

Utilisation du programme « Groupes ponctuels »

Choix du groupe.

Cette option permet de choisir l'un des **32 groupes ponctuels**.

La projection stéréographique des éléments de symétrie de ce groupe est tracée après sélection dans la liste de gauche.

L'axe direct **c** est vertical (sauf pour le trigonal). Pour les groupes ayant un axe principal, celui-ci est confondu avec l'axe **c**.

L'origine des ϕ est (sauf pour le trigonal) l'axe direct **a** ou sa projection dans le plan de figure.

Représentation des éléments de symétrie.

Les symboles utilisés pour représenter les éléments de symétrie sont ceux des Tables Internationales de Cristallographie. Ces éléments de symétrie sont dessinés en **noir**.

Les traits **gris** sont de simples repères.

La projection d'un **miroir** est un grand cercle (qui peut être dégénéré en une droite).

La projection d'un **axe** se limite à deux points (projections des intersections de l'axe avec la sphère). La ligne pointillée joignant ces deux points est seulement un guide pour les yeux.

Paramètres de maille.

Sauf dans le réseau cubique, les valeurs des angles ϕ et ρ d'une face ($h k l$) dépendent des valeurs des paramètres de maille. Il est possible de modifier avec les zones de texte du bandeau inférieur de l'applet les valeurs de ces paramètres.

Les paramètres du réseau réciproque sont calculés et tous les paramètres (directs et réciproques) sont affichés dans une fenêtre. Les unités supposées sont l'Angström (\AA) pour le réseau direct et son inverse (\AA^{-1}) pour le réseau réciproque.

Remarque :

Pour le réseau trigonal les paramètres affichés sont ceux de la maille hexagonale.

Toutes les valeurs des indices relatives à ce mode de réseau **doivent** être fournies dans le **repère trigonal**. (Les conversions nécessaires aux calculs sont effectuées automatiquement.)

Les résultats finaux sont affichés dans le repère trigonal et dans le repère hexagonal.

Tracé des pôles

L'utilisateur est invité à sélectionner les valeurs h , k et l d'un pôle. (indices de Miller de la normale à la face choisie).

L'ensemble des pôles équivalents dans les opérations de symétrie du groupe est déterminé par application des opérations de symétrie du groupe en utilisant les générateurs correspondants. Dans les groupes cubiques l'axe ternaire $[1\ 1\ 1]$ est toujours utilisé comme générateur. (il suffit de réaliser une permutation circulaire sur les indices).

Les angles « ϕ » et « ρ » sont alors calculés pour chaque triplet (hkl) et les pôles sont ensuite tracés (croix rouge si $\rho \leq 90^\circ$, cercle bleu si $\rho > 90^\circ$).

Ces calculs sont réalisés dans un repère triorthonormé : le repère international.

Le programme tient compte (par tri et élimination des doublons) des pôles en **positions particulières** (i.e. placés sur un élément de symétrie).

Les boutons radio « **Indices** » et « **Angles** » permettent d'afficher au choix soit la liste des indices de MILLER des pôles équivalents dans les opérations de symétrie du groupe, soit celle des angles « ϕ » et « ρ » de ces pôles. Pour faciliter leur identification, la case à cocher

« **Numéros** » permet d'afficher sur la projection (à côté des pôles), les numéros correspondants à la liste.

Formes idéales

Il n'est pas évident d'imaginer à partir d'une projection stéréographique le solide correspondant. Au prix de quelques calculs, il est possible de calculer les coordonnées des sommets du solide convexe correspondant.

Méthode utilisée :

* A partir du tableau des indices des faces, on calcule toutes les intersections possibles entre trois plans.

* Un premier test élimine les triplets ayant au moins deux plans parallèles. Ensuite on teste chaque nouveau sommet ainsi calculé pour savoir s'il a déjà été trouvé. Si ce sommet A n'a pas encore été examiné, il faut savoir s'il est sur la surface du solide ou en dehors. On projette successivement le vecteur **OA** sur le vecteur unitaire normal à chaque plan. Si la projection est plus grande que la norme du vecteur normal **N**, c'est que le sommet n'appartient pas au solide.

* La table des coordonnées des sommets du solide est alors connue. Il faut construire maintenant la table des sommets contenus dans chaque face. Pour toutes les faces, on examine successivement chacun des sommets. Si la projection du vecteur **OA** sur le vecteur unitaire normal est égale à la norme du vecteur normal alors le sommet appartient au plan considéré.

