Les opérations de symétrie

La matière cristallisée présente dans sa structure et dans toutes ses propriétés des caractères de symétrie. Le degré de symétrie réalisé par les cristaux sert à leur classement en type cristallographique. D'où l'importance capitale, de l'étude de la symétrie.

III.1- La symétrie d'orientation (ponctuelle)

La symétrie ponctuelle désigne l'ensemble des applications linéaires qui laissent invariant un objet de dimension finie. Les éléments de symétrie d'un objet passent tous par son centre et ont donc au moins un point en commun, le centre de l'objet, d'où le nom de « symétrie ponctuelle ». Les opérations de translation ne font pas partie des opérations de symétrie ponctuelle.

En cristallographie, la symétrie ponctuelle d'un cristal doit aussi laisser le réseau invariant : on ne considère que les isométries, qui conservent les longueurs. D'autre part, seul un petit nombre d'opérations de symétrie est compatible avec les translations de réseau : c'est le « théorème de restriction cristallographique ».

III.1.1-Les opérations de symétrie

1- **La rotation**

Une rotation d'angle θ= 2π /x (x est un nombre entier) est une opération qui associe à tout point P de l'espace un point image P' qui est tourné de l'angle θ par rapport à l'axe de la rotation. L'angle de la rotation est exprimé en degrés. La rotation s'effectue dans le sens trigonométrique autour de l'axe et dans le plan contenant le point P et perpendiculaire à l'axe. Les points fixes d'une rotation constituent l'axe de la rotation. La rotation est une isométrie : elle conserve les distances. En particulier, la distance du point P à l'axe de rotation est la même que la distance de son image P' à l'axe.

Pour une rotation 2π /x, x prend les valeurs : 1, 2, 3,4 et 6

a- **Axe binaire (angle de rotation : 2π /2)**

- **axe 2 //oz**

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

xyz → -x, -y, z → x, y, z deux points équivalentes générales.

Pour un axe binaire il est positif seulement par rapport à l'axe de rotation, donc :

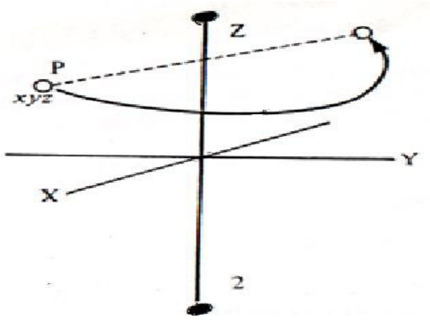


Fig.III-1 : Représentation graphique d'un axe binaire

- **Axe 2 //oy**

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

- **Axe 2 //ox**

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

b- Axe ternaire 3//Oz : 3⇒Rotation de 2π/3 = 120°

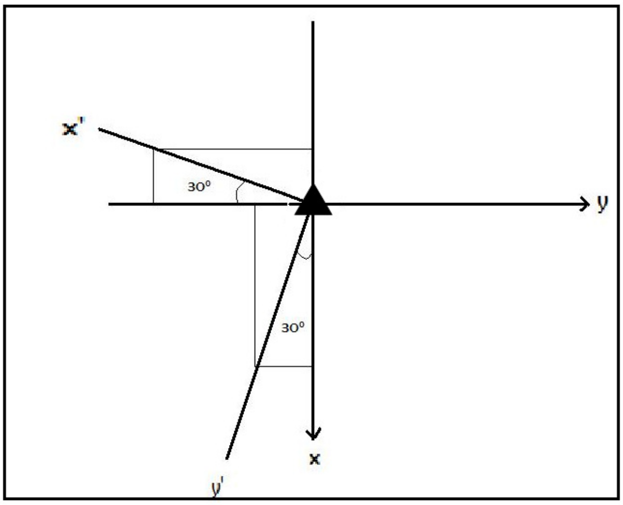


Fig.III-2 : Représentation graphique d'un axe ternaire

$$\begin{cases} x' = -y\cos 30 - x\sin 30 \\ y' = x\cos 30 - y\sin 30 \\ z' = z \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} x' = -\sqrt{3}/2\ y - 1/2\ x \\ y' = \sqrt{3}/2\ x - 1/2\ y \\ z' = z \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

