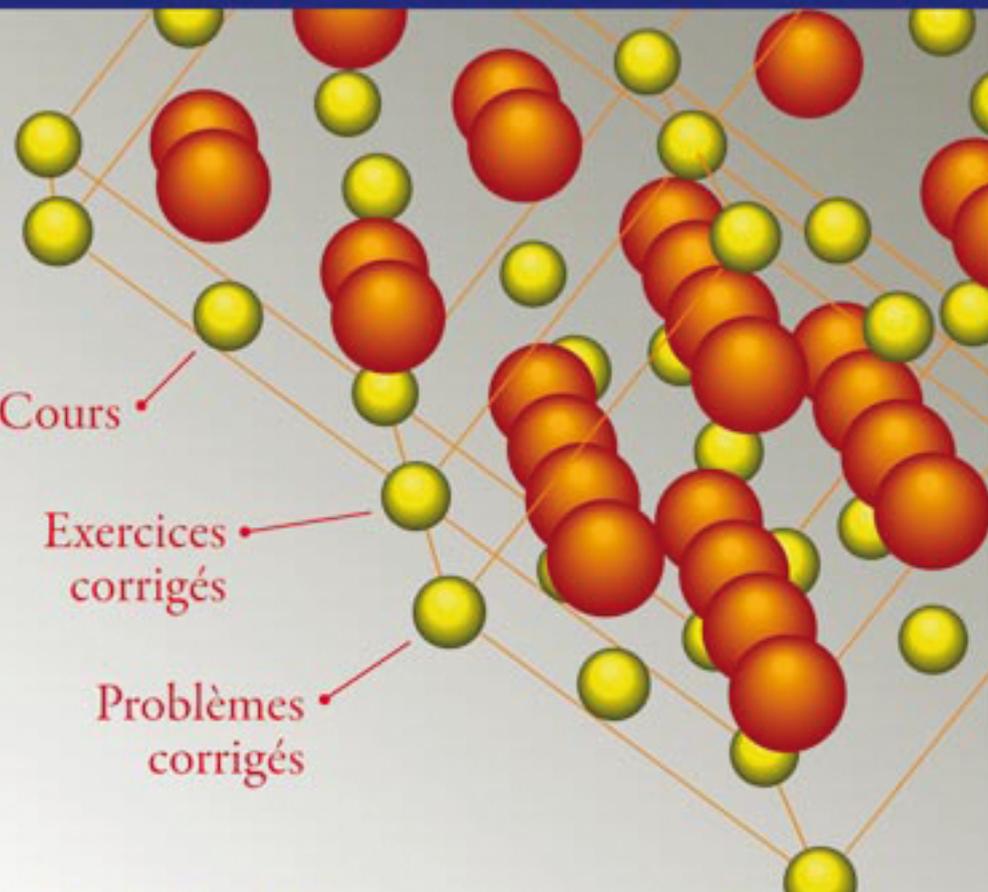


Licence 3 • Master • Écoles d'ingénieurs

Préparations au CAPES et à l'agrégation



Cours

Exercices
corrigés

Problèmes
corrigés

Cristallographie géométrique

Nadine Millot • Jean-Claude Nièpce

TEC
& DOC

Lavoisier

Réseaux cristallins et symétrie d'orientation dans les cristaux

1. Définitions utiles dans le réseau cristallin

1.1. Réseau cristallin

Définition du réseau cristallin d'un cristal

Le réseau cristallin d'un cristal est un être purement géométrique. Il est constitué de points de l'espace à trois dimensions, appelés nœuds du réseau, et obtenus à partir d'un nœud origine arbitraire en lui appliquant l'ensemble des translations \vec{T} caractéristiques du cristal. Les translations \vec{T} sont alors appelées translations de réseau.

Dans le réseau cristallin, un des nœuds est choisi arbitrairement comme origine et le repère \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} défini pour le cristal est conservé pour le réseau. Ainsi, chacun des nœuds du réseau est défini par chacune des translations de réseau $\vec{T} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} = \vec{T}_{uvw}$ avec u , v , w entiers relatifs quelconques qui sont les *coordonnées du nœud* dans le réseau.

1.2. Rangées cristallines

Toute droite passant par deux nœuds du réseau est appelée rangée cristalline (figure 2.1).

Le réseau étant *a priori* supposé infini, il y a une infinité de nœuds régulièrement espacés sur une même rangée.

Tous les autres nœuds du réseau peuvent être décrits par des rangées parallèles à la première rangée considérée. Le faisceau de rangées ainsi considéré est appelé *une famille de rangées cristallines*.

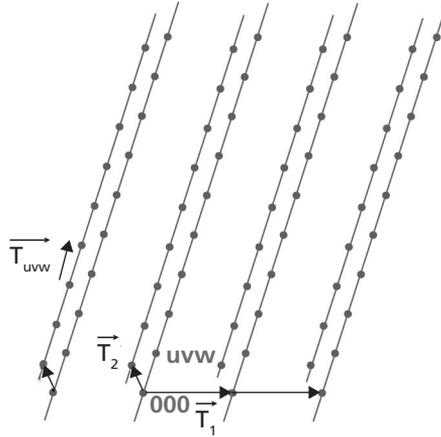


Figure 2.1. Famille de rangées $[uvw]$ d'un réseau cristallin.

