Radiocristallographie & cristallochimie II
Travaux dirigés
2020/2021

Série N°2
- exercice 1-

K. ELATAOUI (k.elataoui@uca.ac.ma)

Exercice 1:

Déterminer la représentation matricielle des opérations de symétrie suivantes (système cubique):

1) Un plan miroir confondu avec le plan YOZ.

2) Un plan miroir confondu avec le plan XOZ.

3) Un axe d'ordre 2, bissectrice de l'angle XOY.

4) Un axe d'ordre 2, bissectrice de l'angle XOZ.

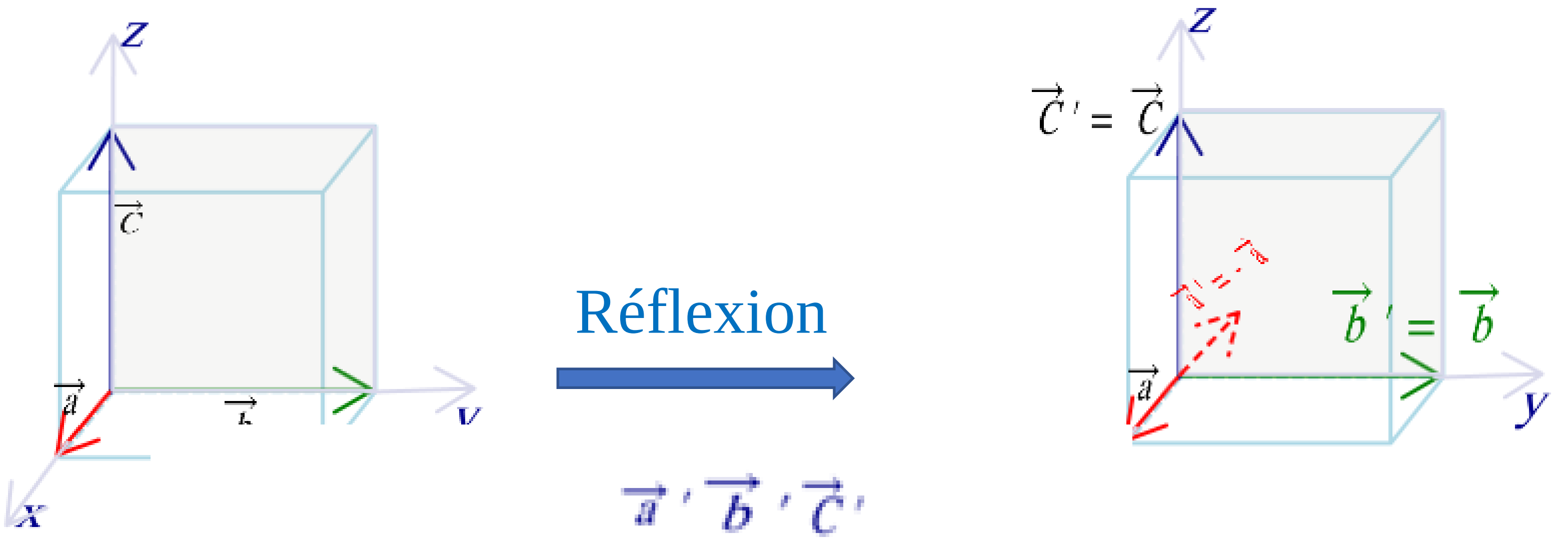
5) Un axe d'ordre 4, parallèle à l'axe OZ.

6-a) Un axe 4, parallèle à l'axe OX.

6-b) Un axe $\bar{4}$, parallèle à l'axe OX

1) Déterminer la représentation matricielle du plan miroir confondu avec le plan YOZ

La méthode la plus simple pour déterminer la matrice associée à une opération de symétrie donnée, c'est de s'intéresser à la transformation de vecteurs de base de la maille par l'application de cette opération.



$$\vec{a}\,' = -\,\vec{a}$$
$$\vec{b}\,' = \vec{b}$$
$$\vec{c}\,' = \vec{c}$$

$$\mathcal{M}(m)_{yoz} = \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} \vec{a}\,' & \vec{b}\,' & \vec{c}\,' \end{array} \\ \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

matrice associée au plan miroir (YOZ)

