 axe d'ordre 6

8.4.2 Existence des opérations d'ordre 4

Il ne peut exister que 0 ou 1 ou 3 axes d'ordre 4. S'il y a 2 axes A_4 à $\pi / 2$, il y a nécessairement un troisième orthogonal aux deux précédents et leur existence entraîne celle de 4 axes A_3 dans les directions des diagonales d'un cube (faisant un angle $\alpha = 109,47 \text{ deg.}$; $\cos \alpha = -1/3$).

On va vérifier cette règle d'existence par la méthode matricielle. On suppose le premier axe A_4 suivant $[1 \ 0 \ 0]$ et le second suivant $[0 \ 0 \ 1]$, Fig. 8.7.

L'association de ces 2 opérations donne un nouvel opérateur représenté par le produit matriciel :

$$(A) = (4_z)(4_x) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$\det(A) = 1$; $\text{trace}(A) = 0$ C'est un axe ternaire direct

Les composantes v_x v_y v_z de l'élément de symétrie associé à la valeur propre +1 sont données par :

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} = 0 \text{ soit } v_x = v_y = v_z = 1$$

L'axe ternaire agit autour de la direction $[1\ 1\ 1]$

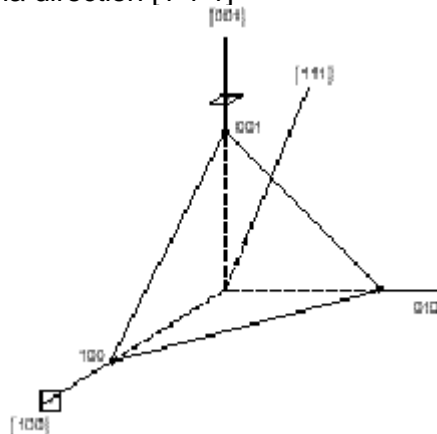


Figure 8.7 - Association de 2 axes 4_x et 4_z orthogonaux

L'axe quaternaire 4_z répète 4 fois cet axe ternaire et 4 fois l'axe 4_x qui lui est perpendiculaire

En conclusion, s'il y a 3 axes quaternaires orthogonaux, il y a 4 axes ternaires suivant les diagonales d'un cube dont les arêtes sont confondues avec les 3 axes quaternaires. Mais, la réciproque n'est pas vraie, comme on va le voir.

8.4 3 Existence des opérations d'ordre 3

Il ne peut exister que 0 ou 1 ou 4 axes d'ordre 3. S'il y a 4 A_3 , ils sont situés suivant les directions des diagonales d'un cube (faisant un angle $\alpha = 109,47$ deg. $\cos \alpha = -1/3$) et leur présence entraîne l'existence de 3 A_2 suivant 3 directions orthogonales.

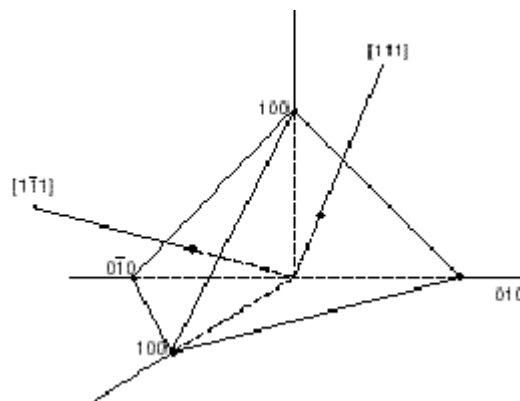


Figure 8.8 - Association de 2 axes ternaires à 109,47 deg.

On va encore utiliser la méthode matricielle pour vérifier ce théorème d'existence. On associe deux A_3 disposés suivant les directions $[1 \ -1 \ 1]$ et $[1 \ 1 \ 1]$ dans un système orthonormé (Fig. 8.8). Le résultat est une opération A représentée par :

$$(A) = (3_{111})(3_{1\bar{1}\bar{1}}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(A) est une opération binaire direct autour de $[100]$.

L'axe ternaire suivant $[1 \ 1 \ 1]$ répète cet axe binaire 2 autres fois suivant $[0 \ 1 \ 0]$ et $[0 \ 0 \ 1]$. L'axe binaire suivant $[0 \ 0 \ 1]$ répète les axes ternaires deux autres fois, suivant les diagonales $-1 \ 1 \ 1$ et $-1 \ -1 \ 1$. C'est la symétrie minimale de la classe cubique : 3 axes binaires orthogonaux et 4 axes ternaires suivant les diagonales d'un cube dont les arêtes sont confondues avec les axes binaires.