- Une famille de rangées dans un réseau cristallin contient donc tous les nœuds du réseau.
- Il y a une infinité de manières de regrouper les nœuds en famille de rangées. Il y a donc une infinité de familles de rangées dans un réseau cristallin.

► **Remarque**

Au sein d'une même famille de rangées, les rangées sont parallèles entre elles, la période d'espacement des nœuds sur les rangées est la même pour toutes les rangées de la même famille. En revanche, les rangées de la famille ne présentent pas la même équidistance selon les différentes directions ($\vec{T}_1 \neq \vec{T}_2$, figure 2.1).

Indices caractéristiques d'une famille de rangées :

Une des rangées de la famille considérée passe nécessairement par le nœud choisi comme origine : $0, 0, 0$. Sur cette rangée, on considère le premier nœud à partir de l'origine. Il est repéré par la translation \vec{T}_{uvw} et donc par ses coordonnées u, v, w . Toutefois, cette translation \vec{T}_{uvw} est caractéristique de toute la famille de rangées puisqu'elle donne la direction de toutes les rangées de la famille et la période de la répartition des nœuds sur les rangées. Dans un réseau donné, la connaissance de u, v, w est donc suffisante pour distinguer une famille de rangées de toutes les autres familles.

Conventionnellement on désigne une famille de rangées par les trois entiers u, v, w disposés entre crochets $[u, v, w]$ et appelés indices de la famille de rangées. Ces indices u, v, w sont les coordonnées du premier nœud à partir de l'origine et se trouvant sur la rangée de la famille passant par l'origine du repère $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$. On parle alors de la famille de rangées $[u, v, w]$.

Quelques exemples simples de rangées cristallines sont représentés figure 2.2 : les rangées correspondant aux directions données par les vecteurs $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$, à savoir les rangées $[100], [010]$ et $[001]$, ainsi que les rangées $[110]$ et $[111]$.

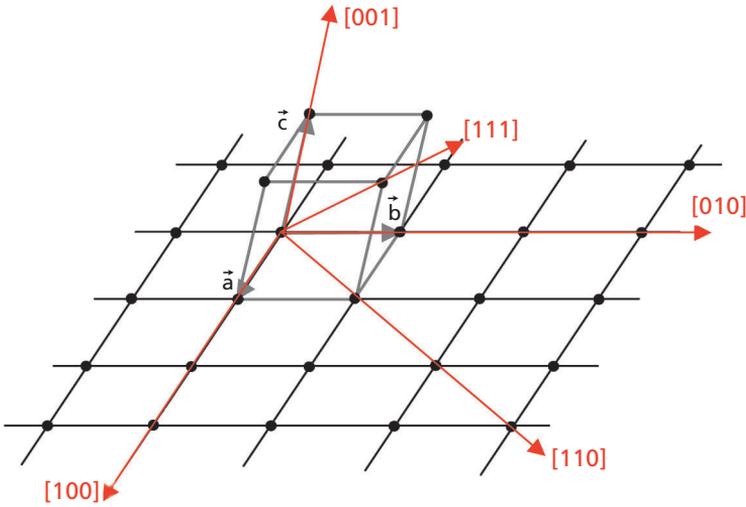


Figure 2.2. Exemples d'indices des principales familles de rangées.

1.3. Plans cristallins (ou plans réticulaires)

1.3.1. Définition et propriétés

Pour introduire cette importante notion de plans cristallins, il est nécessaire d'en donner une définition puis les principales propriétés.

Trois nœuds non situés sur une même rangée définissent un *plan cristallin* (ou *plan réticulaire*).

Tous les autres nœuds du réseau peuvent être disposés dans des plans parallèles au précédent. En raison de la périodicité du réseau cristallin, dans une direction donnée, tous les plans parallèles sont équidistants. Cet ensemble de plans cristallins parallèles et équidistants est appelé *une famille de plans cristallins* (ou réticulaires).

- Un plan réticulaire contient une infinité de nœuds.
- La famille de plans réticulaires considérée contient tous les nœuds du réseau.
- Il y a une infinité de manières de regrouper les nœuds d'un réseau en familles de plans réticulaires.