c- Axe quaternaire 4//Ox : 4⇒Rotation de 2π/4 = 90°

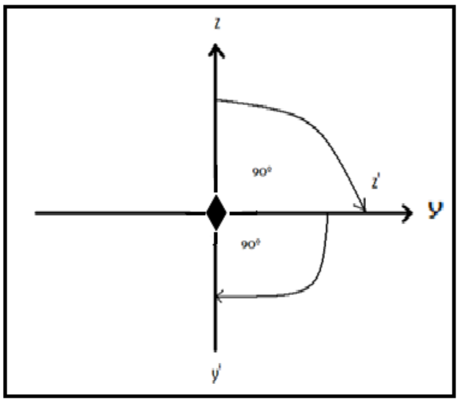


Fig.III-3 : Représentation graphique d'un axe quaternaire

$$\left.\begin{array}{l} x'=x \\ y'=-z \\ z'=y \end{array}\right\} \Rightarrow$$

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

d- Axe sénaire 6 //Oy : 6⇒Rotation de 2π/6 = 60°

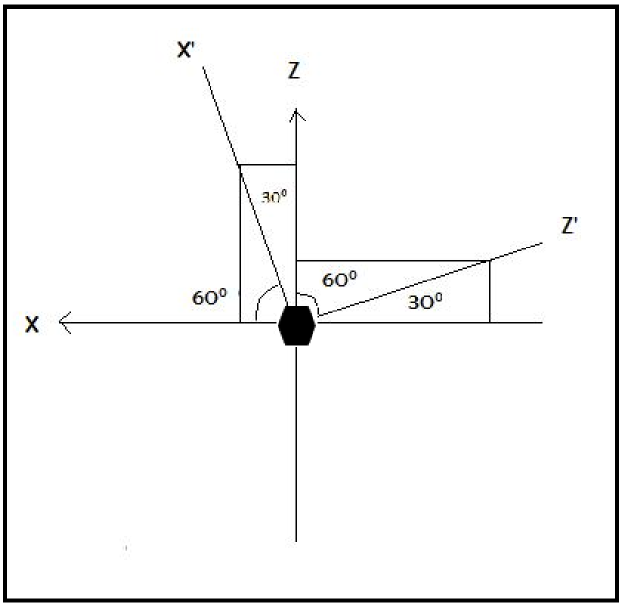


Fig.III-4 : Représentation graphique d'un axe sénaire

$$\begin{cases} x' = z\cos 30 + x\sin 30 \\ y' = y \\ z' = -x\cos 30 + z\sin 30 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} x' = 1/2\ x + \sqrt{3}/2\ z \\ y' = y \\ z' = -\sqrt{3}/2 x + 1/2\ z \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & \sqrt{3}/2 \\ 0 & 1 & \mathbf{0} \\ -\sqrt{3}/2 & \mathbf{0} & 1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

Remarque : on appelle les points engendrés par les éléments de symétrie : points équivalents.

La représentation graphique et symboles des axes de rotation sont représentés dans le tableau 1.

Tableau III. 1 : Représentation graphique et symboles

***n* = 360/θ**	**1**	**2**	**3**	**4**	**6**
Rotations	1	2	3	4	6
		⬮	▲	◆	⬢
Roto-inversions	$\bar{1}$	$m \equiv \bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$	$\bar{6}$
	○	—	▲	◆	⬢

Remarque : Quand l'axe 2 est dans le plan de dessin on le représente par ——— ou ●
● ⟷ ———

2- **La réflexion (ou miroir)**

Une figure possède cette symétrie si une moitié de la figure est l'image de l'autre dans un miroir ou plan de symétrie.

