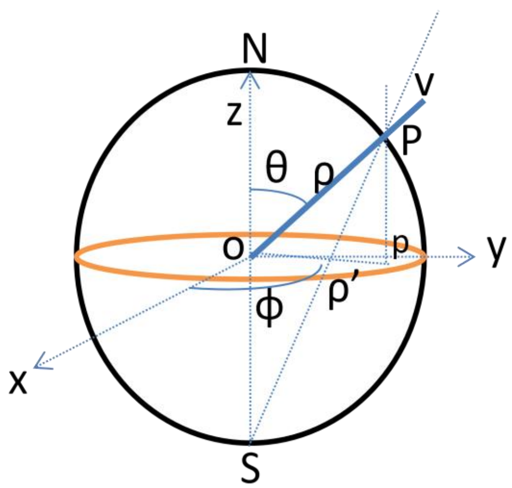
Les groupes ponctuels

Dans le précédent chapitre, nous avons introduit les groupes ponctuels du cristal qui gouvernent la symétrie des propriétés physiques macroscopiques des cristaux. Pour rappel, ces groupes sont constitués des opérations de symétrie du cristal moins toutes les translations. Ces opérations de symétrie sont les rotations et roto-inversion dons nous faisons passer les axes et les centres d'inversion par un point commun O. Nous avons aussi vu que les opérations de symétrie du groupe ponctuel d'un cristal forment un sous-groupe du groupe ponctuel des opérations de symétries du réseau cristallin. Ce dernier résultat servira de point de départ pour le dénombrement des groupes ponctuels ne contenant que des opérations de symétrie propres. En effet, comme seules les rotations d'ordre 1, 2, 3, 4 et 6 sont compatibles avec le réseau, les groupes ponctuels propres ne peuvent se construire qu'en combinant ces rotations. Pour construire les groupes impropres, nous montrerons que tous les groupes impropres contiennent un groupe propre d'ordre moitié. Pour représenter ces groupes, nous utiliserons la projection stéréographique qui permet de trouver les directions équivalentes à une direction quelconque donnée. Par une direction quelconque, nous entendons une direction qui n'est pas parallèle pas un axe de rotation ou de roto-inversion. A chaque opérations de symétrie, il y une direction équivalente et ainsi, il y autant de directions équivalente que d'opérations de symétrie. La projection stéréographique est une représentation dans un plan des directions équivalentes qui s'étendent dans l'espace tridimensionnel. C'est la représentation choisie en cristallographie.

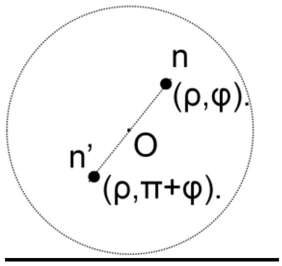
<u>Principe de la projection stéréographique et application à quelques opérations de symétrie</u>

Dans cette partie, nous décrirons le principe de la projection stéréographique et illustrerons son utilisation pour les différentes opérations de symétrie qui constitue le groupe ponctuel.



Soit le point O par lequel passe tous les axes de rotation et roto-inversion. Ce point est aussi un centre d'inversion pour les inversions. Considérons une sphère de centre O et de rayon ρ. et soit Ov une direction quelconque. La demi-droite Ov coupe la sphère au point P de coordonnées (ρ,θ,φ). La projection stéréographique de la direction Ov revient à projeter le P dans un plan. Le plan choisi est un plan passant par le centre O de la sphère et coupant ce dernier selon un cercle C. Ce plan de projection est le plan équatorial de la sphère (en orange dans la figure précédente). Le diamètre perpendiculaire à ce plan est noté NS. Ceci nous permet de définir les pôles nord (N) et sud (S). Considérons le segment SP. Il coupe le plan équatorial en p qui est la projection cherchée. Les coordonnées polaires de p dans le plan équatorial sont ρ et φ. En conséquent, la projection conserve l'angle φ. Nous avons choisi P dans l'hémisphère nord. Soit, maintenant Ov' qui coupe la sphère en un point P' dans l'hémisphère sud. Le segment SP' coupe le plan équatorial en un point p' qui est à l'extérieur du cercle C. Le point p' est d'autant plus loin que P' est proche de S. Ceci revient à utiliser un plan infini pour la projection stéréographique !!! Pour contourner ce problème, on effectue une inversion de pôle nord pour les directions dans l'hémisphère sud. Ceci permet de ramener le point p' dans le cercle équatorial. Ainsi, la projection stéréographique est obtenue en faisant une inversion de pôle nord pour les directions dans l'hémisphère sud et une inversion de pôle sud pour les directions dans l'hémisphère nord. Deux directions symétriques par rapport au plan équatorial ont une projection stéréographique identique. Pour distinguer ces deux directions, nous pouvons utiliser deux signes différents pour noter ces projections. Dans ce cours, nous utiliserons des croix (×) pour les directions dans l'hémisphère nord et des cercles (o) pour celles dans le sud.