1.3.2. Indices caractéristiques d'une famille de plans réticulaires

Une famille de plans réticulaires (parallèles et équidistants) découpe des segments égaux sur toute droite non parallèle aux plans de la famille. Dans les trois directions $[100]$, $[010]$ et $[001]$, il y a un nœud à l'origine O et un nœud à chacune des extrémités des trois vecteurs \vec{a} , \vec{b} et \vec{c} . Des plans de la

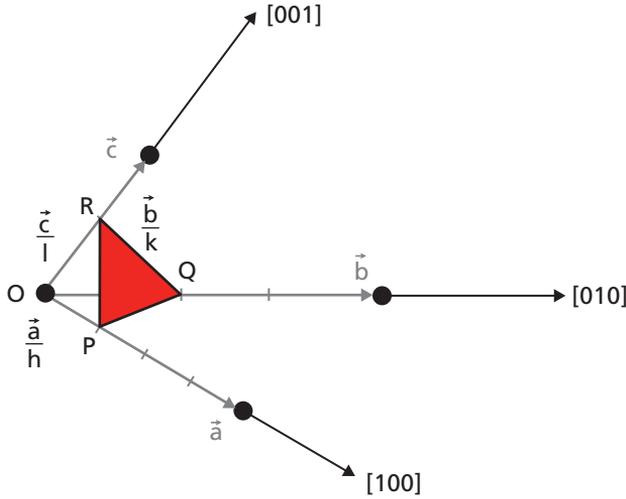


Figure 2.3. Définition des indices h , k et l de la famille de plans réticulaires (hkl) .

famille considérée passent donc par O ou par les extrémités des vecteurs \vec{a} , \vec{b} et \vec{c} . Toutefois (et en général) d'autres plans de la famille s'intercalent et découpent le vecteur \vec{a} en h parties égales, le vecteur \vec{b} en k parties égales et le vecteur \vec{c} en l parties égales. Le premier plan de la famille, à partir du plan passant par l'origine, passe par les points P, Q et R (figure 2.3) ; ils sont tels que :

$$\overrightarrow{OP} = \frac{\vec{a}}{h} \quad \overrightarrow{OQ} = \frac{\vec{b}}{k} \quad \text{et} \quad \overrightarrow{OR} = \frac{\vec{c}}{l}$$

Attention ! En général, P, Q et R ne sont pas des nœuds !

► Remarques

- Sur la figure 2.3, les trois vecteurs \overrightarrow{OP} , \overrightarrow{OQ} et \overrightarrow{OR} sont orientés dans le sens positif des axes [100], [010] et [001]. Toutefois, le premier plan rencontré depuis l'origine pourrait être tel que l'un ou l'autre de ces vecteurs soit orienté dans le sens négatif. On rendrait alors compte de cela en introduisant un signe négatif dans l'entier h , k ou l correspondant.

- Dans le repère Ox, Oy, Oz , le plan passant par P, Q et R (figure 2.3) peut être défini par une équation de la forme $px + qy + rz = 1$. Les axes Ox, Oy, Oz portent respectivement les vecteurs de base \vec{a}, \vec{b} et \vec{c} .

Ce plan coupe l'axe Ox en P ; P est tel que $y = z = 0$ et $px = 1$ soit $x = OP = 1/p$

On a de même $OQ = 1/q$ et $OR = 1/r$

En comparant avec les expressions de OP, OQ et OR écrites plus haut, il vient :

$$1/p = a/h, \quad 1/q = b/k \quad \text{et} \quad 1/r = c/l$$

$$\begin{aligned} \text{d'où } p &= h/a, \\ q &= k/b, \\ \text{et } r &= l/c \end{aligned}$$

Dans le repère Ox, Oy, Oz, l'équation du premier plan de la famille (hkl) à partir de l'origine est donc : $\frac{hx}{a} + \frac{ky}{b} + \frac{lz}{c} = 1$.

- Pour les différents systèmes cristallins, cette notation des familles de plans à l'aide des trois indices h, k et l (dits de Miller) permet en général de répondre à tous les besoins, y compris celui impliquant que les familles de plans équivalentes dans une opération de symétrie soient distinguées par des indices qui présentent des relations linéaires simples entre eux (*voir* exercice n° 18, p. 91). Toutefois, dans le cas d'un repère hexagonal, la notation à trois indices ne conduit pas à des relations simples entre les indices des familles de plans équivalentes dans les opérations de symétrie (figure 2.4).

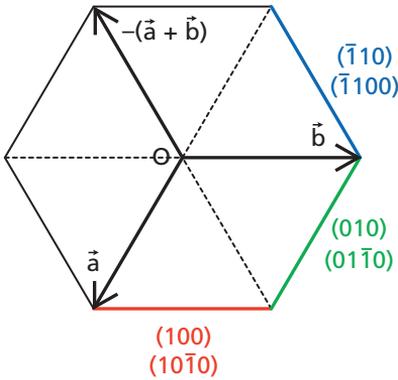


Figure 2.4. En notation à trois indices, la famille (100) devient la famille (010) puis la famille $(\bar{1}10)$ dans les rotations autour de l'axe 3 ou 6 ; en notation à quatre indices, la famille $(10\bar{1}0)$ devient la famille $(01\bar{1}0)$ puis la famille $(\bar{1}100)$ dans les rotations autour de l'axe 3 ou 6.

