

DEVOIR SURVEILLE de CHIMIE1^{ère} année de 1^{er} cycle

Durée : 1h30

Date du D.S. : **lundi 14 mars 2022**

Aucun document supplémentaire n'est autorisé. Les étudiants étrangers peuvent consulter un dictionnaire de traduction (électronique ou papier). Seule la calculatrice distribuée est autorisée.

Exercice 1 :

Expliquez succinctement ce que l'on appelle des phases polymorphes.

1 pt

Rappelez la loi de Bragg, qui lie l'angle de Bragg à la distance d_{hkl} .

1 pt

Exercice 2 : oxyhydroxyde de fer(III)**A) Phase α : la goethite**

C'est une phase naturelle brun/orange connue depuis la préhistoire (utilisée comme pigment dans la grotte de Lascaux, par exemple). Elle cristallise dans le groupe Pnma (n° 62). Ses paramètres de maille sont $a = 9.9134 \text{ \AA}$, $b = 3.0128 \text{ \AA}$, $c = 4.5800 \text{ \AA}$.

Les atomes indépendants sont : Fe (0.1459 ; $\frac{1}{4}$; 0.9514)O1 (0.8010 ; $\frac{1}{4}$; 0.2850)O2 (0.9483 ; $\frac{1}{4}$; 0.8040)

1 – Donnez le mode de réseau du composé.

1 pt

2 – Donnez le motif et le nombre de motifs par maille du composé.

1 pt

3 – Cette phase est un oxyhydroxyde de fer(III), expliquez pourquoi les coordonnées xyz de l'hydrogène ne sont pas fournies.

1 pt

4 – Calculez (donnez le détail) la masse volumique cristallographique (en g/cm^3) et la compacité de cette phase cristalline.

2 pts

B) Phase γ : la lépidocrocite

Cette phase, polymorphe de la précédente, aussi appelée pyrrhosidérite, est moins stable que la goethite. Elle cristallise dans le groupe d'espace Cmcm (n° 63). Les paramètres de réseau deviennent $a = 3.06 \text{ \AA}$; $b = 12.51 \text{ \AA}$; $c = 3.87 \text{ \AA}$.

Les atomes indépendants sont : Fe (0 ; 0.325 ; $\frac{1}{4}$) O1 (0 ; 0.706 ; $\frac{1}{4}$) O2 (0 ; 0.925 ; $\frac{1}{4}$)

1 – Donnez le motif et le nombre de motifs par maille du composé.

1 pt

2 – Calculez (donnez le détail) la masse volumique cristallographique (en g/cm^3) et la compacité de cette phase cristalline.

2 pts

C) Analyse par diffraction des rayons X

On étudie un échantillon inconnu d'oxyhydroxyde de fer(III). Un premier pic de diffraction est observé à $2\theta = 17.9^\circ$ (longueur d'onde $\lambda(\text{Cu}) = 1.5406 \text{ \AA}$). L'étude des conditions de diffraction indique qu'il s'agit de la famille de plans pour lesquels h k l valent 2 0 0.

1 – D'après l'angle, calculez la distance inter-réticulaire correspondante.

1 pt

2 – De quelle phase s'agit-il ? Démontrez-le.

2 pts

Si vous ne connaissez pas la loi de Bragg (...), un indice : l'autre phase avec les mêmes h k l aurait donné un angle plus grand.

Exercice 3 : oxydes de fer

Soient 2 oxydes de fer, la wustite et la magnétite. Les deux phases sont cubiques,
 $a = 4.311 \text{ \AA}$ ($n^\circ 225$, Fm-3m) pour la première avec Fe en (0 0 0) et O en ($\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$)
 (qui n'ont des équivalents que par le mode de réseau)

et $a = 8.395 \text{ \AA}$ ($n^\circ 227$) pour la seconde avec Fe1 ($\frac{1}{8} \frac{1}{8} \frac{1}{8}$)
 Fe2 ($\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$)
 O ($0.2546 \ 0.2546 \ 0.2546$).

