Acta Cryst. (1978). A**34**, 432–441

Définition Algébrique des Groupes de Symétrie (d'Isométries) des Cristaux et Autres Objets Parfaits de l'Espace à *n* Dimensions

PAR DOMINIQUE WEIGEL ET JEAN FRANÇOIS BERAR

Laboratoire de Chimie-Physique du Solide (ERA au CNRS n° 456), *Ecole Centrale des Arts et Manufactures, Grande Voie des Vignes,* 92290 *Chatenay-Malabry, France*

(*Reçu le* 15 *novembre* 1977, *accepté le* 14 *décembre* 1977)

Using isomorphism properties of translation groups, an intrinsic definition of the classes of perfect objects belonging to n dimensional space, such as crystals, semicrystals, non-crystals and perfect gas, is given. Through the partition of space group G with respect to its (invariant) translation sub-group T, its point group is defined, an isomorph of the group of classes G/T. Examples are given, with symmorphic or non-symmorphic objects in spaces E_2, E_3, E_4 and E_n. Moreover, the unsuitable expression 'Bravais lattice' should be changed into 'Bravais type of cell'.

Introduction: Les isométries (ou symétries) de l'espace à *n* dimensions

Nous rappelons, dans cette introduction, quelques notions d'algèbre des cours de première année d'université (Queysanne, 1964).

Soit $\mathbf{E}_n$ un espace vectoriel proprement euclidien* à n dimensions défini sur le corps des réels, $\mathbb{R}$, et E_n l'espace affine euclidien sur $\mathbb{R}$ associé à E_n.

L'espace objet est l'espace pointé $(E_n O)$ où O est un point particulier de E_n.

Définition des isométries, ou symétries,† *de l'espace* E_n. Une isométrie est une transformation *intrinsèque* de l'espace E_n qui conserve les longueurs (ou normes) et elle est caractérisée par l'opération f telle que, $\forall M \in E_n$, ce point est transformé en $M' \in E_n$ par la relation (1):

$$\left.\begin{array}{ll} & \mathbf{OM}' = f(\mathbf{OM}) \\ \text{et} & \\ & \forall (M_1,M_2) \in E_n^2 \quad \|\mathbf{M}_1\,\mathbf{M}_2\| = \|\mathbf{M}'_1\,\mathbf{M}'_2\|. \end{array}\right\} \quad (1)$$

Ecriture extrinsèque d'une isométrie (ou symétrie). Soient $(O,\mathbf{e}_1,\mathbf{e}_2,\ldots \mathbf{e}_n)$ un repère orthonormé de l'espace pointé $(E_n O)$ et $\mathbf{X}$, $\mathbf{X}'$ les matrices unicolonnes constituées des n coordonnées des vecteurs $\mathbf{x} = \mathbf{OM}$ et $\mathbf{x}' = \mathbf{OM}'$; dans ce repère on démontre que l'isométrie la plus générale de E_n s'écrit en langage matriciel à l'aide de l'opérateur $(\mathbf{B},\mathbf{A}_\perp)$ tel que:

$$\left.\begin{array}{l} \mathbf{X}' = \mathbf{A}_\perp \mathbf{X} + \mathbf{B} = \mathbf{B} + \mathbf{A}_\perp \mathbf{X} \\ \mathbf{B} \text{ est une matrice unicolonne constituée} \\ \text{de } n \text{ coordonnées du vecteur translation} \\ \boldsymbol{\beta} = \mathbf{OO}' \\ \mathbf{A}_\perp \text{ est une matrice orthogonale réelle.} \end{array}\right\} \begin{array}{c}(1')\\ \text{générale}\end{array}$$

L'isométrie la plus générale est donc une transformation linéaire particulière produit de deux opérations: une opération ponctuelle de symétrie (OPS) traduite par l'opération f_1 suivie* d'une translation traduite par l'opérateur f_2, si bien qu'on peut écrire de façon intrinsèque que

$$f = f_2 \circ f_1. \qquad (1'')$$

Deux exemples concrets d'isométries (générales)†

La glissymétrie dans E_2, composée d'une réflexion sur le support du vecteur $\mathbf{e}_1$ suivie d'une translation $\mathbf{a}/2$ où le vecteur $\mathbf{a}$ est parallèle à $\mathbf{e}_1$, est caractérisée par l'opérateur:

$$\mathbf{B} = \begin{vmatrix} a/2 \\ 0 \end{vmatrix}, \quad \mathbf{A}_\perp = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}.$$

Cette isométrie est un élément générateur du groupe spatial de symétrie *pg* du cristal rectangle de la Fig. 2.

L'hélirotation dans E_3, composée d'une rotation d'un tiers de tour autour de la diagonale du cube de côté a construit sur $\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2\mathbf{e}_3$ et trisectrice de ces trois

* Un espace vectoriel sur $\mathbb{R}$ est dit euclidien si, à chaque couple de vecteurs $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \in \mathbf{E}_n^2$ correspond un nombre réel $\mathbf{x}.\mathbf{y} \in \mathbb{R}$ jouissant des propriétés du produit scalaire; il est dit proprement euclidien si la norme, ou carré scalaire $\mathbf{x}.\mathbf{x}$ d'un vecteur $\mathbf{x} \in \mathbf{E}_n$ est strictement positive sauf pour le vecteur nul.

† Les cristallographes et les chimistes appellent symétries ou opérations de symétrie, ce que les mathématiciens nomment isométries: nous utiliserons donc indifférement l'un ou l'autre mot dans cet article.

* Ou précédée; dans ce cas: $f = f_1 \circ f_2$.

† Glissymétrie = symétrie avec glissement. Hélirotation = rotation hélicoïdale. Les cristallographes disent 'réflexion sur un miroir' au lieu de symétrie par rapport à une droite dans E_2, par rapport à un plan dans E_3, par rapport à un hyperplan dans E_4.

vecteurs suivie d'une translation $a/2$ ($\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3$) parallèle à cette diagonale, est caractérisée par l'opérateur:

$$\mathbf{B} = \begin{vmatrix} a/2 \\ a/2 \\ a/2 \end{vmatrix}, \quad \mathbf{A}_\perp = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix}.$$

Cette isométrie est un élément du groupe spatial de symétrie $I\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$ des cristaux métalliques cubiques à corps centré (Na,W,Cr, . . .).