<u>Exemples de projections pour quelques groupes ponctuels</u>

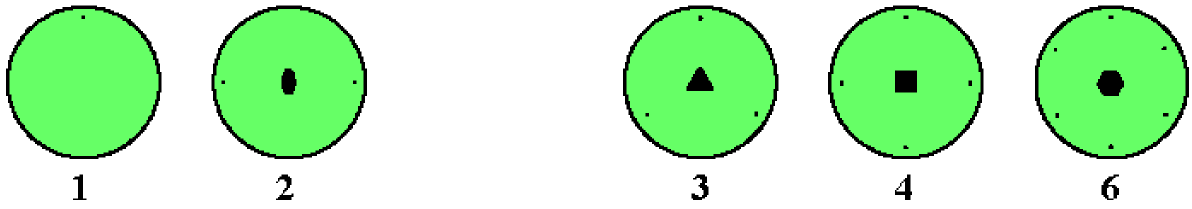


Groupe ponctuel 2

Considérons le groupe ponctuel 2. Pour ce groupe, l'élément de symétrie est un axe de rotation d'ordre 2. Les opérations associées sont les rotations de π et 2π (identité) par rapport à l'axe. Nous choisirons le plan de projection perpendiculaire à cet axe qui est confondu avec le diamètre NS. La projection de l'axe est ainsi un point en O. Considérons une direction quelconque Ov. Sa projection stéréographique est n de coordonnées polaires (ρ,φ). Une rotation de Ov autour de l'axe NS conserve l'angle θ et la distance ρ. La projection stéréographique des deux directions équivalentes sont obtenues par l'application des opérations de symétrie du groupe. Ces deux projections sont n pour l'opération identité et n' de coordonnées (ρ, φ + π) pour la rotation de π. Nous voyons que le nombre de directions équivalentes à une directions quelconque est égal au nombre d'opérations de symétrie constituant le groupe (ou ordre du groupe). Ceci n'est pas pour une direction particulière comme, par exemple, pour une direction suivant l'axe pour laquelle la projection stéréographique est un point en O. Voici les projections stéréographiques des quelques éléments de symétrie et des directions équivalentes.

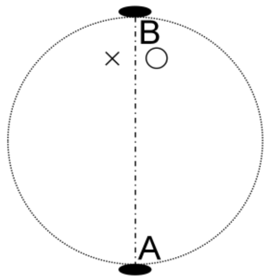
- **Axes de rotation d'ordre n perpendiculaire au plan de projection**

Comme sur l'exemple précédent, la projection des axes est en O. Les directions équivalentes sont dans le même hémisphère et donc, sont représentées par le même symbole.



