



III-1 INTRODUCTION

En cristallographie géométrique, le réseau reste invariant (transformation du réseau en lui-même et sans déformation) lors de certains déplacements, c'est-à-dire que les atomes peuvent être en coïncidence avec des atomes de même nature. Ces déplacements sont appelés les opérations de symétrie.

Les opérations de symétrie sont les transformations de l'espace qui transforment un objet en un homologue rigoureusement superposable à l'original ou superposable à l'image original dans un miroir. Dans une opération de symétrie les points, les droites et les plans de la figure qui ne changent pas sont appelés éléments de symétrie. Si on se limite aux symétries d'orientation, comportent : la translation, la rotation, l'inversion, la réflexion et l'inversion rotatoire. Une figure peut posséder à la fois plusieurs opérateurs de symétrie et l'ensemble de ces opérateurs qui laisse une image invariante s'appelle un groupe de symétrie. Il convient de différencier :

* Les figures finies, telles que les cristaux limités géométriquement par des faces planes. La symétrie sera la cause de la répartition de certaines faces du cristal.

* Les figures infinies, telles que la structure cristalline constituée par la répartition presque illimitée d'une figure finie, par trois transformations indépendantes déterminant le réseau.

III-2 OPERATIONS DE SYMETRIE

1- La translation

Dans cette opération de symétrie il n'y a aucun point fixe. Donc dans un réseau cristallin, les translations ne sont des opérations de symétrie que si le réseau est infini. Le vecteur de translation \vec{T} (voir le chapitre I) est une combinaison linéaire des vecteurs de base du réseau \vec{a}, \vec{b} et \vec{c} .

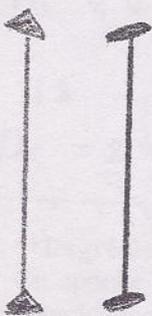
Pour cette opération de symétrie l'objet initial et l'objet final sont superposables.



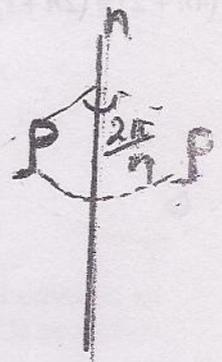
2- La rotation

La rotation laisse un ensemble de points invariants dans l'opération de symétrie. Elle est caractérisée par l'axe de rotation n (n nombre entier) et l'angle de rotation $\frac{2\pi}{n}$. On dit que l'axe de rotation est d'ordre n et on le note n ou C_n ou A_n ou X .

L'élément de symétrie est appelé **axe direct**. Après n opération de rotation, on trouve la situation initiale. Dans les cristaux, les valeurs possibles pour l'ordre de rotation n sont : 1, 2, 3, 4 et 6. Les représentations graphiques et les symboles des axes de symétrie sont représentés dans le tableau suivant :



Symbole de l'axe Direct (n)	Représentation graphique axe perpendiculaire au plan de dessin	Terminologie
1		identité
2		axe binaire
3		axe ternaire
4		axe quaternaire
6		axe sénaire



3- La réflexion

Une figure admet une réflexion lorsque une moitié de la figure s'obtient par l'image dans un plan de symétrie de l'autre moitié, le plan de symétrie est appelé miroir noté m . Pour la représentation graphique :

- Lorsque le miroir est perpendiculaire au plan de dessin.
- Lorsque le miroir est dans le plan de dessin.

4- L'inversion

L'inversion I ou symétrie de point est une opération de symétrie qui transforme un vecteur en son opposé et ne laisse qu'un point de l'espace invariant. Le point est le centre de symétrie. La représentation graphique est I ou c ou 1 .

Il faut remarquer qu'à la suite d'une inversion, il est impossible d'envisager une transformation continue de l'espace qui permet de faire coïncider l'objet initial et l'objet final (où la flèche de l'objet initial pointe vers l'avant alors que celle de l'objet final pointe vers l'arrière). L'objet initial et l'objet final ne sont pas superposables. De tels objets sont dits **énantiomorphes**.

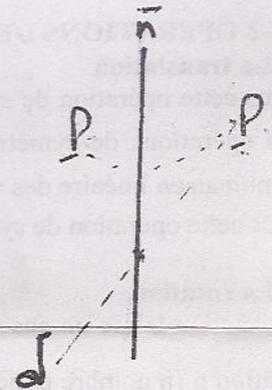
5- L'inversion rotatoire

Une rotation suivie d'une inversion par rapport à un point situé sur l'axe de rotation ; l'élément de symétrie est appelé **axe d'inversion**. Les deux opérations successives ne peuvent pas être dissociées.

Les objets initiaux et finaux sont là aussi **énantiomorphes**.

On note les axes d'inversion comme suit : \bar{C}_n ou \bar{I}_n ou \bar{n} ($\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$).

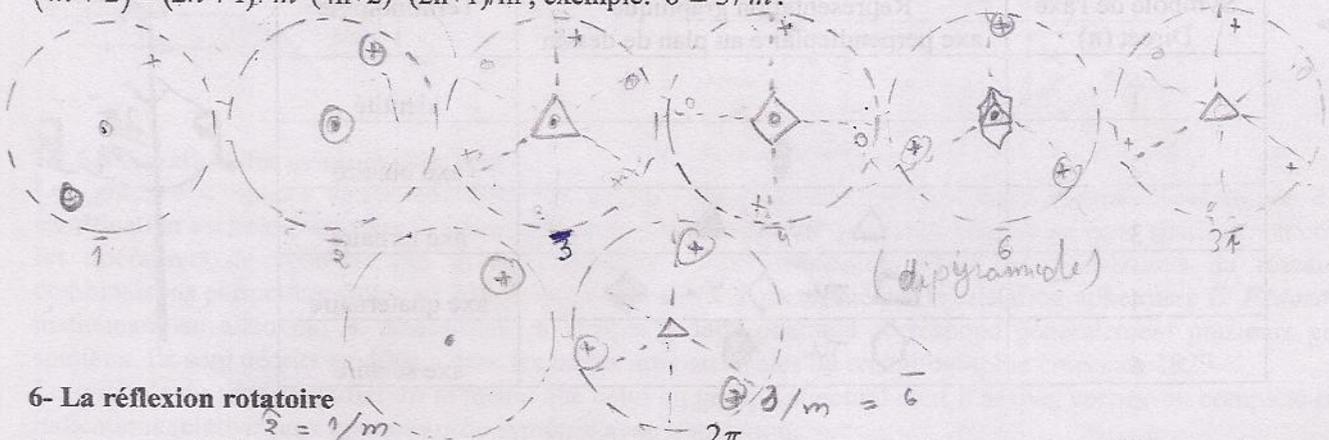
Symbole de l'axe d'inversion	Représentation graphique axe perpendiculaire au plan de dessin
1	
2	
3	
4	
6	