On a pris l'habitude d'introduire un quatrième indice i, combinaison linéaire des indices h et k et tel que $i = -(h+k)$, afin que ce soient des permutations simples des indices qui distinguent des familles de plans équivalentes dans les rotations autour de l'axe 3 ou 6. Une famille de plans se note (hkil) (indices de Miller-Bravais) et les familles de plans équivalentes dans les rotations autour de l'axe 3 ou 6 s'obtiennent alors par permutation des trois premiers indices h, k et i.

Cette notation à quatre indices est aussi habituellement justifiée par l'ajout d'un 4^e axe perpendiculaire au vecteur \vec{c} dans le système hexagonal, souvent appelé « 3^e axe a » (direction $-(\vec{a} + \vec{b})$ figure 2.4).

L'ensemble des 3 entiers relatifs h, k, l ainsi défini caractérise pleinement la famille de plans considérée. Ces trois entiers relatifs, disposés entre parenthèses, sont appelés les *indices de Miller* de la famille de plans. On parle alors de la famille de plans réticulaires (hkl).

Ces indices h, k, l sont (aux signes près) les nombres de segments égaux découpés par la famille de plans (hkl), respectivement sur les trois vecteurs de base \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} .

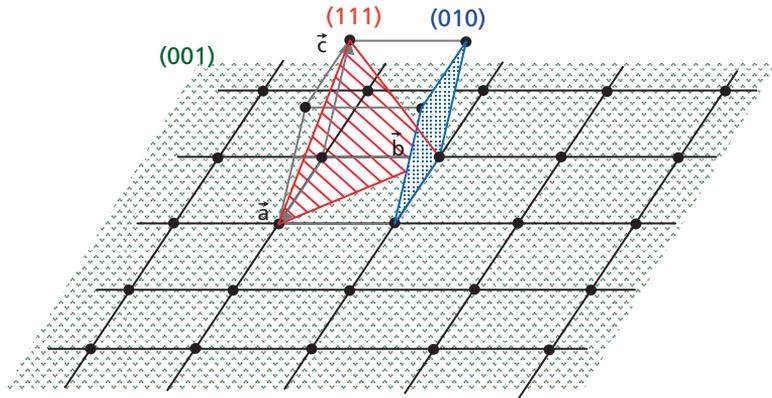


Figure 2.5. Exemples d'indices de Miller des principales familles de plans d'un réseau cristallin.

Quelques exemples simples de plans cristallins sont représentés figure 2.5 : les plans (001), (010) et (111). Dans ces deux derniers cas, c'est en fait l'intersection de ces plans avec une maille élémentaire qui est représentée.

1.3.3. Équidistance caractéristique d'une famille de plans (hkl)

L'équidistance entre les plans d'une même famille (hkl) est caractéristique de cette famille dans un réseau donné. Cette équidistance est appelée *distance inter-réticulaire* et est désignée par d_{hkl} (prononcé « d de hkl »).

► Remarque

d_{hkl} , dans un réseau cristallin, est une fonction des indices h, k, l et des trois vecteurs de base \vec{a} , \vec{b} et \vec{c} . Toutefois le calcul de l'expression de $d(h, k, l, \vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ n'est pas effectué directement dans le réseau du cristal, les calculs étant en général trop lourds. Une méthode beaucoup plus élégante consiste à travailler dans le « réseau réciproque » du réseau du cristal se situant en quelque sorte dans son espace image (voir annexe 3, p. 242). Ce type d'approche est en général traité dans un cours de diffraction des rayonnements par les cristaux. Les expressions donnant d_{hkl} dans les sept systèmes cristallins sont données tableau 2.1.

Tableau 2.1. Expressions de d_{hkl} dans les sept systèmes cristallins.

| Système | d_{hkl} |
|--------------|---|
| Monoclinique | $d_{hkl} = \frac{\sin \beta}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} + \frac{k^2 \cdot \sin^2 \beta}{b^2} - \frac{2 \cdot h \cdot l \cdot \cos \beta}{a \cdot c}}}$ |

Tableau 2.1. (suite).

| Système | d_{hkl} |
|----------------|--|
| Triclinique | $d_{hkl} = \frac{\frac{h}{a} \begin{vmatrix} \frac{h}{a} & \cos \gamma & \cos \beta \\ \frac{k}{b} & 1 & \cos \alpha \\ \frac{l}{c} & \cos \alpha & 1 \end{vmatrix} + \frac{k}{b} \begin{vmatrix} 1 & \frac{h}{a} & \cos \alpha \\ \cos \gamma & \frac{k}{b} & \cos \alpha \\ \cos \beta & \frac{l}{c} & 1 \end{vmatrix} + \frac{l}{c} \begin{vmatrix} 1 & \cos \gamma & \frac{h}{a} \\ \cos \gamma & 1 & \frac{k}{b} \\ \cos \beta & \cos \alpha & \frac{l}{c} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & \cos \gamma & \cos \beta \\ \cos \gamma & 1 & \cos \alpha \\ \cos \beta & \cos \alpha & 1 \end{vmatrix}}$ |
| Orthorhombique | $d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$ |
| Trigonal | $d_{hkl} = \frac{a \sqrt{(1 + 2 \cos^3 \alpha - 3 \cos^2 \alpha)}}{\sqrt{(h^2 + k^2 + l^2) \sin^2 \alpha + 2(hk + hl + kl)(\cos^2 \alpha - \cos \alpha)}}$ |
| Tétragonal | $d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{(h^2 + k^2)}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$ |
| Hexagonal | $d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{4(h^2 + k^2 + hk)}{3a^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$ |
| Cubique | $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$ |

