

Examen

Exercice 01 (04 pts)

1. Quelle est la notation utilisée pour décrire la symétrie cristalline ?
2. Quelle est la notation utilisée pour décrire la symétrie moléculaire ?
3. Quelle est la différence entre les deux notations ?
4. Comment les cristallographes indiquent un changement de caractère (chiralité) dans les diagrammes de symétrie de la projection de maille ?

Exercice 02 (07 pts)

Soit le système cristallin **Tétragonal**.

1. Déterminer les directions principales de symétrie de ce système ?
2. Déterminer les groupes (classes) centrosymétriques ?
3. Pour chaque groupe centrosymétrique, donner :
 - 3.1. Le type de groupe ?
 - 3.2. Les éléments de symétrie générateurs de groupe ?
 - 3.3. La projection stéréographique ?
4. Déterminer, en justifiant, la classe holoédrique de ce système ?
5. Déterminer les matrices représentatives des éléments de symétrie générateurs de la classe holoédrique ?

Exercice 03 : (09 pts)

Soit le groupe d'espace No.82 : $\overline{I}4$, Déterminer :

1. Le groupe ponctuel de symétrie, le système cristallin et le réseau de Bravais ?
2. La projection stéréographique du groupe ponctuel ?
3. Le nombre des positions générales équivalentes ?
4. La projection conventionnelle de maille sur le plan (001) en choisissant $x < y$?
5. Tous les éléments de symétrie engendrés ?
6. Les coordonnées des positions générales équivalentes ?
7. Les coordonnées des positions spéciales ou particulières ?
8. L'unité asymétrique ?

Fin et bon courage

Corrigé type Examen

Exercice 01 (04 pts)

1. Quelle est la notation utilisée pour décrire la symétrie cristalline ?

☞ **C'est la notation Hermann-Mauguin, notation internationale utilisée en cristallographie.**

2. Quelle est la notation utilisée pour décrire la symétrie moléculaire ?

☞ **C'est la notation de Schoenflies, notation utilisée en spectroscopie.**

3. Quelle est la différence entre les deux notations ?

☞ **La notation de Hermann-Mauguin est une notation « orientée », c-à-d chaque élément de symétrie est orienté suivant une direction principale de symétrie. Par contre, la notation de Schoenflies est.**

4. Comment les cristallographes indiquent un changement de caractère (chiralité) dans les diagrammes de symétrie de la projection de maille ?

☞ **Les cristallographes placent une virgule (",") à l'intérieur des cercles ouverts :**

Main droite	⇒	Main gauche
○		○,

Exercice 02 (07 pts)

Soit le système cristallin **Tétragonal**.

1. Déterminer les directions principales de symétrie de ce système ?

	Vecteurs	Rangées
Première direction	$\vec{c}$	[001]
Deuxième direction	$\vec{a}$ ou $\vec{b}$	[100] ou [010]
Troisième direction	$\vec{a} + \vec{b}$ ou $\vec{a} - \vec{b}$	[110] ou [1$\bar{1}$0]

2. Déterminer les groupes (classes) centrosymétriques ?

☞ **Un groupe centrosymétrique est celui qui contient l'élément inversion, on le nomme classe de Laue. Pour le système tétragonal, on trouve deux classes centrosymétriques ou deux classes de Laue : $\frac{4}{m}$ et $\frac{4}{m}$ mm**

3. Pour chaque groupe centrosymétrique, donner :

3.1 Le type de groupe ?

3.2 Les éléments de symétrie générateurs de groupe ?

3.3 La projection stéréographique ?

	Type de groupe	Éléments de symétrie générateurs	Projection stéréographique
$\frac{4}{m}$	$\frac{X}{m}$	Axe 4 perpendiculaire à un miroir	
$\frac{4}{m}mm$	$\frac{X}{m}m$	Axe $\frac{4}{m}$ parallèle à un miroir	

4. Déterminer la classe holoédrique pour ce système ?

☞ **La classe holoèdre ou holoédrique désigne le groupe ponctuel de plus haute symétrie (ayant la symétrie du réseau du système cristallin).**