* Cette table doit enfin être ordonnée pour que les sommets soient rangés dans le sens trigonométrique afin que le tracé des faces soit correct. On choisit un sommet A comme origine, pour tester si les sommets B et C sont dans le bon ordre, on construit les vecteurs **BA** et **CA** et on calcule $\mathbf{M} = \mathbf{BA} \wedge \mathbf{CA}$. Si le produit scalaire $\mathbf{N.M}$ est négatif il faut alors permuter les sommets B et C dans la liste. Cette opération est répétée jusqu'à ce que tous les sommets de la face soient ordonnés correctement.

* Certaines formes (prismes et pyramides) ne ferment pas l'espace. Pour représenter ces formes, il convient d'ajouter à la liste des faces un ou deux plans sécants. Dans le programme, j'ai ajouté les faces (001) et (00-1) pour les prismes et la face (00-1) pour les pyramides.

* La quantité des calculs peut être importante : il y a 12.11.10/6 triplets possibles pour un solide à 12 faces et 17296 pour un solide à 48 faces.

* Le nombre des sommets s , des faces f et des arêtes a sont affichés. On pourra ainsi vérifier la

formule d'Euler : $s + f - a = 2$.

La case à cocher « **Opaque** » permet de masquer les faces invisibles et la case « **Axes** » de tracer un repère orthonormé sur la projection.

Pour modifier l'angle de vision de l'objet étudié, on peut glisser la souris dans la fenêtre de l'applet. (glisser = déplacer le curseur avec le bouton enfoncé).

Zones, axes de zones

Définition : Une **zone** est formée par l'ensemble des plans du réseau direct qui se coupent selon des arêtes parallèles. La direction de ces arêtes est l'**axe de la zone**.

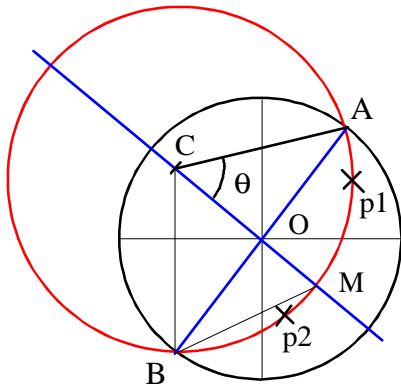
Les indices de la rangée axe de zone $[uvw]$ sont liés aux indices des plans de la zone par la relation : $\mathbf{h}\cdot\mathbf{u} + \mathbf{k}\cdot\mathbf{v} + \mathbf{l}\cdot\mathbf{w} = 0$

Soient deux plans $(h_1 k_1 l_1)$ et $(h_2 k_2 l_2)$. Leur axe de zone est la rangée $[u v w]$ telle que :

$$u = k_1 \cdot l_2 - l_1 \cdot k_2$$

$$v = l_1 \cdot h_2 - h_1 \cdot l_2$$

$$w = h_1 \cdot k_2 - h_2 \cdot k_1$$



Si avec un canevas de WULFF la construction du cercle de zone passant par les pôles p_1 et p_2 est très simple, celle-ci est assez complexe si on utilise la géométrie analytique.

Méthode :

Le segment OM de la projection correspond à un angle $\theta/2$ et aussi à $\rho_M/2$.

Pour tracer l'arc AB du grand cercle de zone il faut :

- Rechercher les coordonnées $x, y,$ et z de l'axe de zone Q dans le repère RI .

- Calculer les angles φ et ρ de l'axe de zone par :

$$\varphi = \text{ArcTg} (y/x) \quad \rho = \text{ArcCos} (z/R)$$

- Calculer les angles Phi et Rhô du point M par :

$$\varphi_M = \pi + \varphi \quad \rho_M = \pi/2 - \rho = \theta$$

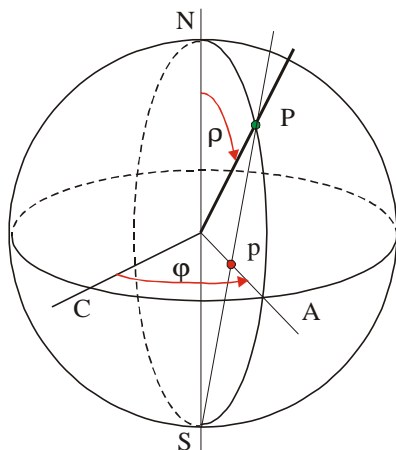
- Calculer les coordonnées x_M et y_M du point M.

- Calculer le rayon du grand cercle $R_1 = R / \sin(\rho_M)$.

- Calculer les coordonnées du centre C du cercle : $X_C = X_M - R_1 \cdot \sin(\varphi_M)$

- Tracer l' arc AB du grand cercle de zone contenu dans le cercle de projection ; Cet arc commence en B (angle $+\varphi_M - \rho_M$ si l'origine des angles est l'axe Ox) et intercepte un arc $2 \cdot \rho_M$.