Chacune de ces deux isométries (symétries) a la propriété particulière d'être commutative, soit intrinsèquement:

$$f_2 \circ f_1 = f_1 \circ f_2$$

soit en écriture extrinsèque:

$$\mathbf{X}' = \mathbf{A}_\perp \mathbf{X} + \mathbf{B} = \mathbf{A}_\perp(\mathbf{X} + \mathbf{B}) \Leftrightarrow \mathbf{A}_\perp \mathbf{B} = \mathbf{B}.$$

Évidemment, dans le cas de l'hélirotation l'opérateur rotation $2\pi/3$ ($\mathbf{A}_\perp$) conserve la translation ($\mathbf{B}$) puisque celle-ci est parallèle à l'axe de la rotation.

Théorème P. Toutes les isométries de l'espace $(E_n O)$ constituent un groupe infini: le groupe de Poincaré, P, de cet espace.

Demonstration. La loi est de composition interne dans l'ensemble de toutes les isométries de E_n puisque le produit de deux isométries conserve évidemment les longueurs (ou normes). L'axiome d'associativité est respecté. Il existe un élément neutre: l'isométrie identité (translation nulle ou rotation $2\pi K$). A chaque isométrie de l'ensemble ($\mathbf{X}' = \mathbf{A}_\perp \mathbf{X} + \mathbf{B}$) est associée une isométrie inverse ($\mathbf{X}'' = \mathbf{A}_\perp^{-1}\mathbf{X}' - \mathbf{A}_\perp^{-1}\mathbf{B}$) $\Rightarrow \mathbf{X}'' \equiv \mathbf{X}$.

Isométries particulières translations. Ce sont les transformations intrinsèques de l'espace E_n qui conservent les vecteurs

$$\mathbf{OM}' = f(\mathbf{OM}) \quad \text{et} \quad \forall (M_1 M_2) \in E_n^2 \quad \mathbf{M}_1\mathbf{M}_2 = \mathbf{M}'_1\mathbf{M}'_2. \qquad (1)t$$

Non seulement la norme est conservée, mais encore la direction du support et le sens du vecteur.

La transformation f s'écrit alors:

$$\mathbf{OM}' = \mathbf{OM} + \boldsymbol{\beta} \qquad (1)t$$

soit en écriture extrinsèque:

$$\mathbf{X}' = \mathbf{X} + \mathbf{B}. \qquad (1')t$$

Cette relation est un cas particulier de la relation (1') où $\mathbf{A}_\perp$ est la matrice orthogonale particulière: matrice identité.

Théorème Γ. L'ensemble de toutes les translations de l'espace $(E_n O)$ muni de la loi addition vectorielle constituent un groupe additif infini abélien: le groupe de translation, Γ, de cet espace qui est un sous-groupe du groupe de Poincaré.

Démonstration. L'addition vectorielle est commutative ($\Rightarrow$ groupe abélien), ce qui n'empèche pas de parler du produit de deux translations qui est évidemment la translation résultante $\boldsymbol{\beta}_2 \circ \boldsymbol{\beta}_1 = \boldsymbol{\beta}_1 + \boldsymbol{\beta}_2 = \boldsymbol{\beta}_2 + \boldsymbol{\beta}_1$: la loi est donc de composition interne. L'axiome d'associativité est respecté. La translation nulle est l'élément neutre. A chaque translation $\boldsymbol{\beta}$ est associé une translation inverse $-\boldsymbol{\beta}$. Γ est sous-groupe de P puisque une translation est une isométrie particulière.

Isométries particulières OPS (opérations ponctuelles de symétrie ou isométries ponctuelles). Ce sont les transformations intrinsèques de l'espace E_n qui conservent les longueurs et au moins un point O de E_n qu'on choisit alors comme origine de l'espace pointé $(E_n O)$.

L'écriture extrinsèque de cette OPS est *dans une base orthonormée*:

$$\mathbf{X}' = \mathbf{A}_\perp \mathbf{X}. \qquad (1')\ \text{OPS}$$

$\mathbf{A}_\perp$ est un opérateur ponctuel de symétrie ou matrice orthogonale qui possède les propriétés suivantes:

$$^t\mathbf{A}_\perp = \mathbf{A}_\perp^{-1} \Leftrightarrow \text{déterminant } \mathbf{A}_\perp = \pm 1. \qquad (2)$$

Le fait que la matrice transposée soit égale à l'inverse [1] implique que le déterminant est égal à ± 1 et nous indique que le rapport d'homothetie' est égal à l'unité (Dieudonne, 1964) d'où la conservation des normes (ou longueurs).

Il y a donc deux types d'isométries: les OPS$^+$, ou rotations, pour lesquelles det $\mathbf{A}_\perp = +1$; les OPS$^-$, pour lesquelles det $\mathbf{A}_\perp = -1$.

On montre dans l'Appendice I que les valeurs propres de la transformation de E_n précisent la nature de l'OPS et que l'orientation du support (axe de rotation, miroir, . . .) de cette OPS par rapport à la base est définie par le support des vecteurs propres.

Isométries ponctuelles (OPS) dans E_1, E_2 et E_3. On démontre dans l'Appendice I que la nature des OPS dans les espaces E_1, E_2, E_3 est la suivante.

OPS$^+$: identité dans E_1, rotations autour d'un point dans E_2 et autour d'un axe dans E_3.

OPS$^-$: symétrie par rapport à un point, appelée 'inversion' par les cristallographes, dans E_1; réflexion autour d'un miroir (droite) dans E_2; rotation–reflexion commutative dans E_3. Si l'angle de la rotation est égal à π, on vérifie que la rotation–réflexion devient une 'inversion' (symétrie par rapport à un point).

Théorème O. Toutes les OPS (isométries ponctuelles) de l'espace E_n constituent un groupe infini non abélien: le groupe orthogonal, O, de cet espace, qui est un sous-groupe du groupe de Poincare.

La démonstration est analogue à celle du théorème Γ.

Théorème O^+. Toutes les OPS$^+$ (rotations) de l'espace E_n constituent un groupe infini, abélien dans E_2, non abélien dans E_3, . . .: le groupe des rotations, O^+, de cet espace, qui est un sous-groupe du groupe orthogonal O.

Remarque. Toutes les OPS$^-$ de E_n ne constituent pas un sous-groupe de O.

Démonstration. La loi est de composition interne dans l'ensemble O^+ car le produit de deux OPS$^+$ (rotations) est une OPS dont le déterminant de l'opérateur est égal à $+1$; l'identité est une rotation ($\det \mathbf{A}_\perp = +1$) et l'inverse d'une OPS$^+$ est une OPS$^+$ puisque le produit des déterminants est égal à $+1$, déterminant de l'identité. Dans E_2 et E_3 l'inverse d'une rotation d'angle φ est une rotation d'angle $-\varphi$.