1.4. Mailles et mailles élémentaires

1.4.1. Définitions

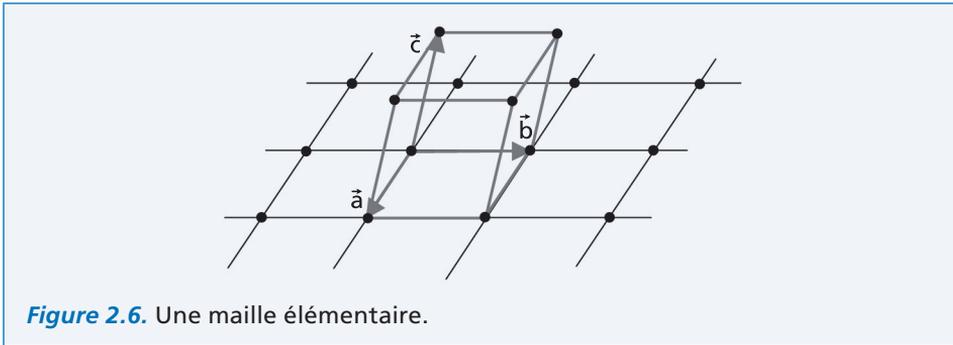
Il est nécessaire, dans un premier temps, de définir les termes suivants :

Maille :

Tout polyèdre (parallélépipède) construit sur trois translations de réseau \vec{T}_1 , \vec{T}_2 et \vec{T}_3 est appelé une *maille* du réseau.

Maille élémentaire :

Une maille est dite *élémentaire* si les translations \vec{T}_1 , \vec{T}_2 et \vec{T}_3 sont telles que la maille définie ne contient, en propre, qu'un seul nœud. Une telle maille n'a un nœud qu'en chacun de ses huit sommets. Chacun de ces huit nœuds appartient à chacune des huit mailles ayant ce nœud pour un de ses sommets. Conventionnellement, le nœud est alors attribué pour 1/8 à la maille considérée (figure 2.6).



1.4.2. Volume de la maille élémentaire construite sur $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$

$$v = (\vec{a} \wedge \vec{b}) \cdot \vec{c} = (\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$$

1.4.3. Volume d'une maille quelconque

$$V = (\vec{T}_1, \vec{T}_2, \vec{T}_3)$$

$$V = \begin{vmatrix} u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \\ u_3 & v_3 & w_3 \end{vmatrix} (\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}) = m \cdot v$$

u_i, v_i, w_i étant des entiers, m est nécessairement un entier. *Le volume d'une maille quelconque est nécessairement un multiple entier du volume de la maille élémentaire.*

L'entier m est appelé *multiplicité* de la maille considérée ; il est également égal au nombre de nœuds appartenant en propre à la maille considérée.

Corollaire

Toutes les mailles élémentaires d'un réseau cristallin ont même volume égal à v et sont telles que $m=1$.

2. ■ Opérations et opérateurs de symétrie d'orientation dans les cristaux et dans les réseaux

Comme cela a été montré dans la première partie, il existe dans les cristaux et dans leurs réseaux cristallins des éléments de symétrie d'orientation : *axes de rotation, plans de symétrie* également appelés *miroirs* et *centres de symétrie* appelés également *centres d'inversion*.

2.1. Formalismes utilisés pour représenter les éléments de symétrie d'orientation

Deux formalismes, héritages de l'histoire, sont utilisés :

- formalisme de Hermann-Mauguin (dit des cristallographes) ;
- le formalisme de Schoenflies (dit des spectroscopistes).

Les tableaux 2.2 et 2.3 (*voir* p. 26) donnent, pour les deux formalismes, les symboles utilisés pour représenter les principaux éléments de symétrie d'orientation rencontrés dans les cristaux et dans les réseaux.

Tableau 2.2. Symboles utilisés pour représenter les principaux éléments de symétrie d'orientation rencontrés dans les cristaux et dans les réseaux cristallins selon les formalismes de Hermann-Mauguin (H.M.) et de Schoenflies.

| Éléments de symétrie d'orientation | Symbole Hermann-Mauguin | Symbole Schoenflies |
|--|-------------------------|---------------------|
| Axe de rotation d'ordre n $n = 1, 2, 3, 4$ ou 6 | n | C_n |
| Axe inverse d'ordre n $n = 3, 4$ ou 6 | \bar{n} | S_n |
| Miroir horizontal (\perp à l'axe principal) | $\frac{1}{m}$ | σ_h |
| Miroir vertical ($//$ à l'axe principal) | m | σ_v |
| Centre d'inversion | $\bar{1}$ | i |

2.2. Représentation des opérations de symétrie d'orientation à l'aide d'opérateurs matriciels

Deux repères peuvent être utilisés :

- le repère des vecteurs de base \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} dans lequel l'opérateur sera noté $[A]$;
- un repère orthonormé \vec{i} , \vec{j} , \vec{k} dans lequel l'opérateur représentant la même opération sera désigné par $[R]$.

