Chapitre 7 : Représentation stéréographique et matricielle des opérateurs de symétrie

7.1 Introduction

Il existe différentes représentations des opérations de symétrie :

o **La notation de Seitz - Bauer** : elle permet d'identifier facilement l'opération de symétrie qu'elle représente : l'opérateur de rotation est écrit à droite, la partie translation à gauche :

- axes hélicoïdaux : la composante parallèle à la direction propre +1 de l'opérateur de rotation donne la composante de glissement
- miroirs à glissement : les deux composantes parallèles aux directions propres dégénérées +1 donnent les directions de glissement (dans le plan du miroir)
- les composantes perpendiculaires sont liées à la position de l'élément de symétrie associé à l'opérateur de symétrie.

o **Représentation matricielle**: la valeur des éléments de la matrice dépend non seulement de l'opération de symétrie qu'elle représente, mais aussi du repère dans lequel elle est exprimée.

L'application successive d'opérations de symétrie se traduit par la multiplication dans l'ordre des matrices qui les représentent. L'écriture et l'identification des opérations de symétrie se fait sans difficulté. Le calcul matriciel est un outil bien adapté à la détermination des coordonnées des positions transformées dans la maille de référence.

o **Projection stéréographique**: la propriété essentielle de la projection stéréographique étant de conserver les angles, on peut aussi l'utiliser pour la représentation des opérateurs de symétrie d'orientation . Elle permet de représenter sur un plan l'effet d'une opération de symétrie isolée ou d'une succession d'opérations. Elle conduit ainsi à des constructions géométriques, qu'il est souvent facile d'interpréter.

On utilisera ces trois types de représentation

7.2 Projection stéréographique

Soit une sphère ayant pour centre le point de concours O des normales aux faces d'un cristal et de rayon p arbitraire. Les points d'intersection de ces normales avec la sphère sont les pôles des faces (en abrégé pôles). On se rend compte facilement que cette projection sphérique n'est guère pratique. La projection stéréographique a été introduite pour projeter la projection sphérique sur un plan.

Soit un axe passant par O, par analogie avec la cartographie, les points d'intersection de cet axe avec la sphère sont les points N et S (pôles Nord et Sud). Le plan diamétral perpendiculaire à N S est le plan équatorial .

En prenant les points N et S comme centres de projection (choix habituel), le plan équatorial est le plan de projection. La projection stéréographique d'un pôle P est l'intersection p de la droite SP avec le plan.

On vérifie que : $\overline{SP}\,\overline{Sp} = 2\,R^2$

p est l'image de P par une inversion (au sens mathématique) de centre S et de puissance $2R^2$. Fig 7.1