Remarque:

* Un axe d'inversion d'ordre impair est identique à un centre de symétrie et un axe direct de même ordre: $(2n+1) \equiv (2n+1)\bar{1}$, exemple: $\bar{3} \equiv 3\bar{1}$

* Un axe d'inversion d'ordre $(4n+2)$ est identique à un axe d'ordre moitié et à un miroir qui lui est perpendiculaire: $(4n+2) \equiv (2n+1)/m$ ($4n+2 = (2n+1)/m$), exemple: $\bar{6} \equiv 3/m$.



6- La réflexion rotatoire

C'est une opération consiste à faire une rotation de $\frac{2\pi}{n}$ suivie nécessairement d'une réflexion dans un plan perpendiculaire. L'élément de symétrie correspondant à cette opération d'ordre n . symbole : $1', 2', 3', 4', 6'$.

Où $1' \equiv \bar{2}, 2' \equiv c \equiv \bar{1}, 3' \equiv \bar{6}, 4' \equiv \bar{4}, 6' \equiv \bar{3}$.

7- La réflexion suivie d'une inversion

Pour un centre d'inversion contenu dans le plan d'un miroir. Cette opération est identique à un axe binaire perpendiculaire à un miroir et passant par le centre.

III-3 THEOREMES

1- Tous les éléments de symétrie définis se coupent au moins en un point, pour cette raison, les groupes qu'ils forment se dit groupes ponctuels.

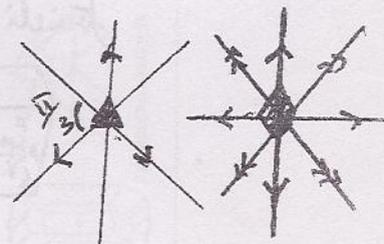
2- Si un axe d'ordre pair est perpendiculaire à un miroir, leur intersection est un centre de symétrie.

3- Lorsque on a un axe d'ordre n et un plan de symétrie, il existe n plans de symétrie forment entre eux les angles de $\frac{\pi}{n}$. Inversement, si n plans se coupent suivant une droite celle-ci est un axe d'ordre n et les plans forment entre

eux des angles de $\frac{\pi}{n}$. Il faut cependant envisager deux cas :

** **n impair** : on peut par des rotations de $\frac{2\pi}{n}$, amener les plans en coïncidence. Ils sont donc tous de même espèce mais leurs extrémités ne sont pas identiques. Ce sont des plans simples ou hétéropolaires.

** **n pair** : les rotations de $\frac{2\pi}{n}$ autour de l'axe n ne font coïncider les plans que de deux en deux. Il y a donc $n/2$ plans d'une espèce et $n/2$ plans d'une espèce différente. Par contre, les extrémités d'un même plan sont identiques. Ce sont des plans doubles ou homopolaires.



4- S'il existe un axe d'ordre supérieur à 2, tout axe d'ordre 2 doit nécessairement lui être perpendiculaire. En effet dans le cas contraire l'axe binaire engendrerait un second axe d'ordre supérieur à 2.

5- Si un axe d'ordre 2 est perpendiculaire à un axe d'ordre n , il existe n axes d'ordre 2 forment entre eux des angles de $\frac{\pi}{n}$ et tous disposés dans les plans perpendiculaire à l'axe d'ordre n .

$1m$ $D_S = 2$	$1mm2$ $D_S = 4$	$3m$ $D_S = 6$	$4mm$ $D_S = 8$	$6mm$ $D_S = 12$	Degré de symétrie (D_S):
12 $D_S = 2$	322 $D_S = 4$	32 $D_S = 2$	422 $D_S = 8$	622 $D_S = 12$	

**Degré de symétrie

On appelle degré de symétrie d'un groupe de symétrie, le nombre d'opération qui ramène le milieu cristallin en coïncidence avec lui-même, autrement dit : c'est le nombre des directions équivalentes données par la projection stéréographique.

III-4 LES 32 CLASSES DE SYMETRIE (LES GROUPES PONCTUELS)

Une classe de symétrie est définie par un groupe ponctuel qui est la combinaison d'opérations qui fait intervenir tous les éléments de symétrie équivalentes. La notation des classes est très différente suivant des auteurs; nous utilisons celle de HERMANN et MAUGUIN. Les combinaisons possibles des éléments de symétrie forment deux catégories:

1- **Les classes non cubiques**: où, après addition des éléments, il ne subsiste au plus qu'un seul axe de symétrie d'ordre supérieur à 2. Cela limite considérablement les combinaisons des éléments de symétrie des classes de cette catégorie. Il n'y a que 7 possibilités qui permettent d'obtenir 27 classes de symétrie.