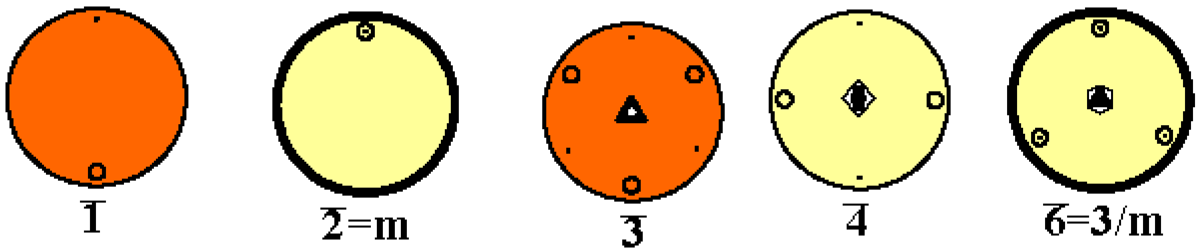
- **Axes de rotation d'ordre 2 parallèles au plan de projection**

La projection des axes sont deux points A et B qui sont les points d'intersection de l'axe avec le cercle équatorial. Les deux directions équivalentes sont situées dans des hémisphères différents et leurs projections sont symétriques par rapport au segment joignant les points A et B.



- **Axes de roto-inversion d'ordre n perpendiculaire au plan de projection**

Le centre de symétrie est confondu avec le point O.



Nous notons que

1. un axe d'ordre $\bar{1}$ est équivalent à un centre de symétrie

2. un axe d’ordre $\bar{2}$ est équivalent à un miroir perpendiculaire à l’axe 2 et passant par le centre de symétrie de la roto-inversion.

3. un axe d’ordre $\bar{3}$ est équivalent à un axe d’ordre 3 et un centre de symétrie en O.
4. un axe d’ordre $\bar{6}$ est équivalent à un axe d’ordre 3 confondu avec l’axe $\bar{6}$ et un miroir perpendiculaire à l’axe 3 passant par le centre de symétrie de la roto-inversion

Notons que l’ordre du groupe n’est égal à n sauf pour le groupe $\bar{3}$ dont l’ordre du groupe est 6.

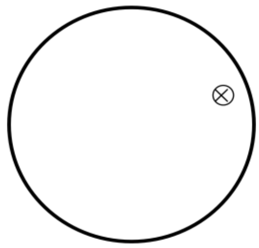
Le tableau suivant donne la représentation graphique des axes précédents quand ils sont perpendiculaires au plan de projection.

***n* = 360/θ**	**1**	**2**	**3**	**4**	**6**
Rotations	1	2	3	4	6
					
Roto-inversions	$\bar{1}$	$m \equiv \bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$	$\bar{6}$
					

source : http://fr.wikibooks.org/wiki/Cristallographie_g%C3%A9om%C3%A9trique/Sym%C3%A9trie_ponctuelle

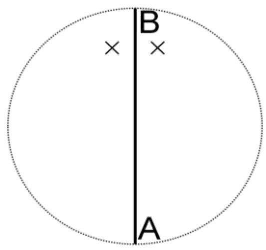
- **Miroir parallèle au plan de projection**

Il est confondu avec le plan équatorial et sa projection stéréographique est le cercle équatorial. Les deux directions équivalentes sont situées dans des hémisphères différents et se projettent au même point. Elles sont, en conséquent, représentées par de symboles de nature différentes (croix et cercle).



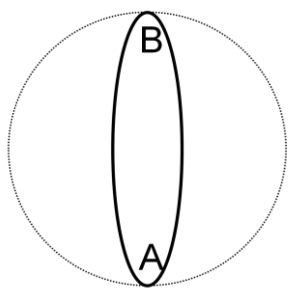
- **Miroir perpendiculaire au plan de projection**

Le miroir passe par NS et coupe le plan équatorial suivant la droite AB. Ainsi, sa projection stéréographique est la droite AB. Les directions équivalentes sont dans le même hémisphère et symétriques par rapport à AB. Elles sont, en conséquent, représentées par le même symbole (croix ou cercle).



- **Miroir d'orientation quelconque**

Le miroir coupe le plan équatorial suivant la droite AB. La projection stéréographique de ce miroir est deux arcs passant par A et B.



