

N° d'ordre :.....



République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et
de la Recherche Scientifique

Université Mohamed Boudiaf - M'sila
Faculté des Sciences
Département de Physique

MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de :

MASTER

Domaine : **Sciences de la matière**

Filière : **Physique**

Option : **Sciences des Matériaux**

Par

FERAHTIA Souaad

THEME

**DENOMBREMENT DES GROUPES SPATIAUX ISSUS DE LA
CLASSE 222 DU SYSTEME ORTHORHOMBIQUE**

Soutenue le : 25/05/2016

Devant le jury composé de :

A. Boussendel	MCA <u>Univ.</u> de M'sila	Président
H. Latelli	Prof. <u>Univ.</u> de M'sila	Rapporteur
B. Assaous	MAA <u>Univ.</u> de M'sila	Examineur
A. <u>Ouali</u>	MCA <u>Univ.</u> de M'sila	Examineur

Promotion Juin 2016

تشكرات

الحمد لله الذي علم بالقلم, ورزقنا العلم و وهب, والصلاة و السلام على المبعوث رحمة للعالمين.

أولا وقبل كل شيء أتقدم بأسمى عبارات الشكر و الامتنان و التقدير إلى من يعجز لساني عن إيجاد العبارات المناسبة لشكره, إلى من سدد خطاي, و أنار طريقي, إلى واهبي الحياة, إلى ربي جل جلاله.

و أتقدم بالشكر الجزيل للأستاذ المحترم لعطلي أحميدة, على تفانيه في عمله, و الذي لم يبخل علي بتوجيهاته و نصائحه القيمة و الثمينة طوال مراحل إنجاز هذا العمل.

كما أتقدم بالشكر الجزيل و الجزيل جدا لأعضاء لجنة المناقشة و على رأسهم الأستاذ بوصندل عبد المجيد على اهتمامه بالموضوع و كذا على قبوله و تفضله برئاسة لجنة المناقشة, كما أشكر كل من الأستاذين عسعوس أبو بكر و والي عامر, الأعضاء الممتحنين على اهتمامهم بالموضوع و كذا قبولهم المشاركة في لجنة المناقشة.

ولا يفوتني أن اشكر كل الأساتذة, الذين تعلمت منهم و لو حرفا واحدا طوال مشواري الدراسي فهم قدموا لي الكثير فشكرا يا من وقفتم معي دون تعب و شجعتموني طوال دربي.

و أخيرا أشكر كل أعضاء قسم الفيزياء على إخلاصهم في عملهم و اذكر منهم الأستاذ حرايز مناد و الأستاذة سايب سليمة... فلکم مني كل الاحترام و التقدير.

إهداء

كل من ساندني من قريب أو بعيد و: أهدي هذا العمل إلى

إلى من لا يمكن للكلمات أن توفي حقهما.

إلى من لا يمكن للأرقام أن تحصي فضائلهما.

إلى والدي العزيزين أدامهما الله لي.

إلى من يحملون في عيونهم ذكريات طفولتي و شبابي إخوتي وأخص بالذكر سندي في حياتي: أخي لحسن.

إلى كل من شجعني في مشواري الدراسي و أخص بالذكر سعودي أمينة.

إلى طلبة قسم الفيزياء تخصص فيزياء المواد.

و إلى كل محبي العلم و المعرفة.

سعاد فراحتية .

Table des matières

Chapitre I – Structures cristallines

I.1. Notions fondamentales	1
I.2. Réseau ponctuel	1
I.3. Notion de maille	1
I.4. Systèmes cristallins	3
I.4.1. Systèmes bidimensionnels	3
I.4.2. Systèmes tridimensionnels	4

Chapitre II – Opérations et éléments de symétrie

II.1. Eléments et opérations de symétrie ponctuelle	5
II.1.1. Identité	5
II.1.2. Réflexion	5
II.1.3. Rotation	6
II.1.4. Inversion	7
II.1.5. Rotation-inversion	7
II.1.6. Représentation graphique des éléments de symétrie	8
II.1.7. Représentation stéréographique des opérations	9
II.1.8. Représentation matricielle des opérations de symétrie	10
II.2. Axes hélicoïdaux	15
II.3. Plans de glissement	21

Chapitre III – Réseaux de Bravais

III.1. Dénombrement des modes de réseaux de Bravais pour le système orthorhombique	23
III.2. Dénombrement des modes de réseaux de Bravais pour les autres systèmes orthorhombique	26

Chapitre IV – Groupes spatiaux

IV.1. Introduction	27
IV.2. Directions de symétrie du système orthorhombique.	27
IV.3. Dénombrement des groupes spatiaux du système orthorhombique de la classe 222	27
IV.4. Coordonnées des positions équivalentes	38

Conclusion générale	39
---------------------	----

Bibliographie générale	40
------------------------	----

Introduction

I. Introduction

La cristallographie est la branche des sciences exactes qui se consacre à l'étude de la structure de la matière à l'échelle atomique : détermination, classification et interprétation des structures géométriques des solides et en particulier celles des cristaux. Le «cristal» d'origine grecque (krustallas) signifie «solidifié par le froid» [1]

Les grecs pensaient que le cristal de roche, le quartz, provenait de la transformation par le froid de la glace.

Un cristal est un solide dont la structure microscopique est caractérisée par une répétition périodique en trois dimensions d'un motif composé d'atomes donc il possède une structure ordonnée. L'étude de l'ordre et du désordre est la préoccupation centrale de cette science [2]

Depuis très longtemps on pense que la forme extérieure des cristaux est liée à un ordonnancement interne régulier de la matière.

La première loi quantitative de la cristallographie, la loi sur la constante des longes, a été pressentie par Nicolas Sténon en 1669 à partir de mesures des angles entre les faces de cristaux de quartz. Elle a été formalisée en 1772 par Jean_Baptiste Romés de l'iste.

Il existe sept systèmes cristallins différents. Ils ont été découverts en 1781 en seconde loi par l'abbé René Just Haüy. Celui ci remarqua de façon hasardeuse que certaines roches possédaient des formes parfaites. Après de longues années de recherches, il élaborait sa théorie sur la structure des cristaux.

En 1848, Auguste Bravais montre qu'il ne peut exister que sept types de mailles cristallines élémentaires.

Le présent mémoire est composé de quatre chapitres. Dans le premier chapitre, nous avons rappelé les notions de base de la cristallographie : réseau ponctuel, notion de maille et systèmes cristallins. Nous abordons, ensuite au chapitre 2, les opérations de symétrie, leurs représentations graphiques et les matrices représentatives qui leurs correspondent. Au chapitre 3, nous avons dénombré les modes de réseaux de Bravais pour le système orthorhombique en utilisant une méthode très simple.

Enfin, au chapitre 4, après avoir rappelé les directions de symétrie du système orthorhombique, nous avons reconstruit les stéréogrammes de toutes les combinaisons possibles (quatre modes et une classe 222) qui sont, à priori, au nombre de trente deux.

Par comparaison des représentations stéréographiques, le groupe spatial résulte de la combinaison d'un mode de réseau avec la classe de symétrie d'orientation appartenant à ce système. Dans notre cas, nous avons choisi la classe 222

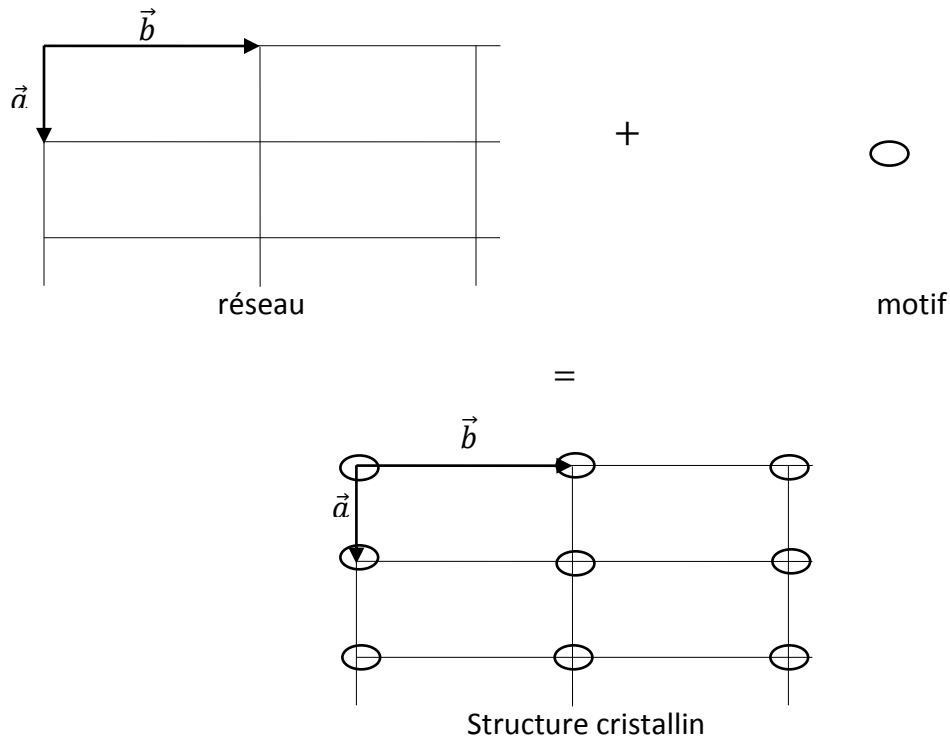
Chapitre I:

Structures cristallines

I. Structures cristallines

I.1. Notions fondamentales [1]

Un Cristal est constitué par un arrangement régulier et répétitif d'un groupe d'atomes. Pour connaître l'ensemble du cristal il suffit de connaître les trois vecteurs définissant le réseau et l'arrangement des atomes dans une des cellules constitutives. Le groupe d'atomes qui engendre le cristal est appelé le motif, et ce dernier peut être un simple atome (les cristaux métallique et covalente) ou un ensemble de molécules (les cristaux moléculaire) ou d'ions (les cristaux ionique), qui se répète par les translations du réseau pour donner la structure périodique.



I.2. Réseau ponctuel [3]

Un réseau ponctuel est une répartition périodique de points et il peut être uni_bi_ou tridimensionnel.

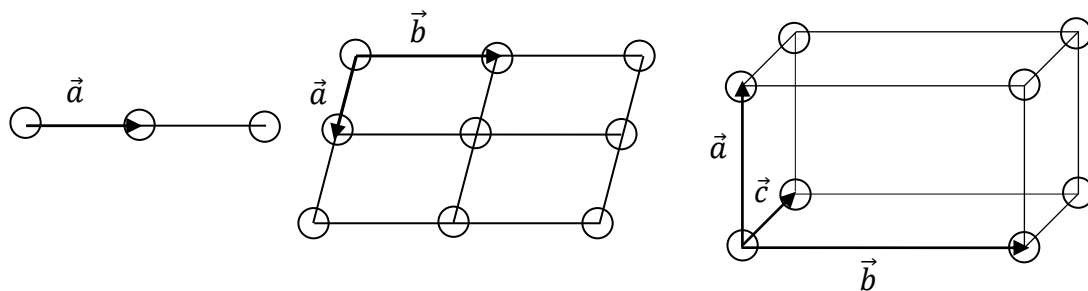


Figure I.2: Réseau uni_bi_ou tridimensionnel.

I.3. Notion de maille [1]

Une maille est une unité de base parallélépidique à partir de laquelle on peut engendrer tout le cristal uniquement par des translations.

Soient trois vecteurs qui définissent un trièdre direct pouvant être oblique : \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} et α , β et γ les angles entre ces vecteurs avec :

α entre \vec{b} et \vec{c} , β entre \vec{c} et \vec{a} , γ entre \vec{a} et \vec{b} .

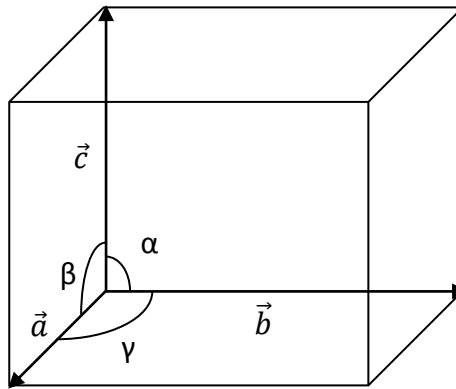
Les vecteurs \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} sont les vecteurs de base.

Le parallélépipède construit sur ces trois vecteurs constitue la maille.

Soit le vecteur $\overrightarrow{OP} = \vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$.

Si u , v et w sont trois entiers, on dit que \vec{r} est une rangée et que le point P est un nœud.

L'ensemble infini des nœuds forme le réseau.



$$\text{Volume de la maille } V = \|(\vec{a} \wedge \vec{b}) \vec{c}\|$$

I.3.1. Maille élémentaire [4]

Une maille primitive ou maille simple est le motif géométrique le plus simple qui, en se répétant indéfiniment, constitue un réseau cristallin. Le terme maille élémentaire est le plus utilisé dans la littérature cristallographique francophone.

Comme l'adjectif « élémentaire » le suggère, la maille en question ne contient qu'un seul nœud de réseau et coïncide donc avec la maille primitive ou simple. Toutefois, dans l'usage courant le terme est souvent utilisé comme synonyme de maille conventionnelle, qui parfois est une maille multiple. Dans ce cas, on obtient une « maille élémentaire » qui, étant multiple, n'a plus le caractère « élémentaire ».