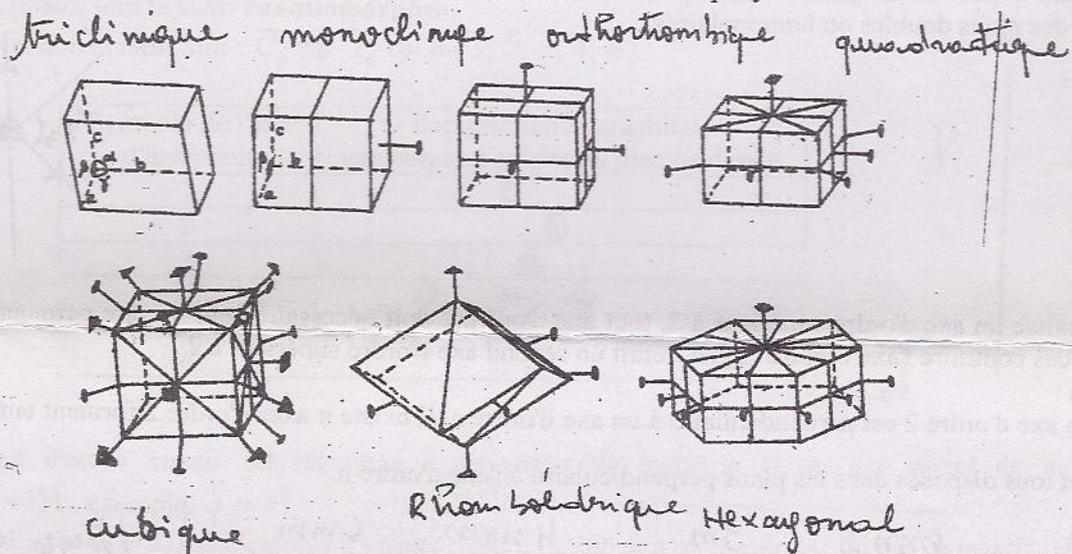
2- **Les classes cubiques:** où, après addition des éléments, il reste plusieurs axes d'ordre supérieur à 2 avec la multiplication des axes. Il y a donc en tout cinq classes de symétrie pour les cubiques. Ces classes ont toutes un axe d'ordre 3.

Nous avons donc défini en tout $27 + 5 = 32$ classes de symétrie. Nous allons voir, en considérant la symétrie des réseaux, que ces classes peuvent être groupées en sept systèmes cristallins, voir le tableau suivant :

triclinique	$1, \bar{1}$
monoclinique	$2, m, 2/m$
orthorhombique	$222, mm2, mmm$
Trigonal	$3, \bar{3}, 32, 3m, \bar{3}m$
Tétragonal (quadratique)	$4, \bar{4}, 4/m, 4mm, 422, \bar{4}2m, 4/mmm$
hexagonal	$6, \bar{6}, 6/m, 6mm, 622, \bar{6}2m, 6/mmm$
cubique	$23, m\bar{3}, 432, \bar{4}3m, m\bar{3}m$

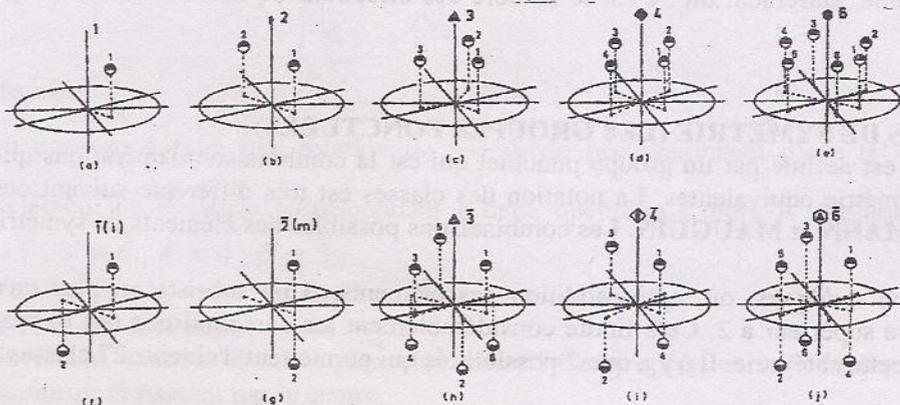
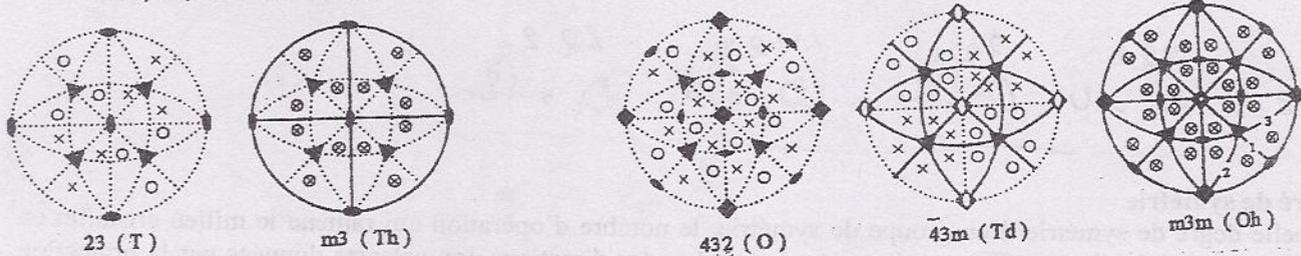
Classement des groupes ponctuels en systèmes