Donc, la classe holoédrique du système tétragonal est $\frac{4}{m}mm$

5. Déterminer les matrices représentatives des éléments de symétrie générateurs de la classe holoédrique ?

Élément de symétrie	Matrice représentative
Axe 4 $\parallel$ [001]	$\begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
Miroir m $\perp$ l'axe 4 m $\parallel$ plan OXY	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$
Miroir m' $\parallel$ l'axe 4 Soit m' $\parallel$ plan OXZ	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

Exercice 03 : (09 pts)

Soit le groupe d'espace No.82 : $\bar{4}$,

Déterminer :

1. Le groupe ponctuel de symétrie, le système cristallin et le réseau de Bravais ?

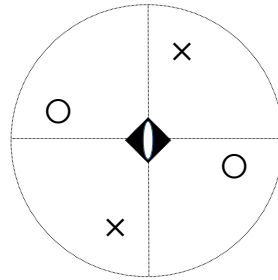
☞ **Groupe ponctuel : $\bar{4}$**

☞ **Système cristallin : Tétragonal (Quadratique)**

☞ **Réseau de Bravais : Réseau à maille centrée (multiplicité $m = 2$)**

2. La projection stéréographique du groupe ponctuel ?

☞ **Degré de symétrie $S = 4$**



3. Le nombre des positions générales équivalentes ?

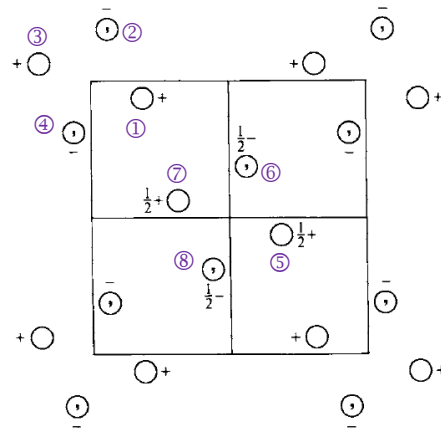
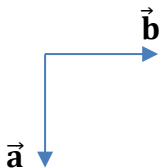
☞ **Nombre de positions générales = multiplicité du réseau * degré de symétrie du GP**

$$n = m * S$$

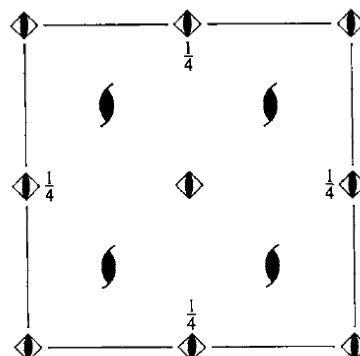
$$n = 2 * 4 = 8 \text{ positions générales équivalentes}$$

4. La projection conventionnelle de maille sur le plan (001) en choisissant $x < y$?

- Axe $\bar{4} \parallel \vec{c}$



5. Tous les éléments de symétrie engendrés ?



6. Coordonnées des positions générales équivalentes :

	(x, y, z)	$+ (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ 		$(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}+z)$
①	(x, y, z)		⑤	$(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}+z)$
②	$(\bar{y}, x, \bar{z})$		⑥	$(\frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-z)$
③	$(\bar{x}, \bar{y}, z)$		⑦	$(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}+z)$
④	$(y, \bar{x}, \bar{z})$		⑧	$(\frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-z)$

7. Coordonnées des positions spéciales :

Symétrie du site	(x, y, z)	$(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}+z)$
$\bar{4}$	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
$\bar{4}$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$
$\bar{4}$	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$	$(\frac{1}{2}, 0, \frac{3}{4})$
$\bar{4}$	$(0, \frac{1}{2}, \frac{3}{4})$	$(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4})$
2	$(0, 0, z) ; (0, 0, \bar{z})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}+z) ; (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}-z)$
2	$(0, \frac{1}{2}, z) ; (\frac{1}{2}, 0, \bar{z})$	$(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}+z) ; (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}-z)$

8. Unité asymétrique :

$$0 \leq x \leq \frac{1}{2} ; \quad 0 \leq y \leq \frac{1}{2} ; \quad 0 \leq z \leq \frac{1}{2}$$

Fin et bon courage