I.1- Introduction

La symétrie est considérée comme l'un des fondements de la cristallographie et c'est pour cette raison qu'un petit rappel des notions de base sur la symétrie est primordial pour pouvoir cerner ; et par conséquent ; comprendre plus facilement les groupes d'espace qui décrivent les symétries des structures périodiques et dont la cristallographie a besoin.

I.2- La symétrie

Toute **opération** conditionnée par des règles définies ; causant le déplacement d'un point et/ou un ensemble de points par rapport à un élément géométrique est appelée **opération de symétrie**. Cet élément géométrique ; appelé aussi **opérateur** de symétrie ; peut-être un **point** appelé centre de symétrie ; un **plan** appelé plan de réflexion ou une **droite** appelée axe de symétrie.

I.3- Opération de symétrie

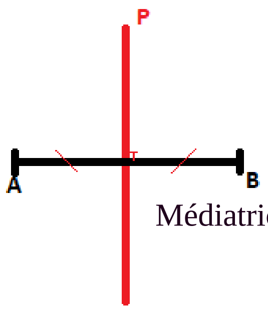
La symétrie est désignée par l'invariance de tout objet et/ ou structure par rapport à certaines opérations. Ces dernières sont donc des applications dans l'espace sur lui-même et qui permettent de **transformer** un objet en lui-même sans causer de **déformations**. En d'autres termes ; l'existence d'une symétrie est traduite par tout ce qui est **invariant** et structuré.

I.4- Eléments de symétrie

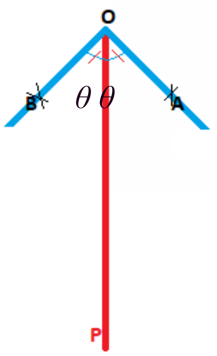
I.4.1- Axe de symétrie

La symétrie engendrée suite à l'action des **axes** de symétrie se présente sous différentes formes. Elle peut être médiatrice de segment ; bissectrices ou sous forme de triangle isocèle et/ou équilatérale…etc.

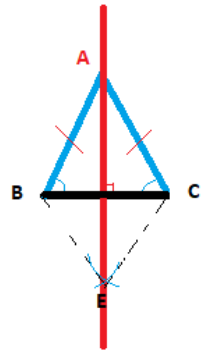
Les figures suivantes présentent les différentes formes issues des rotations axiales. Pour un segment [AB] ; la médiatrice de ce dernier est un axe considéré comme un élément de symétrie possédant un ordre p dont l'angle $2\pi/p$ est l'**angle de rotation** selon cet axe.



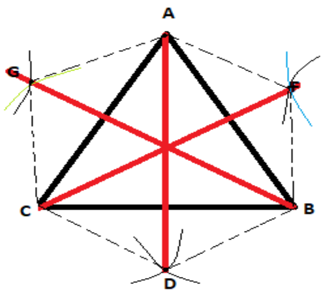
Médiatrice d'un segment



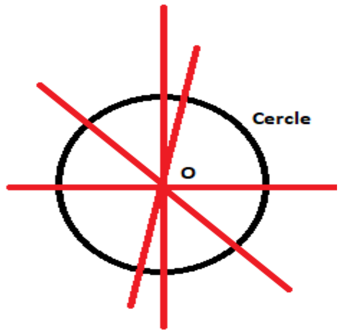
Bissectrice de l'angle 2θ est l'axe de symétrie



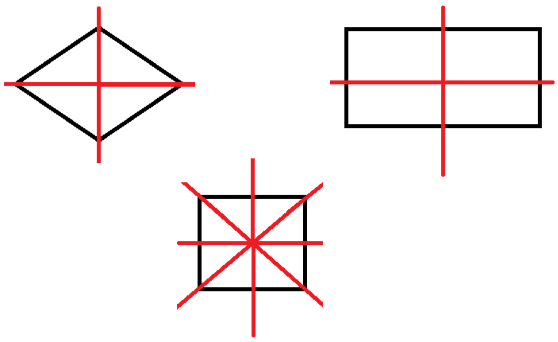
Triangle isocèle : Axe de symétrie est la médiatrice de sa base



Triangle équilatéral ; les médiatrices de ses côtés



Cercle : Infinité d'axes de symétrie définie par ses diamètres



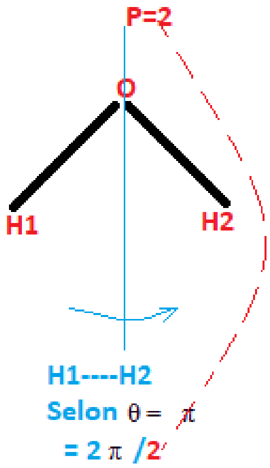
Losange : Axes de symétrie sont ses diagonales

Rectangle : Axes de symétrie sont les médiatrices de ses côtés.