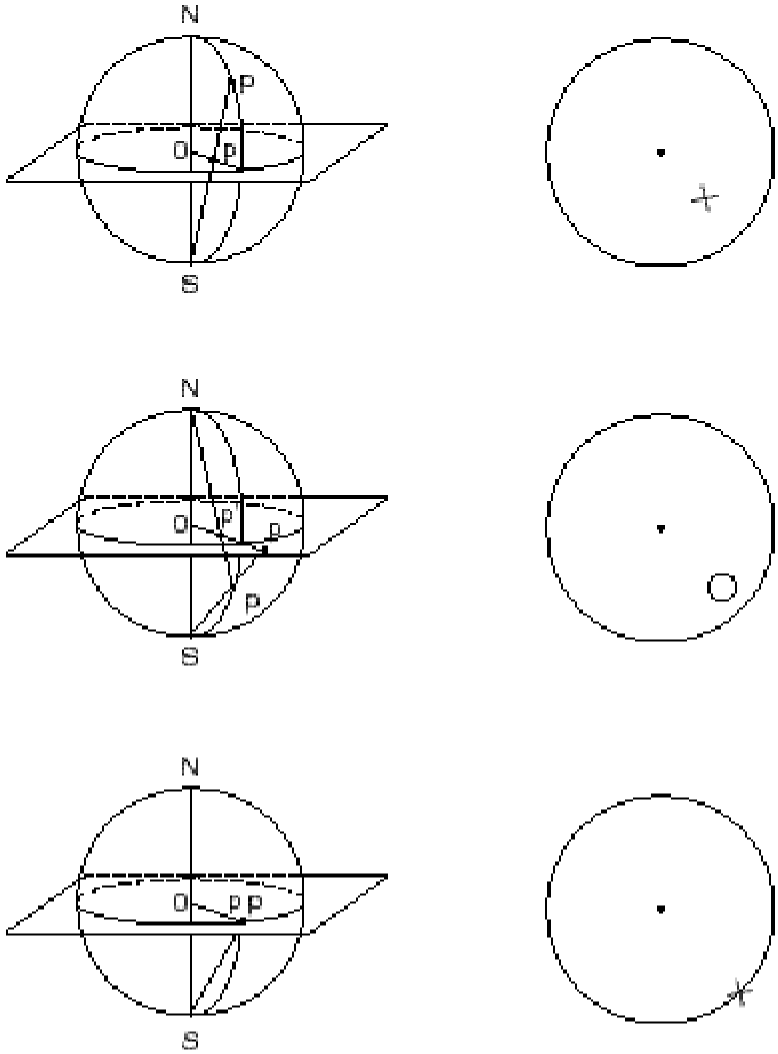

Figure 7.1 - Projection stéréographique

Le plan π est l'image de la sphère dans la projection de centre S. tous les points de l'hémisphère " Nord "sont à l'intérieur du grand cercle , ceux de l'hémisphère " Sud " sont à l'extérieur.

Par convention : Si le pôle P se trouve dans l'hémisphère " Nord " le pôle (centre) de projection est S , le point projeté est noté par une croix. Si le pôle P se trouve dans l'hémisphère " Sud ", le pôle de projection est N, le point projeté est noté par un cercle

On pourra vérifier que les intersections de la sphère de projection avec les plans suivants ont pour projection, Fig. 7.2 :

- o un diamètre, si le plan contient l'axe N S
- o un cercle centré sur O, si le plan est perpendiculaire à l'axe N S

o deux arcs de cercles suivant que la projection est effectuée de S ou de N, si le plan coupe le plan de projection suivant un diamètre

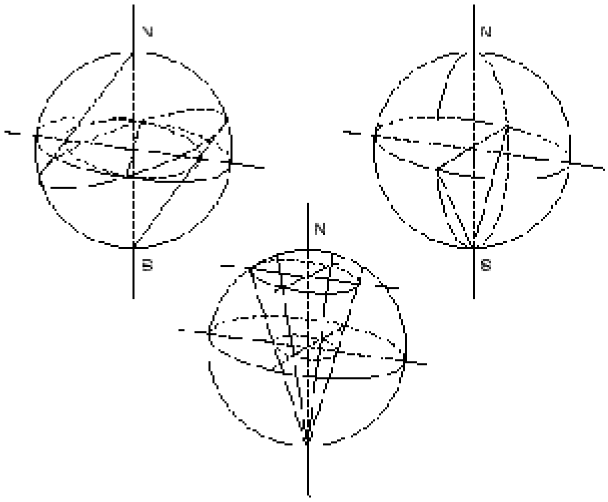

Figure 7.2 - Projection stéréographique de cercles

7.2.1 Exemple d'utilisation de la projection stéréographique

L'abaque (ou stéréogramme) de Wulff, Fig. 7.3 est la projection stéréographique d'une série :

o de grands cercles passant par un diamètre D du plan équatorial et inclinés de 1 (ou 2) deg. en 1 (ou 2) deg.

o de petits cercles ayant pour axe le diamétre D et de rayon correspondant à un intervalle de 1 (ou 2) deg.

La propriété essentielle de la projection stéréographique étant la conservation des angles, les grands et des petits cercles de l'abaque sont orthogonaux. La droite N S est perpendiculaire à la figure.

