

Cristallographie et Symétrie

une opération de symétrie est un déplacement qui ramène une figure en coïncidence avec elle-même.

En cristallographie, il existe trois types fondamentaux de déplacement et 3 façons de combiner eux ces types.
↳ entre

1- types de déplacement

- rotations propres par rapport à un axe ; on dit également axes propres (ce sont les axes $n=1, 2, 3, 4$ et 6) d'angle $\frac{360^\circ}{n}$
- l'inversion par rapport au point $(0,0,0)$ notée $\bar{1}$
- les miroirs "m" perpendiculaires à une direction

2- types de combinaison

- La combinaison d'un axe propre "n" et de l'inversion $\bar{1}$ donne une rotation impropre qui est notée $\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}$ et $\bar{6}$
- La combinaison d'un axe propre "n" et d'une translation le long de cet axe donne un axe hélicoïdal noté " n_c " (exple 6)
- La combinaison d'un miroir et d'une translation : les plans de glissement.

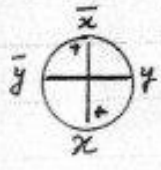
3- Repères stéréographiques Il en existe deux uniquement.



4. Quelques exemples de rotation propre

a. axe de rotation d'ordre 2 ($\alpha = \frac{360^\circ}{2} = 180^\circ$)

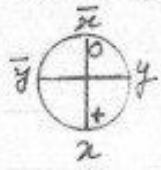
* si cet axe 2 est parallèle à \vec{z} , on aura alors les positions équivalentes suivantes :



$$x, y, z \xrightarrow{2 \parallel \vec{z}} \bar{x}, \bar{y}, z$$

$$\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

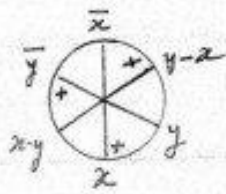
* si cet axe 2 est parallèle à \vec{y} , on aura alors :



$$x, y, z \xrightarrow{2 \parallel \vec{y}} \bar{x}, y, \bar{z}$$

$$\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$$

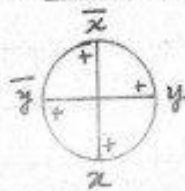
b/ axe de rotation d'ordre 3 ($\alpha = \frac{360^\circ}{3} = 120^\circ$)



$$x, y, z \xrightarrow{3^1} y-x, \bar{x}, z \xrightarrow{3^2} \bar{y}, x, z$$

$$3^1 \text{ ou bien } \begin{pmatrix} \bar{1} & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad 3^2 \text{ ou bien } \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

c/ axe de rotation d'ordre 4 ($\alpha = \frac{360^\circ}{4} = 90^\circ$)



$$x, y, z \xrightarrow{4^1} y, \bar{x}, z \xrightarrow{4^2} \bar{x}, \bar{y}, z \xrightarrow{4^3} \bar{y}, x, z$$

$$4^1 \text{ ou } \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

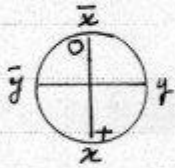
2/ axe de rotation d'ordre 6 // \vec{z} ($\alpha = \frac{360^\circ}{6} = 60^\circ$)



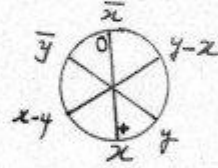
$$x, y, z \rightarrow \begin{cases} y, y-x, z & \Rightarrow C^1 \\ y-x, \bar{x}, z & \Rightarrow C^2 \equiv C^5 \\ \bar{x}, \bar{y}, z & \Rightarrow C^3 \equiv C^4 \\ \bar{y}, x-y, z & \Rightarrow C^4 \equiv C^2 \\ x-y, x, z & \Rightarrow C^5 \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_{C^1} \quad \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_{C^2} \quad \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_{C^3} \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_{C^4} \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_{C^5}$$

5 - Quelques exemples d'inversion $\bar{1}$



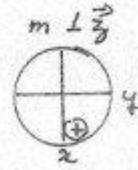
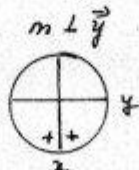
$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



$$x, y, z \xrightarrow{\bar{1}(000)} \bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$$

$$x, y, z \xrightarrow{\bar{1}(000)} \bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$$