- 1 – A quelle structure type correspond la wustite ? 1 pt
- 2 – Donnez le motif et le nombre de motifs par maille des 2 composés. 2 pts
- 3 – Expliquez comment la magnétite peut être électriquement neutre. 1 pt
- 4 – Quelle taille maximale aurait un ion inséré dans les sites tétraédriques de la wustite ?
 Démontrez-le. 3 pts

Données

$N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$; $e = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$

Rayons ioniques : $r(\text{Fe}^{\text{II}}) = 0.076 \text{ nm}$; $r(\text{Fe}^{\text{III}}) = 0.064 \text{ nm}$; $r(\text{O}^{\text{II}}) = 0.140 \text{ nm}$

Pour le système triclinique : $V = \sqrt{a^2 b^2 c^2 (1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma)}$

Pour le système monoclinique : $d = \sin \beta / \sqrt{\left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} + \frac{k^2}{b^2} \sin^2 \beta - 2hl \frac{\cos \beta}{ac}\right)}$

TABLEAU PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENTS

1	1																	13	14	15	16	
1	H hydrogène																	B bore	C carbone	N azote	O oxygène	
2	3	4																	5	6	7	8
2	Li lithium	Be béryllium																	Al aluminium	Si silicium	P phosphore	S soufre
3	11	12																	13	14	15	16
3	Na sodium	Mg magnésium																	Al aluminium	Si silicium	P phosphore	S soufre
4	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34						
4	K potassium	Ca calcium	Sc scandium	Ti titane	V vanadium	Cr chrome	Mn manganèse	Fe fer	Co cobalt	Ni nickel	Cu cuivre	Zn zinc	Ga gallium	Ge germanium	As arsenic	Se sélénium						
5	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52						
5	Rb rubidium	Sr strontium	Y yttrium	Zr zirconium	Nb niobium	Mo molybdène	Tc technétium	Ru ruthénium	Rh rhodium	Pd palladium	Ag argent	Cd cadmium	In indium	Sn étain	Sb antimoine	Te tellure						
6	55	56	lanthanides 57-71		72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84					
6	Cs césium	Ba barium	lanthanides 57-71		Hf hafnium	Ta tantale	W tungstène	Re rhénium	Os osmium	Ir iridium	Pt platine	Au or	Hg mercure	Tl thallium	Pb plomb	Bi bismuth	Po polonium					
7	87	88	actinides 89-103		104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116					
7	Fr francium	Ra radium	actinides 89-103		Rf rutherfordium	Db dubnium	Sg seaborgium	Bh bohrium	Hs hassium	Mt meitnérium	Ds darmstadtium	Rg roentgenium	Cn copernicium	Nh nihonium	Fl flérovium	Mc moscovium	Lv livermorium					
		57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69								
		La lanthane	Ce cérium	Pr praséodyme	Nd néodyme	Pm prométhium	Sm samarium	Eu europium	Gd gadolinium	Tb terbium	Dy dysprosium	Ho holmium	Er erbio	Tm thulium								
		89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101								
		Ac actinium	Th thorium	Pa protactinium	U uranium	Np neptunium	Pu plutonium	Am américium	Cm curium	Bk berkélium	Cf californium	Es einsteinium	Fm fermium	Md mendélévium								

- métaux alcalins
- alcalino-terreux
- métaux pauvres
- métaux de transition
- métalloïdes
- non-métaux
- halogènes
- gaz rares

Sources : IUPAC, Wikimedia Commons

Pnma

D_{2h}^{16}

mmm

Orthorhombic

No. 62

$P 2_1/n 2_1/m 2_1/a$

Patterson symmetry *Pmmm*

Origin at $\bar{1}$ on 12, 1

Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; (2); (3); (5)

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

Reflection conditions

General:

8	<i>d</i>	1	(1) x, y, z	(2) $\bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{y}, z + \frac{1}{2}$	(3) $\bar{x}, y + \frac{1}{2}, \bar{z}$	(4) $x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$
			(5) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$	(6) $x + \frac{1}{2}, y, \bar{z} + \frac{1}{2}$	(7) $x, \bar{y} + \frac{1}{2}, z$	(8) $\bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$