Isométries générales dans E_1, E_2 et E_3. Pour que cet article soit plus concret, nous précisons la nature des isométries générales, produit d'une OPS (f_1) par une translation générale (f_2) dans E_1 E_2 et E_3: *cf.* Appendice II.

Dans E_1: le produit d'une symétrie par rapport à un centre par une translation revient au déplacement du centre de symétrie.

Dans E_2: le produit d'une rotation pour une translation revient un déplacement du centre de rotation, l'angle étant conservé.

Le produit d'une réflexion par une translation est une glissymétrie par rapport à un glissmiroir parallèle au miroir initial, donc déplacé perpendiculairement à celui-ci.

Dans E_3: le produit d'une rotation d'angle φ et d'axe Δ par une translation est une hélirotation d'angle φ autour d'un axe Δ' parallèlle à Δ, donc déplacé perpendiculairement à celui-ci.

Le produit d'une rotation–réflexion (angle φ, axe Δ, miroir M) par une translation est une rotation–réflexion (angle φ, axe Δ', miroir M') avec $\Delta \parallel \Delta'$ et $M \parallel M'$.

Remarquons que c'est la (les) composante(s) de la translation orthogonale à l'axe de rotation ou (et) au miroir qui provoque le déplacement et, lorsqu'il y a déplacement, le produit $f_2 \circ f_1$ n'est pas commutatif.

Ces rappels d'algèbre étant achevés, nous démontrons le théorème général, puis nous proposons les définitions algébriques des groupes de symétrie cristallographiques et non cristallographiques.

Théorème général ou théorème S

Toutes les isométries (symétries) qui conservent globalement un objet parfait* de l'espace ($E_n O$) constituent un groupe: le groupe de symétrie, G, de cet objet.

Démonstration. Le produit de deux isométries conservant l'objet est évidemment une isométrie le conservant $\Rightarrow$ la loi est de composition interne dans l'ensemble.

L'axiome d'associativité est respecté, l'élément neutre identité appartient à l'ensemble car il conserve l'objet et l'inverse d'une isométrie conservant l'objet le conserve $\Rightarrow$ l'ensemble est un groupe.

1. Groupe de translation d'un objet parfait infini – définition intrinsèque d'un cristal parfait et de son réseau dans l'espace à n dimensions

Théorème T. L'ensemble de *toutes* les translations, $\mathbf{t}$, qui conservent globalement un objet parfait infini de l'espace objet ($E_n O$) constitue un groupe abélien: le groupe de translation, T, de cet objet.

Non seulement le groupe T est un sous-groupe du groupe de symétrie G de cet objet, mais encore il est le sous-groupe d'ordre maximum* [du groupe de translation Γ de ($E_n O$)] qui conserve l'objet.

Démonstration. Elle est identique à celle du théorème S où l'on remplace le mot isométrie par le mot translation. Les éléments $\mathbf{t}$ sont des translations, $\Rightarrow T \subseteq \Gamma$, et ce sont des isométries particulières $\Rightarrow T \subseteq G$. T est le sous-groupe 'd'ordre maximum' de Γ qui conserve l'objet puisque, par définition, T contient *toutes* les translations qui le conservent.

Exemple: groupe de translation du cylindre de révolution infini. L'axe du cylindre est parallèle au vecteur $\mathbf{a}_1$ et sa longueur est infinie.

Les éléments $\mathbf{t}$ du groupe T sont les vecteurs: $\mathbf{t} = r\,\mathbf{a}_1$ avec $r \in \mathbb{R}$ (tous les nombres réels), où $\mathbb{R}$ est le groupe additif des nombres réels, qui est donc isomorphe au groupe de translation du cylindre infini.

Définition intrinsèque d'un cristal parfait de ($E_n O$). Par définition, on appelle cristal parfait de l'espace à n dimensions tout objet infini de cet espace conservé par un groupe de translation abélien, T, *isomorphe au groupe $\mathbb{Z}^n$* où $\mathbb{Z}$ est le groupe additif des entiers relatifs: les éléments de $\mathbb{Z}^n$ sont donc tous les multiplets ($u^1, u^2, \ldots, u^n$) d'entiers relatifs.

Nous appelons un tel groupe: groupe de translation cristallographique.

Définition intrinsèque du réseau d'un cristal parfait de E_n. L'origine de tous les vecteurs $\mathbf{t}$, éléments du groupe de translation cristallographique T d'un cristal parfait de ($E_n O$) étant fixée *arbitrairement* au point O, nous appellons, par définition, *noeuds du réseau* les extrémités de ces vecteurs.

Le réseau est donc un groupe infini de points de E_n, positionné à une translation arbitraire, $\mathbf{OO}'$, près.

Ecriture extrinsèque des éléments $\mathbf{t}$ *du groupe de translation cristallographique* T. Soit une base†

* Un objet est dit parfait s'il ne présente pas de défauts et en particulier pas de défauts thermiques (vibrations, ...) exemples: molécule parfaite, cristal parfait, ...; ce sont des modèles approchés des molécules et cristaux réels.

* Même si ce groupe est infini c'est-à-dire que c'est le sous-groupe de Γ qui possède le plus d'éléments et qui conserve l'objet. Ne pas confondre avec l'expression sous-groupe maximum: T n'est presque jamais un sous-groupe maximum de Γ.

† En général, de telles bases ne sont pas orthonormées et elles ne peuvent l'être sauf pour les cristaux carrés, cubiques, hypercubiques, ... dans E_2, E_3, E_4, E_5, ...

$(\mathbf{a}_1,\mathbf{a}_2,\ldots,\mathbf{a}_n)$ de $\mathbf{E}_n$ telle que tous les vecteurs $\mathbf{t}$ éléments de T s'écrivent:

$$\left.\begin{array}{l} \mathbf{t} = u^1\,\mathbf{a}_1 + u^2\,\mathbf{a}_2 + \ldots + u^n\,\mathbf{a}_n \\ \text{avec} \\ (u^1,u^2,\ldots,u^n) \text{ tous les multiplets} \in \mathbb{Z}^n. \end{array}\right\} \quad (5)$$

Définition des mailles simples d'un cristal. N'importe quelle base permettant d'écrire tous les vecteurs $\mathbf{t} \in T$ à l'aide d'une relation du type (5) définit un segment, une surface, un volume, un hypervolume. . . convexe $(0,\mathbf{a}_1,\mathbf{a}_2,\ldots,\mathbf{a}_n)$ qu'on nomme, par définition, une *maille simple* du cristal.