6/ quelques exemples de miroirs



$$x, y, z \xrightarrow{m \perp \vec{x}} \bar{x}, y, z$$

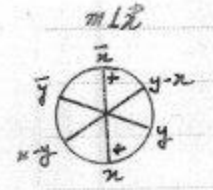
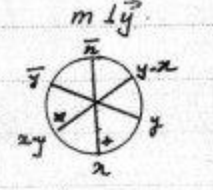
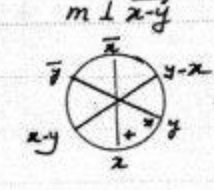
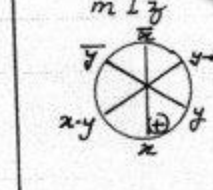
$$x, y, z \xrightarrow{m \perp \vec{y}} x, \bar{y}, z$$

$$x, y, z \xrightarrow{m \perp \vec{z}} x, y, \bar{z}$$

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

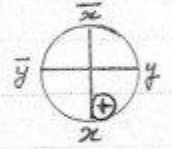
$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$m \perp \vec{x}$ 	$m \perp \vec{y}$ 	$m \perp \vec{x-y}$ 	$m \perp \vec{z}$ 
$xyz \rightarrow \bar{x}; y-x; \bar{z}$	$xyz \rightarrow x; y; \bar{z}$	$xyz \rightarrow y; x; \bar{z}$	$xyz \rightarrow x; y; \bar{z}$
$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

7. Exemples de rotation impropres

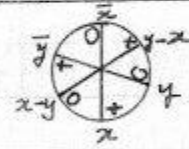
a. axe \bar{z} parallèle à \vec{z}



$xyz \rightarrow x \ y \ \bar{z}$

 $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

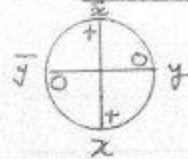
b. axe \bar{z} parallèle à \vec{z}



$xyz \rightarrow$

 $\begin{cases} z-y; x; \bar{z} \\ \bar{y}; x-y; \bar{z} \\ \bar{x}; \bar{y}; \bar{z} \\ y-x; \bar{x}; \bar{z} \\ y; y-x; \bar{z} \end{cases}$
 $\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

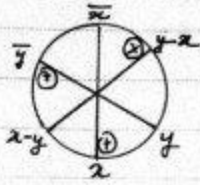
c) axe \bar{y} parallèle à \vec{z}



$xyz \rightarrow$

 $\begin{cases} \bar{y} \ x \ \bar{z} \\ \bar{x} \ \bar{y} \ \bar{z} \\ y \ \bar{x} \ \bar{z} \end{cases}$
 $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

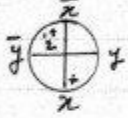
d) axe 6 parallèle à \vec{z}



$$xyz \rightarrow \begin{cases} \bar{y}; x-y; \bar{z} \\ y-x; \bar{x}; \bar{z} \\ x; y; \bar{z} \\ \bar{y}; x-y; \bar{z} \\ y-x; \bar{x}; \bar{z} \end{cases} \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$$

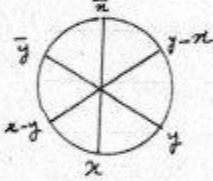
8. Exemple d'axe hélicoïdal 2_1

a) Il s'agit d'une rotation d'ordre 2 suivie d'une translation de longueur $t = 1/2$ selon l'axe \vec{z} (ou \vec{x} ou \vec{y})



$$\begin{aligned} xyz &\xrightarrow{2_1 // \vec{z}} \bar{x}; \bar{y}; \bar{z} + \frac{1}{2} \\ xyz &\xrightarrow{2_1 // \vec{x}} \frac{1}{2} + x; \bar{y}; \bar{z} \\ xyz &\xrightarrow{2_1 // \vec{y}} \bar{x}; \frac{1}{2} + y; \bar{z} \end{aligned}$$

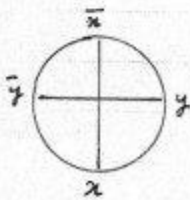
b) axe hélicoïdal 3_2 parallèle à \vec{z}



$$\begin{aligned} xyz &\xrightarrow{3_1 // \vec{z}} y-x; \bar{x}; \frac{1}{3} + \bar{z} \\ &\downarrow 3_1 // \vec{z} \\ &\bar{y}; x-y; \frac{2}{3} + \bar{z} \end{aligned}$$

$$xyz \xrightarrow{3_2 // \vec{z}} y-x; \bar{x}; \frac{2}{3} + \bar{z} \xrightarrow{3_2 // \vec{z}} \bar{y}; x-y; \frac{1}{3} + \bar{z}$$