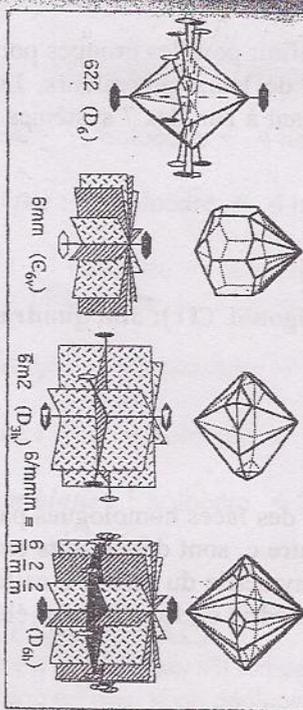
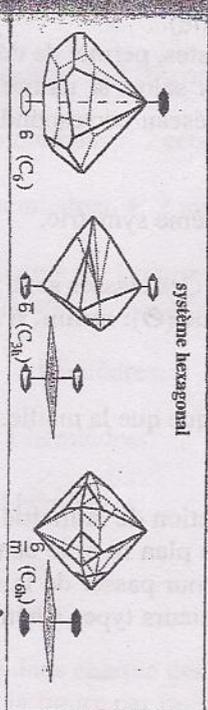
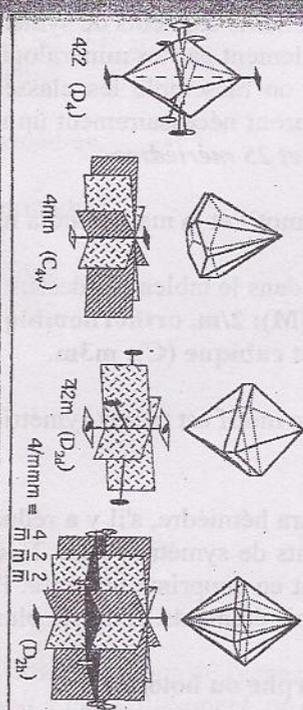
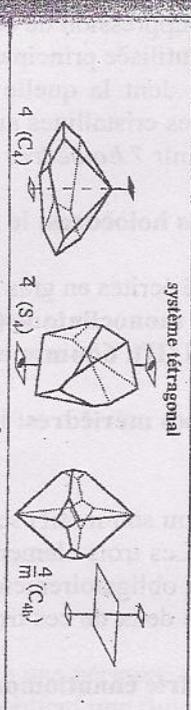
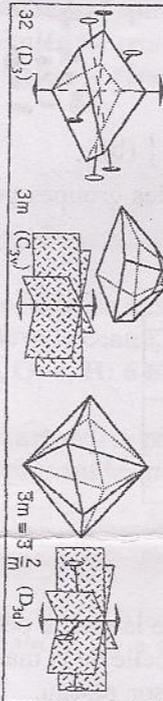
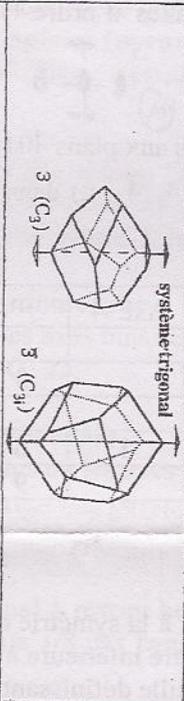
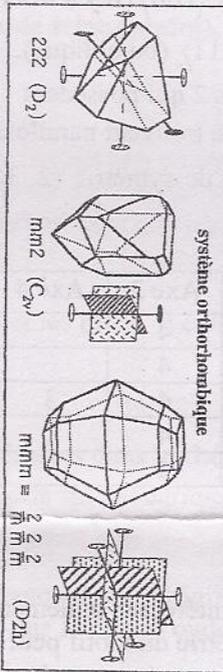
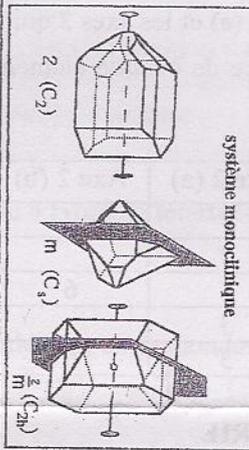
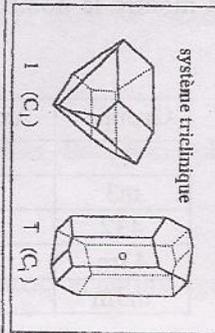
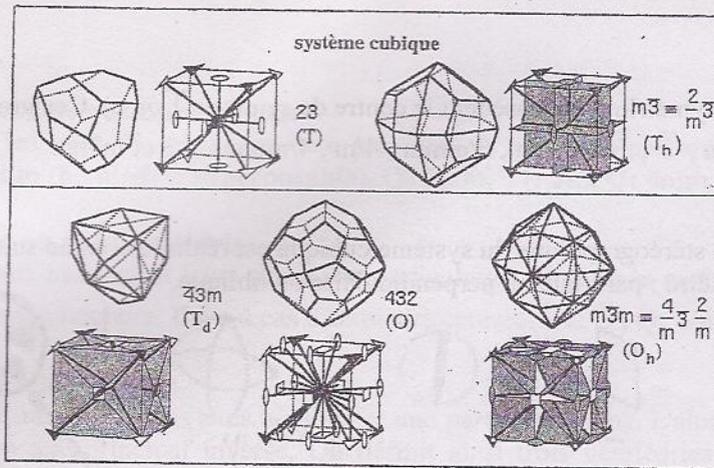
La figure suivante montre la représentation des éléments de symétrie dans les sept systèmes cristallins :



La projection stéréographique des 32 classes de symétrie (groupes ponctuels) est effectuée comme suit :

Groupes ponctuels cubiques





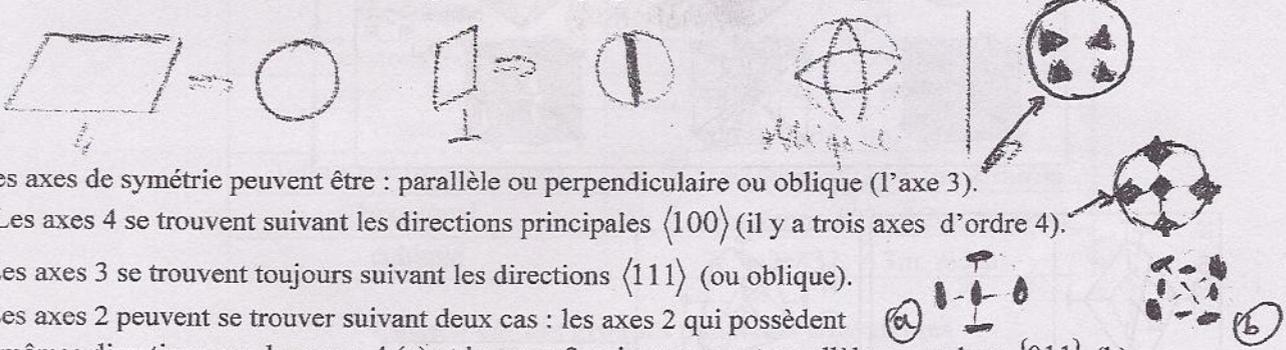
Remarque 1

Il y a 11 groupes ponctuels centro-symétriques (possèdent le centre de symétrie $\bar{1}$ ou c). Ces groupes sont appelés les groupes de Laue : $\bar{1}$, $2/m$, mmm , $\bar{3}$, $\bar{3}m$, $6/m$, $6/mmm$, $4/m$, $4/mmm$, $m\bar{3}$ et $m\bar{3}m$.