Symbole de l'élément de symétrie est **m.**

Représentation graphique

Pour un m ⊥au plan de dessin

Pour un miroir dans le plan de dessin

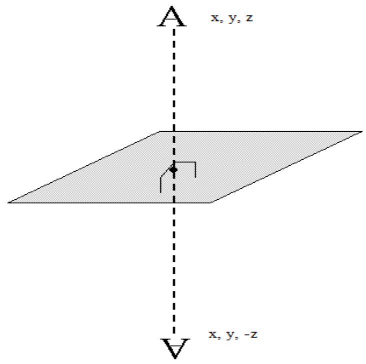


Fig.III-5 : Représentation graphique d'un miroir // (xoy)

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

La même remarque que l'axe binaire, le miroir est positif par rapport au plan de projection seulement.

Donc pour m // (xoz) on obtient :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

Et pour m // (yoz) on obtient :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

3- L'inversion

La symétrie d'inversion se fait par rapport à un point, appelé centre d'inversion ou de symétrie. La figure qui possède cet élément de symétrie est dite centrosymétrique.

Symbole : C

Représentation graphique : ○

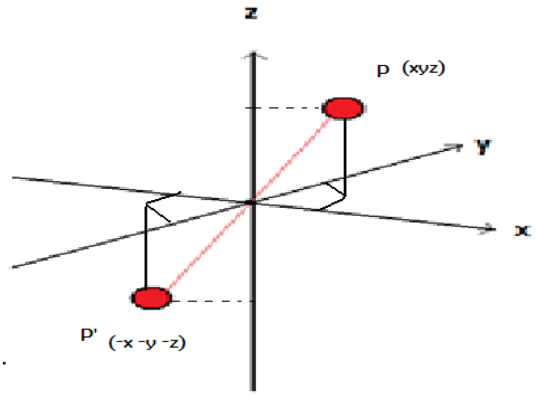


Fig.III-6 : Représentation graphique d'une image centrosymétrique

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

4- **La roto-inversion :**

La roto-inversion est une rotation de 2π /x suivie d'une inversion par rapport à un centre situé sur l'axe de rotation.

L'élément de symétrie est appelé axe d'inversion, noté$\overline{X}$.

Exemple : $\overline{2}$

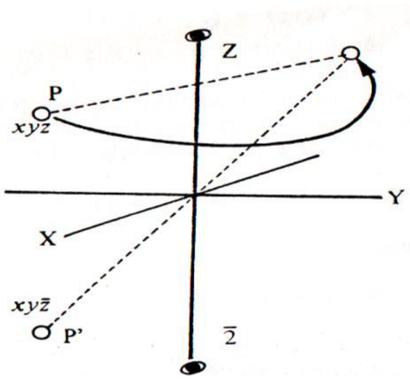


Fig.III-7 : Représentation graphique d'une roto-inversion $\overline{2}$

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

Cette opération est équivalente à un miroir // (xoy).

La représentation graphique et symboles des axes de roto-inversion sont donnés dans le tableau 1.

5- La réflexion rotatoire

C'est une rotation de **2π/x** suivie d'une réflexion dans un plan perpendiculaire à l'axe. L'élément de symétrie est un axe de réflexion.

Symbole: X' : 1', 2', 3', 4', 6'

Exemple : axe 2'

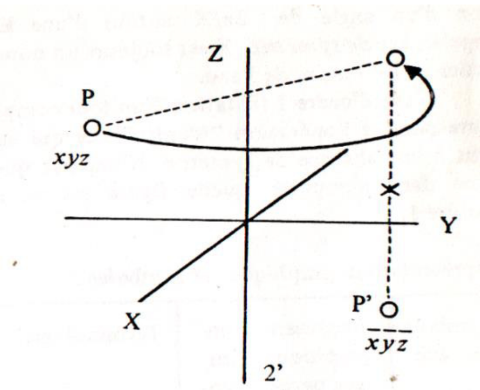


Fig.III-8 : Représentation graphique d'un axe 2'

III.2 -Représentation de la symétrie (Projection stéréographique)

Principe

La Projection stéréographique permet de représenter sur un plan l'effet d'une opération de symétrie isolée ou d'une succession d'opérations.