I.4. Changement de maille [3]

Un changement de maille peut être nécessaire, soit pour se placer dans le cadre des mailles conventionnelles, soit pour toute commodité particulière.

Soit une maille initiale basée sur les vecteurs \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} . Les coordonnées d'un point p sont x , y , z ; celles d'un point du réseau sont u , v , w .

Une nouvelle maille est basée sur les vecteurs $\vec{a}'\vec{b}'\vec{c}'$ qui sont de la forme :

$$\begin{aligned}\vec{a}' &= u_1\vec{a} + v_1\vec{b} + w_1\vec{c} \\ \vec{b}' &= u_2\vec{a} + v_2\vec{b} + w_2\vec{c} \\ \vec{c}' &= u_3\vec{a} + v_3\vec{b} + w_3\vec{c}\end{aligned}$$

Soit sous forme matricielle :

$$\begin{bmatrix} \vec{a}' \\ \vec{b}' \\ \vec{c}' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \\ u_3 & v_3 & w_3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \\ \vec{c} \end{bmatrix} = [S] \begin{bmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \\ \vec{c} \end{bmatrix}$$

I.5. Systèmes cristallins [3]

Les cristaux se classent en système cristallins suivant la symétrie de leurs faces, définie par des axes de symétrie autour desquels le cristal peut tourner en présentant toujours le même aspect. Ces systèmes se subdivisent à leur plusieurs sous-systèmes (les réseaux de bravais) ceci conduit à quatre systèmes bidimensionnels et à sept Systèmes cristallins tridimensionnels.

I.5.1. Systèmes bidimensionnels

Il n'existe que quatre (4) combinaisons linéaires de points qui peuvent créer un système à deux dimensions. Les caractéristiques des sept systèmes sont décrites par le tableau I.5.1 et leurs formes sont montrées dans le diagramme qui suit.

Système	Forme de la maille Élémentaire	Condition sur les paramètres	
		Métriques	Angulaires
Oblique	Parallélogramme quelconque	Aucune	Aucune
Rectangulaire	Rectangle	Aucune	$\gamma = \pi/2$
Carré	Carré	$a = b$	$\gamma = \pi/2$
Hexagonal	Losange	$a = b$	$\gamma = 2\pi/3$

Tableau I.5.1: Caractéristique des systèmes bidimensionnels.

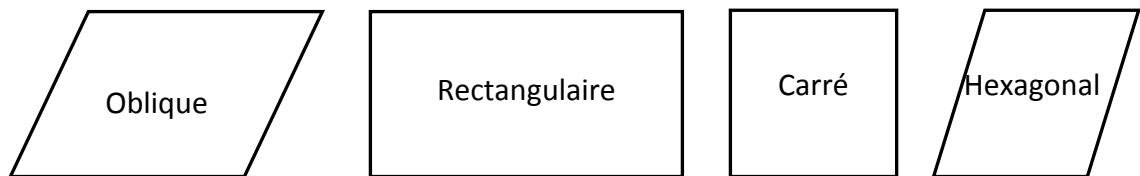


Figure I.5.1: Réseaux bidimensionnels.

I.5.2. Systèmes tridimensionnels

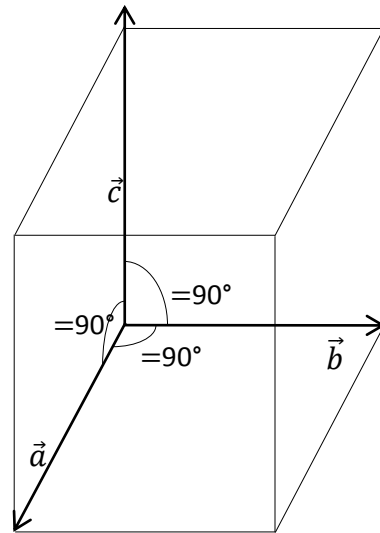
Il n'existe que sept systèmes tridimensionnels et ils diffèrent l'un de l'autre par les relations entre ces paramètres. Les caractéristiques des sept systèmes sont décrites par le tableau I.5.2. La forme du système orthorhombique qui nous concerne est montrée dans le diagramme qui suit.

Système	Forme de la maille élémentaire	Condition sur les paramètres	
		Métrique	Angulaire
Triclinique	quelconque	Aucune	Aucune
Monoclinique	Prisme droit a base quelconque	Aucune	$\alpha = \gamma = \frac{\pi}{2}, \beta \neq \frac{\pi}{2}$
Orthorhombique	Prisme droit a base rectangulaire	Aucune	$\alpha = \gamma = \beta = \pi/2$
Quadratique	Prisme droit a base carré	$a = b$	$\alpha = \gamma = \beta = \pi/2$
Rhomboédrique	Prisme droit a base losange	$a = b = c$	$\alpha = \gamma = \beta \neq \pi/2$
Hexagonal	rhomboèdre	$a = b$	$\alpha = \beta = \frac{\pi}{2}, \gamma = \frac{2\pi}{3}$
Cubique	Cube	$a = b = c$	$\alpha = \gamma = \beta = \pi/2$

Tableau I.5.2: Caractéristique des systèmes tridimensionnels.

Système orthorhombique

Minéraux cristallisant dans ce système Soufre, Atacamite, Topaze, Aragonite, Goethite, Talc, Orpiment, Barytine, Aurichalcite...etc.



Chapitre II :
Opération et éléments
de symétrie

II. opérations et Éléments de symétrie

II.1 Éléments et opérations de symétrie ponctuelle [3,5-9]

Deux figures sont dites mutuellement symétriques si on peut les faire coïncider par une opération géométrique (transformation géométrique). Cet opérateur géométrique est appelé "élément de symétrie" et il existe deux types d'opération de symétries ; symétries d'orientation : Agissent sur des directions (vecteurs) : rotations, réflexions, inversions rotatoires, réflexions rotatoires ; et symétries de position : Agissent sur des positions (points) : translations, axes hélicoïdaux, miroirs à glissement.

Les éléments de symétrie connus sont :

Élément de symétrie	Notation	Effet
Point	$\bar{1}$	Symétrie central
Plan	m	miroir
Axes	A_1	Identité
	A_2	Rotation d angle 180°
	A_3	Rotation d angle 120°
	A_4	Rotation d angle 90°
	A_6	Rotation d angle 60°

Tableau II.1: Les éléments de symétrie.

Une opération de symétrie est une application linéaire qui associe à tout point de l'espace un point image. Un élément de symétrie est l'ensemble des points fixes de l'opération de symétrie associée, qui restent inchangés par l'application de l'opération de symétrie : il peut s'agir d'un point, d'une droite ou d'un plan par rapport auquel est effectuée l'opération de symétrie.

Une opération de symétrie ne possède qu'un seul élément de symétrie. Les éléments de symétrie d'un objet passant tous par son centre, on choisit ce point comme origine de l'espace.

II.1.1. Identité

L'identité est une opération, notée 1, qui associe à tout point P de l'espace le point P lui-même comme image. Il s'agit d'une opération sans effet et tous les points de l'espace sont points fixes de l'identité. Si le point P a pour coordonnées (x,y, z), son image a aussi pour coordonnées (x,y,z). Tout objet est invariant par l'application de l'identité.

II.1.2. Réflexion

La réflexion est notée m et associe à tout point P de l'espace un point P' qui est son image par rapport à un plan, de la même façon qu'une image dans un miroir. Pour cette raison, le

plan de la réflexion est appelé « plan miroir » en cristallographie. Le point P' est tel que sa distance au plan miroir est la même que celle du point P et la droite (PP') est perpendiculaire au plan miroir. Les points fixes de la réflexion constituent le plan miroir. La réflexion conserve les distances et est donc une isométrie mais ne conserve pas la chiralité des objets. La chiralité est d'ailleurs définie par la réflexion par rapport à un plan : un objet chiral est un objet qui ne se superpose pas à son image dans un miroir. Dans l'espace à deux dimensions, la réflexion s'effectue par rapport à une droite appelée « droite miroir ».

Soit un point P de l'espace de coordonnées (x, y, z) dans un système de coordonnées cartésien. Son image P' par réflexion par rapport au plan (x, y), perpendiculairement à l'axe z, a pour coordonnées (x, y, -z).

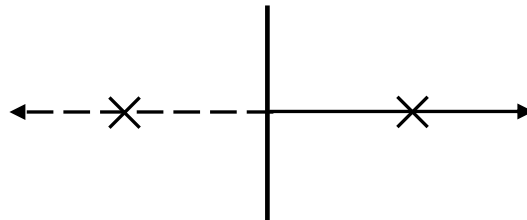


Figure II.1.2: Exemple de réflexion.

II.1.3 Rotation

Une rotation d'angle θ 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. 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 et la chiralité des objets. L'ordre n d'une rotation est défini comme le nombre de rotations successives à appliquer au point P pour revenir à la position initiale. Si l'angle de rotation θ est un diviseur de 2π , l'ordre de la rotation est $n = 2\pi/\theta$.

Dans l'espace bidimensionnel, la rotation s'effectue autour d'un point appelé « centre de rotation ».

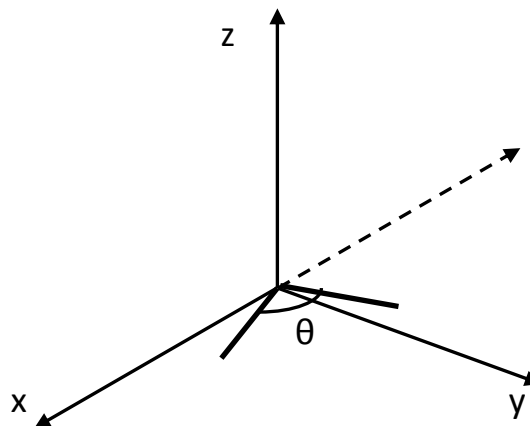


Figure II.1.3: Exemple de rotation.

II.1.4 Inversion

L'inversion en cristallographie est notée $\bar{1}$ et correspond à la symétrie centrale en mathématiques. Les axes inverses sont caractérisés par la combinaison d'un axe et d'un centre de symétrie.

Elle s'effectue par rapport à un centre d'inversion. Le point fixe de l'inversion est ce centre d'inversion.

L'inversion associe à tout point P de l'espace un point image P' qui lui est symétrique par rapport au centre d'inversion situé sur l'origine O et tel que O est au centre du segment [PP']. Si le point P a pour coordonnées (x, y, z), son image P' a alors pour coordonnées (-x, -y, -z).

L'inversion est une isométrie car elle conserve les distances. L'inversion ne conserve pas la chiralité.

Dans l'espace à deux dimensions, l'inversion est assimilable à une rotation d'ordre 2 autour d'un point, elle conserve alors la chiralité. De façon générale, l'inversion est une rotation dans les espaces de dimension paire.

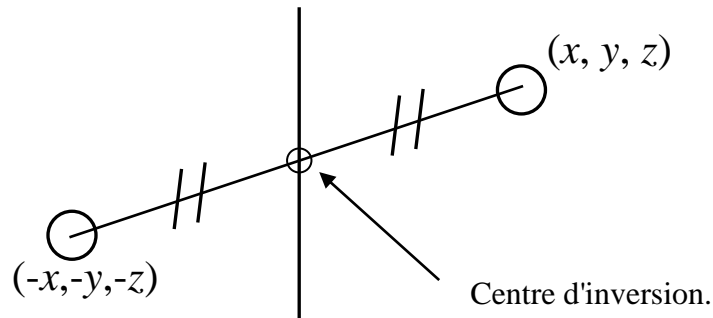


Figure II.1.4: Exemple d'inversion.

II.1.5 Rotation-inversion

La rotation-inversion est la composée d'une rotation d'ordre n autour d'un axe et de l'inversion par rapport à un point de l'axe. Ces deux opérations de symétrie commutent et elle notée par : \bar{n}

L'ordre d'une rotation-inversion est l'ordre de sa rotation associée. Du fait de l'utilisation de l'inversion, la rotation-inversion ne conserve pas la chiralité dans l'espace à trois dimensions et elle n'existe pas dans l'espace bidimensionnel

L'ordre dans lequel elles sont effectuées ne change pas le résultat de la rotation-inversion : rotation-inversion = inversion- rotation.

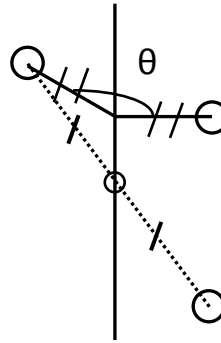


Figure II.1.5: Exemple de rotation_ inversion.

II.1.6 Représentation graphique des éléments de symétrie [3]

La nomination des éléments de symétrie et leurs symboles sont regroupés dans le tableau II.1.6.










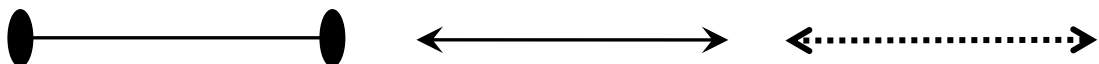
Axe	Nomination	Symbole graphique
1	Identité	Néant
2	Binaire	
3	ternaire	
4	quaternaire	
6	Sénaire	
$\bar{1}$	Centre de symétrie	
$\bar{2} = m$	Axe inverse d'ordre 2	
$\bar{3}$	Axe inverse d'ordre 3	
$\bar{4}$	Axe inverse d'ordre 4	
$\bar{6}$	Axe inverse d'ordre 6	

Tableau II.1.6 : Représentation graphique et symboles des différents éléments de symétrie.

