[Retour à l’applet]

Les opérations de symétrie

Cette applet permet de visionner les opérations de symétrie élémentaires et le résultat du produit d’opérations élémentaires. Je me suis plus spécialement attaché aux opérations de symétrie possibles dans les cristaux. (Les contraintes induites par la tripériodicité du réseau cristallin limitent les axes possibles aux axes 2, 3, 4 et 6).

Eléments de symétrie

On distingue les opérations **propres** qui donnent d’un objet une image superposable et les opérations **impropres** qui donnent une image symétrique de l’objet dans un miroir.
Les opérations étudiées sont affichées dans la liste centrale du panneau inférieur. Un click sur une opération de cette liste provoque l'affichage de l'élément de symétrie sélectionné, de l'objet initial et de ses images.
Sont représentés des **éléments de symétrie** et non des **opérations de symétrie** élémentaires.
Un élément de symétrie contient en général plusieurs opérations. Ainsi un axe C4 correspond à l'identité, et aux rotations de $\pi/2$, π et $3\pi/2$.
Les axes inverses sont des roto-inversions et sont des axes impropres.
Les axes inverses et hélicoïdaux, les miroirs de glissement ne correspondent pas à des opérations élémentaires mais sont des produits particuliers.
Seules figurent dans cette liste des opérations de symétrie autorisées dans les cristaux.

Produits d'opérateurs

Un click sur un item de cette liste provoque l'affichage en noir des éléments du produit et en cyan les éléments induits. Pour certains produits, (**miroirs ou binaires sécants**) si la valeur de l'angle α séparant les deux opérateurs est quelconque, le nombre d'images est infini. Si par contre la quantité $2\pi/\alpha$ est un rationnel, il y a alors superposition des images lorsque l'on répète l'opération : Le produit des deux opérateurs (miroirs ou binaires sécants) est alors un **axe de symétrie**. Le programme autorise la représentation des axes de 2 à 6 (5 étant inclus).
Les roto-inversions et les roto-réflexions sont traitées pour les axes d'ordre 3 à 6.
Pour les produits de rotations, il faut saisir les valeurs des **cosinus directeurs** de l'axe et de **l'angle de la rotation** pour les deux axes. Le programme calcule et affiche les cosinus directeurs (normalisés) de l'axe de la rotation produit et la valeur de l'angle de cette rotation puis la figure est dessinée à l'écran. On pourra vérifier le caractère non commutatif de ce produit d'opérations.

Représentation des opérations de symétrie

Les transformations qui intéressent les cristallographes sont des isométries qui peuvent s'obtenir en combinant trois opérations élémentaires : les translations, les rotations et les inversions. Elles peuvent être représentées par des matrices dont le déterminant est égal à ± 1. (+1 pour les isométries **propres** comme les rotations et – 1 pour les isométries **impropres** comme l'inversion).
Translations : **OM'** = **OM** + **T**

Inversion : OM' = **– OM**
Rotations :
Pour le calcul de la position des images de l'objet initial, on utilise les matrices de rotation :
Dans le repère orthonormé Oxyz, on considère une rotation d'angle θ dont l'axe est orienté suivant la direction de Oz. Les coordonnées x', y' et z' de l'image, se déduisent des coordonnées x, y et z de l'objet initial par la relation matricielle :

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

Le déterminant vaut 1. La trace est égale à $1 + 2\cos\theta$
De même une rotation autour de Ox est représentée par :

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

Si l'orientation de l'axe est quelconque, l'expression de la matrice rotation est beaucoup plus complexe. Soit une rotation d'angle **θ**, dont l'axe est le vecteur **u** dont les cosinus directeurs sont l, m et n. En utilisant les angles d'Euler , on montre que cette matrice s'écrit :

$$\begin{matrix} x' \\ y' = \\ z' \end{matrix} \begin{pmatrix} a1 & b1 & c1 \\ a2 & b2 & c2 \\ a3 & b3 & c3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

Avec :

$a1 = l^2 + (m^2 + n^2).\mathrm{Cos}\theta$ $a2 = l.m.(1 - \mathrm{Cos}\theta) + n.\mathrm{Sin}\theta$ $a3 = n.l.(1 - \mathrm{Cos}\theta) - m.\mathrm{Sin}\theta$
$b1 = l.m.(1 - \mathrm{Cos}\theta) - n.\mathrm{Sin}\theta$ $b2 = m^2 + (l^2 + n^2).\mathrm{Cos}\theta$ $b3 = n.m.(1 - \mathrm{Cos}\theta) + l.\mathrm{Sin}\theta$
$c1 = n.l.(1 - \mathrm{Cos}\theta) + m.\mathrm{Sin}\theta$ $c2 = n.m.(1 - \mathrm{Cos}\theta) - l.\mathrm{Sin}\theta$ $c3 = n^2 + (m^2 + l^2).\mathrm{Cos}\theta$.