Pour un cristal donné il existe une infinité de mailles simples; par exemple pour le cristal parfait de la Fig. 1: $(0,\mathbf{a},\mathbf{b}_0')$, $(0,\mathbf{a},\mathbf{b}_0)$, $(0,\mathbf{a},\mathbf{b}_1)$ avec $\mathbf{b}_1 = \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$ $(0,\mathbf{a},\mathbf{b}_2)$ avec $\mathbf{b}_2 = 2\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$, *etc.*

Propriété des mailles simples d'un cristal. Chacune de ces mailles simples ne contient qu'un noeud par maille.* Cependant on écrit souvent, à la suite de Bravais, tous les vecteurs $\mathbf{t} \in T$ avec une relation du type (6):

$$\mathbf{t} = u^1\,\frac{\mathbf{b}_1}{n_1} + u^2\,\frac{\mathbf{b}_2}{n_2} + \ldots + u^n\,\frac{\mathbf{b}_n}{n_n} \quad (6)$$

avec $(u^1,u^2,\ldots,u^n) \in \mathbb{Z}^n$ mais restriction sur $u^1, u^2,\ldots,u^n$ et avec $n_1, n_2,\ldots,n_n$ entiers naturels $\neq 0$ dont l'un au moins diffère de 1.

La surface, le volume, l'hypervolume,. . . convexe $(0,\mathbf{b}_1,\mathbf{b}_2,\ldots,\mathbf{b}_n)$ est alors, par définition, une *maille multiple du cristal* dont la multiplicité est égale au nombre de noeuds contenus dans la maille.

Par exemple la maille rectangle centrée† $(0,\mathbf{a},\mathbf{b})$ du cristal parfait de la Fig. 1 est une maille double et tous les vecteurs $\mathbf{t} \in T$ s'écrivent:

$$\mathbf{t} = u\,\frac{\mathbf{a}}{2} + v\,\frac{\mathbf{b}}{2} \quad \text{avec } (u,v) \in \mathbb{Z}^2 \text{ et } u + v \text{ pair.} \quad (6')$$

* Dans E_3 par exemple le volume de la maille simple est la période de la fonction vectorielle densité électronique.

$$\forall \mathbf{x} \in E_3 \quad \text{et} \quad \forall \mathbf{t} \in T\colon \rho_e(\mathbf{x} + \mathbf{t}) \equiv \rho_e(\mathbf{x}).$$

† D'où la lettre c dans le symbole de son groupe spatial de symétrie *cmm*.

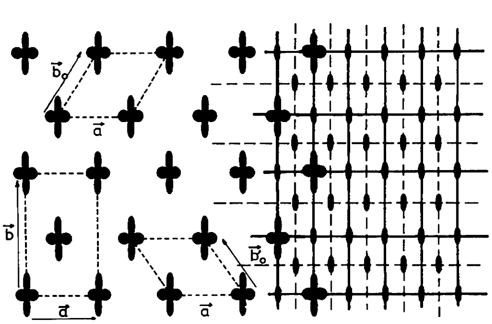

Fig. 1. Cristal *cmm* de E_2 (maille conventionnelle **a**, **b**).

On rappelle dans l'Appendice III la définition* des modes de description de Bravais ou types de mailles de Bravais qui ne sont que des modes d'écriture des vecteurs $\mathbf{t}$, éléments du *groupe de translation du cristal parfait*: *caractéristique intrinsèque de ce cristal qui n'a qu'un seul réseau, isomorphe à son unique groupe de translation T.*

Pour conclure ce paragraphe nous insistons sur la nécessité de proscrire absolument l'expression fausse 'réseau de Bravais' et donnons les définitions intrinsèques des semi cristaux parfaits et des non cristaux.

Définitions intrinsèques

Semi cristaux parfaits de l'espace E_n. On appelle ainsi tout objet infini de l'espace E_n dont le groupe de translation, T, n'est pas isomorphe à $\mathbb{Z}^n$, mais dont au moins un sous-groupe de T (propre ou impropre) est isomorphe à $\mathbb{Z}^p$, où p est un entier naturel tel que: $1 \leq p \leq n - 1$.

Non cristal parfait de l'espace E_n. Tout objet de l'espace E_n dont aucun sous-groupe (propre où impropre) du groupe de translation, T, n'est isomorphe à $\mathbb{Z}^p$, où p est un entier naturel tel que: $1 \leq p \leq n$.

A ne pas confondre avec un cristal non parfait, appelé souvent *cristal réel* et qui correspond à la présence de défauts perturbant le modèle du cristal parfait: par exemple le cristal est fini d'où la présence de défauts de surface, *etc.*

II. Groupe spatial de symétrie et groupe ponctuel de symétrie d'un objet infini conservé globalement par un groupe de translation (différent de l'identité) dans l'espace à *n* dimensions

Ce paragraphe concerne aussi bien les cristaux parfaits que les autres objets infinis de l'espace objet $(E_n O)$.

Théorème G. Toutes les isométries qui conservent globalement un tel objet constituent un groupe infini, en général non abélien; le groupe spatial de symétrie, G, de cet objet, identique au groupe de symétrie de l'objet défini au théorème général.

Le groupe G est le sous-groupe 'd'ordre maximum' [du groupe de Poincaré, P, de $(E_n O)$] qui conserve globalement cet objet. Le groupe de translation, T, de cet objet est un sous-groupe invariant, ou distingué, de son groupe spatial de symétrie, G.

Démonstration. Le début du théorème G est identique au théorème général qui a été démontré. G est le sous-groupe d'ordre maximum de P qui conserve l'objet puisque, par définition, G contient toutes les isométries qui le conservent. Les translations sont des isométries particulières $\Rightarrow T \subset G$. Montrons

* En anglais 'Bravais types of cells'.

que le sous-groupe T est invariant,* c'est-à-dire: $\forall y \in G\ yT = Ty$, c'est-à-dire: $yt_1 = t_2y$ avec $(t_1,t_2) \in T^2$; si $y \in T\ yt_1 = t_1y$ puisque le 'produit' de deux translations est commutatif.