Remarque 2

La représentation de la projection stéréographique du système cubique est réalisée comme suit :

1- les plans de symétrie peuvent être : parallèle ou perpendiculaire ou oblique.



2- les axes de symétrie peuvent être : parallèle ou perpendiculaire ou oblique (l'axe 3).

3- Les axes 4 se trouvent suivant les directions principales $\langle 100 \rangle$ (il y a trois axes d'ordre 4).

4- Les axes 3 se trouvent toujours suivant les directions $\langle 111 \rangle$ (ou oblique).

5- Les axes 2 peuvent se trouver suivant deux cas : les axes 2 qui possèdent les mêmes directions que les axes 4 (a) et les axes 2 qui se trouvent parallèles aux plans $\{011\}$ (b).

Le tableau suivant montre le nombre de chaque élément de symétrie (2, 3, 4, $\bar{4}$, m) dans les groupes ponctuels cubiques :

Groupes	Axe 2 (a)	Axe 2 (b)	Axe 3	Axe 4	Axe $\bar{4}$	m
23	3		4			
$m\bar{3}$	3		4			3
432	3	6	4	3		
43m	3		4		3	6
$m\bar{3}m$	3	6	4			9

III-5 HOLOEDRIE ET MERIEDRIE

Pour connaître la symétrie d'un cristal, il faut non plus s'intéresser seulement à la symétrie de la maille définissant son réseau, mais aussi à la symétrie de son motif. La symétrie du motif peut être inférieure à celle de la maille.

*** un cristal est dit holoèdre lorsqu'il présente la même symétrie que la maille définissant son réseau.

*** un cristal est dit mérièdre lorsqu'il a une symétrie inférieure à celle de la maille définissant son réseau (motif moins symétrique; suppression de certains éléments de symétrie).

Cette nomenclature utilisée principalement par les minéralogistes, permet de définir pour les groupes ponctuels une autre classification, dont la quelle on rassemble les classes selon la nature de leurs générateurs. Les cristaux groupés en 32 classes cristallines auront nécessairement un réseau correspondant à l'un des 7 systèmes cristallins. On pourra donc définir 7 holoèdres et 25 mérièdres.

III-5-1 Les 7 classes holoèdres: le motif et la maille ont la même symétrie.

Les 7 classes ont été écrites en gras dans le tableau ci-dessus. Ces classes sont :

Triclinique (T): $\bar{1}$, **monoclinique (M): $2/m$** , **orthorhombique (O): mmm** , **trigonal (Tr): $\bar{3}m$** , **quadratique (Q): $4/mmm$** , **hexagonal (H): $6/mmm$** et **cubique (C): $m\bar{3}m$** .

III-5-2 Les 25 classes mérièdres: le motif est moins symétrique que la maille.

1) Hémiédries

Un cristal (ou son motif) sera hémihédre, s'il y a réduction de la moitié des faces homologues par rapport à la forme holoèdre. Les trois éléments de symétrie: l'axe 2, le plan m et le centre c, sont dépendants car si l'on en supprime un, il faut obligatoirement en supprimer un autre. Pour passer de la symétrie du réseau à celle du cristal hémihédre, on enlève deux de ces trois éléments. Il existe plusieurs types d'hémihédrie en fonction des éléments que l'on enlève :

a) Hémiédrie énantiomorphe ou holoaxe

On supprime le centre et les plans perpendiculaires aux axes. Il ne subsiste que les axes. Il y a 7 cas d'hémihédrie énantiomorphe: T: 1, M: 2, O: 222, Tr: 32, Q: 422, H: 622 et C: 432.

b) Hémiédrie pyramidale ou antihémiédrie

On supprime le centre et les axes. Il subsistera l'axe principal et les plans passant par cet axe. Il y a 5 cas d'hémiédrie pyramidale: **M: m** (hémiédrie superposable), **O: 2mm**, **Tr: 3m**, **Q: 4mm** et **H: 6mm**.

c) Hémiédrie centrée ou parahémiédrie

On supprime les axes binaires et leurs plans perpendiculaires. Il reste le centre et l'axe principal d'ordre supérieur à 2 et son plan perpendiculaire. Il y a 4 cas d'hémiédrie centrée: **Tr: $\bar{3}$** , **Q: 4/m**, **H: 6/m** et **C: m3**.

d) Hémiédrie particulière

On enlève le centre, une partie des axes binaires et une partie des plans. L'alternance des axes binaires et des plans fait apparaître un axe principal inverse. On définit ainsi trois hémiédries particulières dont le nom correspond à la forme obtenue caractéristique:

- * **Q: 42m** : hémiédrie sphénoédrique (sphénoèdre).
- * **H: 62m** : hémiédrie triangulaire (pyramide triangulaire).
- * **C: 43m** : hémiédrie tétraédrique (tétraèdre).