Nous distinguons deux types de groupes ponctuels

1. Les groupes propres ne contenant que des opérations de symétrie de rotation

2. Les groupes impropres qui contiennent au moins une opération impropre et une opération propre, l'identité

Dénombrement des groupes propres

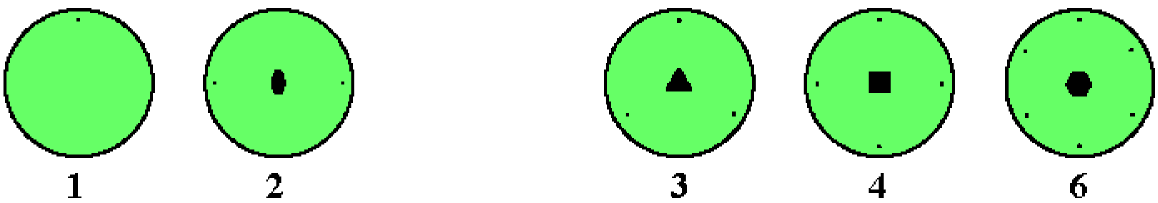
Les opérations de symétrie formant les groupes propres sont les rotations d'ordre n autour d'un axe d'ordre n = 1, 2, 3, 4 et 6 et leurs produits. Les groupes cycliques sont les groupes les plus simples car constitués d'opérations de symétries associées qu'à un seul de ces axes. Quels sont les groupes ponctuels générés par la combinaison de plusieurs axes de rotation ? Soient deux axes A_n et $A_{n'}$ d'ordre n et n' respectivement et passant un point commun O. Les rotations $2\pi/n$ et $2\pi/n'$ associées sont des opérations de symétrie du cristal contenant les deux axes. Pour que la composition de ces deux rotations soit aussi une opération de symétrie du cristal, on a les restrictions suivantes sur n et n' :

1. Pour n quelconque et n' est égal à 2. Les axes An et A_2 sont à 90° l'un de l'autre. Il existe n axes A_2 qui font un angle π/n entre eux. Les groupes correspondants sont appelés les groupes diédraux.

2. Pour n = 2 ou 4, n' peut aussi être égal à 3. L'angle entre les axes de rotation d'ordre 2 ou 4 et les axes d'ordre 3 est celui que fait la grande diagonale avec une arête d'un cube. Les groupes correspondants sont appelés les groupes cubiques.

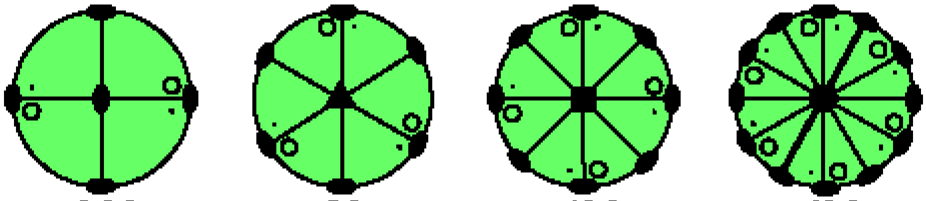
Groupes Cycliques

Ces groupes ne contiennent que les opérations de symétrie associées à un axe d'ordre n. Il existe 5 groupes cycliques notés n.



Groupes diédraux

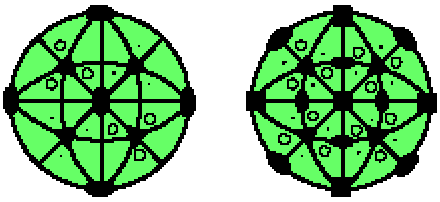
Ces groupes ne contiennent que les opérations de symétrie associées à un axe d'ordre n et de n axes d'ordre 2 perpendiculaires. Ces groupes sont notés n22 si n est pair et n2 si n est impair. Il y a 4 groupes diédraux.



222 32 422 622

Groupes cubiques propres

Ces groupes contiennent que les opérations de symétrie associées à un axe d'ordre 2 ou 4 et un axe d'ordre 3 faisant un angle que fait la grande diagonale d'un cube avec une arête.