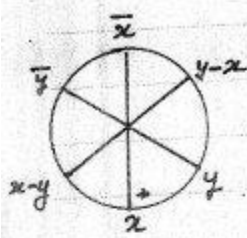
c) axe hélicoïdal 4_2 parallèle à \vec{z}



$$xyz \xrightarrow{4_1 // \vec{z}} y; \bar{x}; \frac{1}{4} + \bar{z} \quad \text{ect ect}$$

$$xyz \xrightarrow{4_2 // \vec{z}} y; \bar{x}; \frac{3}{4} + \bar{z} \quad \text{ect ect}$$

$$xyz \xrightarrow{4_3 // \vec{z}} y; \bar{x}; \frac{2}{4} + \bar{z} \quad \text{ect ect}$$



$$\Rightarrow xyz \xrightarrow{C_1} y; y-x; \frac{1}{6}+z \xrightarrow{C_1} y-x; \bar{x}; \frac{5}{6}+z$$

$$xy; x; \frac{5}{6}+z \xleftarrow{C_1} \bar{y}; x-y; \frac{4}{6}+z \xleftarrow{C_1} \bar{x}; \bar{y}; \frac{2}{6}+z$$

$$xyz \xrightarrow{C_2} y; y-x; \frac{2}{6}+z \text{ ect ect}$$

$$xyz \xrightarrow{C_3} y; y-x; \frac{3}{6}+z \text{ ect ect}$$

$$xyz \xrightarrow{C_4} y; y-x; \frac{4}{6}+z \text{ ect ect}$$

$$xyz \xrightarrow{C_5} y; y-x; \frac{5}{6}+z \text{ ect ect}$$

9. Les plans de glissement

En appliquant un miroir puis en faisant une translation (sur tout ou partie des axes), on obtient un plan de glissement:

c'est donc une translation qui est associée à une réflexion!

a) Plan de glissement axial il en existe 3 sortes

plan "a": translation de $\frac{1}{2}$ le long de l'axe x

"b": _____ y

"c": _____ z

b) plan de glissement nodal (ou normal) noté "n"

$n \perp \vec{x}$: miroir $\perp \vec{x}$ puis translation $(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2})$ ou $\frac{b+c}{2}$

$n \perp \vec{y}$ _____ $\perp \vec{y}$ _____ $(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2})$ ou $\frac{a+c}{2}$

$n \perp \vec{z}$ _____ $\perp \vec{z}$ _____ $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$ ou $\frac{a+b}{2}$

$n \perp [111]$ _____ $\perp [111]$ _____ $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2})$ ou $\frac{a+b+c}{2}$

↳ uniquement dans le cube ou le système cubique

C/ Plan de glissement diagonal (ou diamant) note d
d $\perp \vec{x}$: miroir $\perp \vec{x}$ puis translation $(\frac{b \pm c}{4})$

d $\perp \vec{y}$: miroir $\perp \vec{y}$ puis translation $(\frac{a \pm c}{4})$

d $\perp \vec{z}$: miroir $\perp \vec{z}$ puis translation $(\frac{a \pm b}{4})$

d $\perp [111]$: miroir $\perp [111]$ puis translation $(\frac{a \pm b \pm c}{4})$
↳ dans le cube ou le quadratique uniquement

10. Symétrie de réseau

- Réseau primitif P : noeuds aux 8 sommets
- Réseau centré A : noeuds (aux 8 sommets + milieu de faces $\perp \vec{a}$)
B : _____ $\perp \vec{b}$)
C : _____ $\perp \vec{c}$)
- Réseau centré I : noeuds (aux 8 sommets + milieu $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$)
- Réseau à faces centrées F : noeuds (aux 8 sommets + milieux des 6 faces)

Exercices d'application

1. En utilisant l'expression matricielle, établir les équivalences suivantes :

$$\bar{2} \equiv m$$

$$\bar{3} \equiv 3 + \bar{1}$$

$$\bar{6} \equiv 3 + m \perp \text{axe } 3$$

$\bar{6} \perp \text{axe } 2 \Rightarrow$ il existe 3 axes 2 \Rightarrow il existe 3 miroirs

2. trouver dans les livres de chimie du solide et de cristallographie la représentation graphique de tous les éléments de symétrie (sous forme de tableau)

7

groupes ponctuels

a - théorème Tous les éléments de symétrie d'une figure finie se coupent au moins en un point : c'est pourquoi on utilise le terme "groupe ponctuel".