La figure suivante montre le principe de cette projection. Pour un point qui se trouve dans l'hémisphère nord on le relie avec le pôle sud et le point d'intersection avec le plan latérale est noté « x », inversement un point dans l'hémisphère sud est relié au pôle nord et le point d'intersection avec le plan latérale est noté « o ».

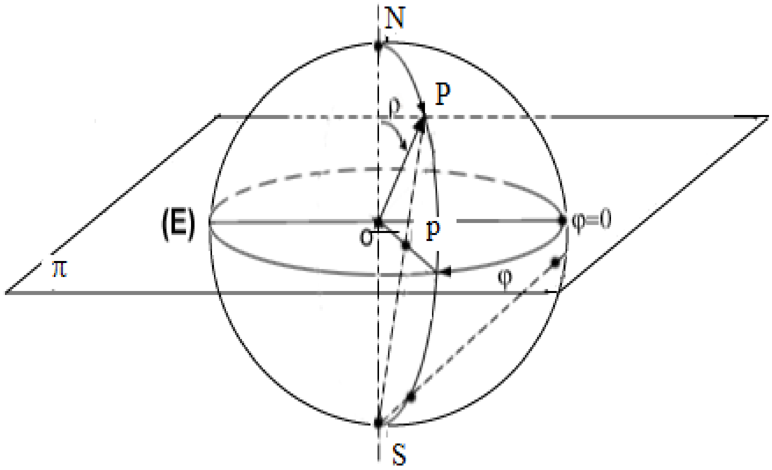
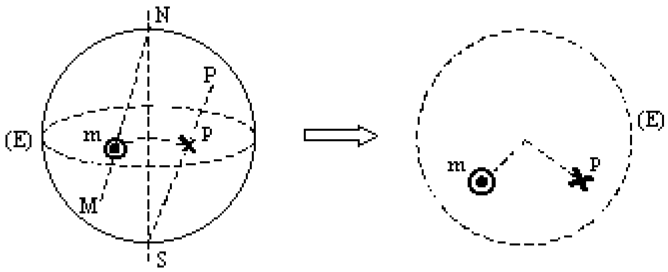


Fig.III-9 : Principe de la projection stéréographique



La figure suivante donne les projections stéréographiques d'ensemble de points équivalents liés par des opérations de symétrie.

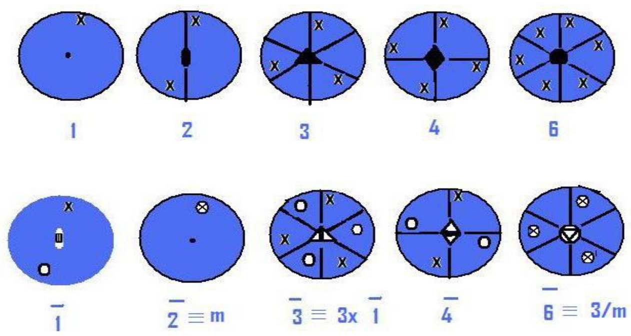


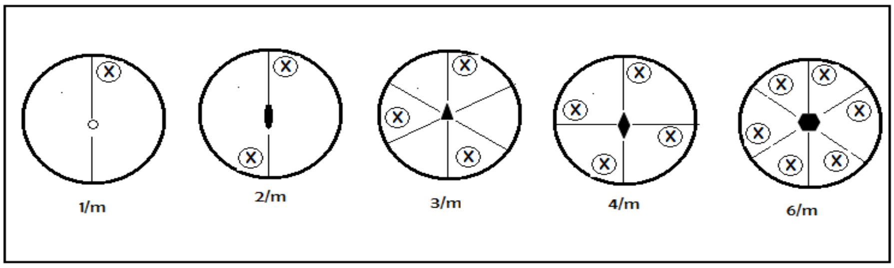
Fig.III-10 : Représentation graphique de la projection stéréographique de la rotation et la roto-inversion