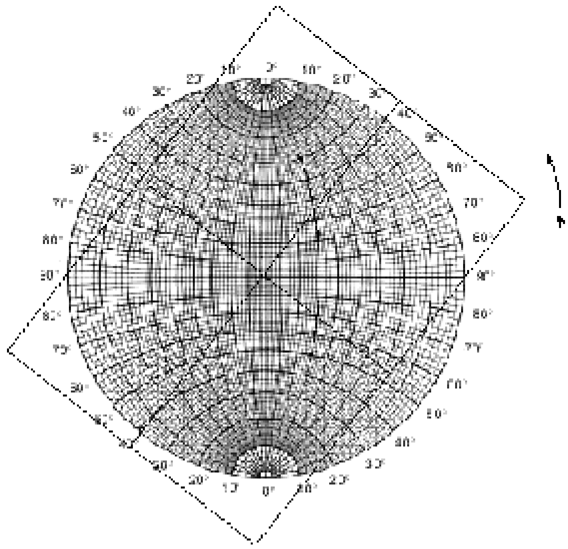

Figure 7.3 - Abaque de Wulff La figure a été tournée jusqu'à ce que la courbe en pointillé coïncide avec un grand cercle

Considérons deux normales aux faces d'un cristal : elles se trouvent dans un plan diamétral, leurs projections se trouvent donc sur un grand cercle.

Pour mesurer l'angle entre ces normales, il faut tourner, autour du centre de l'abaque, la figure sur laquelle les deux projections sont tracées, jusqu'à ce qu'elles se trouvent sur un même grand cercle.

L'angle entre les deux normales est donné par le nombre d'intersections de petits cercles

7.2.2 Représentation des opérations de symétrie d'orientation

L'ensemble des points p' images des directions OP équivalentes déduites les unes des autres par les opérations de symétrie associées à un opérateur A, constitue la représentation stéréographique de cet opérateur. Le nombre des points p' donne l'ordre de cet opérateur.

On considère d'abord les opérateurs de symétrie d'ordre supérieur à 2 ; l'axe N S est parallèle à l'élément de symétrie. Fig. 7.4 / 7.5

On remarque que :

- o l'opération $\bar{3}$ implique un centre : $\bar{3} = 3\bar{1}$
- o l'opération $\bar{4}$ implique une opération binaire d'axe colinéaire.
- o l'opération $\bar{6}$ implique une opération d'ordre 3 et un miroir de normale colinéaire à l'axe 3 : $\bar{6} = 3 / m$

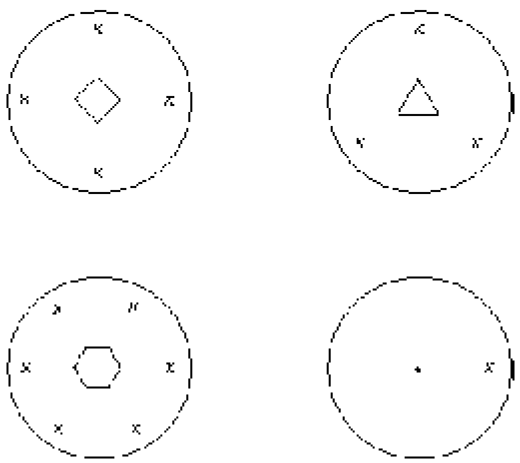

Figure 7.4 - Axes Directs
On a représenté dans l'ordre : l'opération unité (1), un A_3, un A_4 et un A_6.

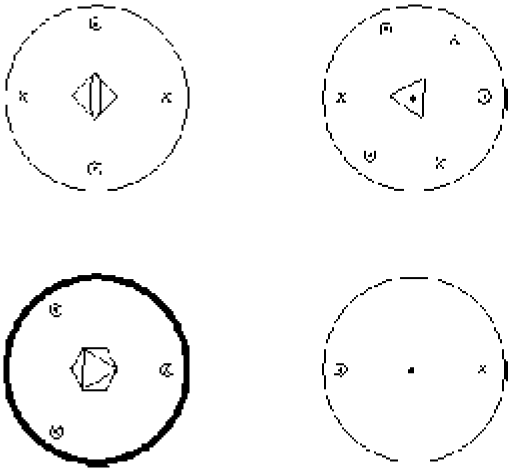

Figure 7.5 - Axes Inverses

On a représenté dans l'ordre : Un centre $(\bar{1})$, un $\bar{A}_3$, un $\bar{A}_4$ et un $\bar{A}_6$.