Propriété 1

Le réseau cristallin doit demeurer invariant dans une opération de symétrie d'orientation (de même pour un cristal infini). Il en résulte que toute translation \vec{T} devient une translation \vec{T}' telle que :

$$\vec{T}' = [A]\vec{T} = [R]\vec{T} \text{ avec } |\vec{T}'| = |\vec{T}|$$

Corollaire à la propriété 1

$\det [A] = \det [R] = \pm 1$

Les opérateurs $[A]$ et $[R]$ sont donc des matrices orthogonales.

► **Remarques**

- Si $\det [A]$ ou $\det [R] = + 1$, il s'agit d'une **rotation propre** ou **directe** (axe de rotation d'ordre $n = 2, 3, 4, 6$ ou identité).
- Si $\det [A]$ ou $\det [R] = - 1$, il s'agit d'une **rotation impropre** ou **indirecte** (axe inverse de rotation $\bar{2}, \bar{3}, 4$ ou $\bar{6}$, miroir ou centre d'inversion).

2.2.1. Écriture des matrices $[A]$ dans le repère des vecteurs de base $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$

Si $\vec{T} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$ et $\vec{T}' = u'\vec{a} + v'\vec{b} + w'\vec{c}$
 et comme $\vec{T}' = [A]\vec{T}$

$u' = A_{11} u + A_{12} v + A_{13} w$

$v' = A_{21} u + A_{22} v + A_{23} w$

$w' = A_{31} u + A_{32} v + A_{33} w$

d'où $[A] = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{bmatrix}$

Propriété 2

Comme u, v, w et u', v', w' sont des entiers dans le repère $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ alors A_{ij} sont des entiers.

Toute opération de symétrie d'orientation, dans un réseau cristallin ou dans un cristal, peut donc être représentée, dans le repère des vecteurs de base $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ par une matrice carrée « trois – trois », orthogonale, à coefficients entiers.

2.2.2. Écriture des matrices $[R]$ dans un repère orthonormé $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$

On a encore $\vec{T}' = [R]\vec{T}$

Dans $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ $\vec{T} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k}$

et $\vec{T}' = x'\vec{i} + y'\vec{j} + z'\vec{k}$

avec $x' = R_{11} x + R_{12} y + R_{13} z$

$y' = R_{21} x + R_{22} y + R_{23} z$

$z' = R_{31} x + R_{32} y + R_{33} z$

d'où

$$[R] = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{bmatrix}$$

2.2.3. Précision sur la nature des coefficients R_{ij}

Pour cela on considère le transformé du repère $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ dans l'opération de symétrie représentée par la matrice $[R]$, il devient un pseudo-repère $\vec{i}', \vec{j}', \vec{k}'$ (figure 2.7).

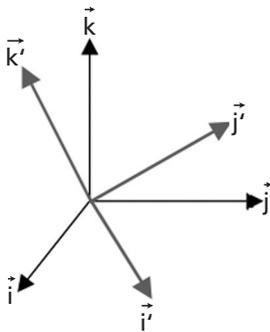


Figure 2.7. Transformation du repère $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ en $\vec{i}', \vec{j}', \vec{k}'$ par l'opération de symétrie R .

On montre que dans le repère $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ la matrice $[R]$ peut s'écrire :

$$[R] = \begin{bmatrix} \cos(\vec{i}', \vec{i}) & \cos(\vec{j}', \vec{i}) & \cos(\vec{k}', \vec{i}) \\ \cos(\vec{i}', \vec{j}) & \cos(\vec{j}', \vec{j}) & \cos(\vec{k}', \vec{j}) \\ \cos(\vec{i}', \vec{k}) & \cos(\vec{j}', \vec{k}) & \cos(\vec{k}', \vec{k}) \end{bmatrix}$$

C'est sous cette forme que la matrice $[R]$ est utile pour établir certaines propriétés (voir plus loin) et aussi pour raisonner en symétrie d'orientation dans le réseau cubique.

Il faut ajouter que la présente expression de $[R]$ est une expression générale pour un repère $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ choisi de façon quelconque par rapport à l'opération de symétrie. Nous allons voir que cette expression se simplifie énormément lorsque le repère est choisi judicieusement.