III .3- Association des opérations de symétrie

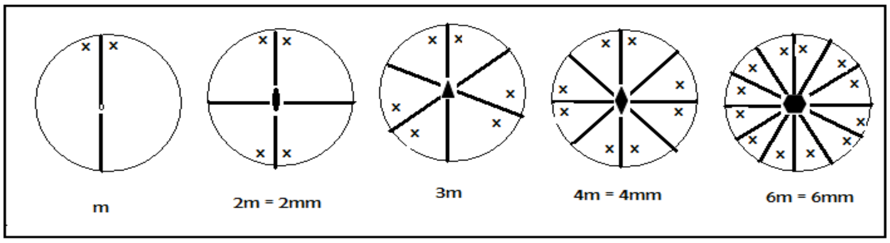
Un cristal peut avoir plusieurs opérations de symétrie. On utilise les symboles de la notation internationale d'Hermann-Maugin.

III.3.1- Association d'un miroir et un axe normal au plan du miroir « X/m »

L'association d'un miroir et un axe normal au plan du miroir, notée X/m entraine un centre d'inversion à leur intersection.

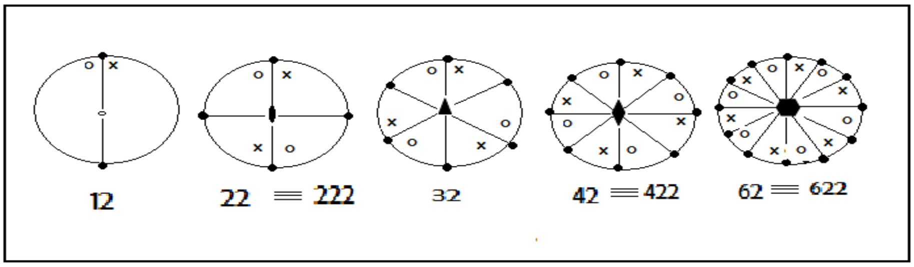


III.3.2- Association d'un axe direct X et un miroir au même plan « Xm »



Pour un groupe de symétrie Xm, si X est pair on obtient Xmm et si X est impair on trouve Xm .

III.3.3- Association d'un axe directe X et d'un axe direct binaire orthogonal « X2 »



Pour un groupe de symétrie X2, si X est pair on obtient X22 et si X est impair on trouve X2.

III.4- Groupes ponctuels

a- Définition

L'ensemble des opérations de symétrie d'une figure finie forment un groupe au sens mathématique du terme, dit groupe de symétrie d'orientation.

Les groupes ponctuels compatibles avec un réseau cristallin, obéissent à des lois très strictes (des théorèmes), sont formés des opérations directes (axes d'ordre X) et inverses$\bar{X}$. En dénombrant les associations possibles entre ces opérations, on aboutit aux 32 groupes ponctuels cristallographiques ou 32 classes de symétrie. Le tableau 2 présente le classement des groupes ponctuels en système. Parmi les 32 groupes ponctuels, 11 sont centro-symétriques, on les appelle groupes de Laue.