Si $y \notin T$, yt_1 s'écrit extrinsèquement $\mathbf{X}' = \mathbf{A}_\perp(\mathbf{X} + \mathbf{B}_1) + \mathbf{B}$ où y est représenté par $(\mathbf{B},\mathbf{A}_\perp)$ et t_1 par $\mathbf{B}_1$ or $\mathbf{A}_\perp(\mathbf{X} + \mathbf{B}_1) + \mathbf{B} = \mathbf{A}_\perp\mathbf{X} + \mathbf{B} + \mathbf{B}_2$ si $\mathbf{B}_2 = \mathbf{A}_\perp\mathbf{B}_1$ qui représente bien une translation $t_2 \in T$, d'où: $yt_1 = t_2y$.

Théorème H, ou théorème de la partition de G en n classes modulo le sous-groupe invariant T. Cette partition est possible pour tout groupe spatial de symétrie et elle est univoque car deux classes sont disjointes ou confondues.

Chacune de ces classes est un élément du groupe quotient (ou groupe facteur) G/T (qui est un groupe de classes); un seul élément de ce groupe est un sous-groupe de G: la classe T, élément identité du groupe quotient ($E \equiv T$).

Tous les éléments d'une même classe ont la même symétrie d'orientation (Curien, 1971) caractérisée par une OPS du groupe orthogonal de l'espace E_n.

Les n OPS, caractéristiques des n classes forment un groupe, sous-groupe du groupe orthogonal, qu'on note H, qui est, par définition, le groupe pontuel de symétrie (GPS) de l'objet et qui est isomorphe au groupe quotient G/T. Cette définition est valable, que l'objet soit symmorphique ou qu'il ne le soit pas.

Démonstration. Puisque le sous-groupe T de G est invariant la relation yRz: $y^{-1}z \in T \Leftrightarrow zy^{-1} \in T$ est une relation d'équivalence; il existe donc un ensemble quotient (ou facteur) G/T de G par la relation d'équivalence qui définit les classes modulo T.

Deux classes modulo T, X et Y sont disjointes ou confondues car $x \in X$ et $x \in Y \Rightarrow X \equiv Y$; l'élément neutre e de G n'appartient donc qu'à la seule classe T, sous-groupe de G, qui est la classe de l'élément neutre modulo T; les autres classes modulo T ne sont pas des sous-groupes puisqu'elles ne contiennent pas l'élément neutre.

L'application de G dans G/T est donc un *homomorphisme surjectif* d'où l'on déduit que G/T est un groupe dont l'élément neutre est l'application de e dans G/T, c'est-à-dire $T \equiv E$.

Deux éléments d'une même classe sont tels que l'un est le produit de l'autre par une translation (qui conserve l'orientation de l'espace): ils ont donc la même symétrie d'orientation traduite par la matrice orthogonale, $\mathbf{A}_\perp$, dans l'écriture extrinsèque de la relation (1′), qui caractérise elle même une OPS *cf.* relation (1′) OPS.

Il y a donc *isomorphisme* entre le groupe de classes G/T et l'ensemble H d'isometries ponctuelles ($\mathbf{A}_\perp$) qui est alors un groupe d'opérations ponctuelles de symétrie et on l'appelle naturellement le *groupe ponctuel de symétrie* (*GPS*) de l'objet: tous ses éléments étant contenus dans le groupe orthogonal, il en constitue évidemment un sous-groupe.

Définition des objets symmorphiques et non symmorphiques

Deux cas peuvent se présenter. (1) $H \subset G$ (le GPS de l'objet est un sous-groupe de son groupe spatial de symétrie): ce dernier est dit symmorphe et l'objet symmorphique.

Propriété des groupes spatiaux symmorphes. Ils sont égaux au produit, semi direct, (*cf.* Appendice I) du groupe ponctuel de symétrie par le groupe de translation de l'objet

$$G = T \wedge H \text{ symmorphes} \tag{7}$$

puisque le groupe de translation est un sous groupe invariant. En effet, dans ce cas, on peut trouver un système minimum d'éléments générateurs du groupe G qui ne contient que des OPS et des translations.

(2) $H \not\subset G$ (le GPS n'est pas un sous-groupe du groupe spatial) ce dernier est dit non symmorphe et l'objet non symmorphique.

Propriété des groupes spatiaux de symétrie non symmorphes. Il est impossible de trouver un système minimum d'éléments générateurs de G, donc *de toute et seulement toute* la symétrie de l'objet, qui ne contient que des OPS et des translations.

III. Exemples d'objets parfaits symmorphiques et non symmorphiques

Dans ce paragraphe nous concrétisons les définitions introduites aux §§ I et II.

1er exemple, non cristal symmorphique dans E_3: Le cylindre de révolution de longueur infinie

Le GPS, H, et le groupe quotient G/T, isomorphes, sont des groupes infinis ($n = \infty$). Le groupe H contient toutes les OPS conservant un point O choisi arbitrairement sur l'axe du cylindre, Δ parallèle à $\mathbf{a}_1$ supposé vertical: toutes les rotations d'angle $\varphi \in \mathbb{R}$ autour de Δ, la rotation d'angle π autour d'un axe horizontal quelconque, Δ_h, passant par O, la symétrie $\bar{1}^1$ par rapport au point O, le produit de toutes ces OPS: rotation π autour de tous les axes horizontaux, réflexions sur tous les miroirs verticaux sur le miroir horizontal, rotations–réflexions . . ..

Remarquons que les molécules H_2, O_2, CO_2, C_2H_2

* Un sous-groupe T de G est un sous-groupe invariant (ou distingué) si toute classe à gauche modulo T est une classe à droite modulo T et réciproquement. La classe à gauche modulo T de l'élément $y \in G$ est constituée de tous les éléments $z \in G$ tels que $y^{-1}z = t \in T \Rightarrow z = yt$ (ici $t = \mathbf{t}$; $t_1 = \mathbf{t}_1$; ...); classe à droite modulo T de y: $zy^{-1} = t \in T \Rightarrow z = ty$. Dans un groupe abélien où tous les produits sont commutatifs, tous les sous-groupes sont invariants.

ont le même GPS, $D_{\infty h}$ ou $\infty/m\ 2/m$. Le groupe spatial de symétrie de ce cylindre est symmorphe et égal au produit du groupe $D_{\infty h}$ par le groupe de translation ($r\ \mathbf{a}_1$) avec $r \in \mathbb{R}$ [$G = D_{\infty h} \wedge (r\ \mathbf{a}_1)$].