8.5 Association des opérations de symétrie avec les translations de réseau

Une opération de symétrie de rotation quelconque est représentée par $\{t|A\}$; elle est

réductible à $\{\vec{t}_{//}|A\}$ L'association avec une translation de vecteur \vec{t} quelconque

$$\text{s'écrit : } \{\vec{t}_{//} + \vec{t}_{\perp}|E\}\{\vec{t}'_{//}|A\} = \{\vec{t}_{\perp} + (\vec{t}_{//} + \vec{t}'_{//})|A\}$$

$\vec{t}_{//}$ et \vec{t}_{\perp} pouvant être pris dans n'importe quel ordre :

- les composantes de translation **parallèles** s'ajoutent. Elles transforment éventuellement un axe ordinaire en axe hélicoïdal (ou vice versa) ou changent le pas de l'axe hélicoïdal (idem pour les miroirs à glissement),
- la composante de translation **perpendiculaire** entraîne un déplacement \vec{u} de l'élément de symétrie tel que $\vec{t}_{\perp} = [E - A]\vec{u}$

L'existence de translations à composantes non entières parallèles aux éléments de symétrie (réseau rhomboédrique et réseaux multiples de Bravais) entraîne la coexistence d'éléments de symétrie ordinaires et à glissement.

8.5.1 Exemples d'association avec les translations entières

L'existence des translations de réseau entraîne une multiplication de chaque élément de symétrie à l'intérieur de la maille, et en outre la répétition à l'identique de tous les éléments contenus dans chaque maille.

- Association d'une opération binaire "2_z" avec la translation $\vec{100}$:

$$\{100|E\}\{000|2_z\} = \{100|2_z\}$$

C'est un axe binaire ordinaire décalé de \vec{u} tel que $\vec{t}_{\perp} = [E - 2_z]\vec{u}$

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} u_x \\ u_y \\ u_z \end{pmatrix}$$

$u_x = 1/2$ $u_y = 0$ u_z est indéterminé.

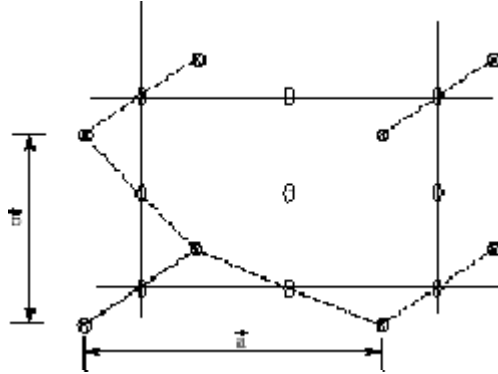


Figure 8.9 - Association d'un axe 2z avec les translations. \vec{a} et \vec{b}

L'axe binaire est reproduit en $1/2 \ 0 \ 0$ et en $0 \ 1/2 \ 0$ et $1/2 \ 1/2 \ 0$. L'existence des translations de réseau entraîne une multiplication de chaque élément de symétrie à l'intérieur de la maille, et en outre la répétition à l'identique de tous les éléments contenus dans chaque maille.

- Association d'un miroir de "normale z" avec la translation de vecteur $\vec{001}$:

$$\{001 | E\} \{000 | m_z\} = \{001 | m_z\}$$

C'est un miroir sans glissement décalé de \vec{u} tel que $\vec{t}_\perp = [E - m_z] \vec{u}$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} u_x \\ u_y \\ u_z \end{pmatrix}$$

u_x, u_y sont indéterminés, $u_z = 1/2$. Le miroir est reproduit en $0 \ 0 \ 1/2$.

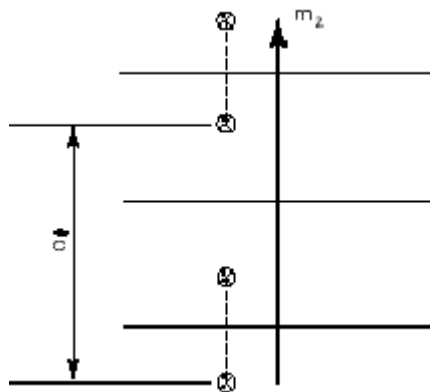


Figure 8.10 - Association d'un miroir m_z avec la translation de vecteur \vec{c}

On vérifie, Fig. 8.10, que cette association introduit un miroir en cote $c/2$

8.5.2 Exemple d'association avec les translations fractionnaires

On a vu que les mailles multiples comportent des translations fractionnaires. Elles sont demi-entières pour les réseaux corps centré et faces centrées.