Un axe d'ordre 2, quand il est dans le plan de la figure, est représenté par les symboles suivants :



Un axe d'ordre $\bar{2} = 2 \times \bar{1} = \bar{1} \times 2 = m$, équivalent à une réflexion par rapport à un plan. Un symbole particulier est employé pour désigner le plan de symétrie (miroir).

Sa représentation graphique est :

Pour m perpendiculaires au plan de la figure :



Pour m dans le plan de la figure :



II.1.7. Représentation stéréographique des opérations [3]

Lorsqu' il n'existe qu'un seul axe de rotation, direct ou inverse, il est commode de choisir l'axe des pôles selon cette direction. Les figures suivants donnent la projection stéréographique des positions équivalentes obtenues en appliquant les différents axes de symétrie.

- **Axes directs**

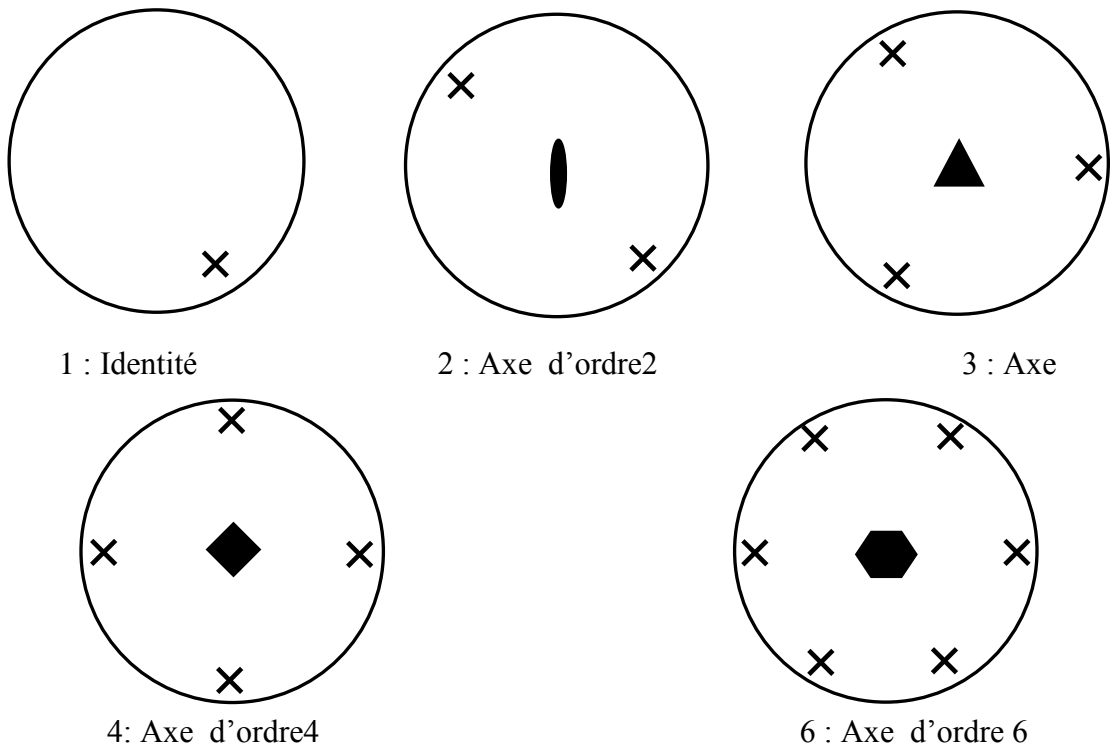


Figure II.1.7.1: Projection stéréographique des axes directs.

• **Axes inverses**

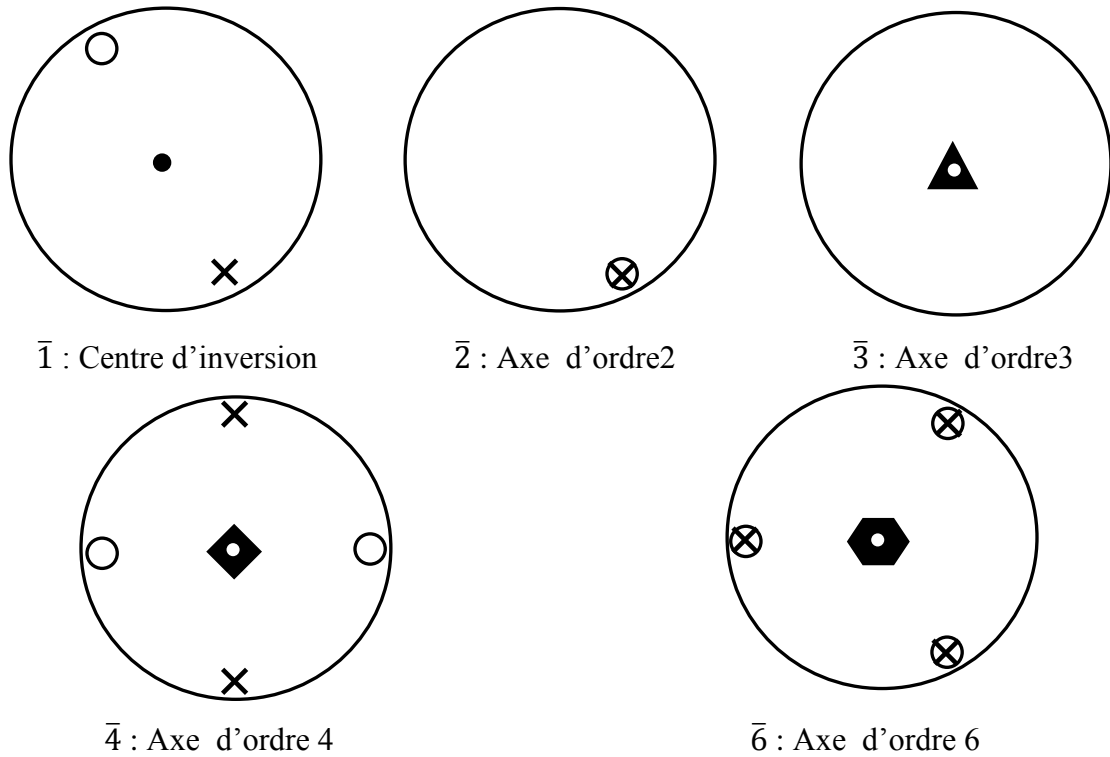
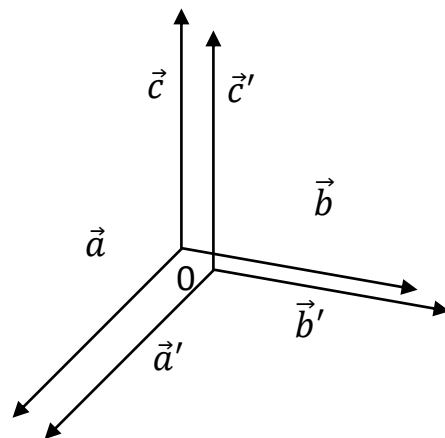


Figure II.1.7.2: Projection stéréographique des axes inverses.

II.1.8 Représentation matricielle des opérations de symétrie [3]

Les opérations de symétrie peuvent être représentées par des matrices. Ces matrices dépendent pour une opération donnée, des vecteurs de base choisis et de ce à quoi l'opération s'applique.

Opérateur identité : $\frac{2\pi}{1} = 2\pi$



$$\vec{a}' = 1\vec{a} + 0\vec{b} + 0\vec{c}$$

$$\vec{b}' = 0\vec{a} + 1\vec{b} + 0\vec{c}$$

$$\vec{c}' = 0\vec{a} + 0\vec{b} + 1\vec{c}$$

La matrice de transformation est :

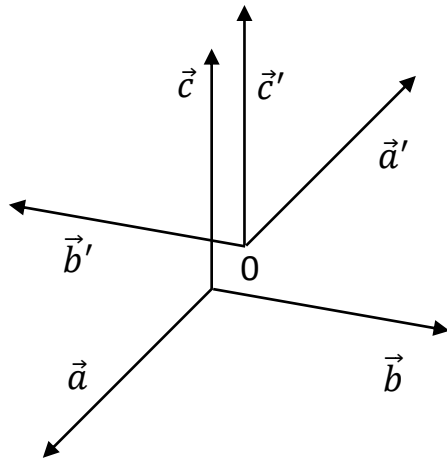
$$[R] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Quelque soit le repère, x, y, z se transforment en x', y', z' par la rotation de 2π de la manière suivante :

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

Opérateur binaire: $\frac{2\pi}{2} = \pi$

Pour l'axe 2 selon \vec{c} , et \vec{a} et \vec{b} perpendiculaires à \vec{c} .



$$\vec{a}' = -1\vec{a} + 0\vec{b} + 0\vec{c}$$

$$\vec{b}' = 0\vec{a} - 1\vec{b} + 0\vec{c}$$

$$\vec{c}' = 0\vec{a} + 0\vec{b} + 1\vec{c}$$

La matrice de transformation est :

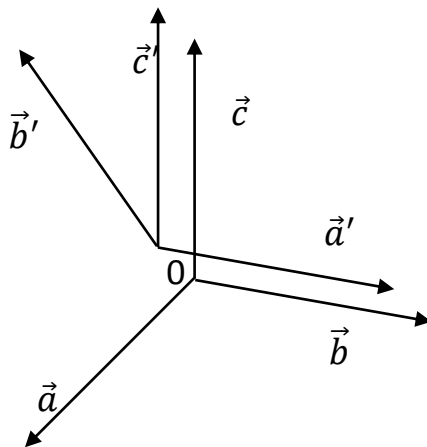
$$[R] = \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Quelque soit le repère, x, y, z se transforment en x', y', z' par la rotation de π de la manière suivante :

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ z \end{bmatrix}$$

Opérateur ternaire : $\frac{2\pi}{3}$

\vec{c} selon l'axe 3, \vec{a} et \vec{b} perpendiculaire à \vec{c} te forment entre eux l'angle $\frac{2\pi}{3}$.



$$\vec{a}' = 0\vec{a} + 1\vec{b} + 0\vec{c}$$

$$\vec{b}' = -1\vec{a} - 1\vec{b} + 0\vec{c}$$

$$\vec{c}' = 0\vec{a} + 0\vec{b} + 1\vec{c}$$

La matrice de transformation est :

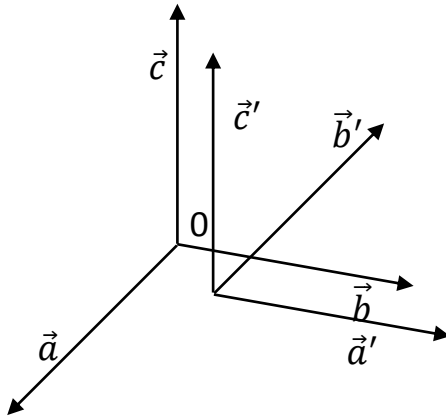
$$[R] = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Quelque soit le repère, x, y, z se transforment en x', y', z' par la rotation de $\frac{2\pi}{3}$ de la manière suivante :

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\widetilde{R}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x - y \\ z \end{bmatrix}$$

Opérateur quaternaire : $\frac{2\pi}{4} = \frac{\pi}{2}$

L'axe 4 selon \vec{c} , \vec{a} et \vec{b} perpendiculaire à \vec{c} te forment entre eux l'angle droit.



$$\vec{a}' = 0\vec{a} + 1\vec{b} + 0\vec{c}$$

$$\vec{b}' = -1\vec{a} + 0\vec{b} + 0\vec{c}$$

$$\vec{c}' = 0\vec{a} + 0\vec{b} + 1\vec{c}$$

La matrice de transformation est :

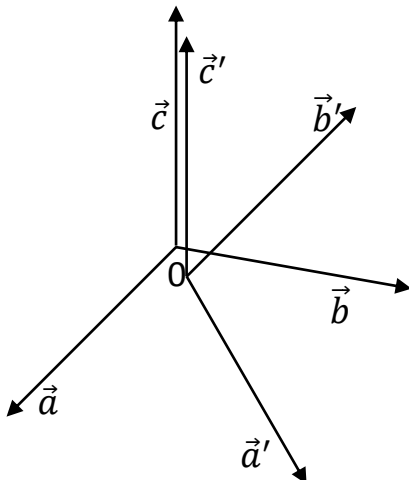
$$[R] = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Quelque soit le repère, x, y, z se transforment en x', y', z' par la rotation de $\frac{\pi}{2}$ de la manière suivante :

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\widetilde{R}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x \\ z \end{bmatrix}$$

Opérateur Sénaire : $\frac{2\pi}{6} = \frac{\pi}{3}$

\vec{c} selon l'axe 6, \vec{a} et \vec{b} perpendiculaire à \vec{c} te forment entre eux l'angle $\frac{2\pi}{3}$.



$$\vec{a}' = 1\vec{a} + 0\vec{b} + 0\vec{c}$$

$$\vec{b}' = -1\vec{a} + 0\vec{b} + 0\vec{c}$$

$$\vec{c}' = 0\vec{a} + 0\vec{b} + 1\vec{c}$$

La matrice de transformation est :