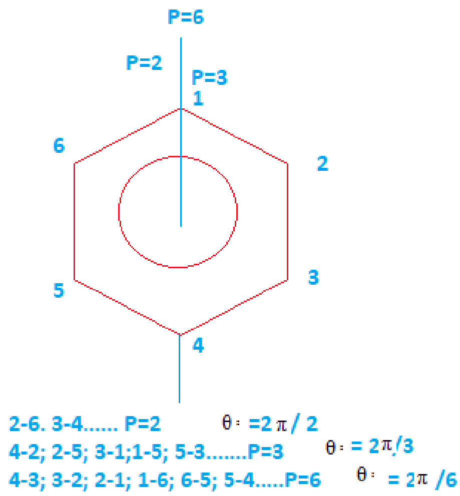
Carrée : 4 axes de symétrie (c'est à la fois un losange et un rectangle).

Quadrilatère

En cristallographie ; les axes de symétrie sont notés : **p** (ordre p). La symétrie rotationnelle s'effectue selon un angle $\boldsymbol{\theta = 2\pi/p}$. Pour la molécule H_2O par exemple; l'axe P=2 est un axe de symétrie qui transforme H_1 en H_2 avec une rotation $\theta = 2\pi/2$. Pour certaines molécules ; comme celle du benzène C_6H_6, il existe trois axes de symétrie rotationnels. L'axe dont l'ordre est le plus élevé est considéré comme l'axe principal et que par convention il est représenté verticalement**.**



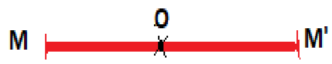
Molécule H_2O



Forme hexagonale du Benzène

I.4.2- Centre de symétrie

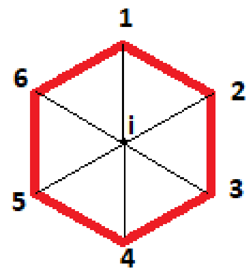
Cet opérateur ; appelé aussi le **centre d'inversion (i)** ; transforme le point M en M' de telle manière ;



$$\overrightarrow{OM} = -\overrightarrow{OM'}$$

Pour une forme hexagonale (Exp ; la molécule de l'hexane) ;

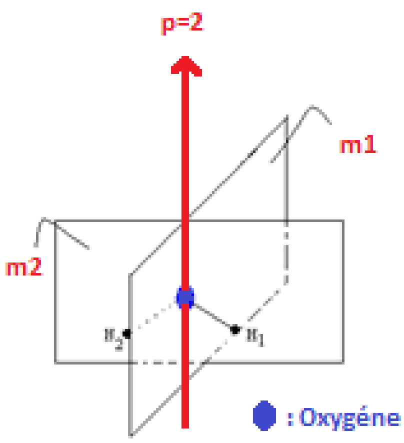
il existe un centre de symétrie (i) comme le montre la figure suivante :



1-i-4; 2-i-5; 3-i-6

I.4.3- Plan de Symétrie

Ce type de symétrie représente la **réflexion** d'une image selon un plan **σ** perpendiculaire à **l'axe principal**; en d'autre termes; il s'agit d'une symétrie **plane**. En cristallographie ; un plan de symétrie est noté **m**. La molécule d'eau déjà évoquée ; présente deux plans de symétrie **m1** et **m2** perpendiculaire à l'axe princi

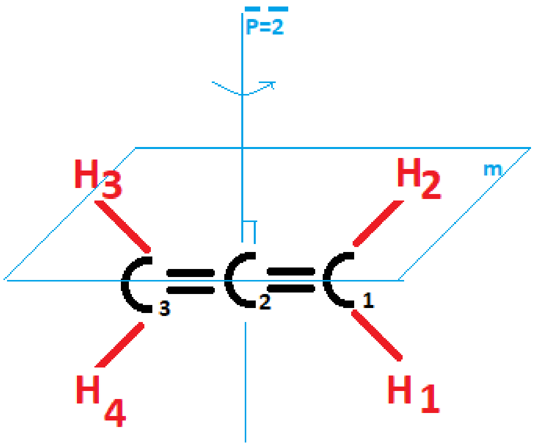


I.4.4- Axes de symétrie impropre

Un axe de symétrie dit : **impropre** ; est déterminé par la combinaison de deux éléments de symétrie ; à savoir :

- Axe de rotation P.
- Inversion (i).