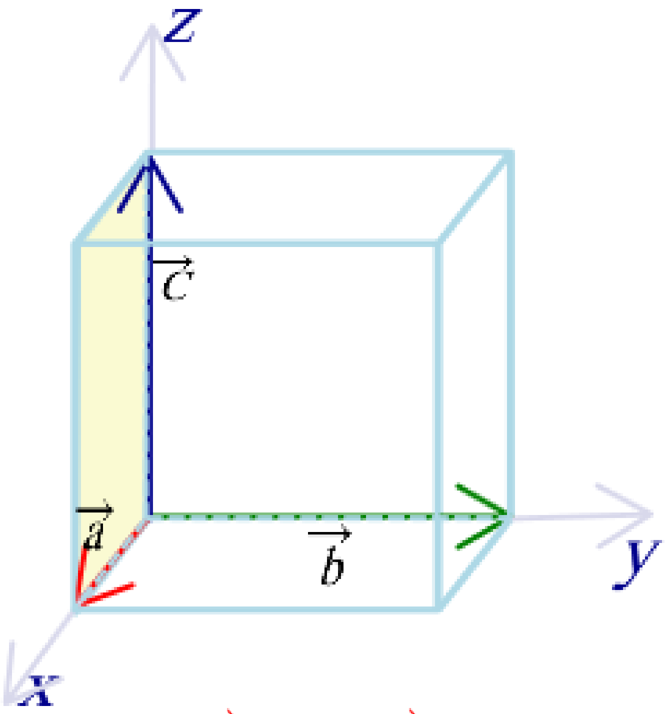
L’application de cette matrice sur les positions (x, y, z) d’un atome P conduit à un atome équivalent P’ de positions (x’, y’, z’).

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

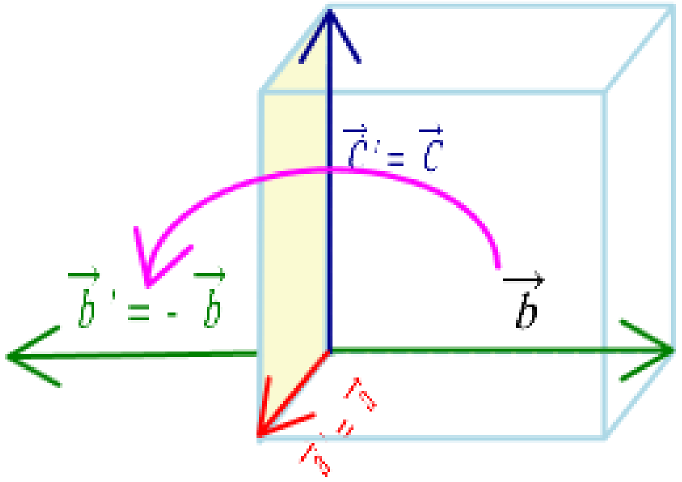
$$\begin{pmatrix} x' \\ \boxed{y'} \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Longrightarrow \begin{cases} x' = \overline{x} \\ y' = y \\ z' = z \end{cases}$$

Les positions générées par le plan (YOZ) sont :(x, y, z) et ($\bar{x}$, y, z)

2) La matrice associée à un plan miroir confondu avec le plan XOZ



Réflexion



$$\vec{a}\,' = \vec{a}$$
$$\vec{b}\,' = - \vec{b}$$
$$\vec{C}\,' = \vec{C}$$

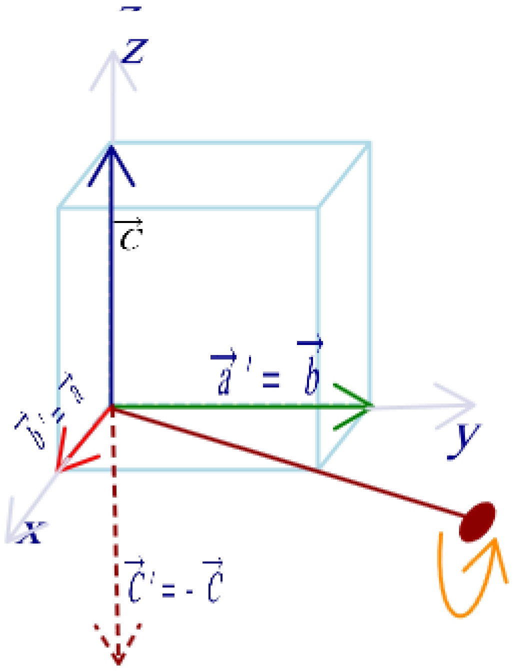
$$\mathcal{M}(m_{xoz}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