$Ok\bar{l} : k + l = 2n$
 $hk0 : h = 2n$
 $h00 : h = 2n$
 $0k0 : k = 2n$
 $00l : l = 2n$

Special: as above, plus

4	<i>c</i>	.m.	$x, \frac{1}{4}, z$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, \frac{3}{4}, z + \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \frac{3}{4}, \bar{z}$	$x + \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, z + \frac{1}{2}$
---	----------	-----	---------------------	---	---------------------------------	---

no extra conditions

4	<i>b</i>	$\bar{1}$	$0, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, 0$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$
---	----------	-----------	---------------------	---------------------	-------------------------------	-------------------------------

$hkl : h + l, k = 2n$

4	<i>a</i>	$\bar{1}$	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$0, \frac{1}{2}, 0$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
---	----------	-----------	-----------	-------------------------------	---------------------	---

$hkl : h + l, k = 2n$

Symmetry of special projections

Along [001] *p2gm*
 $a' = \frac{1}{2}a$ $b' = b$
 Origin at 0, 0, z

Along [100] *c2mm*
 $a' = b$ $b' = c$
 Origin at $x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

Along [010] *p2gg*
 $a' = c$ $b' = a$
 Origin at 0, y, 0

Maximal non-isomorphic subgroups

I

[2] <i>Pn2₁a</i> (<i>Pna2₁</i> , 33)	1; 3; 6; 8
[2] <i>Pnm2</i> , (<i>Pmn2₁</i> , 31)	1; 2; 7; 8
[2] <i>P2₁ma</i> (<i>Pmc2₁</i> , 26)	1; 4; 6; 7
[2] <i>P2₁2₁2₁</i> (19)	1; 2; 3; 4
[2] <i>P112₁/a</i> (<i>P2₁/c</i> , 14)	1; 2; 5; 6
[2] <i>P2₁/n11</i> (<i>P2₁/c</i> , 14)	1; 4; 5; 8
[2] <i>P12₁/m1</i> (<i>P2₁/m</i> , 11)	1; 3; 5; 7

IIa none
IIb none

Cmcm

D_{2h}^{17}

mmm

Orthorhombic

No. 63

$C 2/m 2/c 2_1/m$

Patterson symmetry *Cmmm*

Origin at centre (2/m) at 2/mc2₁

Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; $t(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$; (2); (3); (5)

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

Reflection conditions

General:

16	<i>h</i>	1	(1) x, y, z	(2) $\bar{x}, \bar{y}, z + \frac{1}{2}$	(3) $\bar{x}, y, \bar{z} + \frac{1}{2}$	(4) x, \bar{y}, \bar{z}
			(5) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$	(6) $x, y, z + \frac{1}{2}$	(7) $x, \bar{y}, z + \frac{1}{2}$	(8) \bar{x}, y, z

$hkl : h + k = 2n$
 $Ok\bar{l} : k = 2n$
 $h0l : h, l = 2n$
 $hk0 : h + k = 2n$
 $h00 : h = 2n$
 $0k0 : k = 2n$
 $00l : l = 2n$

Special: as above, plus

8	<i>g</i>	..m	$x, y, \frac{1}{4}$	$\bar{x}, \bar{y}, \frac{3}{4}$	$\bar{x}, y, \frac{1}{4}$	$x, \bar{y}, \frac{3}{4}$
---	----------	-----	---------------------	---------------------------------	---------------------------	---------------------------

no extra conditions

8	<i>f</i>	<i>m</i> ..	$0, y, z$	$0, \bar{y}, z + \frac{1}{2}$	$0, y, \bar{z} + \frac{1}{2}$	$0, \bar{y}, z$
---	----------	-------------	-----------	-------------------------------	-------------------------------	-----------------

no extra conditions

8	<i>e</i>	2..	$x, 0, 0$	$\bar{x}, 0, \frac{1}{2}$	$\bar{x}, 0, 0$	$x, 0, \frac{1}{2}$
---	----------	-----	-----------	---------------------------	-----------------	---------------------