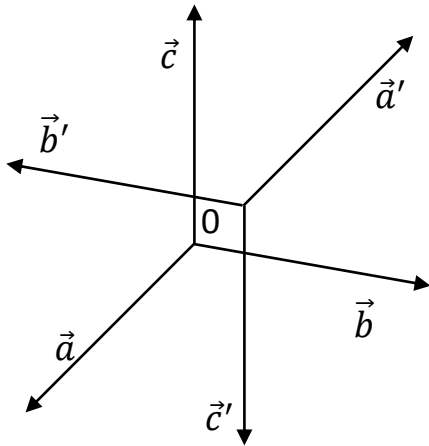
$$[R] = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Quelque soit le repère, x, y, z se transforment en x', y', z' par la rotation de $\bar{2}$ de la manière suivante :

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x - y \\ x \\ z \end{bmatrix}$$

Centre d'inversion : $2\pi + \bar{1}$

Quelque soit le repère.



$$\vec{a}' = -1\vec{a} + 0\vec{b} + 0\vec{c}$$

$$\vec{b}' = 0\vec{a} - 1\vec{b} + 0\vec{c}$$

$$\vec{c}' = 0\vec{a} + 0\vec{b} - 1\vec{c}$$

La matrice de transformation est :

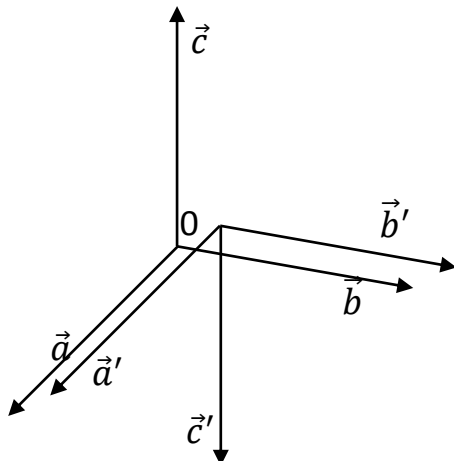
$$[R] = \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix}$$

Quelque soit le repère, x, y, z se transforment en x', y', z' par la rotation de \square de la manière suivante :

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ \bar{z} \end{bmatrix}$$

Miroir $m = \bar{2} : \pi + \bar{1}$

pour \vec{a} et \vec{b} dans le plan et \vec{c} perpendiculaire à m .



$$\vec{a}' = 1\vec{a} + 0\vec{b} + 0\vec{c}$$

$$\vec{b}' = 0\vec{a} + 1\vec{b} + 0\vec{c}$$

$$\vec{c}' = 0\vec{a} + 0\vec{b} - 1\vec{c}$$

La matrice de transformation est :

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

Quelque soit le repère, x, y, z se transforment en x', y', z' par la réflexion, par rapport au plan $\vec{a}\vec{b}$ la manière suivante :

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ \bar{z} \end{bmatrix}$$

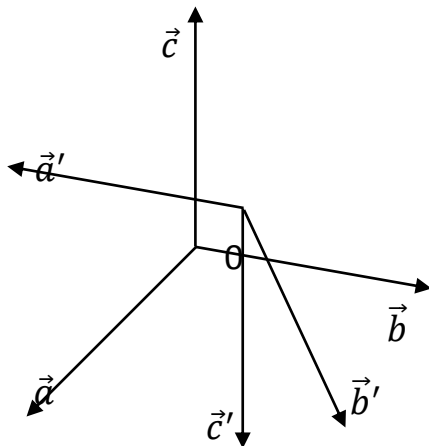
Suivant \vec{c} , $\bar{2}$ est équivalent à un axe binaire suivant \vec{c} auquel s'ajoute un centre de symétrie en O.

Soit :

$$R = \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix}.$$

Opérateur $\bar{3} : \frac{2\pi}{3} + \bar{1}$

\vec{c} selon L'axe 3, \vec{a} et \vec{b} perpendiculaire à \vec{c} te forment entre eux l'angle $\frac{2\pi}{3}$.



$$\vec{a}' = 0\vec{a} - 1\vec{b} + 0\vec{c}$$

$$\vec{b}' = 1\vec{a} + 1\vec{b} + 0\vec{c}$$

$$\vec{c}' = 0\vec{a} + 0\vec{b} - 1\vec{c}$$

La matrice de transformation est :

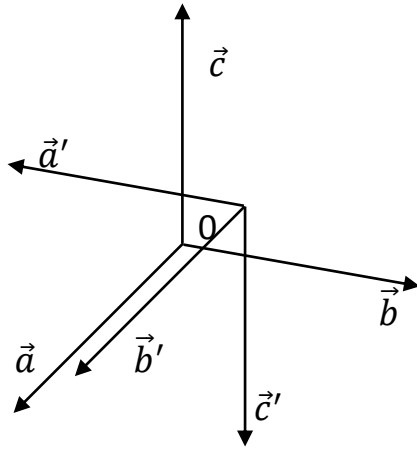
$$[R] = \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix}$$

Quelque soit le repère, x, y, z se transforment en x', y', z' par l'opération $\bar{3}$ de la manière suivante :

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y \\ y - x \\ \bar{z} \end{bmatrix}.$$

Opérateur $\bar{4} : \frac{\pi}{2} + \bar{1}$

L'axe 4 selon \vec{c} , \vec{a} et \vec{b} perpendiculaire à \vec{c} te forment entre eux l'angle droite.



$$\vec{a}' = 0\vec{a} - 1\vec{b} + 0\vec{c}$$

$$\vec{b}' = 1\vec{a} + 0\vec{b} + 0\vec{c}$$

$$\vec{c}' = 0\vec{a} + 0\vec{b} - 1\vec{c}$$

La matrice de transformation est :

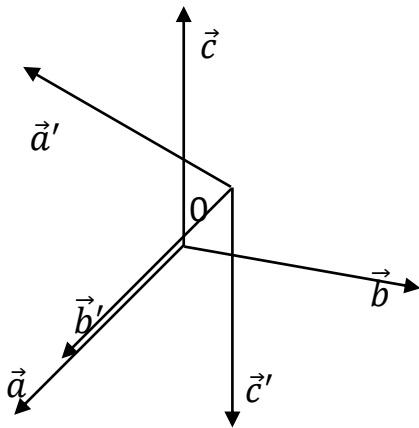
$$[R] = \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix}$$

Quelque soit le repère, x, y, z se transforment en x', y', z' par l'opération $\bar{4}$ de la manière suivante :

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y \\ \bar{x} \\ \bar{z} \end{bmatrix}$$

Opérateur $\bar{6} : \frac{\pi}{3} + \bar{1}$

\vec{c} selon l'axe 6, \vec{a} et \vec{b} perpendiculaire à \vec{c} te forment entre eux l'angle $\frac{2\pi}{3}$.



$$\vec{a}' = -1\vec{a} - 1\vec{b} + 0\vec{c}$$

$$\vec{b}' = 1\vec{a} + 0\vec{b} + 0\vec{c}$$

$$\vec{c}' = 0\vec{a} + 0\vec{b} - 1\vec{c}$$

La matrice de transformation est :

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

Quelque soit le repère, x, y, z se transforment en x', y', z' par l'opération $\bar{6}$ de la manière suivante :

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{1} & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y - x \\ \bar{x} \\ \bar{z} \end{bmatrix}.$$

II.2 Axes hélicoïdaux [2]

Il s'agit de chercher dans quelles conditions une rotation de $2\pi/n$ autour d'un axe n suivie

ou précédée d'une translation \vec{t} parallèle à cet axe, peut amener une maille du réseau coïncidé avec une autre. n_m est le symbole de cette opération composée : l'axe hélicoïdal, ou n est l'ordre de l'axe. Le nombre entier m précise la part translatrice \vec{t} de l'opération associée (n, \vec{t}) Un axe de rotation est toujours parallèle à une rangée de nœuds du cristal.

Si d est la distance entre deux nœuds consécutifs de cette rangée, pour qu'il y ait coïncidence une fois cette translation hélicoïdale achevée, il faut évidemment que: $n\vec{t} = m\vec{d} \leftrightarrow \vec{t} = \frac{m}{n}\vec{d}$.

Considérons que l'on peut toujours au cas où : $0 < |\vec{t}| < |\vec{d}|$

Ceci implique: $0 < m < n$.
















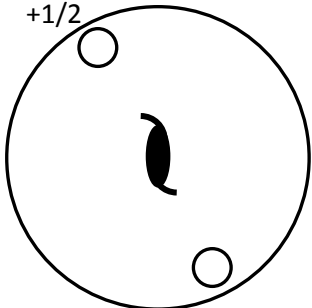
N	m	Axe	Symbole graphique	Nature de la translation
2	0	2		0
	1	2 ₁		1/2
3	0	3		0
	1	3 ₁		1/3
	2	3 ₂		2/3
4	0	4		0
	1	4 ₁		1/4
	2	4 ₂		1/2
	3	4 ₃		3/4
6	0	6		0
	1	6 ₁		1/6
	2	6 ₂		1/3
	3	6 ₃		1/2
	4	6 ₄		2/3
	5	6 ₅		5/6

Tableau II.2: Représentation graphique et symboles des axes hélicoïdaux.

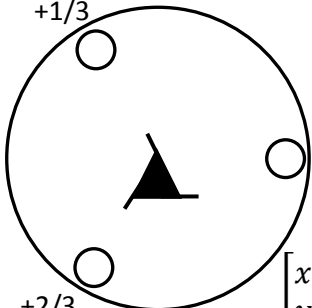
II.2.1 Représentation matricielle: ($\vec{t} // \vec{c}$)

Opération 2₁



$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ \frac{1}{2} + z \end{bmatrix}.$$

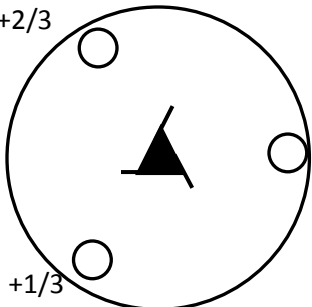
Opération 3₁



$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x - y \\ \frac{1}{3} + z \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x - y \\ \frac{1}{3} + z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y - x \\ \bar{x} \\ \frac{2}{3} + z \end{bmatrix}$$

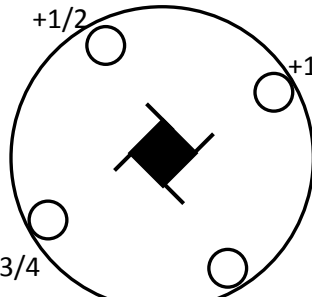
Opération 3₂



$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{2}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x - y \\ \frac{2}{3} + z \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x - y \\ \frac{2}{3} + z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{2}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y - x \\ \bar{x} \\ \frac{4}{3} + z \end{bmatrix}$$

Opération 4₁

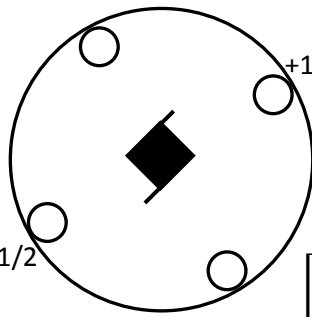


$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x \\ \frac{1}{4} + z \end{bmatrix}.$$

$$\begin{bmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x - y \\ \frac{1}{4} + z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ \frac{1}{2} + z \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x''' \\ y''' \\ z''' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ \frac{1}{2} + z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y \\ \bar{x} \\ \frac{3}{4} + z \end{bmatrix}$$

Opération 4₂

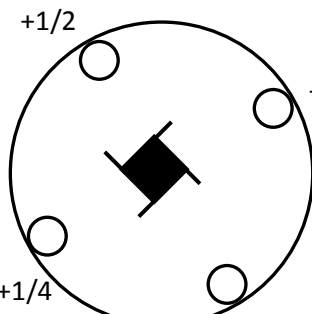


$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x \\ \frac{1}{2} + z \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x \\ \frac{1}{2} + z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ z \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x''' \\ y''' \\ z''' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y \\ \bar{x} \\ \frac{1}{2} + z \end{bmatrix}$$

Opération 4₃

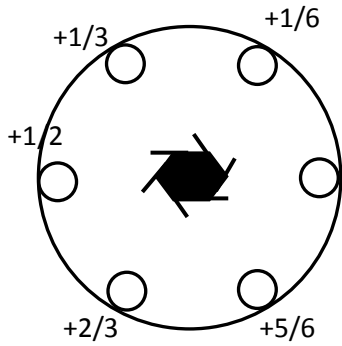


$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{3}{4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x \\ \frac{3}{4} + z \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x \\ \frac{3}{4} + z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{3}{4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ \frac{1}{2} + z \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x''' \\ y''' \\ z''' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ \frac{1}{2} + z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{3}{4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y \\ \bar{x} \\ \frac{1}{4} + z \end{bmatrix}$$

Opération 6₁



$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x - y \\ x \\ \frac{1}{6} + z \end{bmatrix}.$$