La projection stéréographique.



Pour représenter un cristal on effectue la **projection stéréographique** de l'intersection des **normales à ses faces** avec une sphère de rayon R qui est la "**sphère de projection**".

Soit OP la normale à une face. Si P est dans l'hémisphère Nord, la projection stéréographique de P est le point **p** intersection de la droite SP avec le plan diamétral normal à NS. **p est le pôle de la face**.

La direction OP est caractérisée par les angles **phi** (azimut) et **rho** (inclinaison)

La sphère découpe sur ce plan de projection un grand cercle : le cercle de projection.

Cette transformation géométrique qui associe un plan à une sphère est une "**inversion**". Pour les normales contenues dans l'**hémisphère Nord** on utilise le point S comme centre d'inversion et on représente les pôles correspondants par une **croix**.

Pour les normales contenues dans l'**hémisphère Sud** on utilise le point N comme centre d'inversion et on représente les pôles correspondants par un **cercle**.

L'origine des "phi" est arbitraire; on utilise souvent la direction du vecteur **a** du réseau direct comme origine. L'origine des "rhô" est la direction ON.

La position du point p dans un repère cartésien, tracé dans le plan de projection, est donnée par :

$$X = R \cdot \cos(\varphi) \cdot \tan(\rho/2)$$

$$Y = R \cdot \sin(\varphi) \cdot \tan(\rho/2)$$

Le réseau réciproque.

Définition :

Soient **a, b, c** les vecteurs de base du réseau direct et $V = (\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c})$ le volume de la maille.

Le réseau réciproque est un réseau de points, tri périodique caractérisé par :

$$A^* = b \cdot c \cdot \sin \alpha / V \quad \mathbf{A}^* = \mathbf{b} \wedge \mathbf{c}$$

$$B^* = a \cdot c \cdot \sin \beta / V \quad \mathbf{B}^* = \mathbf{c} \wedge \mathbf{a}$$

$$C^* = a \cdot b \cdot \sin \gamma / V \quad \mathbf{C}^* = \mathbf{a} \wedge \mathbf{b}$$

$$\cos \alpha^* = (\cos \beta \cdot \cos \gamma - \cos \alpha) / (\sin \beta \cdot \sin \gamma)$$

$$\cos \beta^* = (\cos \alpha \cdot \cos \gamma - \cos \beta) / (\sin \alpha \cdot \sin \gamma)$$

$$\cos \gamma^* = (\cos \alpha \cdot \cos \beta - \cos \gamma) / (\sin \beta \cdot \sin \alpha)$$

$$V = a \cdot b \cdot c [1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cdot \cos \alpha \cdot \cos \beta \cdot \cos \gamma]^{1/2}$$

$$V = a \cdot b \cdot c \cdot \sin \alpha^* \cdot \sin \beta \cdot \sin \gamma$$

Propriétés :

La rangée réciproque $[\mathbf{hkl}]^*$ est normale à la famille de plans (\mathbf{hkl}) du réseau direct.

Soient N^* la norme du vecteur réciproque $\mathbf{N}^* = h \cdot \mathbf{A}^* + k \cdot \mathbf{B}^* + l \cdot \mathbf{C}^*$ et d_{hkl} l'équidistance entre deux plans de la famille hkl du réseau direct.

$$\mathbf{N}^* \cdot \mathbf{d}_{hkl} = 1$$

Pour les réseaux triorthogonaux les axes réciproques sont colinéaires avec les axes directs.

Repère international.

Pour les réseaux non triorthogonaux les calculs, dans la maille de BRAVAIS, sont souvent délicats.

On définit **RI** le repère triorthonormé **i, j, k** (dit **repère international**) par :

$$\mathbf{i} = \mathbf{a} / a$$

$$\mathbf{j} = \mathbf{a} \wedge \mathbf{C}^* / a \cdot C^* \cdot \sin(\mathbf{a}, \mathbf{C}^*)$$

$$\mathbf{k} = \mathbf{C}^* / C^*$$

Dans le programme on utilise le repère **RI** pour calculer les valeurs de φ et ρ qui correspondent au triplet h, k, l qui caractérise une face de pôle p.