Tableau III.2 : Les 32 groupes ponctuels

Système	**définition**	**Classes cristallines**
Triclinique	Classe 1 ou -1	1, -1*
Monoclinique	une seule direction	2, m, 2/m*
	binaire 2 ou -2≡m	
Orthorhombique	3 directions	222, mm2, mmm*
	binaires	
Rhomboédrique	perpendiculaires	3, -3*, 32, 3m, -3m*
	une seule direction	
Quadratique	ternaire 3 ou -3	4, -4, 4/m*, 4mm,
	une seule direction	422,
Hexagonale	quaternaire 4 ou -4	-42m , 4/mmm*
	une direction	6, -6 , 6/m* , 6mm ,
Cubique	sénaire 6 ou -6	622,
	4 directions	-62m, 6/mmm*
	ternaires 3 ou -3	23, $m\bar{3}$*, 432, -43m,
		$m\bar{3}m$*

b- Les principaux théorèmes de la symétrie ponctuelle

1- Tous les éléments de symétrie d'une figure finie se coupent au moins en un point, d'ou le nom de groupe ponctuel.(voir 2/m)

2- Si un axe d'ordre pair est perpendiculaire à un plan de symétrie, l'intersection est un centre de symétrie. (voir 2/m, 4/m)

3- Si une figure n'a qu'un axe de symétrie, tout plan de symétrie doit passer par l'axe ou lui être perpendiculaire. (voir 2m ou 2/m)

4- Lorsqu'un axe d'ordre X est dans un plan de symétrie, il existe X plans de symétrie formant entre eux des angles de π/X. (voir 3m)

5- S'il existe qu'un seul axe d'ordre supérieur à 2, tout axe d'ordre 2 doit nécessairement lui être perpendiculaire.

6- Si un axe d'ordre 2 est perpendiculaire à un axe d'ordre X, il existe X axes d'ordre 2 formant entre eux des angles π/X et tous disposés dans le plan perpendiculaire à l'axe d'ordre X. (voir 32)

7- L'existence de plans miroirs horizontaux et verticaux entraine l'existence d'axes d'ordre 2 à leur intersection. (voir mm)

c- La notation des groupes ponctuels (notation d'Hermann-Maugin)

Les symboles utilisés pour la dénomination des groupes ponctuels sont : X pour une rotation ; $\bar{X}$ pour une roto-inversion ; m pour un miroir.

Dans les conventions internationales, les groupes ponctuels sont déterminés par trois symboles (opérateurs de symétrie).

Les positions des éléments de symétrie dans la notation des groupes ponctuels sont représentées dans le tableau

Tableau III.3 : ordre des symboles et orientations

Système cristallin	1èr position	2ème position	3ème position
Triclinique	Toute direction dans le cristal	-	-
Monoclinique	2 ou -2 :[010]ou	-	-
	[001]	[010]	[001]
Orthorhombique	2 ou -2 :[100]	[100] ou [010]	[1-10] ou [110]
Quadratique	4 ou -4 :[001]	[110],[100]ou	[120],[1-10]ou[-2-10]
Hexagonal	6 ou -6 :[001]	[010]	-
Trigonal	3 ou -3 :[001]	[110],[010],[100]	2 ou -2 : [110],
cubique	2 ou -2, 4 ou -4 : [100], [010] ou[001]	3 ou-3 : [111], [1-1-1],[-111], [-1-11]	[110],[011],[011] [-101],[101]

III.5- La symétrie spatiale

Pour décrire la symétrie des figures infinies, il faut ajouter, à l'ensemble des opérations de symétrie d'orientation des groupes ponctuels, les opérations qui résultent de leur produit par les translations.

1-Opérateurs de symétrie

a- Axes hélicoïdaux : translations rotatoires

Ce sont des rotations de **2π/x** autour d'un axe, suivi d'une translation **t** parallèlement à l'axe de rotation. Il faut, pour que les deux opérations soient compatibles, après X translations rotatoires successives, nous retrouvons la translation pure.