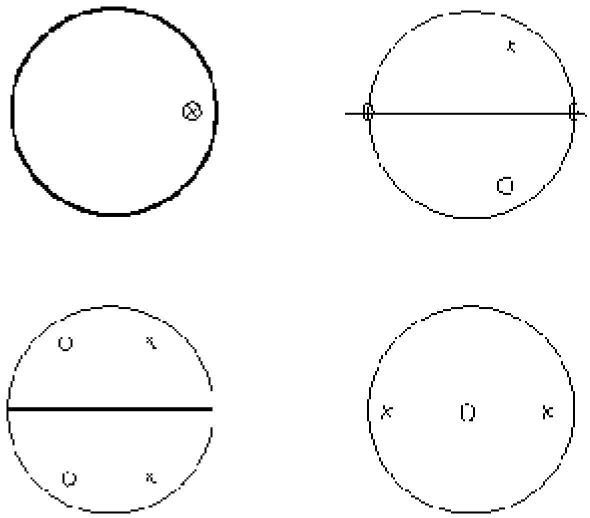

Figure 7.6 - Axes binaires Directs et Inverses (miroirs) .

A droite : en bas un axe binaire parallèle à l'axe de projection N S, en haut un axe binaire perpendiculaire à l'axe N S .

A gauche ,en bas un miroir de normale perpendiculaire à l'axe N S ,en haut un miroir de normale parallèle à l'axe N S

7.3 Matrice de rotation

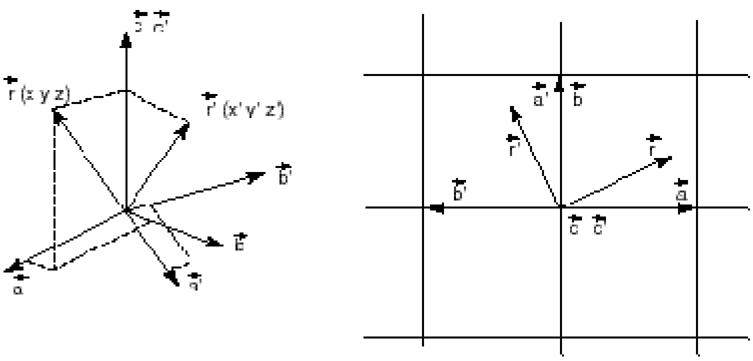

Figure 7.7 - Exemple d'une rotation autour de l'axe c

On se donne 3 vecteurs de base $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$. Toute opération de symétrie autour du point O transformera le repère $(O, \vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ en un repère $(O, \vec{a}', \vec{b}', \vec{c}')$, les points ayant mêmes coordonnées dans les deux repères, seront les images les uns des autres.

o Si une opération de symétrie laisse un cristal invariant, il en est de même pour son réseau. Fig. 7.7.

o Si le repère $(O, \vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ est un repère cristallographique, le repère transformé $(O, \vec{a}', \vec{b}', \vec{c}')$ en est un autre : les vecteurs $\vec{a}', \vec{b}', \vec{c}'$ sont des vecteurs du réseau, combinaisons linéaires de $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$.