2) Tétartoédrie

Un cristal (ou son motif) sera tétartoèdre, s'il n'a plus que 1/4 des faces par rapport à la forme holoèdre. On arrive à la symétrie tétartoèdre, soit en enlevant encore un élément de symétrie in dépendant à la symétrie hémièdre, soit en enlevant les trois éléments à l'holoèdre. Il ne subsistera que les axes principaux:

a) Tétartoédrie énantiomorphe

On enlève le centre, les axes binaires et les plans. Il existe 4 types de tétartoèdres énantiomorphes :
Tr : 3, Q: 4, H: 6 et C: 23.

b) Tétartoédrie particulière

En supprimant les plans ou les axes binaires dans les hémiédries correspondantes, on définit également une tétartoédrie triangulaire $\bar{6}$ (H) et une tétartoédrie sphénoédrique $\bar{4}$ (Q).

Remarque:

Dans le cas d'un cristal trigonal à réseau hexagonal, on définit une **ogdoédrie (3)** par rapport à la symétrie de la maille hexagonale (il n'y a que 1/8 des faces sur le cristal ogdoèdre rhomboédrique comparé à la forme holoèdre hexagonale).

Les 32 classes cristallines se groupent ainsi en 7 systèmes cristallins:

Système cubique : 1 holoèdre + 3 hémièdres + 1 tétartoèdre.

Système hexagonal : 1 holoèdre + 4 hémièdres + 2 tétartoèdres.

Système quadratique : 1 holoèdre + 4 hémièdres + 2 tétartoèdres.

Système trigonal : 1 holoèdre + 3 hémièdres + 1 tétartoèdre.
1 hémièdre + 3 tétartoèdres + 1 ogdoèdre.

Système monoclinique : 1 holoèdre + 2 hémièdres.

Système triclinique : 1 holoèdre + 1 hémièdre.

Système orthorhombique : 1 holoèdre + 2 hémièdres.

Scan par Imadeddine
site : tajribaty.com

III.6 LES GROUPES D'ESPACE

Une figure infinie est périodique, s'il existe dans chaque des trois directions de l'espace une période; c'est-à-dire un vecteur de translation tel que, si on déplace la figure par rapport à un déplacement, on obtient une figure inchangée.

Une figure infinie peut avoir une symétrie de translation à partir des opérations de symétrie de chaque groupe ponctuel. Il est possible de trouver des opérations de symétrie avec translation ou engendre ainsi des groupes d'opération qui ne laissent pas toujours invariant un point du cristal, on les appelle *groupes spatiaux ou groupes d'espace*. Les atomes sont donc répétés périodiquement à travers tout le cristal obéissant à des lois de symétrie identiques à celles que nous connaissons déjà. Pour reproduire tous les atomes, il faut ajouter un nouvel opérateur de symétrie aux groupes ponctuels ; *la translation*.

III. 6.1 Opérations de symétrie avec translation

Elles sont de deux types:

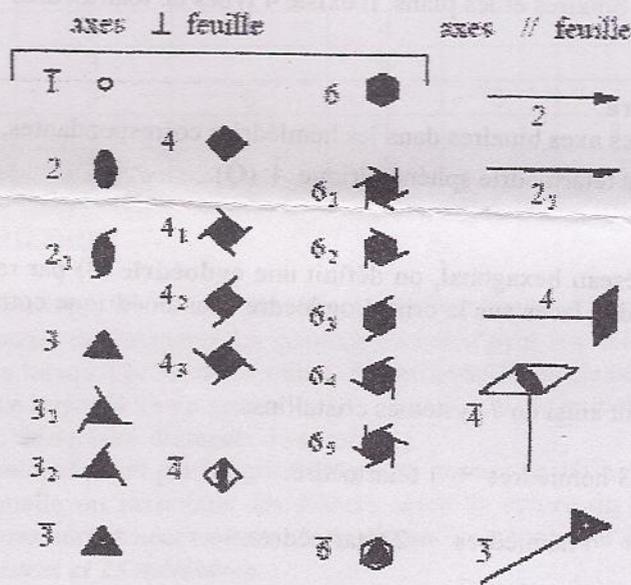
- 1- Celles qui dérivent des rotations : ces sont des opérations de symétrie hélicoïdales. Les éléments de symétrie correspondants sont appelés *axes hélicoïdaux*.
- 2- Celles qui dérivent de la réflexion: ce sont des opérations de symétrie de glissement. Les éléments de symétrie correspondants sont *des plans de glissement (miroir)*.

III.6.2 Les axes hélicoïdaux

Etant donné un axe de rotation n et un nombre t positif; un axe hélicoïdal n_t donne lieu à l'opération suivante: rotation de $2\pi/n$ autour de l'axe n suivie d'une translation parallèlement à l'axe égale à t/n fois la période de l'axe. Si on répète n fois l'opération on doit retrouver la position initiale.

Les translations égales ou multiples du paramètre sont considérées comme des opérations identité. Seules nous intéressent les translations égales à une fraction du paramètre donc t/n . On se limite aux valeurs positives ; les valeurs négatives reviennent à changer le sens de la translation.

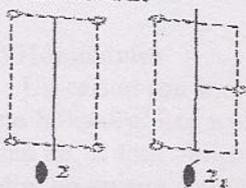
Les différents axes hélicoïdaux n_t possibles et leurs représentations graphiques sont:



** Etude des différents axes hélicoïdaux

Chaque position (ou atome) de la maille située à une cote z positive par rapport à l'origine sera désignée par $+$. Le paramètre de l'axe sera pris pour unité. Les translations seront des fractions d'unité qui vont caractériser les différentes positions obtenues par symétrie. L'axe est normal au plan de la feuille (où se trouve l'origine).