Le symbole d'un axe hélicoïdal est :X_n avec $1 \leq n < X$

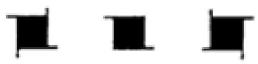
X_n désigne une rotation de $2\pi/x$ + translation $t=n/X$

Donc pour X= 1 n'existe pas un axe hélicoïdal

Tableau III.4 : les axes hélicoïdaux

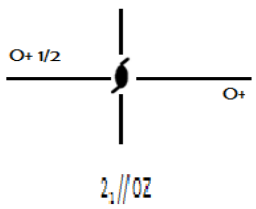
X	2	3	4	6
n	**1**	**1, 2**	**1, 2, 3**	**1, 2, 3, 4, 5**
axe	$\mathbf{2_1}$	$\mathbf{3_1, 3_2}$	$\mathbf{4_1, 4_2, 4_3}$,	$\mathbf{6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5}$

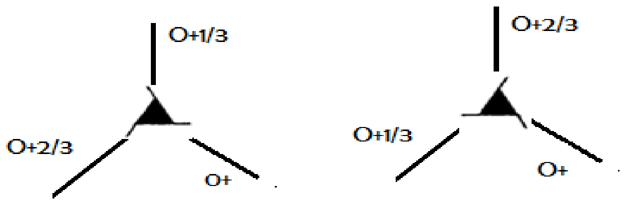
Tableau III.5 : Représentation graphique et symboles des axes hélicoïdaux

Symbole de l'axe	**Représentation graphique ⊥au plan du dessin**	**Terminologie**
2_1		Axe hélicoïdal binaire
3_1 3_2		Axe hélicoïdal ternaire
4_1 4_2 4_3		Axe hélicoïdal quaternaire
6_1 6_5		Axe hélicoïdal sénaire
6_2 6_3 6_4		

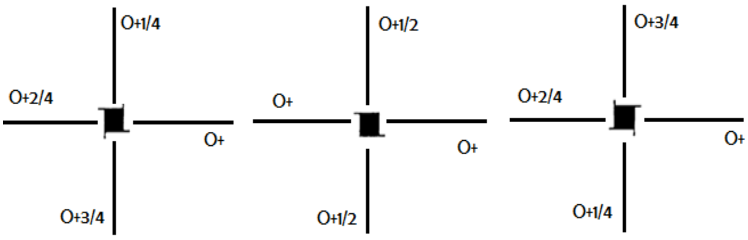
Remarque : Le symbole graphique de l'axe 2_1 dans le plan de dessin est : ⇀

Exemples :





3_1 // OZ 3_2 // OZ



4_1 // OZ 4_2 // OZ 4_3 // OZ

b- plan de glissement

C'est une réflexion suivie d'une translation de d/2 ou d/4 (les seules possibles) parallèlement au plan de réflexion.

Il existe différents types de plans de glissement, plan de glissement axiaux : a, b, c ; et plans de glissements diagonaux: n, et d (miroir diamant, la translation est d/4).

Exemples :

1-plan de glissement type a (// ox,oz) :

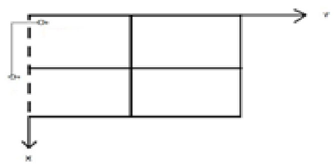
x y z $\longrightarrow$ x+1/2 -y z

2- plan de glissement type b (// oy,oz) :

x y z $\longrightarrow$ -x y+1/2 z

Plan de glissement « a » (translation de ½ de a)

Plan de glissement « b » (translation de ½ de b)



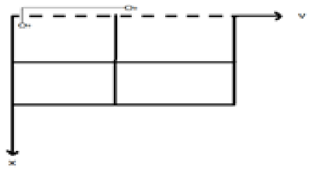


Tableau III.6 : Représentation graphique et symboles des plans de glissements

Orientation	Symbole	Représentions	Graphique	Nature de translation
		Normal	Parallèle	
(010) ou (001)	a,	— — — —		a/2 le long de x
(100) ou (001)	b	— — — —		b/2 le long de y
(100) ou (010)	c	• • • • •	—	c/2 le long de z
(100), (001), (010) ou (1$\bar{1}$0)	n (glissement oblique)	— • — • — •		(a+b)/2 ou (b+c)/2 ou (a+c)/2 ou (a+b+c)/2 (quadra. ou cubique)
(001), (100), (010) ou (1$\bar{1}$0)	d (miroir diamant)	→• — • — ←• — • —		(a ± b)/4, (b ±c)/4 ou (a ±c)/4 ou (a ±b± c)/4 (quad. ou cubique)