Donnons quelques exemples en appliquant à chaque fois la « recette » suivante :

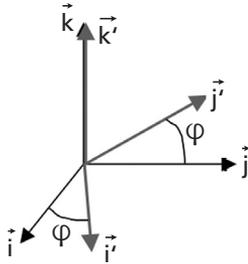
Pour écrire dans un repère orthonormé $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ l'opérateur matriciel représentant une opération de symétrie d'orientation, on considère les vecteurs unitaires $\vec{i}', \vec{j}', \vec{k}'$ respectivement transformés des vecteurs $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ dans l'opération de symétrie :

- la première colonne de la matrice $[R]$ est constituée des cosinus directeurs de \vec{i}' dans le repère $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$;
- la deuxième est constituée de ceux de \vec{j}' ;
- la troisième de ceux de \vec{k}' .

► Attention

Il ne s'agit pas d'une matrice de changement de repère ; le repère reste le même et la matrice $[R]$ représentant l'opération de symétrie est définie dans le repère $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$. Cette matrice transforme les composantes d'un vecteur \vec{T} en vecteur \vec{T}' par l'opération de symétrie. Les composantes de \vec{T}' , comme celles de \vec{T} , sont toutes définies dans le même repère $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$.

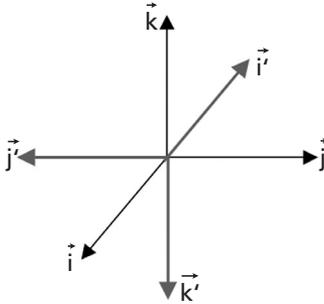
- Rotation d'angle φ autour de l'axe selon lequel est choisi \vec{k} (figure 2.8)



$$[R] = \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Figure 2.8. Transformation du repère $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ en $\vec{i}', \vec{j}', \vec{k}'$ par une rotation φ autour de l'axe \vec{k} .

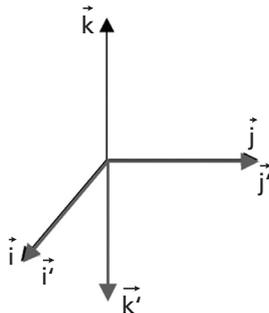
- Centre de symétrie choisi comme origine du repère $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ (figure 2.9)



$$[R] = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Figure 2.9. Transformation du repère $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ en $\vec{i}', \vec{j}', \vec{k}'$ par un centre de symétrie à l'origine du repère.

- Miroir dans le plan contenant (\vec{i}, \vec{j}) (figure 2.10)

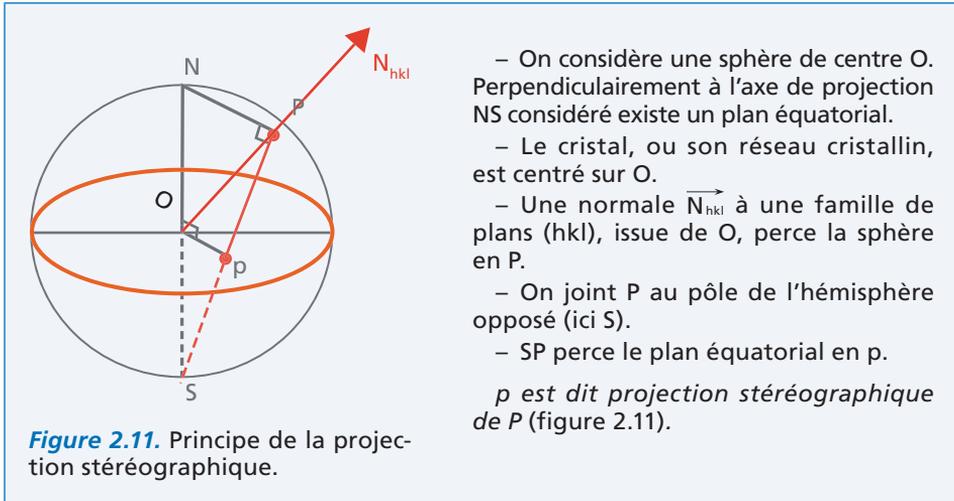


$$[R] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Figure 2.10. Transformation du repère $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ en $\vec{i}', \vec{j}', \vec{k}'$ par un miroir contenant (\vec{i}, \vec{j}) .

2.3. Représentation des éléments de symétrie d'orientation à l'aide de la projection stéréographique

2.3.1. Définition



► **Remarque**

Si l'axe de projection NS est axe de symétrie, la rotation autour de cet axe répète la famille de plans et donc les normales à ces familles et donc les projections !

Ce mode de représentation permet de rendre simplement compte d'une symétrie à condition que le plan de projection soit choisi judicieusement par rapport à l'élément de symétrie (figure 2.12).

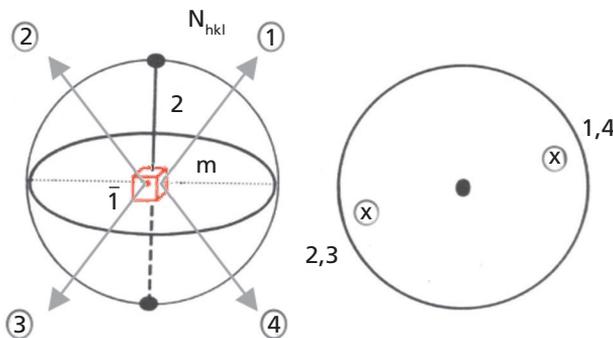


Figure 2.12. Exemple de projection stéréographique des éléments de symétrie d'un cristal : un axe d'ordre 2 et un miroir perpendiculaire à cet axe.