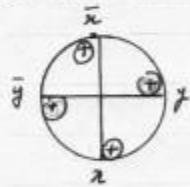
On appelle groupe ponctuel l'ensemble des opérations de symétrie d'une figure finie, ce groupe est à entendre au sens mathématique :

- il existe l'opération identité (c'est 1)
- A toute opération, il correspond nécessairement l'opération inverse telle que leur produit soit l'identité 1
- Le produit (c'est à dire l'application successive) de 2 ou plusieurs opérations de symétrie du groupe est toujours une opération du groupe.
- la loi associative est vérifiée $A(BC) = (AB)C$

b - Coexistence d'éléments de symétrie et groupe ponctuel

Quand plusieurs éléments de symétrie coexistent, ils peuvent engendrer d'autres éléments de symétrie, ainsi, par exemple,

- axe l parallèle à \vec{z} et $m \perp \vec{z}$



$$x y z \rightarrow y \bar{x} z \rightarrow \bar{x} \bar{y} z \rightarrow \bar{y} x z$$

$$x y \bar{z} \rightarrow y \bar{x} \bar{z} \rightarrow \bar{x} \bar{y} \bar{z} \rightarrow \bar{y} x \bar{z}$$

d'après ces 8 positions équivalentes générales, on peut bien constater qu'il a été engendré l'élément $\bar{1}$; en effet :

$$x y z \xrightarrow{\bar{1}} \bar{x} \bar{y} \bar{z}$$

$$y \bar{x} z \xrightarrow{\bar{1}} \bar{y} x \bar{z}$$

$$\bar{x} \bar{y} z \xrightarrow{\bar{1}} x y \bar{z}$$

$$\bar{y} x z \xrightarrow{\bar{1}} y \bar{x} \bar{z}$$

On peut établir ce fait par le calcul matriciel ; en effet :

$$x y z \xrightarrow{4^{(2)} \parallel \vec{z}} \bar{x} \bar{y} z \quad \text{ou bien} \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = m_1$$

$$x y z \xrightarrow{m \perp \vec{z}} x y \bar{z} \quad \text{ou bien} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} = m_2$$

$$m_1 \cdot m_2 = m_3 \Rightarrow \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} \equiv (\bar{x} \bar{y} \bar{z}) \text{ ou } \bar{1}(000)$$

On dira alors que les éléments de symétrie : axe $4 \parallel \vec{z}$; $m \perp \vec{z}$ et $\bar{1}(000)$ coexistent entre eux et forment alors un groupe ponctuel noté $\frac{4}{m_2}$ d'ordre 8 car il possède 8 positions générales

deuxième exemple : axe $4 \parallel \vec{z}$ et miroir $m_1 \perp \vec{x}$

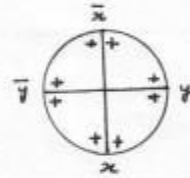
$$x y z \rightarrow y \bar{x} z \rightarrow \bar{x} \bar{y} z \rightarrow \bar{y} x z$$

$$\bar{x} y z \rightarrow y x z \rightarrow x \bar{y} z \rightarrow \bar{y} \bar{x} z$$

On peut bien constater qu'il a été engendré 3 autres miroirs

$$m_2 \perp \vec{y} ; m_3 \perp \vec{x}-\vec{y} \text{ et } m_4 \perp \vec{x}+\vec{y}$$

il s'agit du groupe $4mm$



$$x y z \xrightarrow{\bar{1}(000)} x y z$$

$$x y z \xrightarrow{4^{(1)} \parallel \vec{z}} y \bar{x} z$$

$$x y z \xrightarrow{4^{(2)}} \bar{x} \bar{y} z$$

$$x y z \xrightarrow{4^{(3)}} \bar{y} x z$$

$$x y z \xrightarrow{m_1 \perp \vec{x}} \bar{x} y z$$

$$x y z \xrightarrow{m_3 \perp \vec{x}-\vec{y}} y \bar{x} z$$

$$x y z \xrightarrow{m_2 \perp \vec{y}} x \bar{y} z$$

$$x y z \xrightarrow{m_4 \perp \vec{x}+\vec{y}} \bar{y} \bar{x} z$$

On peut dresser la table de "multiplication" ou de "composition" de ces éléments de symétrie ou de ce groupe $4mm$: II-2

Cristallographie et Symétrie

Une opération de symétrie est un déplacement qui ramène une figure en coïncidence avec elle-même.