$hkl : l = 2n$

8	<i>d</i>	$\bar{1}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$	$\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, 0$
---	----------	-----------	-------------------------------	---	---	-------------------------------

$hkl : k, l = 2n$

4	<i>c</i>	<i>m2m</i>	$0, y, \frac{1}{4}$	$0, \bar{y}, \frac{3}{4}$
---	----------	------------	---------------------	---------------------------

no extra conditions

4	<i>b</i>	<i>2/m</i> ..	$0, \frac{1}{2}, 0$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
---	----------	---------------	---------------------	-------------------------------

$hkl : l = 2n$

4	<i>a</i>	<i>2/m</i> ..	$0, 0, 0$	$0, 0, \frac{1}{2}$
---	----------	---------------	-----------	---------------------

$hkl : l = 2n$

Symmetry of special projections

Along [001] *c2mm*
 $a' = a$ $b' = b$
 Origin at 0, 0, z

Along [100] *p2gm*
 $a' = \frac{1}{2}b$ $b' = c$
 Origin at $x, 0, 0$

Along [010] *p2mm*
 $a' = \frac{1}{2}c$ $b' = \frac{1}{2}a$
 Origin at 0, y, 0

$Fd\bar{3}m$ O_h^7 $m\bar{3}m$

Cubic

No. 227

 $F4_1/d\bar{3}2/m$ Patterson symmetry $Fm\bar{3}m$ Origin at centre ($\bar{3}m$), at $\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}$ from $\bar{4}3m$ Positions
Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

Reflection conditions

(0,0,0)+ (0, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$) + ($\frac{1}{2}$, 0, $\frac{1}{2}$) + ($\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, 0) + h, k, l permutable

General:

192	<i>i</i>	1	(1) x, y, z	(2) $\bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$	(3) $\bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	(4) $x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	$hkl : h + k = 2n$ and $h + l, k + l = 2n$
			(5) z, x, y	(6) $z + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}$	(7) $\bar{z} + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}$	(8) $\bar{z} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}$	$OkI : k + l = 4n$ and $k, l = 2n$
			(9) y, z, x	(10) $\bar{y} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}$	(11) $y + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}$	(12) $\bar{y} + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}$	$hhl : h + l = 2n$
			(13) $y + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	(14) $\bar{y}, \bar{x}, \bar{z}$	(15) $y + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$	(16) $\bar{y} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$	$h00 : h = 4n$
			(17) $x + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}$	(18) $\bar{x} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}$	(19) $\bar{x}, \bar{z}, \bar{y}$	(20) $x + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}$	
			(21) $z + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}$	(22) $z + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}$	(23) $\bar{z} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}$	(24) $\bar{z}, \bar{y}, \bar{x}$	
			(25) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$	(26) $x + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	(27) $x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$	(28) $\bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$	
			(29) z, \bar{x}, \bar{y}	(30) $\bar{z} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}$	(31) $z + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}$	(32) $z + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}$	
			(33) $\bar{y}, \bar{z}, \bar{x}$	(34) $y + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}$	(35) $\bar{y} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}$	(36) $y + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}$	
			(37) $\bar{y} + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$	(38) y, x, z	(39) $\bar{y} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	(40) $y + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	
			(41) $\bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}$	(42) $x + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}$	(43) x, z, y	(44) $\bar{x} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}$	
			(45) $\bar{z} + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}$	(46) $\bar{z} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}$	(47) $z + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}$	(48) z, y, x	

Special: as above, plus

no extra conditions

96	<i>h</i>	. . 2	0, y, \bar{y}	$\frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}$
			$\bar{y}, 0, y$	$\bar{y} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}$	$y + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}$	$y + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}$
			$y, \bar{y}, 0$	$\bar{y} + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$y + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\bar{y} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
			0, \bar{y}, y	$\frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}$
			$y, 0, \bar{y}$	$y + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}$	$\bar{y} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}$	$\bar{y} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}$
			$\bar{y}, y, 0$	$y + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\bar{y} + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$y + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