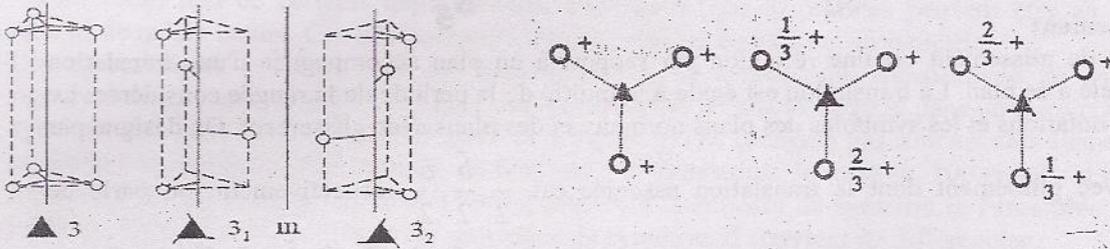
1- Axe d'ordre 2 (axe binaire hélicoïdal): soit un axe 2_1 normal au plan de la feuille. La rotation est de π et la translation est de $1/2$.



On sait que la position z (notée $+$) est la même que la position $1+z$ (notée $+$) en raison de l'opération identité.

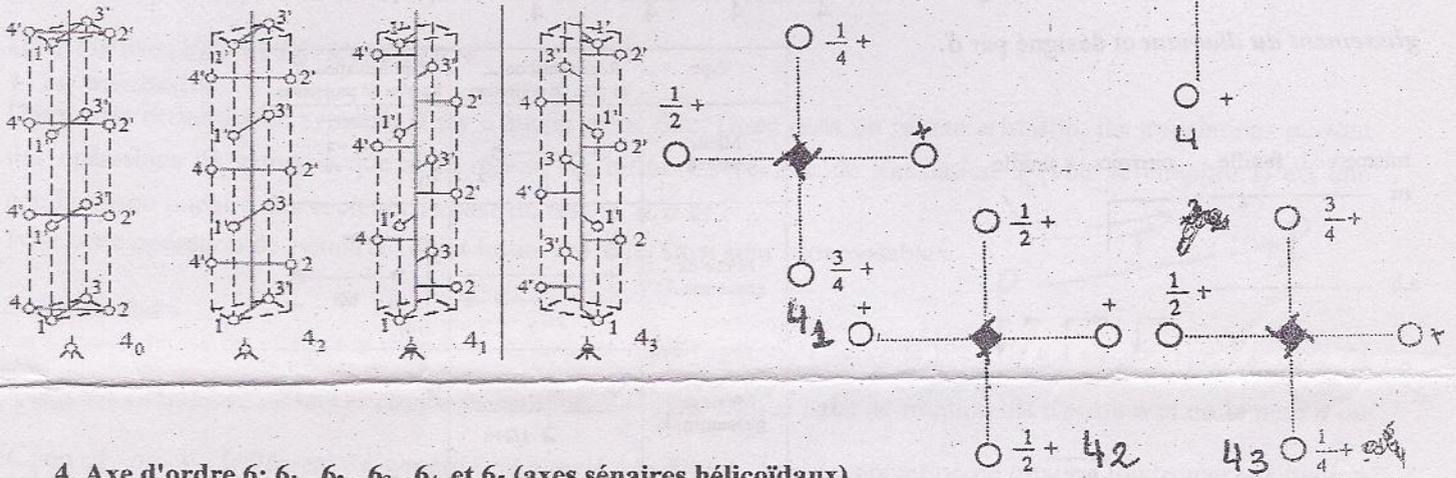
2- Axe d'ordre 3: 3_1 et 3_2 (axes ternaires hélicoïdaux).

La rotation est de $2\pi/3$ et les translations sont respectivement de $1/3$ pour 3_1 et $2/3$ pour 3_2 . Pour l'axe 3_2 , la troisième position est normalement à la cote $+4/3$, mais cette cote est équivalente à $+1/3$. On peut voir sur cette projection que l'axe 3_1 et l'axe 3_2 conduisent aux mêmes translations, si on change le sens de rotation pour l'un entre eux. Les figures ne sont pas superposables mais énantiomorphes.



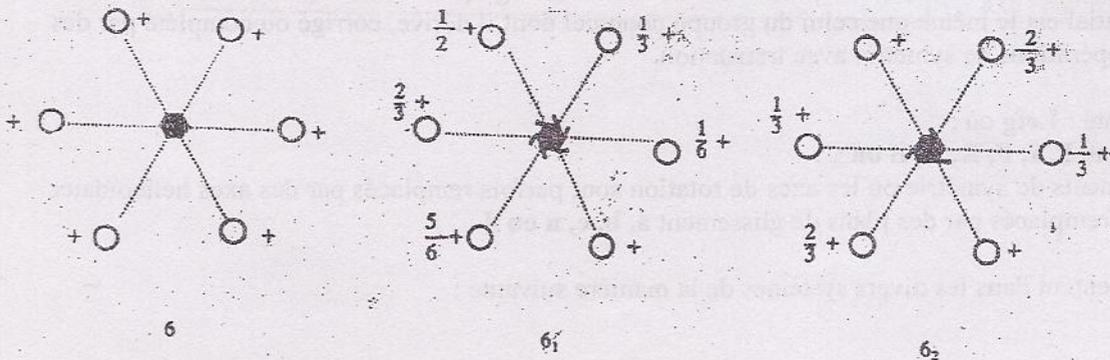
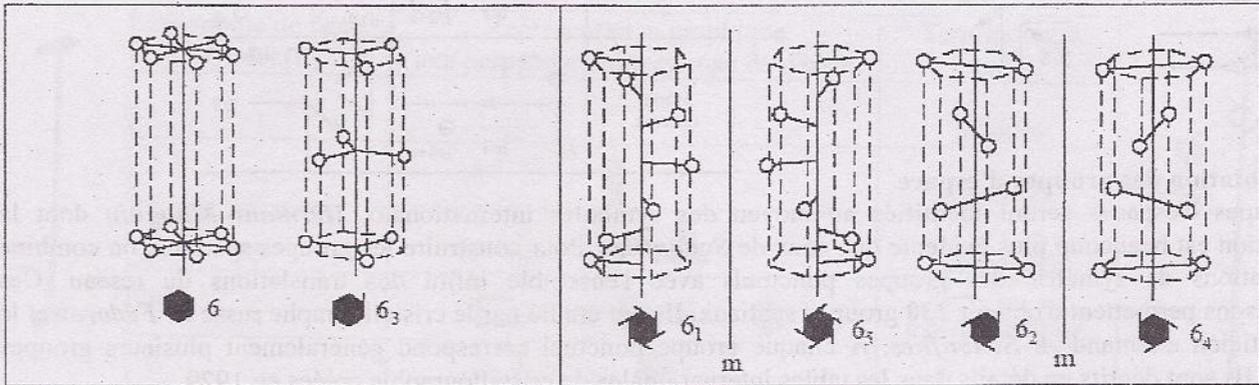
3- Axe d'ordre 4: 4_1 , 4_2 et 4_3 (axes quaternaires hélicoïdaux).