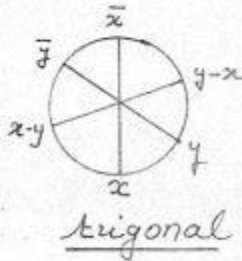
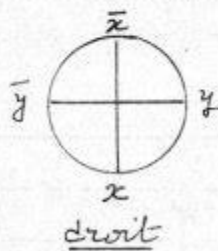
En cristallographie, il existe trois types fondamentaux de déplacement et 3 façons de combiner eux ces types.
↳ entre

1- types de déplacement

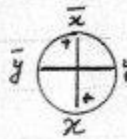
- rotations propres par rapport à un axe ; on dit également axes propres (ce sont les axes $n=1, 2, 3, 4$ et 6) d'angle $\frac{360^\circ}{n}$
- l'inversion par rapport au point $(0,0,0)$ notée $\bar{1}$
- les miroirs "m" perpendiculaires à une direction

2- types de combinaison

- La combinaison d'un axe propre "n" et de l'inversion $\bar{1}$ donne une rotation impropre qui est notée $\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}$ et $\bar{6}$
 - La combinaison d'un axe propre "n" et d'une translation le long de cet axe donne un axe hélicoïdal noté "n_h" (exple 6)
 - La combinaison d'un miroir et d'une translation : les plans de glissement.
- ## 3- Repères stéréographiques Il en existe deux uniquement.



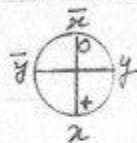
4. Quelques exemples de rotation propre
 a. axe de rotation d'ordre 2 ($\alpha = \frac{360^\circ}{2} = 180^\circ$)
 * si cet axe 2 est parallèle à \vec{z} , on aura alors les positions équivalentes suivantes :



$$x, y, z \xrightarrow{2 \parallel \vec{z}} \bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$$

$$\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

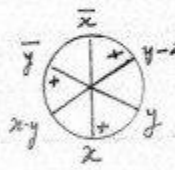
* si cet axe 2 est parallèle à \vec{y} , on aura alors :



$$x, y, z \xrightarrow{2 \parallel \vec{y}} \bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$$

$$\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$$

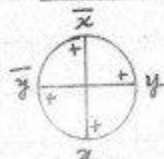
b/ axe de rotation d'ordre 3 ($\alpha = \frac{360^\circ}{3} = 120^\circ$)



$$x, y, z \xrightarrow{3^1} y-x, \bar{x}, \bar{z} \xrightarrow{3^2} \bar{y}, x, \bar{z}$$

$$3^1 \text{ ou bien } \begin{pmatrix} \bar{1} & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad 3^2 \text{ ou bien } \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

c/ axe de rotation d'ordre 4 ($\alpha = \frac{360^\circ}{4} = 90^\circ$)



$$x, y, z \xrightarrow{4^1} y, \bar{x}, \bar{z} \xrightarrow{4^2} \bar{x}, \bar{y}, \bar{z} \xrightarrow{4^3} \bar{y}, x, \bar{z}$$

$$4^1 \text{ ou } \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

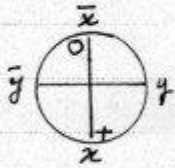
2/ axe de rotation d'ordre 6 // \vec{z} ($\alpha = \frac{360^\circ}{6} = 60^\circ$)



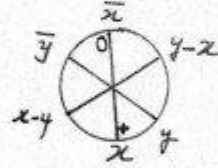
$$x, y, z \rightarrow \begin{cases} y, y-x, z & \Rightarrow C^1 \\ y-x, \bar{x}, z & \Rightarrow C^2 \equiv 3^1 \\ \bar{x}, \bar{y}, z & \Rightarrow C^3 \equiv 2 \\ \bar{y}, x-y, z & \Rightarrow C^4 \equiv 3^2 \\ x-y, x, z & \Rightarrow C^5 \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_{C^1} \quad \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_{C^2} \quad \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_{C^3} \quad \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_{C^4} \quad \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_{C^5}$$

5 - Quelques exemples d'inversion $\bar{1}$



$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



$$x, y, z \xrightarrow{\bar{1}(000)} \bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$$

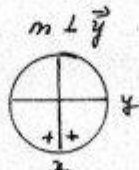
$$x, y, z \xrightarrow{\bar{1}(000)} \bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$$

6/ quelques exemples de miroirs



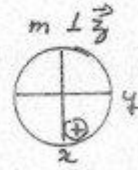
$$x, y, z \xrightarrow{m \perp \vec{x}} \bar{x}, y, z$$