23 432

Les groupes impropres

Si un groupe propre ne contient que des opérations de symétries propres, un groupe impropre contient au moins une opération impropre (roto-inversions) et une opération propre (l'identité). Tout groupe ponctuel G est donc une somme d'un sous-ensemble d'opérations propres et un sous-ensemble d'opération impropres. Pour un groupe propre, le sous-ensemble impropre est vide. Si les opérations propres et impropres sont notées Si et Ii respectivement, nous avons

$G = \{E,S_1,S_2,\ldots,S_n\} + \{I1,I2,\ldots\}$

Nous pouvons montrer *que les éléments propres forment un sous-groupe propre invariant d'ordre moitié* c.à.d. si A est une opération impropre, nous avons

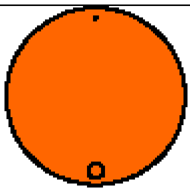
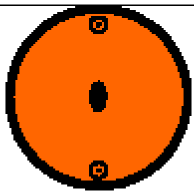
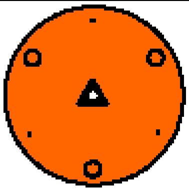
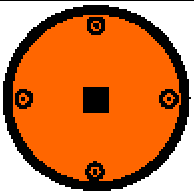
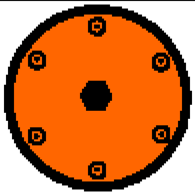
$G = \{ E,S_1,S_2,\ldots,S_n \} + A \{ E, S_1, S_2,\ldots, S_n \}$

Dénombrement des groupes impropres

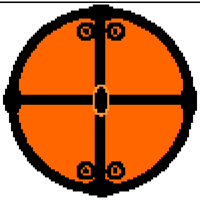
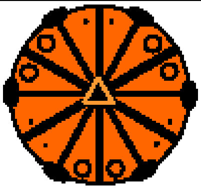
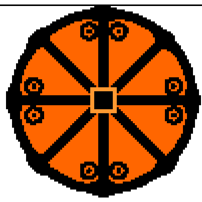
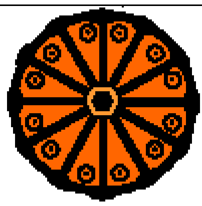
Groupes impropres contenant l'inversion

Pour les groupes contenant l'inversion, nous pouvons choisir A = I (inversion) dans l'expression précédente. Les groupes ponctuels résultants se déduisent des groupes ponctuels propres correspondants décrits précédemment.

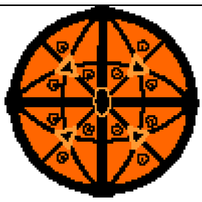
Groupes impropres déduits des groupes cycliques propres

 $\bar{1}$	 2/m	 $\bar{3}$	 4/m	 6/m
1 → 1'	2 → 2/m	3 → 3'	4 → 4/m	1 → 6/m

Groupes impropres déduits des groupes diédraux propres

 mmm	 $\bar{3}$m	 4/mmm	 6/mmm
222 → mmm	32 → 3'm	422 → 4/mmm	622 → 6/mmm

Groupes impropres déduits des groupes cubiques propres

 m$\bar{3}$	 m$\bar{3}$m
23 → m3'	432 → m3'm

Groupes ponctuels impropres ne contenant pas l'inversion

Ces groupes sont tel que

G = $\{E,S_1,S_2,\ldots,S_n\}$ + A$\{E,S_1,S_2,\ldots,S_n\}$ où A n'est pas une inversion. Ces groupes se déduisent des groupes propres énumérés précédemment comme suit. Soit un groupe propre

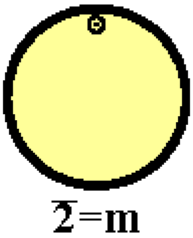
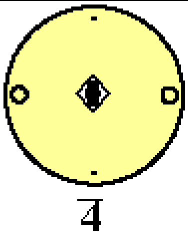
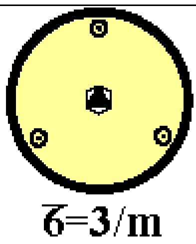
G_{2n} d'ordre 2n. On peut définir un sous-groupe propre d'ordre moitié G_n et l'ensemble complémentaire de G_n dans $G_{2n,}$ l'ensemble $\{K_i\}$. Le groupe impropre correspondant ne contenant pas l'inversion se déduisant de G_{2n} est