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

Les positions générées par le plan (XOZ) sont :(x, y, z) et (x, $\bar{y}$, z)

3) Déterminer la représentation matricielle d'un axe d'ordre 2, bissectrice de l'angle XOY.

Système cubique: a = b = c et $\alpha = \beta = \Upsilon = \frac{\pi}{2}$



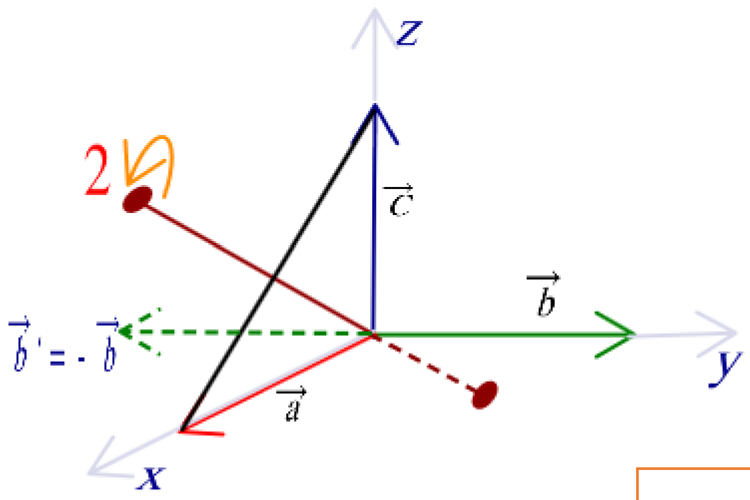
$$\vec{a}\,' = \vec{b}$$
$$\vec{b}\,' = \vec{a}$$
$$\vec{C}\,' = -\vec{C}$$

$$\mathcal{M}(\mathbf{2})biss_{xoy} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

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

Les positions équivalentes sont :(x, y, z) et (y, x, $\bar{z}$)

4) Déterminer la représentation matricielle d'un axe d'ordre 2, bissectrice de l'angle XOZ.



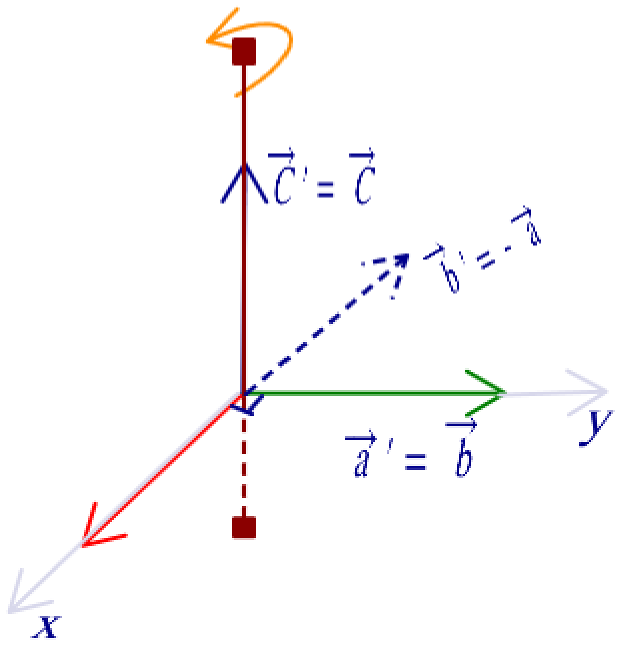
$$\vec{a}\,' = \vec{c}$$
$$\vec{b}\,' = -\,\vec{b}$$
$$\vec{c}\,' = \vec{a}$$

$$\boxed{\mathcal{M}(\mathbf{2})biss_{xoz} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}}$$