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



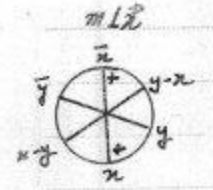
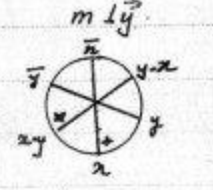
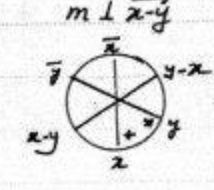
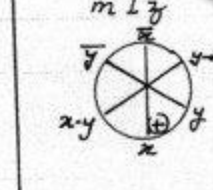
$$x, y, z \xrightarrow{m \perp \vec{y}} x, \bar{y}, z$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



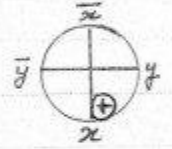
$$x, y, z \xrightarrow{m \perp \vec{z}} x, y, \bar{z}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

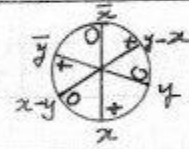
$m \perp \vec{x}$ 	$m \perp \vec{y}$ 	$m \perp \vec{x-y}$ 	$m \perp \vec{z}$ 
$xyz \rightarrow \bar{x}; y-x; \bar{z}$	$xyz \rightarrow x; y; \bar{z}$	$xyz \rightarrow y; x; \bar{z}$	$xyz \rightarrow x; y; \bar{z}$
$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

7. Exemples de rotation impropres

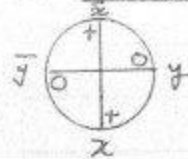
a. axe \vec{z} parallèle à \vec{z}


 $xyz \rightarrow x \ y \ \bar{z}$
 $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

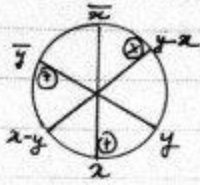
b. axe \vec{z} parallèle à \vec{z}


 $xyz \rightarrow \begin{cases} z-y & ; & x & ; & \bar{z} \\ \bar{y} & ; & x-y & ; & \bar{z} \\ \bar{x} & ; & \bar{y} & ; & \bar{z} \\ y-x & ; & \bar{x} & ; & \bar{z} \\ y & ; & y-x & ; & \bar{z} \end{cases}$
 $\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

c) axe \vec{y} parallèle à \vec{z}


 $xyz \rightarrow \begin{cases} \bar{y} & x & \bar{z} \\ \bar{x} & \bar{y} & \bar{z} \\ y & \bar{x} & \bar{z} \end{cases}$
 $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

d) axe 6 parallèle à \vec{z}



$$xyz \rightarrow \begin{cases} \bar{y}; x-y; \bar{z} \\ y-x; \bar{x}; \bar{z} \\ x; y; \bar{z} \\ \bar{y}; x-y; \bar{z} \\ y-x; \bar{x}; \bar{z} \end{cases} \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$$

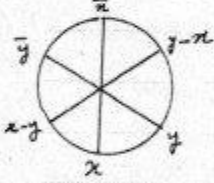
8. Exemple d'axe hélicoïdal 2_1

a) Il s'agit d'une rotation d'ordre 2 suivie d'une translation de longueur $t = 1/2$ selon l'axe \vec{z} (ou \vec{x} ou \vec{y})



$$\begin{aligned} xyz &\xrightarrow{2_1 // \vec{z}} \bar{x}; \bar{y}; \bar{z} + \frac{1}{2} \\ xyz &\xrightarrow{2_1 // \vec{x}} \frac{1}{2} + x; \bar{y}; \bar{z} \\ xyz &\xrightarrow{2_1 // \vec{y}} \bar{x}; \frac{1}{2} + y; \bar{z} \end{aligned}$$

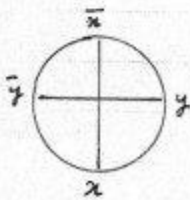
b) axe hélicoïdal 3_1 parallèle à \vec{z}



$$\begin{aligned} xyz &\xrightarrow{3_1 // \vec{z}} y-x; \bar{x}; \frac{1}{3} + \bar{z} \\ &\downarrow 3_1 // \vec{z} \\ &\bar{y}; x-y; \frac{2}{3} + \bar{z} \end{aligned}$$

$$xyz \xrightarrow{3_2 // \vec{z}} y-x; \bar{x}; \frac{2}{3} + \bar{z} \xrightarrow{3_2 // \vec{z}} \bar{y}; x-y; \frac{1}{3} + \bar{z}$$