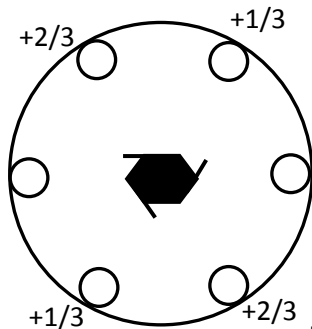
$$\begin{bmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x - y \\ x \\ \frac{1}{6} + z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x - y \\ \frac{1}{3} + z \end{bmatrix}.$$

$$\begin{bmatrix} x''' \\ y''' \\ z''' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x - y \\ \frac{1}{3} + z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ \frac{1}{2} + z \end{bmatrix}.$$

$$\begin{bmatrix} x^4 \\ y^4 \\ z^4 \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x''' \\ y''' \\ z''' \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ \frac{1}{2} + z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y - x \\ \bar{x} \\ \frac{2}{3} + z \end{bmatrix}.$$

$$\begin{bmatrix} x^5 \\ y^5 \\ z^5 \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x^4 \\ y^4 \\ z^4 \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y - x \\ \bar{x} \\ \frac{2}{3} + z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y \\ y - x \\ \frac{5}{6} + z \end{bmatrix}.$$

Opération 6₂



$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x - y \\ x \\ \frac{1}{3} + z \end{bmatrix}.$$

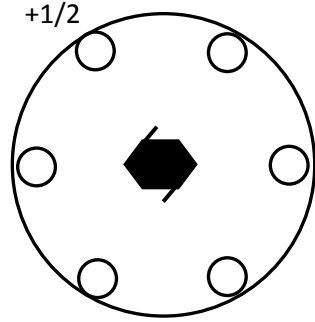
$$\begin{bmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x - y \\ x \\ \frac{1}{3} + z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x - y \\ \frac{2}{3} + z \end{bmatrix}.$$

$$\begin{bmatrix} x''' \\ y''' \\ z''' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x - y \\ \frac{2}{3} + z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ z \end{bmatrix}.$$

$$\begin{bmatrix} x^4 \\ y^4 \\ z^4 \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x''' \\ y''' \\ z''' \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y - x \\ \bar{x} \\ \frac{1}{3} + z \end{bmatrix}.$$

$$\begin{bmatrix} x^5 \\ y^5 \\ z^5 \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x^4 \\ y^4 \\ z^4 \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y-x \\ \bar{x} \\ \frac{1}{3}+z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y \\ y-x \\ \frac{2}{3}+z \end{bmatrix}.$$

Opération 6₃



$$+1/2 \begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x-y \\ x \\ \frac{1}{2}+z \end{bmatrix}.$$

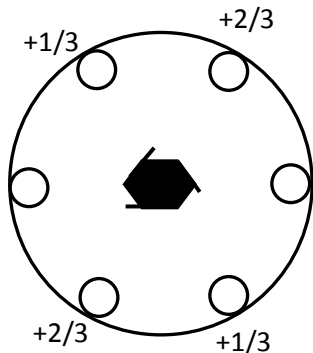
$$+1/3 \begin{bmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x-y \\ x \\ \frac{1}{2}+z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x-y \\ z \end{bmatrix}.$$

$$\begin{bmatrix} x''' \\ y''' \\ z''' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x-y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ \frac{1}{2}+z \end{bmatrix}.$$

$$\begin{bmatrix} x^4 \\ y^4 \\ z^4 \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x''' \\ y''' \\ z''' \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ \frac{1}{2}+z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y-x \\ \bar{x} \\ z \end{bmatrix}.$$

$$\begin{bmatrix} x^5 \\ y^5 \\ z^5 \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x^4 \\ y^4 \\ z^4 \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y-x \\ \bar{x} \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y \\ y-x \\ \frac{1}{2}+z \end{bmatrix}.$$

Opération 6₄



$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{2}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x-y \\ x \\ \frac{2}{3}+z \end{bmatrix}.$$

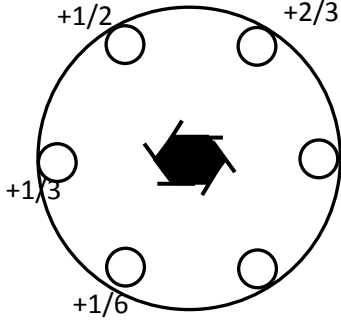
$$\begin{bmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x-y \\ x \\ \frac{2}{3}+z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{2}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x-y \\ \frac{1}{3}+z \end{bmatrix}.$$

$$\begin{bmatrix} x''' \\ y''' \\ z''' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x-y \\ \frac{1}{3}+z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{2}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ z \end{bmatrix}.$$

$$\begin{bmatrix} x^4 \\ y^4 \\ z^4 \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x''' \\ y''' \\ z''' \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{2}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y - x \\ \bar{x} \\ \frac{2}{3} + z \end{bmatrix}.$$

$$\begin{bmatrix} x^5 \\ y^5 \\ z^5 \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x^4 \\ y^4 \\ z^4 \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y - x \\ \bar{x} \\ \frac{2}{3} + z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{2}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y \\ y - x \\ \frac{1}{3} + z \end{bmatrix}.$$

Opération 6₅



$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{5}{6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x - y \\ x \\ \frac{5}{6} + z \end{bmatrix}.$$

$$\begin{bmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x - y \\ x \\ \frac{5}{6} + z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{5}{6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x - y \\ \frac{2}{3} + z \end{bmatrix}.$$

$$\begin{bmatrix} x''' \\ y''' \\ z''' \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{y} \\ x - y \\ \frac{2}{3} + z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{5}{6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ \frac{1}{2} + z \end{bmatrix}.$$

$$\begin{bmatrix} x^4 \\ y^4 \\ z^4 \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x''' \\ y''' \\ z''' \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ \frac{1}{2} + z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{5}{6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y - x \\ \bar{x} \\ \frac{1}{3} + z \end{bmatrix}.$$

$$\begin{bmatrix} x^5 \\ y^5 \\ z^5 \end{bmatrix} = [\tilde{R}] \begin{bmatrix} x^4 \\ y^4 \\ z^4 \end{bmatrix} + [\vec{t}] = \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y - x \\ \bar{x} \\ \frac{1}{3} + z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{5}{6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y \\ y - x \\ \frac{1}{6} + z \end{bmatrix}.$$

II.3. Plans de glissement

Une autre opération (m, \vec{t}) de symétrie est la réflexion par rapport à un plan m (miroir) suivie ou précédée d'une translation \vec{t} parallèle au plan. \vec{t} doit être compatible avec l'état cristallin, c'est donc une fraction de la période dans la direction de \vec{t} , orienté selon une rangée parallèle au plan m [2].

Ils existent cinq plans de glissement :

Glissement d'une demi-translation a ou b ou c , c'est-à-dire :

$(m, \frac{1}{2}\vec{a})$ ou $(m, \frac{1}{2}\vec{b})$ ou $(m, \frac{1}{2}\vec{c})$: symbole a ou b , ou c respectivement.

Glissement d'une demi-translation $a + b$ ou $c + a$ ou $b + c$, c'est-à-dire :

$\left(m, \frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b})\right)$ ou $\left(m, \frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b})\right)$, ou $\left(m, \frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b})\right)$ respectivement : symbole n .
 Dans maille centrée F et I, glissement d'un quart de la translation $a \mp b$, $b \mp c$ ou $c \mp a$ (F) ou $a \mp b \mp c$ (I), c'est-à-dire : $\left(m, \frac{1}{4}(\vec{a} \mp \vec{b})\right)$ ou $\left(m, \frac{1}{4}(\vec{b} \mp \vec{c})\right)$, ou $\left(m, \frac{1}{4}(\vec{c} \mp \vec{a})\right)$ ou $\left(m, \frac{1}{4}(\vec{a} \mp \vec{b} \mp \vec{c})\right)$ respectivement: symbole d .

On a donné le tableau II.3 toutes les présentations usuelles de plans de glissement adoptés par le système international.



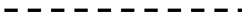






plan	Symbole graphique	
	Plan perpendiculaire au plan de projection	Plan parallèle au plan de projection
m		
a, b		
c		Néant
n		
d		

Tableau II.3: symboles et représentation graphique des plans de glissement.

Chapitre III :

Réseaux de Bravais

III. Réseaux de Bravais

III.1 Dénombrement des modes de réseaux de Bravais pour le système monoclinique

La classification des réseaux en réseaux de Bravais est une classification basée sur la topologie des réseaux. Les réseaux de Bravais représentent les types de mailles conventionnelles possibles pour décrire les réseaux. Il n'existe qu'un nombre fini de réseaux de Bravais pour un espace de dimension donnée. Un réseau de Bravais regroupe donc un ensemble infini de réseaux qui ont les mêmes propriétés topologiques et de symétrie, indépendamment des vecteurs de base utilisés pour les décrire [3, 11].

Lorsque la maille élémentaire utilisée n'est pas primitive, il existe des translations $\vec{t} = x\vec{a} + y\vec{b} + z\vec{c}$ pour lesquelles x, y, z ne sont pas entiers. Ce fait sera illustré dans un réseau bidimensionnel rectangulaire possédant un miroir parallèle à $\vec{b}\vec{c}$, comme indiqué sur la figure III.1.

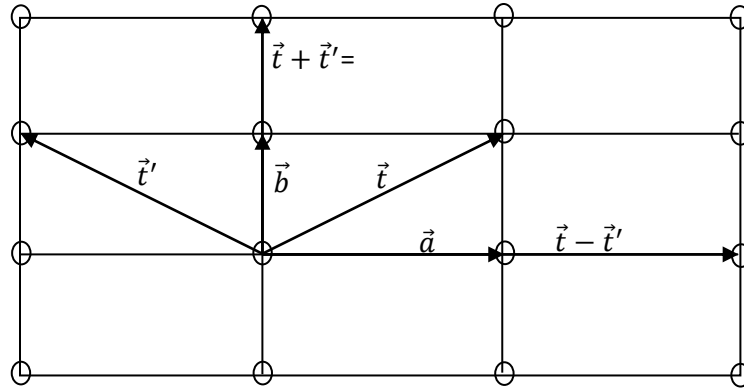


Figure III.1.1: Réseau bidimensionnel rectangulaire.

Soit \vec{t} une translation simple de réseau.

$$\vec{t} = x\vec{a} + y\vec{b}$$

Le vecteur \vec{t}' est le vecteur obtenu à partir de \vec{t} par rotation binaire autour de \vec{b} :

$$\vec{t}' = [m]_{yz}\vec{t} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

Formons $\vec{t} + \vec{t}'$ et $\vec{t} - \vec{t}'$.

Sont des vecteurs du réseau porté par \vec{b} et \vec{a} respectivement, on en déduit :

$$\vec{t} + \vec{t}' = \vec{t} + [m]_{yz}\vec{t} = v\vec{b} \quad (v \text{ plus petit entier}).$$

$$\vec{t} - \vec{t}' = \vec{t} - [m]_{yz}\vec{t} = u\vec{a} \quad (u \text{ plus petit entier}).$$

Écrivons ces deux relations en notation matricielle :

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x} \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 2y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ v \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2x \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u \\ 0 \end{bmatrix}$$

Avec : $x = \frac{1}{2}u$ et $y = \frac{1}{2}v$

Donc :

$$\vec{t} = \frac{1}{2}(u\vec{a} + v\vec{b})$$

Du fait des hypothèses sur u et v , x et y sont nécessairement des demi_entiers et les seules translations possibles suivant x et y sont illustrées dans le tableau III.1.1.

u	v	\vec{t}
0	0	$\vec{0}$
1	0	$\frac{1}{2}\vec{a}$
0	1	$\frac{1}{2}\vec{b}$
1	1	$\frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b})$

Tableau III.1.1: Vecteurs de translation dans un réseau bidimensionnel.

Pour $\vec{t} = \vec{0}$, on obtient le réseau orthorhombique simple et correspondre au mode p ;les translations $\frac{1}{2}\vec{a}$ ou $\frac{1}{2}\vec{b}$ correspondent à des solution contraires aux hypothèses de départ. La solution $\frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b})$ correspondre au mode de réseau .Dans le cas d'un réseau à trois dimensions dans le système orthorhombique.

$$\text{Soit } [2]_{\alpha} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix} \quad ; \quad [2]_{\beta} = \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix} \quad ; \quad [2]_{\gamma} = \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

respectivement les matrices des axes $2 \parallel a$, $2 \parallel b$, $2 \parallel c$.

Les translations possibles sont illustrées dans le tableau III.1.2.

u	v	w	\vec{t}
0	0	0	$\vec{0}$
1	0	0	$\frac{1}{2}\vec{b}$
0	1	0	$\frac{1}{2}\vec{b}$
0	0	1	$\frac{1}{2}\vec{c}$
1	1	0	$\frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b})$
1	0	1	$\frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{c})$
0	1	1	$\frac{1}{2}(\vec{b} + \vec{c})$
1	1	1	$\frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b} + \vec{c})$

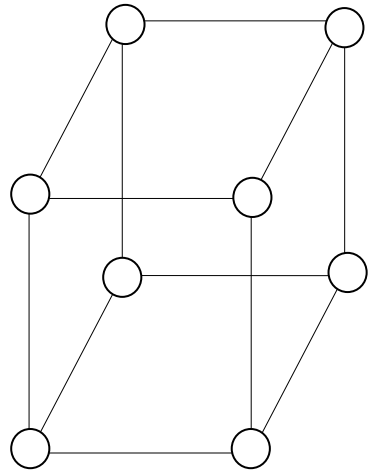
Tableau III.1.2: Vecteurs de translation dans un réseau tridimensionnel.