2- Les groupes d'espace

Le groupe d'espace d'un cristal est une expression de la totalité des symétries de la structure cristalline. On distingue 230 groupes d'espace. Ils sont obtenus en combinant les 32 groupes ponctuels avec les différents types de maille (P, I, A, B, C, F).

a- Conventions de notation des groupes d'espace

Un groupe d'espace s'écrit de la façon suivante : ***X xxx***

Où *X* (une lettre) représente le réseau de Bravais (mode) du cristal, et *xxx* (un groupe de trois lettres ou chiffres) est un groupe ponctuel de symétrie, il représente les différents éléments de symétrie existants selon leur directions..
- Si chiffre, axe de rotation parallèle à l'axe (a, b ou c)
- Si lettre, miroir perpendiculaire à l'axe (a, b ou c)

Exemple : $P2_1$, C222, Pmmm,…

Remarque : On dérive le symbole de la classe cristalline du symbole du groupe d'espace, en supprimant la translation, qui veut dire qu'un axe hélicoïdal devient un axe direct, et un plan de glissement devient un miroir.

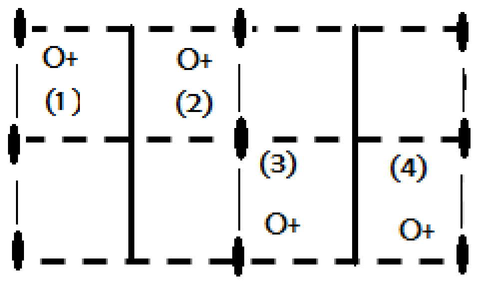
Exemple : $P4_12_12 \rightarrow 422$, $P6_1 \rightarrow 6$, Pmna → mmm

b- **Conventions de représentation des groupes d'espace**

La représentation d'un groupe d'espace s'effectue par une projection cotée de la maille. La projection se fait selon l'axe c avec l'axe b horizontal. On représente :
a- La position et l'orientation des éléments de symétrie de la maille.
b- L'ensemble des positions équivalentes générées à partir d'une position générale, et on donne les coordonnées des points équivalents : nombre de points figurant à l'intérieur du diagramme.

Exemple 1 : la projection côté du groupe spatial P2/b
Le mode P, 2/b⇛ GP (groupe ponctuel): 2/m ⇛ système monoclinique

L'axe 2// $\vec{c}$
Le plan de glissement b ⊥ $\vec{c}$



Les positions équivalentes générales (PEG) sont:
1) x y z
2) x ½-y z
3) –x ½+y z
4) –x -y z

Exemple 2 : la projection côté du groupe spatial Pmm2

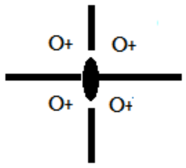
Le mode P, mm2 ⇛ GP: mm2 ⇛ système orthorhombique

m $\perp \vec{a}$

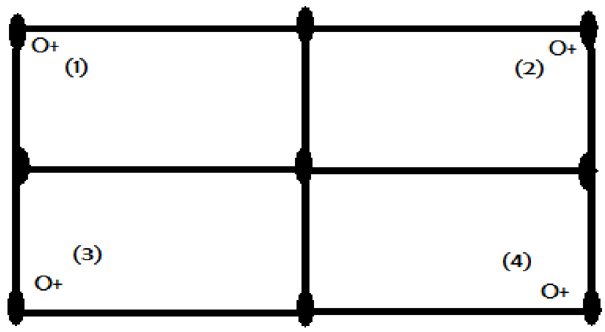
m $\perp \vec{b}$

2// $\vec{c}$

Le motif :



La projection sur le plan (001)



Les positions équivalentes générales sont:

(1) x y z, (2) x -y z, (3) - x y z, (4) - x -y z.