Conséquence : les **coefficients de la matrice** représentant l'opération de symétrie sont des **entiers relatifs**.

$$((\vec{a}', \vec{b}', \vec{c}') = (\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})(A) \quad a_{ij} \in \mathbb{Z}$$

Soit $\vec{r}$ un vecteur ayant pour coordonnées x y z dans $(O, \vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$, le vecteur transformé $\vec{r}\,'$ conserve les **mêmes coordonnées** dans le repère $(O, \vec{a}', \vec{b}', \vec{c}')$.

$$\vec{r}\,' = \left(\vec{a}\,'\,\vec{b}\,'\,\vec{c}\,'\right)\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \left(\vec{a}\,\vec{b}\,\vec{c}\right)\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}$$

d'où les coordonnées de x' y' z' de $\vec{r}$ dans $(O, \vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = (A)\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

Cette matrice, rapportée à la base $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$, représente une simple opération de rotation autour d'un axe passant par l'origine de la maille, elle s'écrit: $\{0\ 0\ 0 | A\}$.

Si l'opération de symétrie est avec glissement et élément de symétrie décalé par rapport à l'origine, la notation de Seitz - Bauer (S - B) devient :

$$\{t_x\ t_y\ t_z | A_n\}$$ n est l'ordre l'opération de rotation .

La matrice représentant cet opérateur est une matrice (4,4) dite matrice augmentée, définie comme suit :

$$\begin{pmatrix} - & - & - & | \, t_x \\ - & A(3,3) & - & | \, t_y \\ - & - & - & | \, t_z \\ 0 & 0 & 0 & | \, 1 \end{pmatrix}$$

La matrice A(3,3) représente l'opération de symétrie d'orientation autour de l'origine de la maille. L'élément a_{44} est égal à 1, la dernière ligne est complétée par des zéros.

La transformation $\vec{r}\,' = \left\{ t_x\ t_y\ t_z \middle| A \right\} \vec{r} = A\vec{r} + \vec{t}$ = s'écrit :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} - & - & - & | \, t_x \\ - & A(3,3) & - & | \, t_y \\ - & - & - & | \, t_z \\ 0 & 0 & 0 & | \, 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ 1 \end{pmatrix}$$

Le dernier élément des matrices colonne est pris égal à 1

7.4 Propriétés des matrices de rotation

Pour que l'opération de symétrie notée $\left\{ \vec{t} \middle| A \right\}$ soit élément d'un groupe de symétrie cristallographique, il faut qu'elle conserve les angles, les distances et la triple périodicité.

7.4.1 Invariance du tenseur métrique

On rappelle qu'une opération de symétrie ne charge ni les modules des vecteurs, ni les angles qu'ils font entre eux.

Considérons deux vecteurs $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$ rapportés à une base $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$, de tenseur métrique (G) :

$$\vec{r}_1 = (\vec{a}\ \vec{b}\ \vec{c}) \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} \qquad \vec{r}_2 = (\vec{a}\ \vec{b}\ \vec{c}) \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix}$$

Les coordonnées $(x_1^{'}, y_1^{'}, z_1^{'})$ et $(x_2^{'}, y_2^{'}, z_2^{'})$ des vecteurs transformés dans $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ sont donnés par :

$$\begin{pmatrix} x'_1 \\ y'_1 \\ z'_1 \end{pmatrix} = (A) \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} x'_2 \\ y'_2 \\ z'_2 \end{pmatrix} = (A) \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix}$$

(A) est la représentation dans $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ de la matrice associée à l'opération de symétrie, transformant $\vec{r}_1\ en\ \vec{r}_1^{\,'}\,'\ et\ \vec{r}_2\ en\ \vec{r}_2^{\,'}\,'$ Ecrivons la conservation du produit scalaire : $(\vec{r}_1 | \vec{r}_2) = (\vec{r}_1^{\,'} | \vec{r}_2^{\,'})$

$$\begin{pmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \end{pmatrix}(G)\begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x'_1 & y'_1 & z'_1 \end{pmatrix}(G)\begin{pmatrix} x'_2 \\ y'_2 \\ z'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \end{pmatrix}(A^t)(G)(A)\begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix}$$

soit : **$(G) = (A)^t\ (G)\ (A)$**

Réciproquement, si un opérateur laisse le tenseur métrique d'une base donnée invariant, alors c'est un opérateur de symétrie compatible avec cette base.