$Gi = G_n + I\{K_i\}$

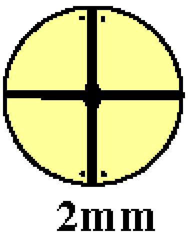
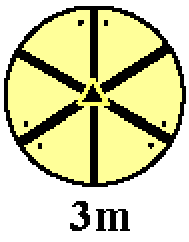
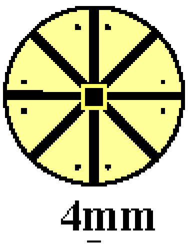
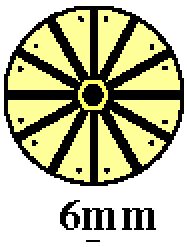
- Les groupes 2n admettent comme sous-groupe d'ordre moitié les groupes n
- Les groupes n22 admettent comme sous-groupe d'ordre moitié les groupes n
- Les groupes n22 où n est pair (et n = 2p) admettent aussi comme sous-groupe d'ordre moitié les groupes p22.
- Le groupe 432 admet le groupe 23 comme sous-groupe d'ordre moitié

On en déduit les 10 groupes ponctuels suivant

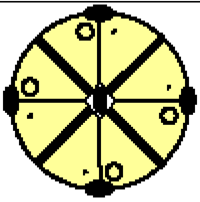
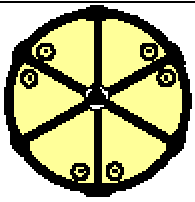
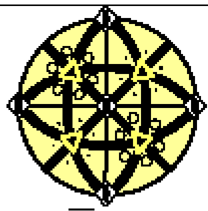
2n → n

		
2 → 1	4 → 2	6 → 3

n22 → n

			
222 → 2	32 → 3	422 → 4	622 → 6

(2p)22 → p22

 $\bar{4}2m$ ($\bar{4}m2$)	 $\bar{6}2m$ ($\bar{6}m2$)	 $\bar{4}3m$
422 → 222	622 → 322	432 → 23

Il existe 32 groupes ponctuels cristallographiques

- 11 groupes ponctuels propres
- 11 groupes ponctuels impropres contenant l'inversion
- 10 groupes ponctuels impropres ne contenant pas l'inversion

L'ensemble des cristaux avec un même groupe ponctuel forment une classe cristalline. Les classes cristallines ayant la même symétrie du réseau forment un système cristallin. Ainsi, on classe les 32 groupes ponctuels cristallographiques suivant les sept systèmes cristallins comme suit :