Il est constitué de toutes les OPS de $D_{\infty h}$ autour de tous les points O, O', O'', . . . de l'axe Δ, de toutes les glissréflexions sur tous les miroirs verticaux (glissements $r\ \mathbf{a}_1$), *etc.*

2ème exemple, cristal parfait symmorphique dans E_2: *Le cristal parfait* (*donc infini*) *de la Fig.* 1

Le groupe spatial symmorphe de ce cristal se note *cmm*. Son sous-groupe invariant, groupe de translation, T contient tous les vecteurs définis par la relation (6′) à l'aide d'une maille (d'un mode) de Bravais rectangle centré d'où la lettre *c* dans le symbole *cmm*.

Toutes les isométries qui conservent le cristal (éléments de symétrie de son groupe spatial G) sont réparties en quatre classes disjointes modulo T, éléments du groupe quotient G/T.

1ère classe T: le sous-groupe T, élément identité de G/T; symétrie d'orientation: élément identité e.

2ème classe 2: les rotations 2^1 d'angle π autour de tous les points O, O', O'', . . . intersections des miroirs représentés en traits gras horizontaux et verticaux et autour de tous les points Ω, Ω', . . . intersections des glissmiroirs représentés en tirets sur la Fig. 1; symétrie d'orientation: la rotation π notée 2^1.

3ème classe M_a: les réflexions m_a^1 sur tous les miroirs verticaux m_a les glissréflexions . . ., $m_1^a.-\mathbf{b}$, $m_a^1.\mathbf{b}$, $m_a^1.2\mathbf{b}$, . . . sur tous les mêmes miroirs verticaux m_a; les glissréflexions . . ., $m_a^1.-\mathbf{b}/2$, $m_a^1.\mathbf{b}/2$, $m_a^1.3\mathbf{b}/2$, . . . sur tous les glissmiroirs verticaux m'_a représentés par des tirets sur la Fig. 1. Symétrie d'orientation de cette classe: la réflexion sur un miroir vertical notée m_a^1.

4ème classe M_b: analogue à la précédente, sauf qu'elle concerne les miroirs et glissmiroirs horizontaux.

Le groupe ponctuel de symétrie (GPS) de ce cristal se note *mm* ou (2)*mm* et il est d'ordre 4: $H(e,2^1,m_a^1,m_b^1)$, et c'est un sous-groupe de G car il conserve globalement le cristal autour des points O, O', . . . (mais pas autour des points Ω, Ω', . . .). Ce cristal est donc symmorphique.

Le GPS est isomorphe au groupe quotient G/T ($\mathsf{T},2,\mathsf{M}_a,\mathsf{M}_b$) et en particulier le groupe d'éléments (GPS) et le groupe de classe (G/T) ont la même table de multiplication.*

On vérifie également qu'on peut reconstruire la totalité du groupe G en effectuant le produit (semi direct) du groupe H autour d'un des points O, O', O'', . . . par le groupe T. Par exemple le produit $m_a^1.(\mathbf{a}+\mathbf{b})/2$ engendre la glissréflexion b^1 ($= m_a^1.\mathbf{b}/2$) sur le glissmiroir m'_a translaté de m_a de $\mathbf{a}/4$ (*cf.* Appendice II).

* Le produit de deux classes s'entend au sens du produit cartésien de deux ensembles.

Deuxième théorème H des objets symmorphiques (finis ou infinis). Dans un objet parfait symmorphique, il existe au moins une famille de Wyckoff de positions les plus particulières O, O', . . . dont la symétrie locale est la symétrie d'orientation de l'objet. Autour de ces points, O, O' . . . toutes les OPS, h, éléments du GPS, H, de l'objet le conservent globalement. Non seulement H est un sous-groupe de G, mais encore il est le sous-groupe d'ordre maximum [du groupe orthogonal, O, de (E_nO)] qui conserve l'objet. Toutes les OPS$^+$ (rotations), h^+, qui conservent globalement l'objet autour de O, O', . . . constituent un groupe: le groupe des rotations, H^+, de cet objet, qui est un sous-groupe d'index 2 du GPS, H.

Démonstration. Analogue à celle du théorème T et Weigel (1972, p. 46).

3ème exemple, cristal parfait non symmorphique dans E_2: *Le cristal parfait* (*donc infini*) *de la Fig.* 2, *dont le groupe spatial non symmorphe se note pg*

Le groupe de translation T, sous-groupe invariant de G, contient tous les vecteurs $\mathbf{t} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b}$ [avec (u,v) tous les doublets de $\mathbb{Z}^2$] écrits à l'aide d'une maille (d'un mode) de Bravais rectangle primitif (parce que la maille de Bravais est simple) d'où la lettre p dans le symbole *pg*.

La partition de G se fait en deux classes disjointes modulo T, éléments du groupe G/T.

1ère classe T: élément identité de G/T dont la symétrie d'orientation est e.

2ème classe M_b: constituée des glissréflexions . . ., $m_b^1.(-\mathbf{a}/2)$, $m_b^1.\mathbf{a}/2$, $m_b^1.3\mathbf{a}/2$, . . . sur tous les glissmiroirs m'_b représentés par des tirets sur la Fig. 2; une isométrie comme $m_b^1.(\mathbf{b} + \mathbf{a}/2)$ est un glissréflexion $m_b^1.\mathbf{a}/2$ sur un glissmiroir parallèle à m'_b. La symétrie d'orientation de cette classe est la réflexion m_b^1.

Le GPS, H, de ce cristal est donc d'ordre 2 et se note m (e,m^1); ce n'est pas un sous-groupe de G: ce

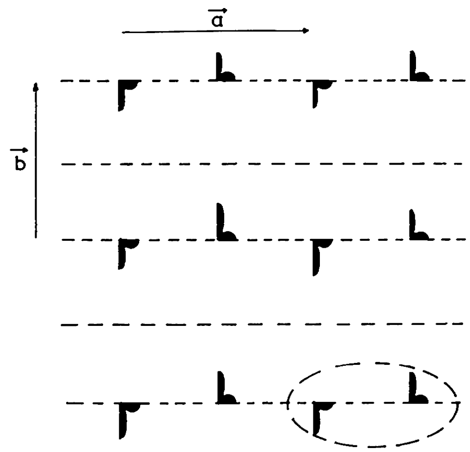

Fig. 2. Cristal *pg* de E_2.

cristal n'est donc pas symmorphique, mais le GPS, (groupe d'éléments) $H = m$ est isomorphe au groupe quotient (groupe de classes modulo T) G/T (T,M_b).

Le groupe G n'est pas égal au produit (semi direct) de H par T.