Méthode :

Le vecteur **OP** est parallèle à la rangée réciproque

$$\mathbf{N}^* = h \mathbf{A}^* + k \mathbf{B}^* + l \mathbf{C}^* \text{ donc :}$$

$$\mathbf{OP} = \mu \cdot \mathbf{N}^* \quad OP = R$$

$$\mu = R / (\mathbf{N}^* \cdot \mathbf{N}^*)^{1/2}$$

Les composantes x, y et z de **OP** dans le repère international sont telles que :

$$x \cdot \mathbf{i} + y \cdot \mathbf{j} + z \cdot \mathbf{k} = \mu \cdot h \cdot \mathbf{A}^* + \mu \cdot k \cdot \mathbf{B}^* + \mu \cdot l \cdot \mathbf{C}^*$$

$$x = \mu \cdot h \cdot A^* \cdot \sin \beta^* \cdot \sin \gamma$$

$$y = \mu \cdot (-h \cdot A^* \cdot \sin \beta^* \cdot \cos \gamma + k \cdot B^* \cdot \sin \alpha^*)$$

$$z = \mu \cdot (h \cdot A^* \cdot \cos \beta^* + k \cdot B^* \cdot \cos \alpha^* + l \cdot C^*)$$

On tire ensuite φ et ρ de :

$$\text{tg } \varphi = y/x \quad \cos \rho = z/R$$

Réciproquement :

Soit le vecteur $\mathbf{OD} = u.\mathbf{a} + v.\mathbf{b} + w.\mathbf{c}$ du réseau direct.

Dans RI les coordonnées de D sont :

$$\begin{aligned}x &= u.a + v.b.\cos \gamma + w.c.\cos \beta \\y &= v.b.\sin \gamma - w.c.\sin \beta .\cos \alpha^* \\z &= w.c.\sin \beta .\sin \alpha^*\end{aligned}$$

Réseau trigonal :

Pour le réseau **trigonal** (rhomboédrique) on a utilisé la représentation classique de MILLER avec l'axe 3 perpendiculaire au plan de projection.

Les calculs concernant les pôles sont toutefois effectués dans le réseau de BRAVAIS hexagonal équivalent (maille triple) défini par :

$$\mathbf{A} = \mathbf{a} - \mathbf{b} \quad \mathbf{B} = \mathbf{b} - \mathbf{c} \quad \mathbf{C} = \mathbf{a} + \mathbf{b} + \mathbf{c}$$

Les indices de MILLER varient comme les vecteurs de bases : on peut calculer les indices dans la représentation hexagonale avec :

$$H = h - k \quad K = k - l \quad L = h + k + l$$

On détermine les triplets H, K, L équivalents dans les opérations de symétrie du groupe puis on recalcule les indices dans la maille trigonale.

$$\begin{aligned}\mathbf{a} &= 1/3 (2.\mathbf{A} + \mathbf{B} + \mathbf{C}) & h &= 1/3 (2.H + K + L) \\ \mathbf{b} &= 1/3 (-\mathbf{A} + \mathbf{B} + \mathbf{C}) & k &= 1/3 (-H + K + L) \\ \mathbf{c} &= 1/3 (-\mathbf{A} - 2.\mathbf{B} + \mathbf{C}) & l &= 1/3 (-H - 2.K + L)\end{aligned}$$

La trace du vecteur \mathbf{a} est confondue avec la projection du plan (1 0 0)

Important :

Toutes les valeurs des indices relatives à ce mode de réseau **doivent** être fournies dans le **repère trigonal**. (Les conversions nécessaires aux calculs sont effectuées automatiquement.)

Les informations affichées sur les paramètres des réseaux direct et réciproque indiquent dans quel mode de réseau sont effectués les calculs.

Les résultats finaux sont toujours donnés dans le repère trigonal.

Norme de rangée directe.

Soit la rangée directe $\mathbf{OD} = u.\mathbf{a} + v.\mathbf{b} + w.\mathbf{c}$

La norme de cette rangée est la racine carrée du produit scalaire du vecteur \mathbf{OD} par lui-même.

Attention : Pour un réseau non primitif le calcul peut être erroné , des noeuds intermédiaires peuvent être présents sur la rangée considérée.

L'inverse de cette norme est égal à l'équidistance \mathbf{Duvw} entre les plans $(uvw)^*$ du réseau réciproque.

Norme de rangée réciproque.

Soit la rangée réciproque $\mathbf{OP} = h.\mathbf{A}^* + k.\mathbf{B}^* + l.\mathbf{C}^*$

La norme de cette rangée est la racine carrée du produit scalaire du vecteur \mathbf{OP} par lui-même.

Attention : Pour un réseau non primitif le calcul peut être erroné des noeuds intermédiaires peuvent être présents sur la rangée considérée.

L'inverse de cette norme est égal à l'équidistance \mathbf{dhkl} entre les plans (hkl) du réseau direct.