Rotations-Inversions :
On combine une rotation avec une inversion dont le centre est situé sur l'axe de la rotation. En choisissant l'axe Oz confondu avec l'axe Δ de la rotation, on a :

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

Un **miroir** est une roto-inversion d'ordre 2.
Un miroir (001) qui correspond à une rotation de π autour de Oz suivie d'une inversion est représenté par la matrice :

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

Rotations-Réflexions
On combine une rotation avec une symétrie par rapport à un plan normal à l'axe de la rotation. Comme le miroir est équivalent à une rotation de π suivie d'une inversion, on peut considérer qu'une roto-reflexion est équivalente à une roto-inversion d'angle $\theta + \pi$ .En choisissant l'axe Oz confondu avec l'axe Δ de la rotation, on a :

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

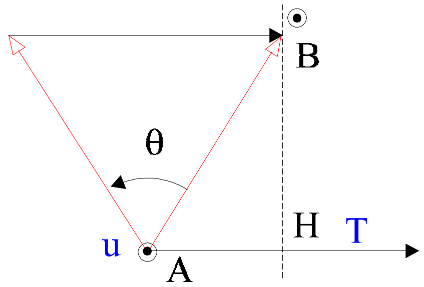
Produits d'opérateurs
Rotations et translations

Soit une translation représentée par le vecteur **T** et une rotation d'angle θ et d'axe **u**
Le vecteur **T** peut se décomposer en une composante parallèle à **u** (**T** //) et une composante normale (**T**⊥ = **t**).
La combinaison de la rotation et de la composante parallèle donne un ***axe hélicoïdal***
Les ***axes hélicoïdaux*** (vissages) résultent de la composition d'une rotation avec une translation parallèle à l'axe de la rotation. Les contraintes introduites par les translations de réseau font que les axes hélicoïdaux compatibles avec la symétrie cristalline sont en nombre

limités. Seuls sont possibles les axes de rotation d'ordres 2, 3, 4 et 6. Après un nombre fini d'opérations, l'image de l'objet initial doit être identique à celui-ci à une translation entière de réseau près. Les translations possibles pour un axe orienté suivant le vecteur de base **c** sont donc : pour les binaires **c/2** et **c** (axes 2_1 et 2).
Pour les ternaires **c/3** , **2c/3** et **c** (axes 3_1, 3_2 et 3).
Pour les quaternaires **c/4** , **2c/4** , **3c/4** et **c** (axes 4_1, 4_2, 4_3 et 4).
Pour les sénaires **c/6** , **2c/6** , **3c/6** , **4c/6** , **5c/6** et **c** (axes 6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5 et 6).
Du point de vue analytique, les coordonnées de l'image (X, Y, Z) de l'objet (x, y, z) dans un axe hélicoïdal de rotation **θ** et de pas h sont :

$$X = x.\cos\theta - y.\sin\theta$$
$$Y = x.\sin\theta + y.\cos\theta$$
$$Z = z + h.\theta/2$$

Dans le programme seuls sont représentés les axes 2_1, 3_1, 4_1, 4_2, et 6_1.
L'objet initial est bleu, les images sont en rouge. Les objets en **vert** se déduisent des autres par des translations entières de réseau.
Le produit d'une rotation par un vecteur normal **t** à l'axe donne une rotation de même angle.



Soit B le point de la médiatrice de **t** tel que BH = t/2.tg(θ/2). B est un invariant dans l'opération produit. C'est la trace, dans le plan de la figure, de l'axe de la rotation résultante. L'angle de la rotation produit est égal à θ.
Cette propriété est très utilisée lors de l'étude des groupes d'espace car il faut alors composer les rotations avec l'ensemble des translations de réseau.

Produits de rotation

Pour traiter ce problème, nous avons préféré la méthode de ***Olinde Rodrigues*** à la méthode des angles d'Euler. La démonstration des formules de Rodrigues repose sur le fait qu'il est possible de décomposer une rotation d'axe Δ et d'angle φ en un produit de deux miroirs sécants selon Δ et faisant un angle dièdre égal à φ/2. L'orientation des plans est quelconque : seul intervient leur angle.
Si **a** et **b** sont les vecteurs normaux aux plans qui caractérisent la première rotation, **c** et **d** les normales aux plans de la seconde rotation, compte-tenu de la remarque précédente, il est possible de confondre les vecteurs **b** et **c** . Le produit des deux rotations est donc représenté par le produit des deux miroirs admettant **a** et **d** comme normales : c'est une rotation dont l'axe est commun avec l'intersection des deux miroirs.
Formules de Rodrigues :
Soient 2α et 2β les angles des deux rotations dont les axes sont **u** et **v** et ψ l'angle entre les deux axes. On pose : $\mathbf{R_1} = \sin\alpha.\mathbf{u}$ et $\mathbf{R_2} = \sin\beta.\mathbf{v}$. La rotation produit est caractérisée par son angle de rotation 2θ et par le vecteur rotation **w** .
On pose $\mathbf{R} = \sin\theta.\mathbf{w}$. On démontre que :

$$\cos\theta = \cos\alpha.\cos\beta - \sin\alpha.\sin\beta.\cos\psi$$

$$\mathbf{R} = \sin\theta.\mathbf{w} = \cos\alpha.\mathbf{R_1} + \cos\beta.\mathbf{R_2} - \mathbf{R_1} \wedge \mathbf{R_2}$$

Ces deux relations permettent de caractériser totalement la rotation produit. La seconde met en évidence le caractère non commutatif du produit de deux rotations.

Retour à l'applet