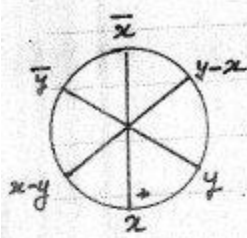
c) axe hélicoïdal 4_1 parallèle à \vec{z}



$$xyz \xrightarrow{4_1 // \vec{z}} y; \bar{x}; \frac{1}{4} + \bar{z} \quad \text{ect ect}$$

$$xyz \xrightarrow{4_2 // \vec{z}} y; \bar{x}; \frac{3}{4} + \bar{z} \quad \text{ect ect}$$

$$xyz \xrightarrow{4_3 // \vec{z}} y; \bar{x}; \frac{2}{4} + \bar{z} \quad \text{ect ect}$$



$$\Rightarrow xyz \xrightarrow{G_1} y; y-x; \frac{1}{6}+z \xrightarrow{G_1} y-x; \bar{x}; \frac{2}{6}+z$$

$$xy; x; \frac{5}{6}+z \xleftarrow{G_1} \bar{y}; x-y; \frac{4}{6}+z \xleftarrow{G_1} \bar{x}; \bar{y}; \frac{3}{6}+z$$

$$xyz \xrightarrow{G_2} y; y-x; \frac{2}{6}+z \text{ ect ect}$$

$$xyz \xrightarrow{G_3} y; y-x; \frac{3}{6}+z \text{ ect ect}$$

$$xyz \xrightarrow{G_4} y; y-x; \frac{4}{6}+z \text{ ect ect}$$

$$xyz \xrightarrow{G_5} y; y-x; \frac{5}{6}+z \text{ ect ect}$$

9. Les plans de glissement

En appliquant un miroir puis en faisant une translation (sur tout ou partie des axes), on obtient un plan de glissement:

c'est donc une translation qui est associée à une réflexion!

a) Plan de glissement axial il en existe 3 sortes

plan "a": translation de $\frac{1}{2}$ le long de l'axe x

"b": _____ y

"c": _____ z

b) plan de glissement nodal (ou normal) noté "n"

$n \perp \vec{x}$: miroir $\perp \vec{x}$ puis translation $(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2})$ ou $\frac{b+c}{2}$

$n \perp \vec{y}$ _____ $\perp \vec{y}$ _____ $(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2})$ ou $\frac{a+c}{2}$

$n \perp \vec{z}$ _____ $\perp \vec{z}$ _____ $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$ ou $\frac{a+b}{2}$

$n \perp [111]$ _____ $\perp [111]$ _____ $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2})$ ou $\frac{a+b+c}{2}$

↳ uniquement dans le cube ou le système cubique

C/ Plan de glissement diagonal (ou diamant) note d
d $\perp \vec{x}$: miroir $\perp \vec{x}$ puis translation $(\frac{b \pm c}{4})$

d $\perp \vec{y}$: miroir $\perp \vec{y}$ puis translation $(\frac{a \pm c}{4})$

d $\perp \vec{z}$: miroir $\perp \vec{z}$ puis translation $(\frac{a \pm b}{4})$

d $\perp [111]$: miroir $\perp [111]$ puis translation $(\frac{a \pm b \pm c}{4})$
↳ dans le cube ou le quadratique uniquement

10. Symétrie de réseau

- Réseau primitif P : noeuds aux 8 sommets
- Réseau centré A : noeuds (aux 8 sommets + milieu de faces $\perp \vec{a}$)
B : _____ $\perp \vec{b}$)
C : _____ $\perp \vec{c}$)
- Réseau centré I : noeuds (aux 8 sommets + milieu $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$)
- Réseau à faces centrées F : noeuds (aux 8 sommets + milieux des 6 faces)

Exercices d'application

1. En utilisant l'expression matricielle, établir les équivalences suivantes :

$$\bar{2} \equiv m$$

$$\bar{3} \equiv 3 + \bar{1}$$

$$\bar{6} \equiv 3 + m \perp \text{axe } 3$$

$\bar{6} \perp \text{axe } 2 \Rightarrow$ il existe 3 axes 2 \Rightarrow il existe 3 miroirs

2. trouver dans les livres de chimie du solide et de cristallographie la représentation graphique de tous les éléments de symétrie (sous forme de tableau)

7

groupes ponctuels

a - théorème Tous les éléments de symétrie d'une figure finie se coupent au moins en un point : c'est pourquoi on utilise le terme "groupe ponctuel".