Règle

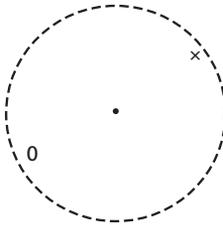
On convient de représenter par des \times les points p correspondant à une normale perçant l'hémisphère nord de la sphère et par des \circ les points p correspondant à une normale perçant la sphère dans l'hémisphère sud.

Seul le plan équatorial sera maintenant représenté sous la forme d'un cercle :

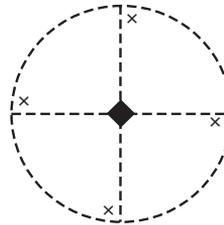
- en pointillés si le plan de projection n'est pas un miroir ;
- en trait continu dans le cas contraire.

2.3.2. Quelques exemples (figure 2.13)

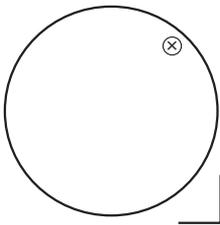
Centre de symétrie en O



Axe de symétrie (\perp feuille), ici d'ordre 4



Plan de symétrie (dans le plan de la feuille)



Plan de symétrie \perp feuille

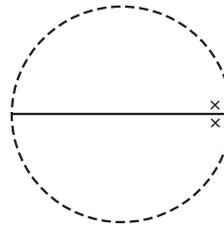
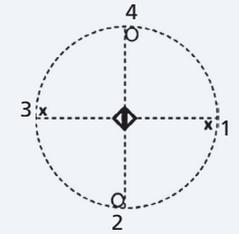
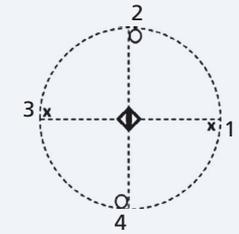
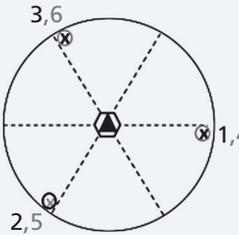
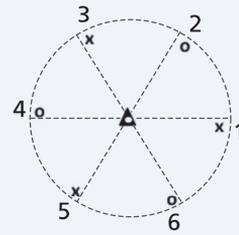


Figure 2.13. Quelques exemples de projections stéréographiques d'éléments de symétrie simples.

Tableau 2.3. Définition des axes inverses selon les formalismes d'Hermann-Mauguin (H.M.) et de Schoenflies. On constate que $S_4 = \bar{4}$ mais que $S_3 \neq \bar{3}$ et $S_6 \neq \bar{6}$. Selon les définitions de \bar{n} et de S_n on a $S_3 = \bar{6}$ et $S_6 = \bar{3}$.

| Éléments de symétrie d'orientation | Selon la définition des cristallographes $\bar{n} = n \times \bar{1}$ | Selon la définition des spectroscopistes $S_n = C_n \times \sigma_h$ |
|------------------------------------|--|---|
| Axe inverse d'ordre 3 | | |

Tableau 2.3. (suite).

| Éléments de symétrie d'orientation | Selon la définition des cristallographes $\bar{n} = n \times \bar{1}$ | Selon la définition des spectroscopistes $S_n = C_n \times \sigma_h$ |
|------------------------------------|---|--|
| Axe inverse d'ordre 4 |  |  |
| Axe inverse d'ordre 6 |  |  |

Les diagonales en pointillés ne sont que des aides à la construction.
 La numérotation des positions est fournie par ordre croissant conformément à l'ordre dans lequel on les obtient à partir de la projection n° 1.

2.4. Notion de groupe de symétrie d'orientation

Découvrons cette notion sur un exemple.

Soit un cristal qui possède un axe d'ordre 4 et un miroir perpendiculaire à cet axe (figure 2.14).

- Représenter la symétrie d'orientation de ce cristal à l'aide d'une projection stéréographique en choisissant l'axe de projection suivant l'axe d'ordre 4.
- Dénombrer les opérations de symétrie d'orientation de ce cristal, en déduire le degré de symétrie de ce cristal.
- Identifier une à une toutes les opérations de symétrie d'orientation de ce cristal.
- Montrer que l'ensemble des opérations de symétrie d'orientation de ce cristal constitue un groupe.

On dénombre huit points dans la représentation ; ce qui signifie que huit opérations de symétrie d'orientation différentes ont été appliquées à la normale 1.

Il existe donc huit familles de plans équivalentes dans ce cristal, c'est-à-dire s'échangeant les unes des autres dans les différentes opérations de symétrie.

On dit que le *degré de symétrie d'orientation*, noté D° , est égal à 8.