96	<i>g</i>	. . <i>m</i>	x, x, x	$\bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	$x + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	no extra conditions
			z, x, x	$z + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}$	$z + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}$	$z + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}$	
			x, z, x	$\bar{x} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}$	$x + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}$	
			$x + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \bar{x}, \bar{z}$	$x + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$	
			$x + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \bar{z}, \bar{x}$	$x + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}$	
			$z + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}$	$z + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}$	$z + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}$	$\bar{z}, \bar{x}, \bar{x}$	

48	<i>f</i>	2 . <i>mm</i>	$x, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}$	$\bar{x} + \frac{3}{4}, \frac{1}{8}, \frac{5}{8}$	$\frac{1}{8}, x, \frac{1}{8}$	$\frac{5}{8}, \bar{x} + \frac{3}{4}, \frac{1}{8}$	$\frac{1}{8}, \frac{5}{8}, x$	$\frac{1}{8}, \frac{5}{8}, \bar{x} + \frac{3}{4}$	$hkl : h = 2n + 1$
			$\frac{7}{8}, x + \frac{1}{4}, \frac{3}{8}$	$\frac{7}{8}, \bar{x}, \frac{7}{8}$	$x + \frac{3}{4}, \frac{3}{8}, \frac{3}{8}$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, \frac{7}{8}, \frac{3}{8}$	$\frac{7}{8}, \frac{3}{8}, \bar{x} + \frac{1}{2}$	$\frac{3}{8}, \frac{3}{8}, x + \frac{3}{4}$	or $h + k + l = 4n$

32	<i>e</i>	. 3 <i>m</i>	x, x, x	$\bar{x} + \frac{3}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}, x + \frac{1}{2}$	$x + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{3}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}$	$\bar{x}, \bar{x}, \bar{x}$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{3}{4}, x + \frac{1}{4}$	no extra conditions
			$\bar{x} + \frac{1}{4}, x + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{3}{4}$	$x + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{3}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}$				
			$x + \frac{3}{4}, x + \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \bar{x}, \bar{x}$				
			$x + \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{3}{4}$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{3}{4}, x + \frac{1}{4}$				

16	<i>d</i>	. $\bar{3}m$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, 0$	$\frac{3}{4}, 0, \frac{1}{4}$	$0, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$	$hkl : h = 2n + 1$
16	<i>c</i>	. $\bar{3}m$	0, 0, 0	$\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}$	$\frac{1}{2}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}$	or $h, k, l = 4n + 2$
							or $h, k, l = 4n$

8	<i>b</i>	$\bar{4}3m$	$\frac{3}{8}, \frac{3}{8}, \frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}, \frac{5}{8}, \frac{1}{8}$	$hkl : h = 2n + 1$
8	<i>a</i>	$\bar{4}3m$	$\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}$	$\frac{7}{8}, \frac{3}{8}, \frac{3}{8}$	or $h + k + l = 4n$

Symmetry of special projections

Along [001] $p4mm$
 $\mathbf{a}' = \frac{1}{4}(\mathbf{a} - \mathbf{b})$ $\mathbf{b}' = \frac{1}{4}(\mathbf{a} + \mathbf{b})$
 Origin at $\frac{1}{8}, \frac{3}{8}, z$

Along [111] $p6mm$
 $\mathbf{a}' = \frac{1}{6}(2\mathbf{a} - \mathbf{b} - \mathbf{c})$ $\mathbf{b}' = \frac{1}{6}(-\mathbf{a} + 2\mathbf{b} - \mathbf{c})$
 Origin at x, x, x

Along [110] $c2mm$
 $\mathbf{a}' = \frac{1}{2}(-\mathbf{a} + \mathbf{b})$ $\mathbf{b}' = \mathbf{c}$
 Origin at $x, x, 0$