Pour : $\vec{t} = \vec{0}$, on obtient le réseau orthorhombique simple qui correspond au mode P ; les translations $\frac{1}{2}\vec{a}$ ou $\frac{1}{2}\vec{b}$ correspondent à des solutions contraires aux hypothèses de départ. La solution $\frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b})$; $\frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{c})$ ou $\frac{1}{2}(\vec{b} + \vec{c})$ correspond aux modes de réseau C, A, B respectivement. La dernière solution $\vec{t} = \frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b} + \vec{c})$ correspond à une maille centrée I. Dans le cas où toutes les faces sont centrées : c'est le mode F.

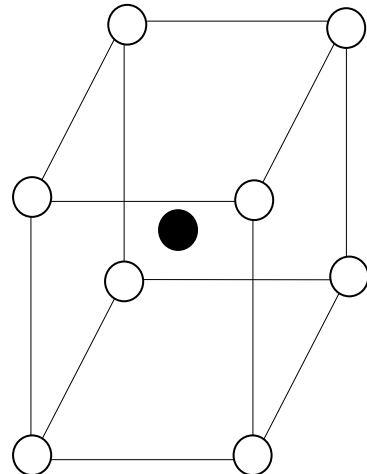
On distingue quatre types de mailles selon la disposition des atomes (et donc des nœuds du réseau) dans la maille tableau III.1.3.

Disposition des atomes dans le parallélépipède	Nom de la maille
Aux huit sommets seulement	Simple ou primitive (P)
Aux huit sommets et au centre	Centrée (I)
Aux huit sommets et au centre des faces	À faces centrées (F)
-Aux huit sommets et aux centres de deux faces parallèles	À bases centrées (C)

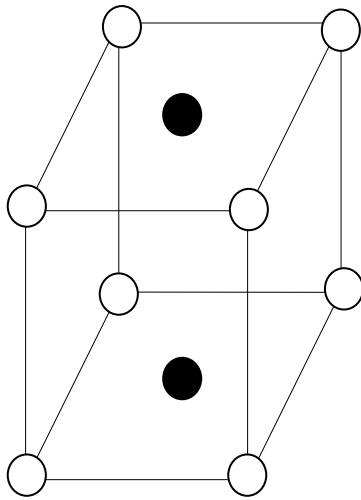
Tableau III.1.3: Différents types de mailles.



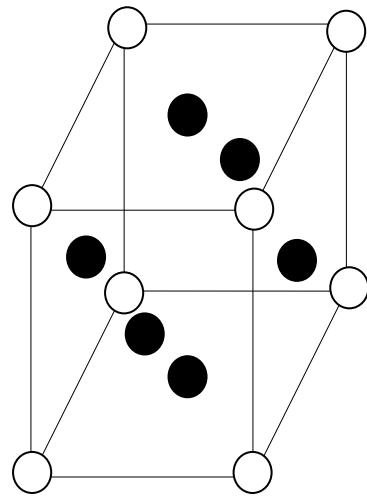
Orthorhombique P



Orthorhombique I



Orthorhombique C



Orthorhombique F

III.2 Réseau de Bravais pour les autres systèmes

Il reste dix réseaux de Bravais pour les autres systèmes.

Système	mode
Triclinique	P
Monoclinique	P, C
Quadratique	P, I
Rhomboédrique	P ou R
Hexagonal	P
Cubique	P, I, F

Tableau III.2: les différents types de mailles.

Chapitre IV :

Groupes spatiaux

IV. Groupes spatiaux

IV.1. Introduction [10,11]

Il existe 230 groupes de recouvrement, répartis entre 32 classes de symétrie d'orientation dans 7 systèmes cristallins.

Ici encore, le groupe spatial résulte de la combinaison d'un mode de réseau avec une classe de symétrie d'orientation appartenant au même système. A chacune des 32 classes de symétrie vont donc correspondre plusieurs groupes spatiaux, pour les dénombrer on utilise, là aussi, la notation de Herman_Mauguin. Elle consiste à faire précéder le symbole international de la classe ponctuelle de la majuscule P, C, I, F ou R précisant le mode de réseau de Bravais et ce mode indique bien sur les translations internes de la maille élémentaire.

IV.2. Directions de symétrie du système orthorhombique [3]

Trois symboles (chiffre ou lettre) relatifs successivement aux trois directions de symétrie

\vec{a} , \vec{b} puis \vec{c} .

IV.3. Dénombrement des groupes spatiaux du système orthorhombique de la classe 222

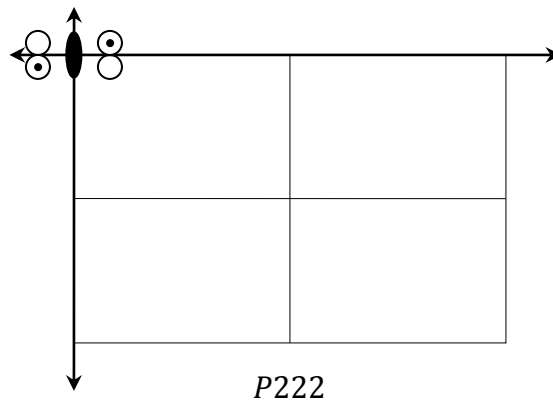
Dénombrement des groupes spatiaux peut se faire à l'aide d'une méthode géométrique.

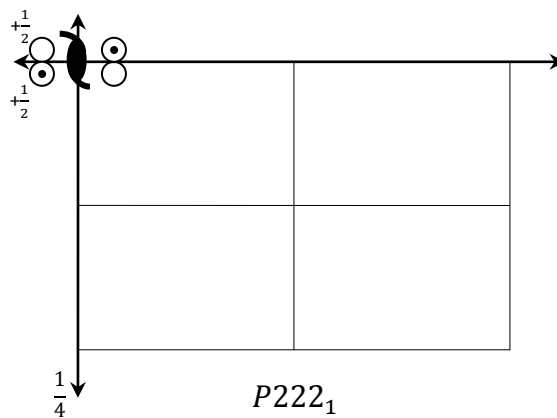
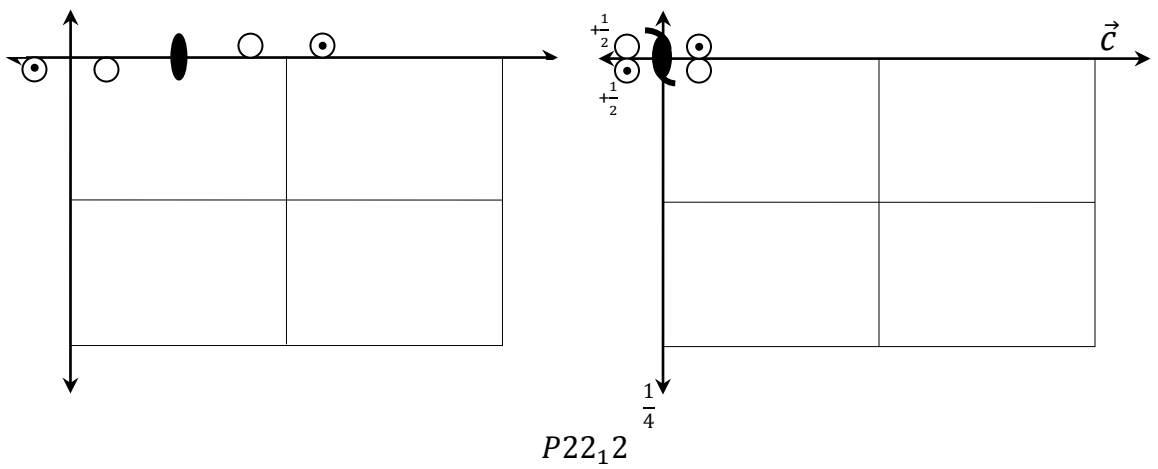
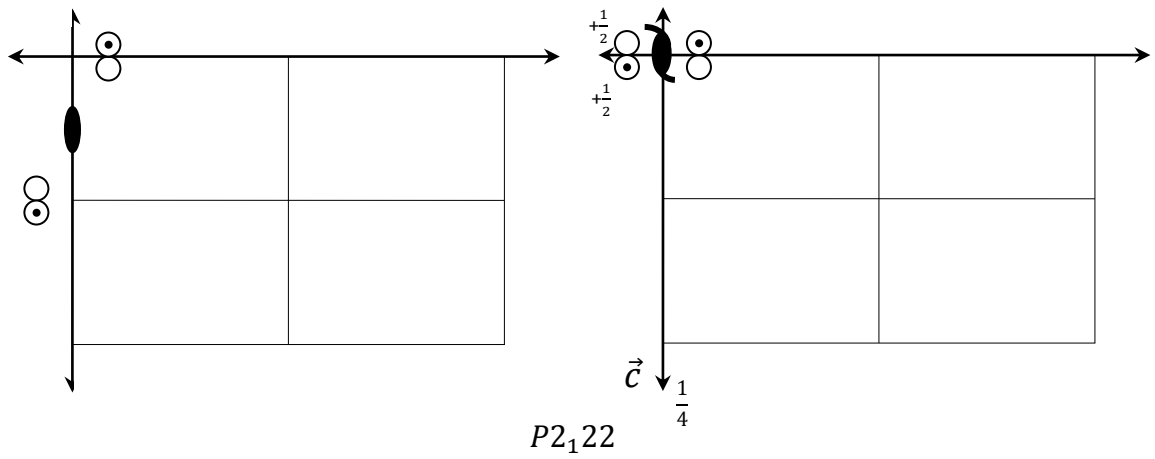
Ainsi pour la classe 222 du système orthorhombique correspondent les modes P, C, I, F. Les modes A et B étant équivalent à C. A priori :

- Pour le mode P: $P222$, $P2_122$, $P22_12$, $P222_1$, $P2_12_12$, $P22_12_1$, $P2_122_1$, $P2_12_12_1$.
- Pour le mode C: $C222$, $C2_122$, $C22_12$, $C222_1$, $C2_12_12$, $C22_12_1$, $C2_122_1$, $C2_12_12_1$.
- Pour le mode I: $I222$, $I2_122$, $I22_12$, $I222_1$, $I2_12_12$, $I22_12_1$, $I2_122_1$, $I2_12_12_1$.
- Pour le mode F: $F222$, $F2_122$, $F22_12$, $F222_1$, $F2_12_12$, $F22_12_1$, $F2_122_1$, $F2_12_12_1$.

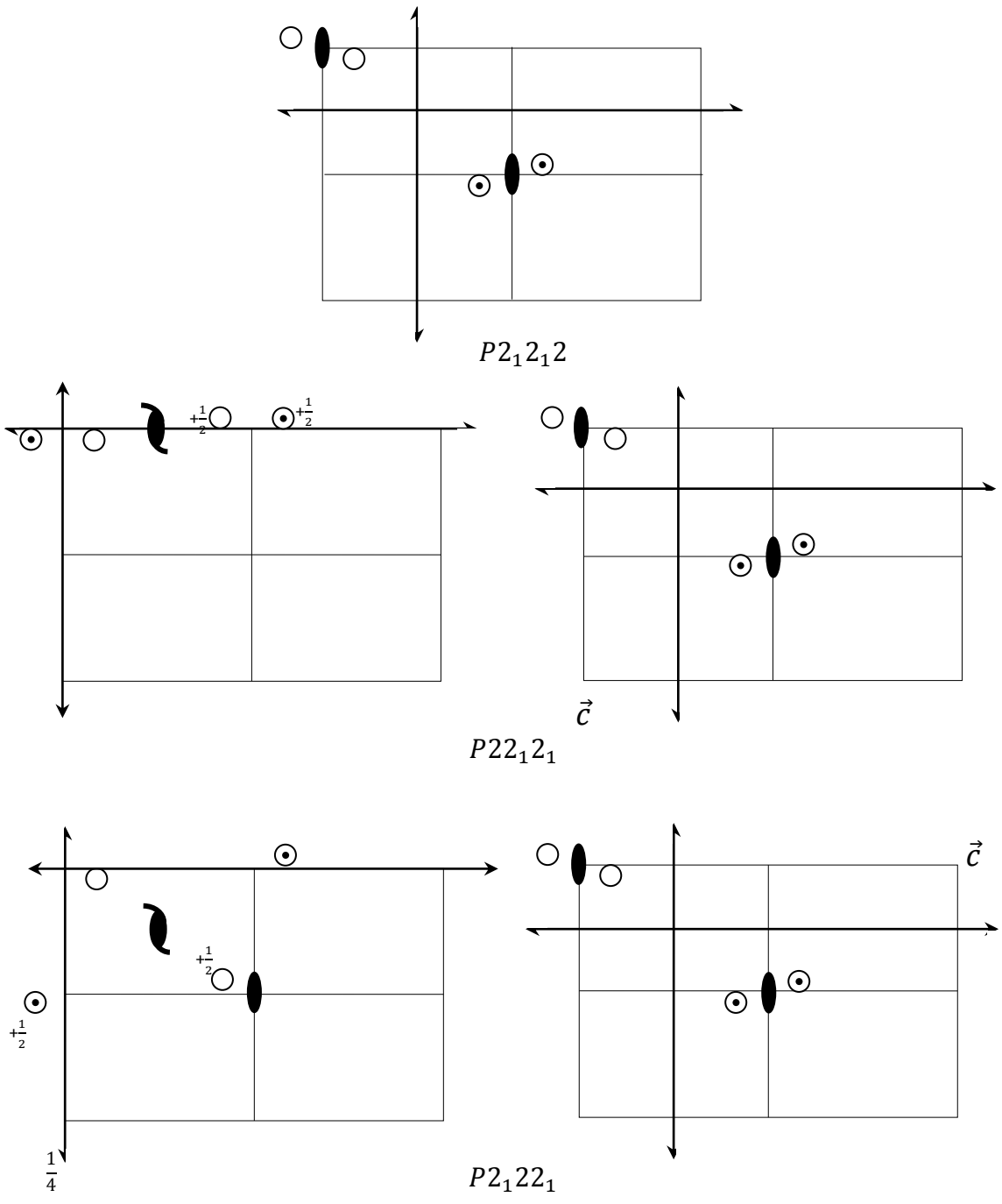
Soit 32 groupes.