Remarquons que la translation **b** et la glissréflexion $m_b^1.\mathbf{a}/2$ $(=a^1)$ sur n'importe quel glissmiroir constituent un *système minimum d'éléments générateurs de G*: en effet tous les produits (= additions vectorielles pour les translations) et les puissances (positives, négatives et nulle) de ces deux éléments engendrent le groupe G dans sa totalité.

4ème exemple, semi cristal parfait non symmorphique dans E_3: le cylindre infini constitué de deux demi cylindres de révolution zébrés périodiquement et décalés d'une demi période le long de l'axe du cylindre (Fig. 3).

Le groupe spatial non symmorphe de ce semi cristal se note $P\,\dfrac{2}{m}\,\dfrac{2}{c}\,\dfrac{2_1}{m}$.

L'objet n'est cristallin que parallèlement à l'axe z avec les éléments **t** du groupe de translation, T, égaux à $w\mathbf{c}$ avec $w \in \mathbb{Z}$; c est égal au double de la hauteur d'une zébrure (noire ou blanche).

La partition de G donne huit classes modulo T qui sont les éléments de G/T.

1ère classe T.

2ème classe 2_x: rotations 2^1, d'angle π, autour de tous les axes 2 parallèles à x et distants de $c/2$.

3ème classe 2_y: rotations 2^1, d'angle π, autour de tous les axes 2 parallèles à y et distants de $c/2$.

4ème classe 2_{1z}: hélirotations ..., $2^1.-\mathbf{c}/2$, $2^1.\mathbf{c}/2$, $2^1.3\mathbf{c}/2$, ... autour de l'unique axe hélicoïdal porté par z.

5ème classe M_x: réflexion m_x^1 et glissréflexions ..., $m_x^1.(-\mathbf{c})$, $m_x^1.\mathbf{c}$, $m_x^1.2\mathbf{c}$, ... sur le miroir yz.

6ème classe C_y: glissréflexions ...; $m_y^1.(-\mathbf{c}/2)$, $m_y^1.\mathbf{c}/2$, $m_y^1.3\mathbf{c}/2$, ... sur le glissmiroir zx.

7ème classe M_z: réflexions m_z^1 sur tous les miroirs parallèles à xy, distants de $c/2$ et passant par les axes 2_y.

8ème classe $\bar{1}$: 'inversions' $\bar{1}^1$ autour de tous les centres de symétrie situés sur l'axe z, distants de $c/2$ et intersections des axes $2x$ avez l'axe z.

Le GPS, H, de ce semi cristal est isomorphe au groupe quotient G/T: il s'agit de $2/m\ 2/m\ 2/m$ $(e,2_x^1,2_y^1,2_z^1,m_x^1,m_y^1,m_z^1,\bar{1}^1)$ d'ordre huit qui n'est pas un sous-groupe de G: ce semi cristal n'est donc pas symmorphique.

5ème exemple, les molécules parfaites symmorphiques dans E_3

Ces molécules sont des non cristaux car le groupe de translation n'est pas isomorphe à $\mathbb{Z}^n$ (il est réduit à l'élément neutre e).

Pour ces molécules, comme pour tous les objets parfaits finis de l'espace E_n, on a donc:

$$G \equiv H. \tag{8}$$

Le GPS, H, est donc un sous-groupe impropre de G qui peut alors être considéré comme symmorphe.

L'ordre du groupe de rotations H^+ de ces molécules est donc leur 'nombre de symétrie' σ utilisé en thermodynamique statistique pour calculer la somme d'états de rotation Z_{rot} (Pacault, 1963; Weigel, 1972, p. 50; voir aussi 2ème théorème H).

Par exemple la molécule parfaite CH_4 est un tétraèdre régulier dont le carbone est au centre et les quatre atomes d'hydrogène aux quatre sommets. Son GPS est d'ordre 24: $\bar{4}3m$ (Td) et son groupe de rotations 23 (T) est d'ordre $12 = \sigma$.

6ème exemple, cristaux parfaits maxicliniques symmorphiques dans E_2, E_3, E_4, E_5*

Monoclinique ou parallélogramme ou oblique dans E_2, triclinique dans E_3, hexaclinique dans E_4, décaclinique dans E_5, ... sont nécessairement symmorphes et ne peuvent avoir que l'un des groupes spatiaux de symétrie suivants: $P\bar{1}$ ou $P1$.

En effet la symétrie d'orientation maximum possible pour un tel cristal est celle de son réseau cristallin et, dans ce cas, le GPS du cristal est dit holoédrique, soit $\bar{1}$ $(e,\bar{1}^1)$ pour les familles cristallines précédentes. Dans ce cas on a

$$G = T \otimes \bar{1} = \bar{1} \otimes T \tag{9}$$

$\otimes$ signifie produit direct, *cf.* Appendice I.

La seule autre possibilité, pour ces familles, est que le GPS se réduise à un sous-groupe réel de $\bar{1}$ soit, ici, 1, groupe à un élément: e. On a alors

$$G \equiv T \text{ (maxicliniques } P1 \text{ dans } E_n) \tag{10}$$

pour la cristallographie à quatre dimensions (Wondratschek, Bulow & Neubuser, 1971).

7ème exemple: cristal parfait symmorphique hypercubique primitif dans E_4

Le groupe de translation T contient tous les vecteurs: $\mathbf{t} = u^1\mathbf{a}_1 + u^2\mathbf{a}_2 + u^3\mathbf{a}_3 + u^4\mathbf{a}_4$ avec $(\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3\mathbf{a}_4)$ base orthonormée de E_4 et (u^1,u^2,u^3,u^4) tous les quadruplets de $\mathbb{Z}^4$.

Si on ne considère que ceux d'entre eux qui ont un GPS holoédrique, on démontre, en dénombrant toutes les matrices orthogonales possibles dans cette base, que

* Les mailles (modes) de Bravais maxicliniques que nous considérons dans cet exemple ont des angles et des longueurs de côtés inégaux. Ainsi dans l'espace E_3 la maille simple rhomboédrique, qui n'est d'ailleurs pas une maille de Bravais n'est pas maxiclinique: on rappelle que la maille de Bravais correspondante est la maille triple hexagonale R (Weigel, 1972, p. 96).

ce GPS est constitué de 384 OPS qui sont ses éléments (Wondratschek *et al.*, 1971; Rigault, 1977), il y a donc 384 positions générales de Wyckoff dans la maille d'un tel cristal.

IV. Définitions intrinsèques des objets infinis: gaz parfait dans E_n et cristal liquide smectique parfait dans E_3

(1) On appelle *gaz parfait*, tout objet infini de $(E_n O)$ conservé par un groupe de translation, Γ, isomorphe au groupe $\mathbb{R}^n$, ou $\mathbb{R}$ est le groupe additif des réels.