Remarque : au cours d'un changement de base défini par la matrice (P), le tenseur métrique (G') transformé de (G) s'écrit :

$$(G') = (P^t)\ (G)\ (P)$$

la matrice de rotation (A) apparaît comme une matrice de transformation particulière.

Dans un repère $(O, \vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ **orthonormé** la matrice (A) est **unitaire**, en effet la relation d'invariance se réduit à (I) = (A^t) (A) puisque (G) = (I), soit :

(A)-1 = (A)t

En s'appuyant sur la relation d'invariance du tenseur métrique, on peut montrer que :

o si A_1 et A_2 représentent une opération de symétrie, alors le produit A_1A_2 est aussi une opération de symétrie.

o si A représente une opération de symétrie, l'inverse A^{-1} est aussi une opération de symétrie.

On peut retrouver ainsi que les opérations de symétrie forment un groupe.

7.4.2 Déterminant des matrices de rotation

En écrivant la relation d'invariance du tenseur métrique sous la forme :

$$(G)\ (A)^{-1} = (A)^t\ (G)$$

et en prenant les déterminants, il vient :

det (A) = +- 1

+1 est associé à une opération de symétrie directe, -1 à une opération de symétrie inverse (roto-inversion).

7.4.3 Trace des matrices de rotation

Dans un **repère orthonormé**, la matrice représentant une rotation d'angle φ autour de z s'écrit (matrice unitaire) :

$$(A_z) = +- \begin{pmatrix} \cos j & \sin j & 0 \\ -\sin j & \cos j & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

avec det (A_z) = +1 (opération directe), /- 1 (opération inverse). Sa trace est égale à

La trace de la matrice représentant la même opération de symétrie, mais rapportée à un **repère cristallographique**, est un **entier relatif**.

Si B est la matrice de changement de base faisant passer d'un repère à l'autre, la matrice (A'_z) transformée de (A) par l'opération B devient (cf. 8.6) :

$$(A'_z)=(B)\,(A_z)\,(B)^{-1}$$

Sachant que Trace (X Y) = Trace (Y X) , les traces de (A_z) et de (A'_z) sont égales : $\pm(1+2\cos j\,)\in\mathbb{Z}$

Il en résulte que les seules opérations de symétrie directes possibles sont celles qui satisfont à : $-1<(1+2\cos j\,)<3$

-

7.4.4 Valeurs propres - Directions propres

Soit A une matrice de rotation : si $\vec{r}$ est un vecteur propre associé à la valeur propre m : $A\vec{r}=m\,\vec{r}$

Soit par exemple une matrice de rotation A_z représentant une rotation pure d'angle ϕ autour de z, rapportée à un repère orthonormé.

L 'équation séculaire s'écrit :

$$\det(A_z-\mu\,I)=(1-\mu)[\,(\cos\phi-\mu)^2+\sin^2\phi\,\}\,]=0$$

Les valeurs propres sont :

$$\mu_1=1\;;\;\mu_2=\cos\phi+i\sin\phi\;;\;\mu_3=\cos\phi-i\sin\phi$$

On peut généraliser ce résultat :

- o le module des valeurs propres est égal à 1
- o il y en a 1 ou 3 réelles ($\phi = k\,\pi$)
- o μ = 1 correspond à un élément de symétrie d'une rotation directe
- o μ = -1 correspond à un élément de symétrie d'une roto - inversion

7.5 Exemples de représentation des opérations de symétrie

La détermination de la matrice représentant une opération de symétrie sans glissement se traite comme un changement de base.

7.5.1 Elément de symétrie passant par l'origine

- o Soit une opération de symétrie est d'ordre 4 autour de l'axe z. Fig. 7.7

La représentation matricielle est rapportée à une maille quadratique (ou cubique) compatible avec cette opération de symétrie.