IV.3.1. Groupes d'espace dérivés de la classe 222

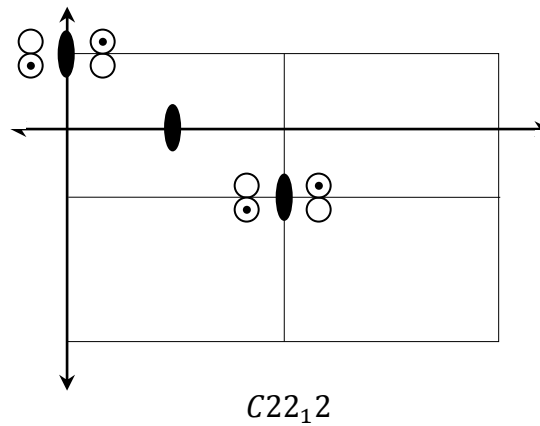
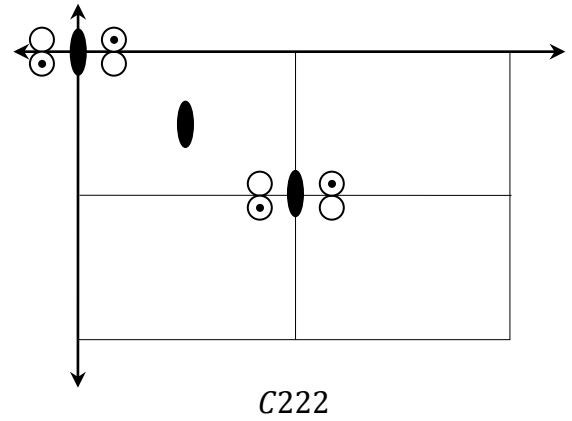
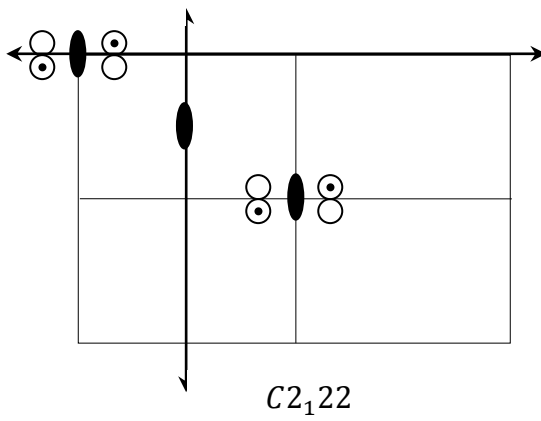
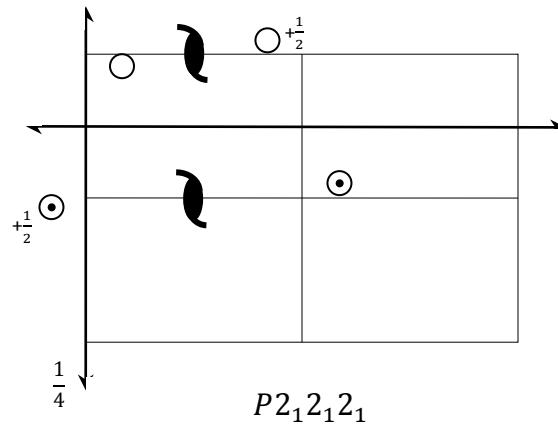




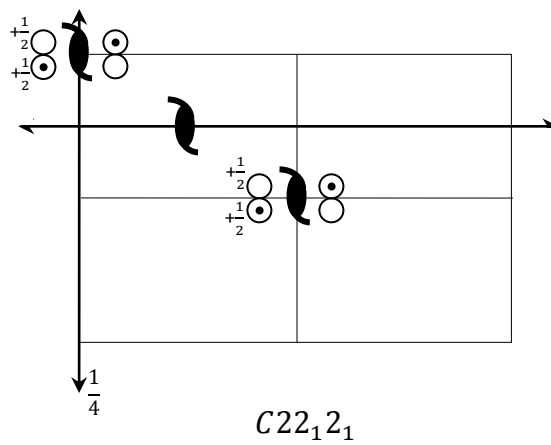
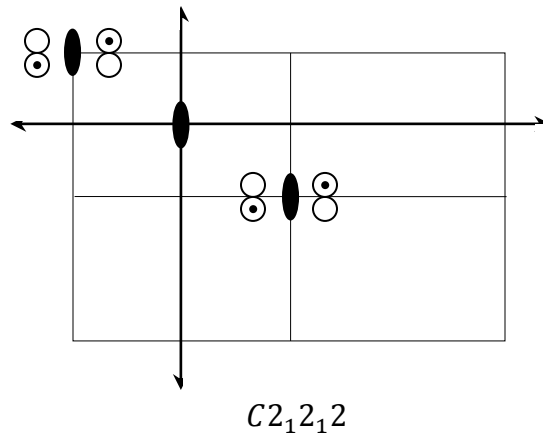
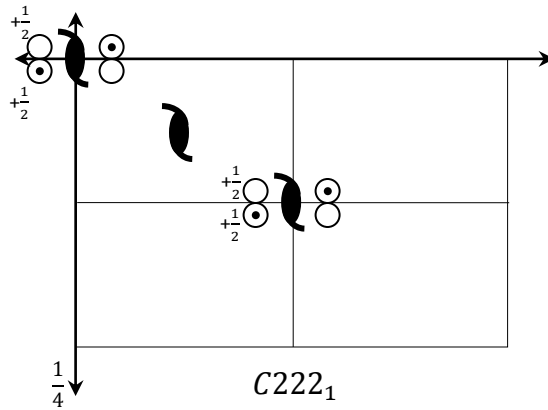
Par une permutation des axes \vec{a} et \vec{c} on transforme $P2_122$ en $P222_1$, et par une permutation des axes \vec{b} et \vec{c} on transforme $P22_12$ en $P222_1$.
 Donc on choisit le groupe $P222_1$.



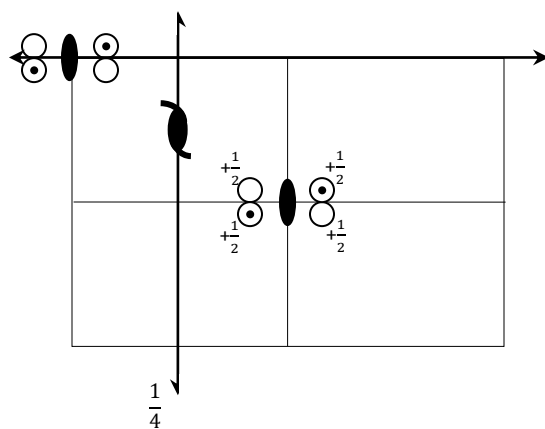
Par une permutation des axes \vec{a} et \vec{c} on transforme $P22_12_1$ en $P2_12_12$ et par une permutation des axes \vec{b} et \vec{c} on transforme $P2_122_1$ en $P2_12_12$.
 Donc on trouve le groupe $P2_12_12$.



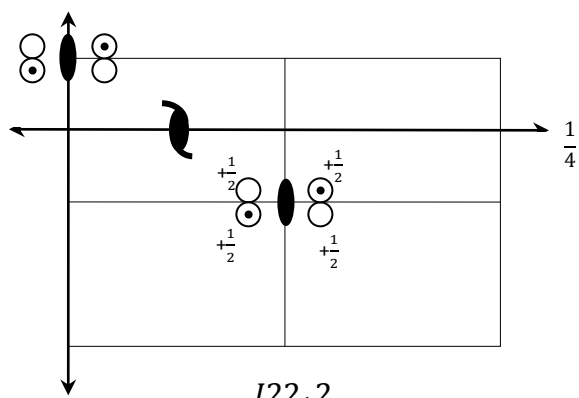
On observe que le groupes $C222$, $C2_12_2$ et $C2_12_2$ sont identiques. On choisit le groupe $C222$.



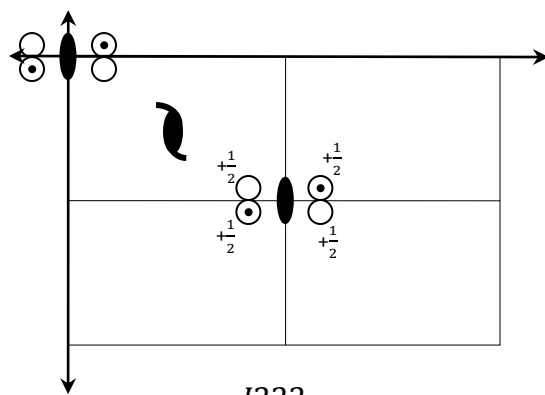
L'étude du groupe $C2_12_12$ donne un résultat identique à celui du groupe $C222$, et le groupe $C222_1$ est identique avec le groupe $C22_12_1$ et on choisit le groupe $C222_1$.



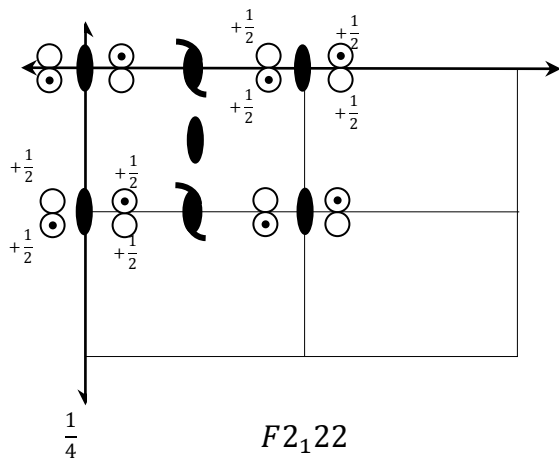
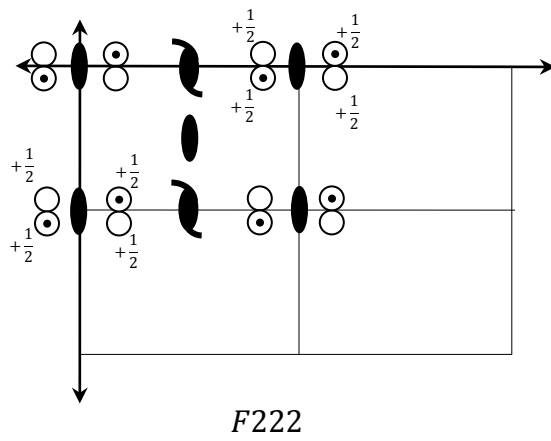
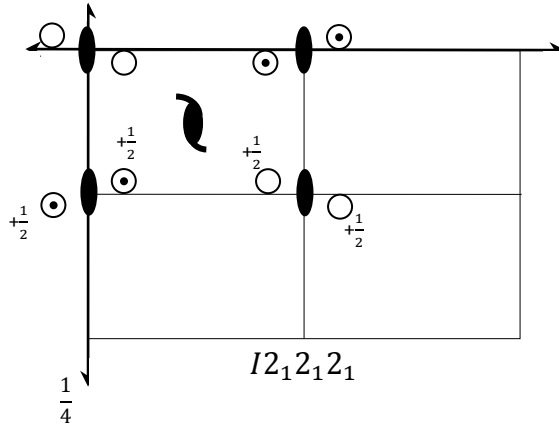
$I2_122$

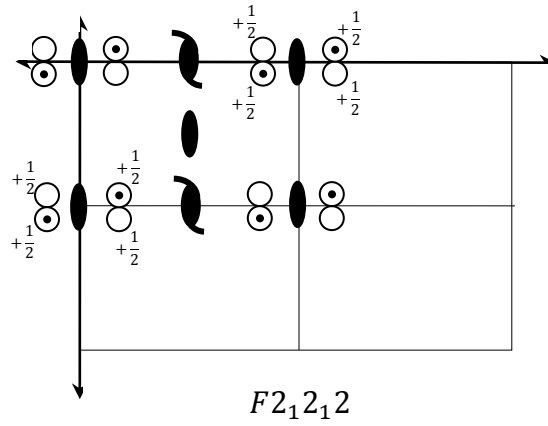
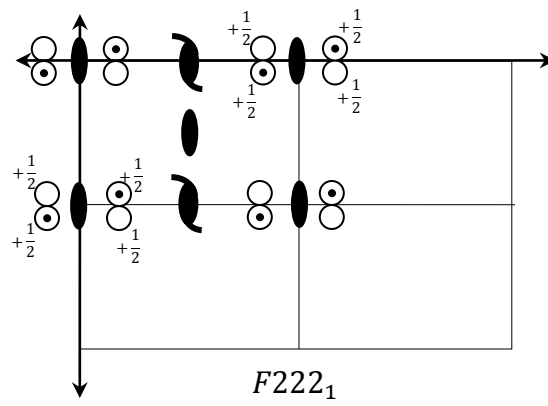
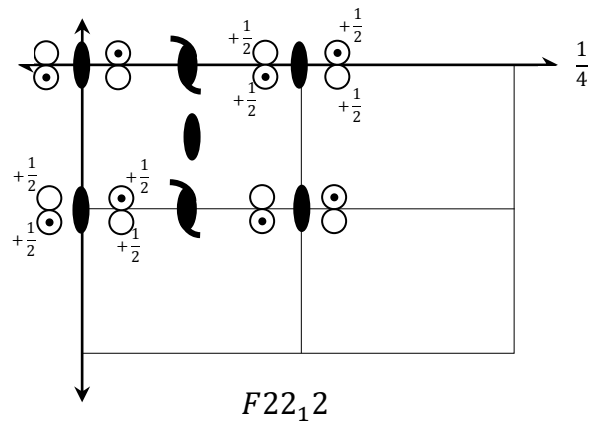