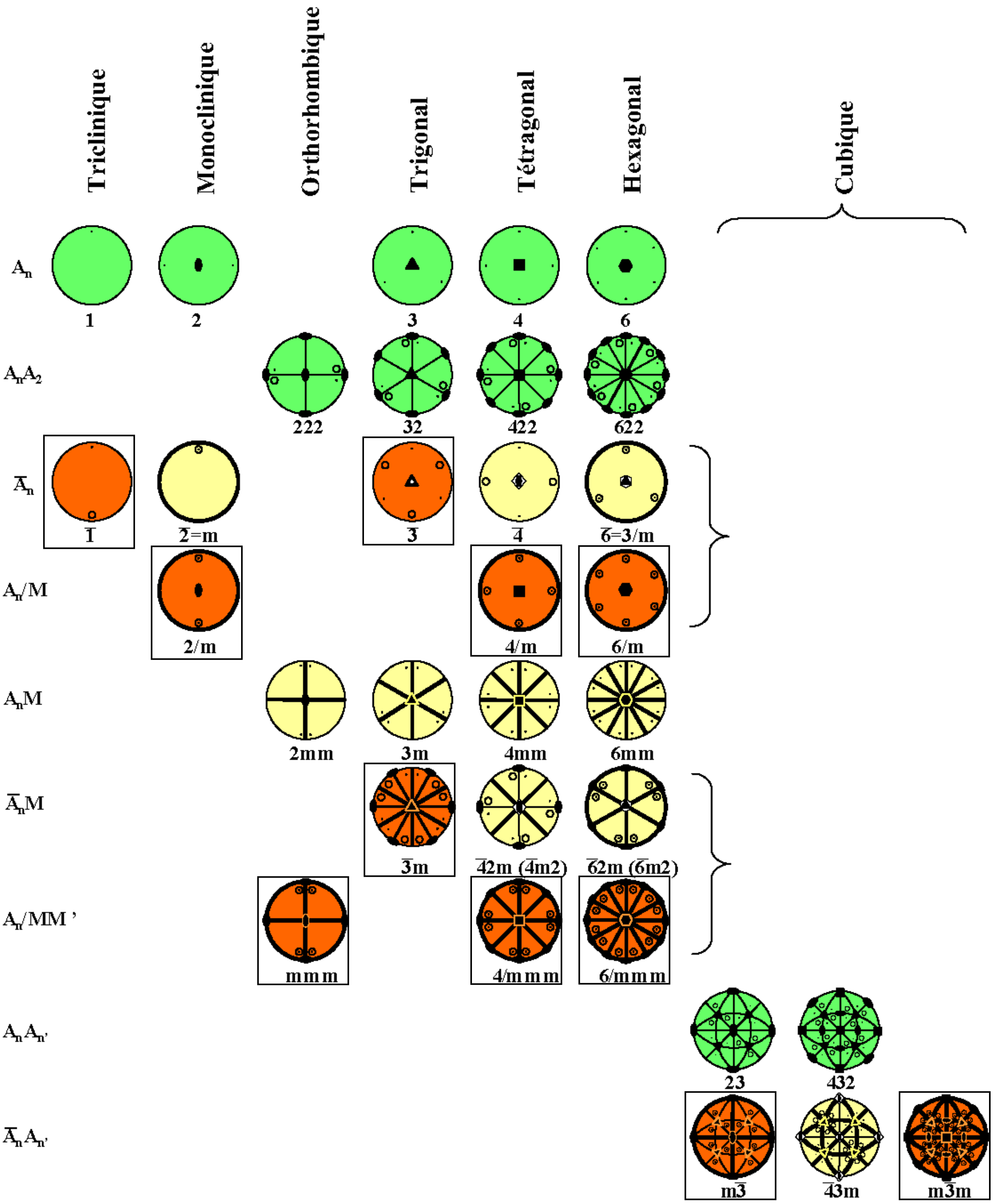


Tableau des groupes ponctuels en fonction des systèmes cristallins

- gris : groupes propres
- entouré : groupes impropres contenant l'inversion
- blanc : groupes impropres ne contenant pas l'inversion

Dans la notation internationale de Hermann-Mauguin des groupes ponctuels, chaque groupe est constitué de un à trois symboles correspondant à des éléments de symétrie. La position de chaque élément de symétrie dans la notation permet de déterminer sa direction en sachant que la direction d'un axe de rotation est celle de l'axe alors que pour un miroir, c'est la direction perpendiculaire au plan du miroir. Le tableau suivant donne, dans chaque système cristallin, les directions conventionnelles choisies pour assembler les éléments de symétries.

Système	**1er symbole**	**2ème symbole**	**3ème symbole**
Triclinique	1 ou 1'		
Monoclinique	**b**		
Orthorhombique	**a**	**b**	**c**
Rhomboédrique	**a** + **b** + **c** (axe 3)	**a - b** ou **b-c** ou **a -c**	
Quadratique	**c**	**a** ou **b**	**a** + **b** ou **a - b**
Hexagonal	**c**	**a** ou **b ou a** - **b**	**a** - **b** ou **a** + 2**b** ou **-2a - b**
Cubique	**a** ou **b o**u **c** (axes 2/4)	**a** + **b** + **c** ou **-a - b - c** ou **-a + b - c** ou **-a - b + c** (axes 3)	**a** + **b** ou **a - b ou b** + **c** ou **b - c** ou **a + c** ou **-a + c** (axes 2)

Convention de notation pour les groupes

Par exemple, pour les groupes cubiques, le premier élément de symétrie est suivant une arête du cube, le deuxième suivant la grande diagonale et le troisième, s'il existe, suivant une diagonale.