Considérons l'association d'une opération binaire 2_z avec la translation $1/2 \ 1/2 \ 1/2$

(cas d'un orthorhombique centré) :

$$\{1/2 \ 1/2 \ 1/2 | E\} \{000 | 2_z\} = \{1/2 \ 1/2 \ 1/2 | 2_z\}$$

On reconnaît un axe binaire hélicoïdal ($\vec{t}_// = 1/2$) agissant autour d'un axe parallèle à z et décalé de \vec{u} tel que $\vec{t}_\perp = [E - 2_z] \vec{u}$ par rapport à l'origine, soit:

$$\begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix} = \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} u_x \\ u_y \\ u_z \end{pmatrix}$$

$u_x = 1/4$; $u_y = 1/4$; u_z est indéterminé. L'axe binaire est transformé en un axe hélicoïdal situé en $1/4 \ 1/4 \ 0$.

8.6 Transformation des opérations de symétrie

L'opération B' est l'opération B transformée par l'opération A , elle est égale à :

$$B' = A B A^{-1}$$

B' est une opération identique à B : elle joue le même rôle que B dans l'espace transformé par l'opération A .

Rappels :

- les représentations matricielles des opérations de symétrie A et B sont notées (A) et (B) et les vecteurs positions \vec{r} .
- le produit de 2 opérations de symétrie A et B représentée par les matrices (A) et (B) est une opération de symétrie $C = B A$ représentée par la matrice : $(C) = (B)(A)$. (B) est écrite à gauche de (A) , qui est associée à l'opération effectuée en premier.

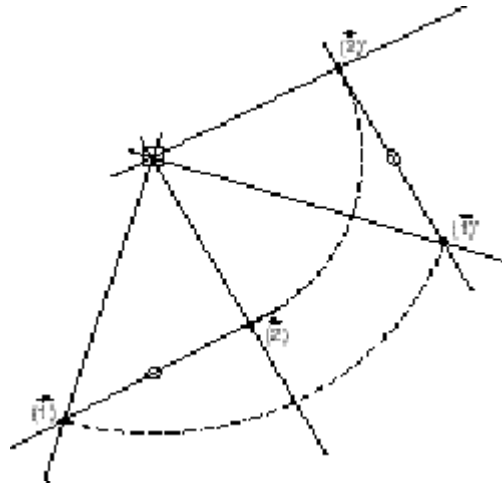


Figure 8.11 - Représentation géométrique de $B' = A B A^{-1}$

On voit que : $(\bar{2}) = (B) (\bar{1})$ $(\bar{1}') = (A) (\bar{1})$ $(\bar{2}') = (A) (\bar{2})$

L'opération B' transformée de B par l'opération A joue le même rôle que B dans l'espace transformé :

$$(\bar{2}') = (B')(\bar{1}')$$

en partant de $(\bar{2}') = (A) (\bar{2})$, on obtient donc : $(A) (B) (\bar{1}) = (B') (A) (\bar{1})$
soit finalement l'expression (1)

$$(B') = (A)(B)(A^{-1})$$

8 6 1 Cas où A et B sont des opérations commutatives

Si A et B sont commutatives, $(A) (B) = (B) (A)$

- d'après (1) $(B') = (B)$: l'opération A transforme B en elle-même.
- alors $(A) = (B) (A) (B)^{-1}$ l'opération B transforme A en elle-même.

Si les opérations de symétrie A et B commutent, elles se laissent mutuellement invariantes. Et réciproquement

Exemple d'opérations qui commutent :

- L'inversion
- Deux opérations de rotation autour d'un même axe

8 6 2 Transformation par une translation

En utilisant la notation de Seitz-Bauer :

$$\{\vec{t}'|B'\} = \{\vec{t}_a|A\}\{\vec{t}_b|A\}\{-A^{-1}\vec{t}_a|A^{-1}\}$$

L'opération de symétrie B' transformée de B notée $\{\vec{t}'|B'\}$ par une translation de vecteur \vec{T} notée $\{\vec{T}|E\}$ est représentée par :

$$\{\vec{T}|E\}\{\vec{t}'|B'\}\{-\vec{T}|E\} = \{(E-B)\vec{T} + \vec{t}'\}$$

Exemple :