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

Les positions équivalentes sont :(x, y, z) et $(z, \bar{y}, x)$

5) Déterminer la représentation matricielle d'un axe d'ordre 4, parallèle à l'axe OZ



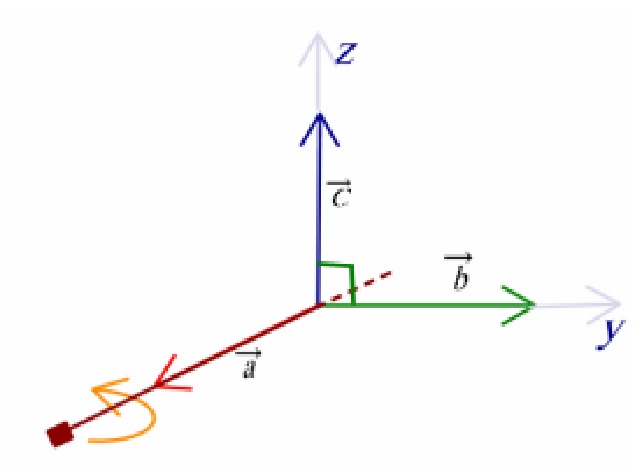
$$\vec{a}\,' = \vec{b}$$
$$\vec{b}\,' = -\vec{a}$$
$$\vec{C}\,' = \vec{C}$$

$$\boxed{\mathcal{M}(\mathbf{4})_{//\,(oz)} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}$$

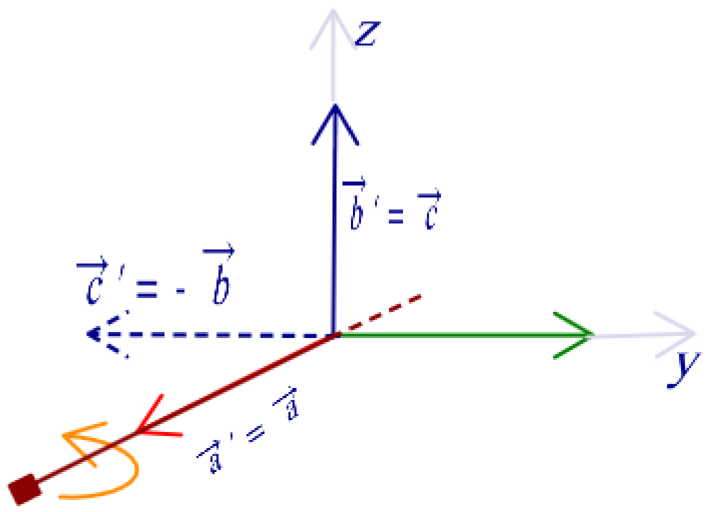
$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} x' = \bar{y} \\ y' = x \\ z' = z \end{cases}$$

Les positions générées par l'axe 4 // (oz) sont : (x, y, z) , ($\bar{y}$, x, z), ($\bar{x}$, $\bar{y}$, z) et (y, $\bar{x}$, z)

6-a) Déterminer la représentation matricielle de 4, parallèle à l'axe OX



Rotation de $\frac{\pi}{2}$



$$\vec{a}\,' = \vec{a}$$
$$\vec{b}\,' = \vec{c}$$
$$\vec{c}\,' = -\,\vec{b}$$

$$\boxed{\mathcal{M}(\mathbf{4})_{//\,(ox)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}}$$

6-b) Déterminer la représentation matricielle de l'axe $\bar{4}$, parallèle à l'axe OX

$$\boxed{\mathcal{M}(\bar{x}) = \mathcal{M}(x) * \mathcal{M}(i) = \mathcal{M}^{-1}(x)}$$

$$\mathcal{M}(i) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

matrice associée à l'inversion)

$$\mathcal{M}(\bar{4})_{//(ox)} = \mathcal{M}(4)_{//(ox)} * \mathcal{M}(i) \qquad avec \quad \mathcal{M}(4)_{//(ox)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{M}(\bar{4})_{//(ox)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

*** On peut aussi déterminer la matrice de l'axe inverse, en inversant la matrice de l'axe direct:**

$$\mathcal{M}(\bar{4}) = \mathcal{M}^{-1}(4) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

matrice associée à l'axe ($\bar{4}$) // (ox)