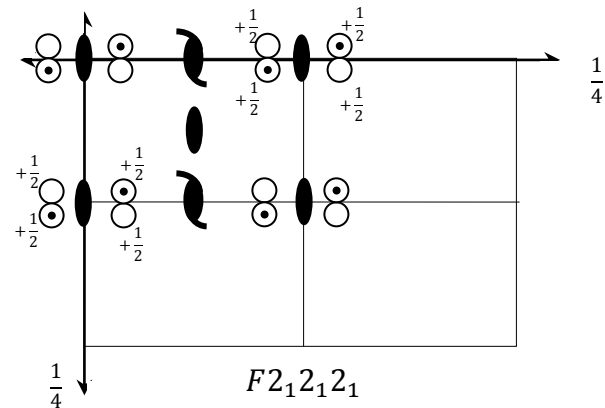
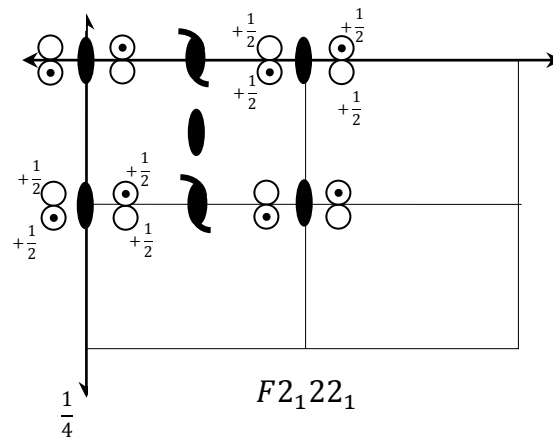
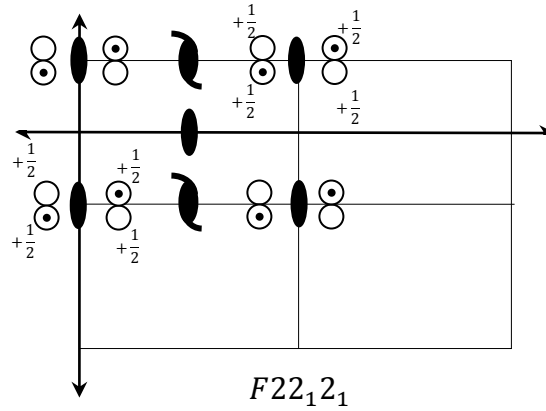
$I22_12$



$I222_1$







Les groupes $F222$, $F2_1 2 2$, $F22_1 2$, $F222_1$, $F2_1 2_1 2$, $F22_1 2_1$, $F2_1 2 2_1$ et $F2_1 2_1 2_1$ sont identiques et on trouve le groupe $F222$.

Donc les groupes issus de la classe 222 avec les 4 modes de réseau de Bravais sont : $P222$, $P222_1$, $P2_1 2_1 2$, $P2_1 2_1 2_1$, $C222$, $C222_1$, $I222$, $I2_1 2_1 2_1$, $F222$.

VI.3. Coordonnées des positions équivalentes

Groupe	Coordonnées des positions équivalentes
$P222$	$x, y, z ; x, \bar{y}, \bar{z} ; \bar{x}, y, \bar{z} ; \bar{x}, \bar{y}, z$
$P222_1$	$x, y, z ; x, \bar{y}, \frac{1}{2} - z ; \bar{x}, y, \bar{z} ; \bar{x}, \bar{y}, \frac{1}{2} + z$
$P2_12_12$	$x, y, z ; \bar{x}, \bar{y}, z ; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y, \bar{z} ; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, \bar{z}$
$P2_12_12_1$	$x, y, z ; \frac{1}{2} + x, \bar{y}, \frac{1}{2} - z ; \bar{x}, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} + z ; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, \bar{z}$
$C222$	$x, y, z ; x, \bar{y}, \bar{z} ; \bar{x}, y, \bar{z} ; \bar{x}, \bar{y}, z ;$ $\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + y, z ; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y, \bar{z} ; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, \bar{z} ; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} - y, z$
$C222_1$	$x, y, z ; x, \bar{y}, \frac{1}{2} - z ; \bar{x}, y, \bar{z} ; \bar{x}, \bar{y}, \frac{1}{2} + z ;$ $\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + y, z ; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} - z ; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} + z ; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, \bar{z}$
$I222$	$x, y, z ; x, \bar{y}, \bar{z} ; \bar{x}, y, \bar{z} ; \bar{x}, \bar{y}, z ; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} + z ; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} - z ;$ $\frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - z ; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} + z$
$I2_12_12_1$	$x, y, z ; \bar{x}, \bar{y}, z ; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} + z ; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} + z ; \frac{1}{2} - x, y, \frac{1}{2} - z ;$ $\frac{1}{2} + x, \bar{y}, \frac{1}{2} - z ; x, \frac{1}{2} - y, \bar{z} ; \bar{x}, \frac{1}{2} + y, \bar{z}$
$F222$	$x, y, z ; x, \bar{y}, \bar{z} ; \bar{x}, y, \bar{z} ; \bar{x}, \bar{y}, z ;$ $\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + y, z ; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y, \bar{z} ; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, \bar{z} ; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} - y, z ;$ $\frac{1}{2} + x, y, \frac{1}{2} + z ; \frac{1}{2} - x, y, \frac{1}{2} - z ; \frac{1}{2} + x, \bar{y}, \frac{1}{2} - z ; \frac{1}{2} - x, \bar{y}, \frac{1}{2} + z ;$ $x, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} + z ; x, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} - z ; \bar{x}, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - z ; \bar{x}, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} + z$

Conclusion générale

Conclusion générale

Le but essentiel de ce travail était, bien entendu, l'initiation à une technique – simple et très pratique – de dénombrement de groupes spatiaux issus des différentes classes de symétrie pour les différents systèmes cristallins.

Dans un premier temps nous avons d'abord commencé à dénombrer les modes de réseaux de Bravais pour le système orthorhombique. Nous avons trouvé qu'il en possède quatre : P, C, I et F.

Puis nous avons considéré, à priori, toutes les combinaisons possibles entre les modes P, C, I, F d'une part et la classe 222 d'autre part, en sachant que l'axe 2 peut être 2 ou 2_1 , nous avons compté 32 groupes.

Nous avons, donc été amené à reconstruire les stéréogrammes des 32 groupes. En comparant ces stéréogrammes entre eux, soit d'une manière directe soit par permutations des vecteurs de base entre eux, nous avons trouvé que seulement 9 sont distincts.

Bibliographie générale

Références

- [1] J-J. Rousseau, 'Cristallographie géométrique et radiocristallographie avec exercices corrigés', Edition Masson, Paris, 2007.
- [2] S. Dieter 'Cristallographie', Presses Polytechniques et universitaires Romandes, 2006.
- [3] H.Latelli, 'Éléments de cristallographie géométrique', OPU, 2011.
- [4] P. Niggli, Krystallographische und Strukturtheoretische Grund-begriffe, Handbuch der Experimentalphysik, Vol.7, part 1, Akademische Verlagsgesellschaft, Leipzig (1928), [En ligne].
nvlpubs.nist.gov/nistpubs/sp958-lide/188-190.pdf.
(Pages consultées le 06/04 2016).
- [5] International *Tables for Cristallographie*, vol. A: Space-group symmetry, Theo Hahn, Kluwer Academic Publishers, 2005, [En ligne].
<file:///C:/Users/dina/Desktop/Nouveau%20dossier%20%285%29/3.htm>.
(Pages consultées le 22/03/2016).
- [6] G. Chiari, G. Gazzoni, J.R. Craig, G.V. Gibbs, S.J. Louisnathan, « Two independent refinements of the structure of paracelsian », Department of Geology, Lakehead University, Canada, 1985, [En ligne].
<file:///C:/Users/dina/Desktop/Nouveau%20dossier%20%285%29/3.htm>.
(Pages consultées le 22/03/2016).
- [7] J. Sivardière, 'La symétrie en Mathématique, physique et Chimie' PUG, Université de Grenoble, 1995, [En ligne].
<https://www.amazon.fr/sym%C3%A9trie-math%C3%A9matiques-physique-chimie/dp/2706106069>
(Pages consultées le 25/02/2016).
- [8] M. Gauthier 'Cours cristallographie' de École de cristallographie Université de Montréal Canada, 2010, [En ligne].
cge2014.imPMC.upmc.fr/ppt/Garreau.pdf.
(Pages consultées le 25/02/2016).
- [9] S. Ravy 'Cours de Structure de la matière condensée', Université Paris, 2015, [En ligne].
<http://chercheurs.lps.u-psud.fr/m2structure/>
(Pages consultées le 25/02/2016).
- [10] O. Bennaoui, Mémoire de Master, Université de M'sila, Algérie, 2014.
- [11] D. Raddaoui, Mémoire de Master, Université de M'sila, Algérie, 2015.

ملخص

في إطار مشروعنا المتمثل في تعداد المجموعات الفضائية الناتجة عن الأنظمة البلورية، اخترنا هذا العام القيام بتعداد المجموعات الفضائية الناتجة عن الفئة 222 من نظام معيني متعامد المحاور باستخدام أسلوب هندسي بسيط.

في الفصل الأول، ثمنا بتذكير بعض المفاهيم الأساسية لعلم البلورات الهندسية التي نعتبرها ضرورية للفترة المتبقية من المذكرة : الشبكة البلورية، الخلية الأولية وخصائص مختلف النظم البلورية.

الفصل 2 سمح لنا باكتساب الأسس اللازمة : تأثير مختلف عمليات التناظر قبل أن نتطرق، في الفصل 4، إلى المجموعات الفضائية. قد نحتاج في هذا الجزء من المذكرة إلى أساسيات الحسابات المصفوفاتية.

الفصل 3 يقوم بعرض شبكات برفيس و تعدادها من وجهة نظر هندسية بحتة. نحن، بالطبع، قمنا بإثبات وجود أربعة أنماط للنظام معيني متعامد المحاور.

و أخيراً، في الفصل الرابع قمنا بتعداد المجموعات الفضائية للفئة 222 للأنواع الأربعة لشبكات برفيس.

كلمات رئيسية : عمليات التناظر، شبكة برفيس، الفئة 222، مجموعة فضائية.

Résumé

Dans le cadre de notre projet qui consistait à dénombrer les groupes spatiaux issus des systèmes cristallins, nous avons choisi, cette année, de dénombrer les groupes spatiaux issus de la classe 222 du système orthorhombique en utilisant une méthode géométrique très simple.

Dans le premier chapitre, nous avons rappelé quelques notions fondamentales de la cristallographie géométrique que nous estimons nécessaires pour le restant du mémoire : réseau cristallin, maille élémentaire et les caractéristiques des différents systèmes cristallins.

Le chapitre 2 a permis d'acquérir les bases nécessaires : effets des différentes opérations de symétrie avant d'aborder, au chapitre 4, les groupes spatiaux. Il n'est fait appel dans cette partie du mémoire qu'à des notions élémentaires de calculs matriciels.

Le chapitre 3 expose les modes de réseaux de Bravais et leur dénombrement d'un point de vue purement géométrique. Nous avons, bien entendu, démontré l'existence de quatre modes pour le système orthorhombique.

Enfin, le chapitre 4 est consacré au dénombrement des groupes spatiaux issus de la classe 222 du système orthorhombique.

Mots clés : Éléments de symétrie, réseau de Bravais, classe 222, groupe spatial.

Abstract

As part of our project was to count the space groups from the crystal systems, we have chosen this year to count the space groups from the class 222 of the orthorhombic system using a simple geometrical method.

In the first chapter, we recalled some fundamental concepts of geometric crystallography we consider necessary for the remainder of memory: crystal lattice, unit cell and the characteristics of different crystal systems.

Chapter 2 has to acquire the necessary bases: effects of different symmetry operations before addressing, in Chapter 4, the space groups. It is not called in this part of the memory as the basics of matrix calculations.

Chapter 3 outlines the Bravais networks modes and their count from a purely geometrical point of view. We, of course, prove the existence of four modes for the orthorhombic system.

Finally, Chapter 4 is devoted to the enumeration of space groups from the class 222 of the orthorhombic system.

Keywords: Elements of symmetry, Bravais lattice, class 222, space group.