Considérons la transformation d'un axe binaire 2_x par un axe ternaire A_3 suivant [1 1 1] les matrices associées dans une base de réseau cubique s'écrivent :

$$(2_x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3_{111}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3_{111})^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$(?) = (3_{111})(2_x)(3_{111})^{-1}$ En effectuant les produits matriciels, on obtient :

$$(?) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

C'est un axe binaire 2_y

On pourrait transformer cet axe binaire 2_y par le même 3_{111} et obtenir un nouvel axe binaire 2_z (cf. 3 -3). Des exemples de transformation d'opérations de symétrie sont traités Réf. (1).

8.6 3 Exercice d'application

Le groupe d'espace $P4_2/n$ (N° 86) est présenté, Fig. 8.12, On peut placer l'origine de la maille :

- **1** sur l'axe $\bar{4}$; :
- **2** sur le centre à 1/4 1/4 1/4 de l'axe $\bar{4}$.

Ecrire la matrice 4*4 de l'axe hélicoïdal 4_{2z} avec l'origine du choix 2.

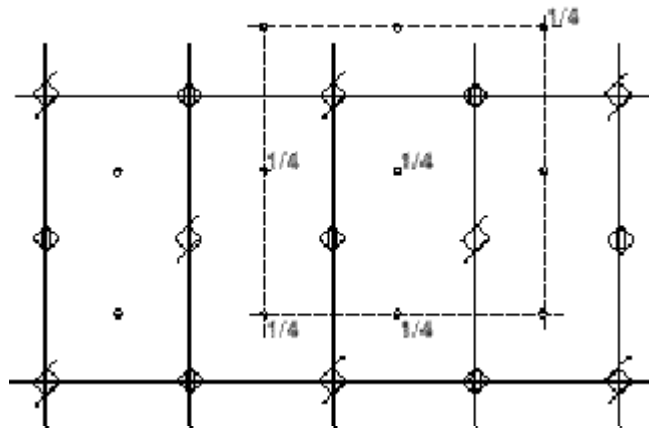


Figure 8.12 - Eléments de Symétrie du groupe P 4₂/n

L'opérateur 4_{2z} décalé de $\vec{u} = (1/2 \ 0 \ 0)$ s'écrit après avoir déterminé les composantes t_x et t_y de \vec{t}

$$\left\{ \begin{matrix} 1/2 & -1/2 & 1/2 & | & 4_z \end{matrix} \right\} \text{ ou } \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 1/2 \\ 1 & 0 & 0 & -1/2 \\ 0 & 0 & 1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

La transformation consiste en une translation $\vec{T} = (1/4 \ 1/4 \ 1/4)$ représentée par :

$$\left\{ \vec{T} | E \right\}: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1/4 \\ 0 & 1 & 0 & 1/4 \\ 0 & 0 & 1 & 1/4 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ et son inverse } \left\{ -\vec{T} | E \right\}: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1/4 \\ 0 & 1 & 0 & -1/4 \\ 0 & 0 & 1 & -1/4 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

On peut effectuer le produit des opérateurs de Seitz-Bauer: ou des matrices

$$\left\{ \vec{t} | B' \right\} = \left\{ (E - 4_z) \vec{T} + \vec{t} | 4_z \right\}$$

$$\left\{ \vec{t} | B' \right\} = \left\{ (1/2 \ 0 \ 0) + (1/2 \ -1/2 \ 1/2) | 4_z \right\}$$

$$\left\{ \vec{t} | B' \right\} = \left\{ 1 \ -1/2 \ 1/2 | 4_z \right\}$$

C'est un axe hélicoïdal 4_{2z} ($\vec{t}_{//} = 1/2$) décalé de \vec{u} par rapport à la nouvelle origine:

L'équation $\vec{t}_{\perp} = (1, -1/2) = [(E) - (4_z)] \vec{u}$ donne les composantes du déplacement, soit : $\vec{u} = (3/4 \ 1/4)$.

En effectuant les produits matriciels on arrive à :

$$(B') = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & -1/2 \\ 0 & 0 & 1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

8.7 Référence

1 - Transformation in Crystallography - H. ARNOLD - Internationale Tables for Crystallography - Volume A.55