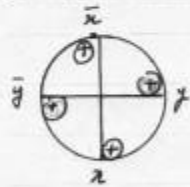
On appelle groupe ponctuel l'ensemble des opérations de symétrie d'une figure finie, ce groupe est à entendre au sens mathématique :

- il existe l'opération identité (c'est 1)
- A toute opération, il correspond nécessairement l'opération inverse telle que leur produit soit l'identité 1
- Le produit (c'est à dire l'application successive) de 2 ou plusieurs opérations de symétrie du groupe est toujours une opération du groupe.
- la loi associative est vérifiée $A(BC) = (AB)C$

b - Coexistence d'éléments de symétrie et groupe ponctuel

Quand plusieurs éléments de symétrie coexistent, ils peuvent engendrer d'autres éléments de symétrie, ainsi, par exemple,

- axe l parallèle à \vec{z} et $m \perp \vec{z}$



$$x y z \rightarrow y \bar{x} z \rightarrow \bar{x} \bar{y} z \rightarrow \bar{y} x z$$

$$x y \bar{z} \rightarrow y \bar{x} \bar{z} \rightarrow \bar{x} \bar{y} \bar{z} \rightarrow \bar{y} x \bar{z}$$

d'après ces 8 positions équivalentes générales, on peut bien constater qu'il a été engendré l'élément $\bar{1}$; en effet :

$$x y z \xrightarrow{\bar{1}} \bar{x} \bar{y} \bar{z}$$

$$y \bar{x} z \xrightarrow{\bar{1}} \bar{y} x \bar{z}$$

$$\bar{x} \bar{y} z \xrightarrow{\bar{1}} x y \bar{z}$$

$$\bar{y} x z \xrightarrow{\bar{1}} y \bar{x} \bar{z}$$

On peut établir ce fait par le calcul matriciel ; en effet :

$$x y z \xrightarrow{4^{(2)} \parallel \vec{z}} \bar{x} \bar{y} z \quad \text{ou bien} \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = m_1$$

$$x y z \xrightarrow{m \perp \vec{z}} x y \bar{z} \quad \text{ou bien} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} = m_2$$

$$m_1 \cdot m_2 = m_3 \Rightarrow \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} \equiv (\bar{x} \bar{y} \bar{z}) \text{ ou } \bar{1}(000)$$

On dira alors que les éléments de symétrie : axe $4 \parallel \vec{z}$; $m \perp \vec{z}$ et $\bar{1}(000)$ coexistent entre eux et forment alors un groupe ponctuel noté $\frac{4}{m_2}$ d'ordre 8 car il possède 8 positions générales

deuxième exemple : axe $4 \parallel \vec{z}$ et miroir $m_1 \perp \vec{x}$

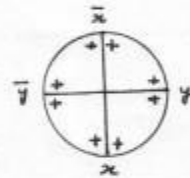
$$x y z \rightarrow y \bar{x} z \rightarrow \bar{x} \bar{y} z \rightarrow \bar{y} x z$$

$$\bar{x} y z \rightarrow y x z \rightarrow x \bar{y} z \rightarrow \bar{y} \bar{x} z$$

On peut bien constater qu'il a été engendré 3 autres miroirs

$$m_2 \perp \vec{y} ; m_3 \perp \vec{x}-\vec{y} \text{ et } m_4 \perp \vec{x}+\vec{y}$$

il s'agit du groupe $4mm$



$$x y z \xrightarrow{\bar{1}(000)} x y z$$

$$x y z \xrightarrow{4^{(1)} \parallel \vec{z}} y \bar{x} z$$

$$x y z \xrightarrow{4^{(2)}} \bar{x} \bar{y} z$$

$$x y z \xrightarrow{4^{(3)}} \bar{y} x z$$

$$x y z \xrightarrow{m_1 \perp \vec{x}} \bar{x} y z$$

$$x y z \xrightarrow{m_3 \perp \vec{x}-\vec{y}} y \bar{x} z$$

$$x y z \xrightarrow{m_2 \perp \vec{y}} x \bar{y} z$$

$$x y z \xrightarrow{m_4 \perp \vec{x}+\vec{y}} \bar{y} \bar{x} z$$

On peut dresser la table de "multiplication" ou de "composition" de ces éléments de symétrie ou de ce groupe $4mm$: II-2