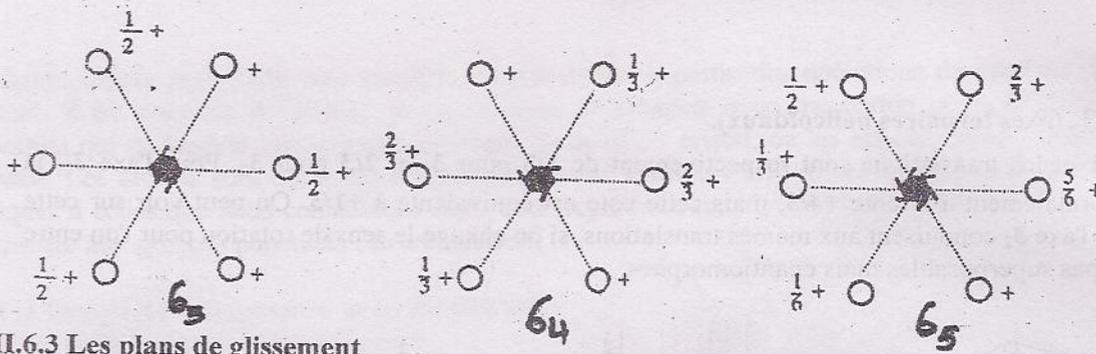
Rotation est de $2\pi/4 = \pi/2$ et les translations sont respectivement: $1/4$, $2/4=1/2$ et $3/4$.



4. Axe d'ordre 6: 6_1 , 6_2 , 6_3 , 6_4 et 6_5 (axes sénaires hélicoïdaux)

Rotation est $\pi/3$ et les translations sont $1/6$, $2/6=1/3$, $3/6=1/2$, $4/6=2/3$ et $5/6$.





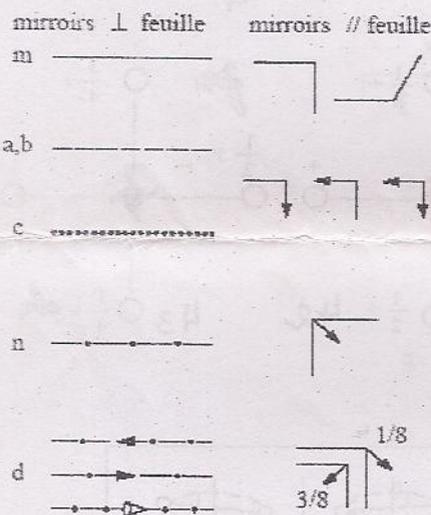
III.6.3 Les plans de glissement

L'opération plan (miroir) de glissement est une réflexion par rapport à un plan accompagnée d'une translation suivant une rangée parallèle à ce plan. La translation est égale à la moitié de la période de la rangée considérée. Le tableau suivant donne les notations et les symboles des plans normaux et des plans avec glissement. On désigne par

a, b ou c un miroir avec glissement dont la translation associée est $\frac{\bar{a}}{2}, \frac{\bar{b}}{2}, \frac{\bar{c}}{2}$ respectivement: on parle de

glissement axial. On désigne par n un miroir avec glissement de composante $\frac{\bar{a}+\bar{b}}{2}, \frac{\bar{a}+\bar{c}}{2}, \frac{\bar{b}+\bar{c}}{2}, \frac{\bar{a}+\bar{b}+\bar{c}}{2}$: les

plans n sont dits *diagonaux*. Un glissement $\frac{\bar{a}+\bar{b}}{4}, \frac{\bar{a}+\bar{c}}{4}, \frac{\bar{b}+\bar{c}}{4}, \frac{\bar{a}+\bar{b}+\bar{c}}{4}$: ces plans sont appelés plans de *glissement du diamant* et désigné par d.



Type	Représentation ⊥ au plan de projection	Représentation // au plan de projection
Miroir « normal »		
Miroir de glissement //		
Miroir de glissement ⊥		
Glissement oblique		
Miroir diamant		

III.6.4 Notation des groupes d'espace

Les groupes d'espaces seront identifiés au moyen des symboles internationaux *Hermann-Mauguin* dont la signification est beaucoup plus évidente que ceux de *Schönflies*. Pour construire les groupes spatiaux, on combine les opérations de symétrie des groupes ponctuels avec l'ensemble infini des translations du réseau. Ces combinaisons permettent d'obtenir 230 groupes spatiaux. Ils ont été étudiés par le cristallographe russe *E. Fédorov* et le mathématicien allemand *A. Schönflies*. A chaque groupe ponctuel correspond généralement plusieurs groupes spatiaux. Ils sont décrits en détails dans les tables internationales de cristallographie créées en 1929.

Le symbole du groupe spatial est le même que celui du groupe ponctuel dont il dérive, corrigé ou complété par des indications relatives aux opérations de symétrie avec translation.

Un groupe d'espace est noté : **Lefg** où :

L : indique le type de réseau **P, I, F, R, A, B** ou **C**.

E, f et g : indique les éléments de symétrie où les axes de rotation sont parfois remplacés par des axes hélicoïdaux et les miroirs sont parfois remplacés par des plans de glissement **a, b, c, n** ou **d**.

Ces 230 groupes se représentent dans les divers systèmes de la manière suivante :