En cristallographie ; l'axe impropre noté $\overline{P}$; appelé aussi axe **indirect** ; définit la combinaison d'un axe de symétrie **P** suivie par une inversion par rapport à un centre de symétrie **(i)**. Pour la molécule C_3H_4 par exemple; les opérateurs de symétrie existant ainsi que leurs combinaisons sont : représentés dans la figure qui suit :

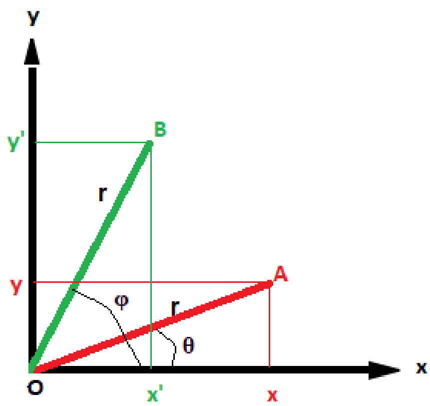


Un axe impropre $\overline{P} = \overline{2} \perp$ plan de réflexion **m** .

Centre d'inversion **(i)** est le carbone **C_2**

I.5- Matrice de rotation

La figure qui suit montre une rotation d'un angle **θ** autour du point **O** et qui transforme le point **A** en **B**. En notant que : **OA** = **OB** = **r**.



on a :

$$\begin{cases} x = r\cos\varphi \\ y = r\sin\varphi \end{cases}$$

En exécutant l'opération de rotation de **θ** ;

x devient x’ et y devient y’ ;

$$\begin{cases} x' = r\cos(\theta+\varphi) \\ y' = r\sin(\theta+\varphi) \end{cases}$$

$$\rightarrow \begin{cases} x' = \mathbf{r}(\cos\theta.\cos\varphi - \sin\theta.\sin\varphi) \\ y' = \mathbf{r}(\sin\theta.\cos\varphi + \sin\varphi.\cos\theta) \end{cases}$$

$$\rightarrow \begin{cases} x' = x\cos\theta - y\sin\theta \\ y' = x\sin\theta + y\cos\theta \end{cases}$$

d’où la forme matricielle de cette expression s’écrit comme suit :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Pour une rotation dans l’espace (3 dimensions) ; l’axe Oz perpendiculaire à Ox et Oy et pour une rotation de θ autour de cet axe ; la coordonnée **z** reste inchangée et la matrice de transformation s’écrit :

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

I-6- Groupe de symétrie

Un nombre d’opérations de symétrie correspond à un ensemble d’opérateurs qui constituent le groupe d’ordre **g**. il est définie comme étant l’ensemble des éléments qui satisfont aux axiomes de structure suivant :

- ***La loi de composition neutre :***

  La résultante de A et B (appartenant au groupe g) est l’élément C appartenant à ce même groupe :

  $$A * B = C \text{ ; avec } A \text{ ; } B \text{ et } C \text{ € } g$$

  Cette loi est associative ;

  $$A*B*C = (A*B) *C = A * (B*C)$$

- L’existence d’un élément neutre E :

$$E.A = A.E = A$$

- L'existence de la symétrie inverse :

La symétrie inverse doit exister pour tout élément appartenant au groupe g

$$A.\ A^{-1} = A^{-1}.A = A$$

- Le groupe g peut être abélien : A.B = B.A

Comme la combinaison des deux éléments A et B appartenant au groupe g engendre un troisième élément C appartenant au même groupe ; une table de multiplication peut être engendrée comme suit :

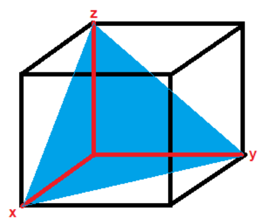
	E	**A**	**B**	**C**
E	E	A	B	C
A	A	E	C	B
B	B	C	E	A
C	C	B	A	E

Table de multiplication des éléments A et b et leur combinaison

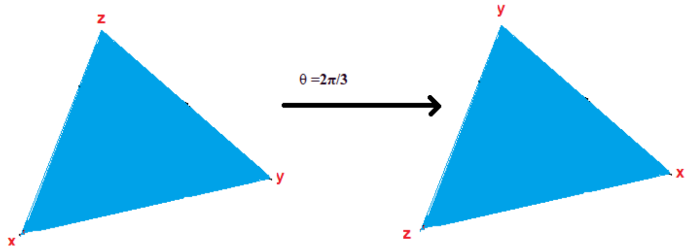
Exemples d'application

Exemple 1 : Quelle est la représentation matricielle d'une rotation de **θ =2π/3** dirigée suivant Oz dans un système trirectangle.