Sa notation de Seitz - Bauer est : $\{0\;0\;0|4_z\}$ la translation de vecteur $\vec{t}$ associée étant nulle. La transformation fait que $\vec{a}' = \vec{b}$; $\vec{b}' = -\vec{a}$; $\vec{c}' = \vec{c}$ d'où la matrice de symétrie agissant sur les coordonnées :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

On vérifie que le vecteur - position (3/4 -1/4 0) est transformé en (-1/4 3/4 0). Si (A) est la matrice ci-dessus :

det (A) = 1 Trace (A) = 1

$j = p/2 = 2p/4$, l'axe z est invariant. C'est bien la représentation d'un 4_z .

Equation aux valeurs propres : $(\mu^2 + 1)(1 - \mu) = 0$ une valeur propre réelle $\mu = 1$, deux imaginaires $\mu = +-i$.

L'élément de symétrie est la direction propre associé à la valeur propre = +1 c'est évidemment l'axe z.

- o Soit l'opération inverse 4_z : elle s'écrit : $(\bar{4}_z) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

Equation aux valeurs propres : $(\mu^2 + 1)(1 + \mu) = 0$, une valeur propre réelle $\mu = -1$ deux imaginaires $\mu = +-i$

- o Soit un miroir m_z de normale z : il se représente par : $(m_z) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

Equation aux valeurs propres : $(\mu - 1)^2 (1 + \mu) = 0$, une valeur propre réelle $\mu = -1$, deux dégénérées $\mu = 1$

- $\mu = 1$: v_x et v_y indéterminés, $v_z = 0$: la direction propre est quelconque dans le plan du miroir.
- $\mu = -1$: $v_x = v_y = 0$, v_z quelconque : la direction propre est normale au plan du miroir.

7.5.2 Elément de symétrie décalé par rapport à l'origine

Considérons à titre d'exemple une opération de symétrie d'ordre 4 autour d'un axe parallèle à l'axe z , décalé de $\vec{u}$: (1/2 1/2 0)

Sa notation de Seitz-Bauer (S - B) est $\{t_x\; t_y\; 0|4_z\}$ puisque l'opération est sans glissement suivant z (t_z = 0). La détermination des composantes t_x, t_y de $\vec{t}$, est obtenue par identification :

$$\left[(E)-(4_z)\right]\ \vec{u}=\vec{t} \quad \text{soit} \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} t_x \\ t_y \end{pmatrix}$$

on trouve $t_x = 1$; $t_y = 0$ d'où la représentation de cet opérateur : $\{1\ 0\ 0|4_z\}$

Sa représentation matricielle rapportée aux vecteurs de base d'une maille quadratique (ou cubique) permet de trouver les coordonnées x' y' z' du vecteur x y z transformé :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \\ 1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ 1 \end{pmatrix}$$

Le vecteur - position (7/8 3/8 0) est transformé en (5/8 7/8 0).,Fig 6.5

7.5.3 Miroirs à glissement

o Considérons un miroir $\{0\,0\,1/2|m_y\}$: il s'agit d'un miroir de normale y avec un glissement c/2 passant par l'origine :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

o Considérons un miroir m_{xy} de normale [1 1 0] : la matrice s'écrit dans une maille cubique ou quadratique compatible avec ce miroir :

$$(m_{xy})=\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

On vérifie que det (m_{xy}) = -1 et que - (1 + 2 cos φ) = 1 soit = π + 2kπ.

$\{1/4\ \ -1/4\ \ 0\,|\,m_{xy}\}$ représente un miroir à glissement d passant par l'origine. La matrice s'écrit :

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 1/4 \\ -1 & 0 & 0 & -1/4 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

7.5.4 Axes hélicoïdaux

L'écriture de la matrice augmentée (4,4) ne présente pas de difficulté particulière.

Par exemple, $\{1/2\,0\,0\,|\,2_x\}$:

Il s'agit d'un axe binaire agissant autour de x avec un glissement égal à a/2, et passant par l'origine. La matrice rapportée à une maille orthogonale s'écrit :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Pour une opération décalée par rapport à l'origine il suffit d'ajouter les composantes $\vec{t}_\perp$ liées à la translation, à celle de $\vec{t}_{//}$ liée au glissement.