- ***Réponse***



Système trirectangle

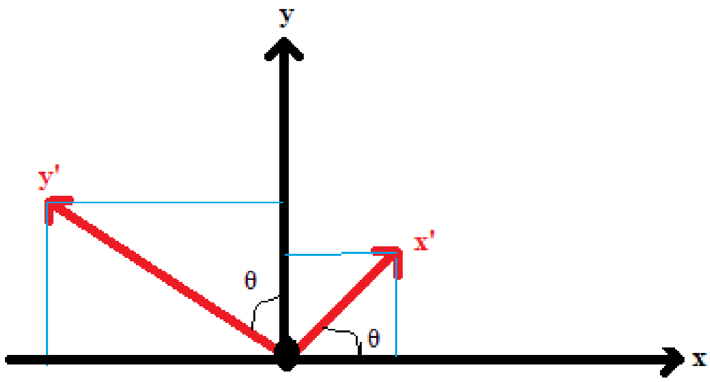


$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

Exemple2 :

Quelle est la représentation matricielle d'une rotation de $\theta = 2\pi/6$ dirigée suivant Oz dans un système trirectangle

- ***Réponse***



$$\begin{pmatrix} \mathbf{x'} \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \text{ ; avec } \theta = 2\pi/6$$

La matrice de transformation M : $\begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

Exemple 3 :

Soit deux rotations axiales de $2\pi/2$ dont une est dirigée selon Ox et l'autre selon Oy. Donnez la table de multiplication

- ***Réponse***

  Deux Rotations de $2\pi/2$ parallèles à Ox et Oy

  La transformation matricielle

$$M_{RA//Ox} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} ; M_{RA//oy} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

avec RA ; Rotation axiale

- La combinaison des deux opérateurs de symétrie (rotations axiales) engendre une transformation matricielle M ;

  $M = M_{RA//Ox} \cdot M_{RA//oy}$

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

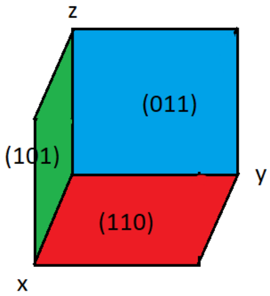
$$= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$; Transformation matricielle d'une rotation axiale de *2π/2 dirigée selon z*

d'où la table de multiplication est :

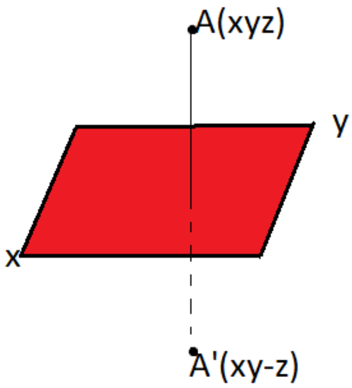
	E	**RAo$_x$**	**Rao$_y$**	**Rao$_z$**
E	E	RAo$_x$	RAo$_y$	RAo$_z$
RAo$_x$	RAo$_x$	E	RAo$_z$	RAo$_y$
RAo$_y$	Rao$_y$	Rao$_z$	E	RAo$_x$
RAo$_z$	Rao$_z$	RAo$_y$	RAo$_x$	E

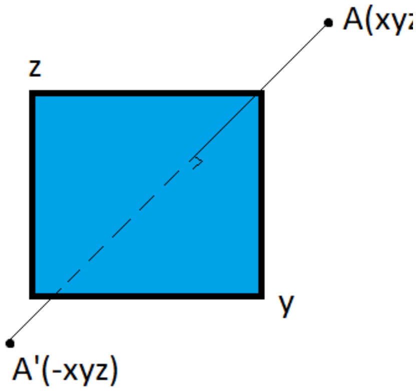
Exemple 4 :

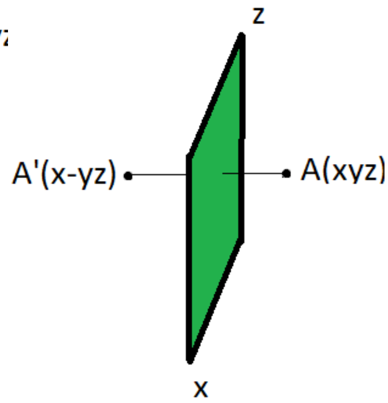
Quel est l'opérateur de symétrie engendré par la combinaison de trois plans de symétrie situées dans les trois plans (xy) ; (xz) et (yz) d'un système trirectangle.



(xy) = (110) **(yz) = (011)** **(xz) = (101)**







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

La combinaison des trois opérations de symétrie m

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ Entraine } \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Qui est la représentation matricielle d'une inversion i(000)