$\gamma = r^1 \mathbf{a}_1 + \cdots + r^n \mathbf{a}_n$, avec $(r^1 r^2 \ldots r_n)$ tous les multiplets de $\mathbb{R}^n$, est l'écriture extrinsèque des éléments de Γ qui représentent donc tous les vecteurs translations de $(E_n O)$ [$(\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_n)$ est une base de $\mathbf{E}_n$].

Puisque tous les vecteurs de l'espace $\mathbf{E}_n$ conservent l'objet gaz parfait, ses propriétés sont constantes dans l'espace objet $(E_n O)$ et, en particulier, la densité de probabilité de présence (des noyaux des 'molécules parfaites') autour de chaque point de cet espace.

L'objet est donc conservé par toutes les isométries de $(E_n O)$ et c'est le l'objet le plus symétrique de cet espace.

Le groupe spatial de symétrie du gaz parfait est le groupe de Poincaré, P, de E_n et son groupe ponctuel de symétrie est le groupe orthogonal de E_n, $O \subset P \Rightarrow$ il s'agit donc d'un objet symmorphique on a d'ailleurs l'égalité

$$P = \Gamma \wedge O. \tag{11}$$

(2) On appelle *cristal liquide smectique parfait** de E_3 tout objet infini de cet espace conservé par un groupe de translation, T, isomorphe à $\mathbb{Z}\mathbb{R}^2$.

* Les cristaux liquides smectiques réels sont imparfaits, les moins imparfaits étant les cristaux liquides smectiques A où les strates sont assimilées à des plans et où l'ordre à courte et moyenne distance parallèlement aux plans est minimum (Brown, Doane & Neef, 1971).

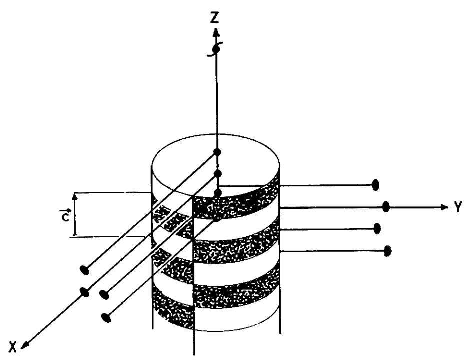

Fig. 3. Semicristal de E_3.

Un sous-groupe T' de T est donc isomorphe à $\mathbb{Z}^1$ et il s'agit d'un semi cristal de E_3 (Fig. 3), *cf.* § I.

$$\mathbf{t} = r^1 \mathbf{a}_1 + r^2 \mathbf{a}_2 + u^3 \mathbf{a}_3 \quad \text{avec } (r^1, r^2) \in \mathbb{R}^2 \text{ et } u^3 \in \mathbb{Z}$$

est l'écriture extrinsèque des éléments de T.

Les propriétés de ce cristal liquide sont donc constantes dans le sous espace E_2 [de base $(\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2)$] de E_3; et le groupe ponctuel de symétrie de cet objet est donc le groupe orthogonale de ce sous espace E_2; l'objet est symmorphique car

$$G = T \wedge O_{\dim 2} = u^3 \mathbf{a}_3 \wedge P_{\dim 2}. \tag{12}$$

Conclusion

Les notions de groupe spatial de symétrie, de groupe de translation et de groupe ponctuel de symétrie s'appliquent donc à tous les objets infinis d'un espace et pas seulement aux cristaux parfaits.

Toutes ces notions sont valables dans l'espace à n dimensions.

On peut définir la nature des objets, de façon intrinsèque, d'après les propriétés d'isomorphisme de leur groupe de translation.

Le caractère cristallin ou semi cristallin d'un objet est incompatible avec l'idée de continuité de passage d'une opération de symétrie à une autre de même type dans les groupes de symétrie de cet objet cristallin ou semi cristallin: ces groupes de symétrie ne sont donc pas des groupes de Lie (Pichon, 1973), contrairement a ceux du gaz parfait dans E_n.

APPENDICE I
Les opérations ponctuelles de symétrie (OPS) dans l'espace E_n (rappels de mathématiques, Queysanne, 1964)

Les transformations linéaires ponctuelles, f, de l'espace $(E_n O)$ sont des applications de cet espace sur lui même, isomorphes aux endomorphismes de l'espace vectoriel $\mathbf{E}_n$ sur le corps des réels, $\mathbb{R}$. Les vecteurs de $\mathbf{E}_n$ dont le support conserve sa direction lors de la transformation sont les vecteurs propres de cet endomorphisme, solutions de l'équation: $f(\mathbf{x}) = \lambda \mathbf{x}$, avec $\lambda \in \mathbb{R}$. Cette équation aux vecteurs propres s'écrit, de façon extrinsèque $(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}_n)\ \mathbf{X} = 0$ (où $\mathbf{I}_n$ est la matrice unité, ou identité) et elle possède des solutions non triviales ($\mathbf{x} \neq 0$) seulement si λ est égal aux racines réelles du polynome caractéristique $\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}_n) = 0$. Ces racines réelles sont appelées valeurs propres sur $\mathbb{R}$. Ce polynome est invariant si on remplace $\mathbf{A}$ par une matrice semblable $\mathbf{A}' = \mathbf{P}^{-1}\ \mathbf{AP}$ (où $\mathbf{P}$ est une matrice carrée $n \times n$ inversible): les racines du polynome caractéristique, donc les valeurs propres, ne dépendent pas de la base choisie et caractérisent la nature de l'endomorphisme, c'est-à-dire la nature de l'OPS (pour les isométries on démontre que $\lambda = \pm 1$). A chaque valeur propre λ_i, racine simple réelle du polynome caractéristique, correspond une droite de E_n supportant tous les vecteurs propres $\mathbf{V}_i$ associés à la valeur propre λ_i.

Exemples d'OPS et définition de leurs supports

(1) *Les OPS de* E_3 sont de deux types: (*a*) Les OPS$^+$ ou rotations ($\det \mathbf{A}_\perp = +1$) sont caractérisées par les racines du polynome caractéristique: $+1$, $e^{i\varphi}$, $e^{-i\varphi}$ (Weigel, 1972, p. 44): les vecteurs propres $\boldsymbol{\delta}$ associés à la valeur propre $+1$ sont invariants par la rotation d'angle φ autour de l'axe de rotation Δ, support de l'OPS$^+$ rotation, support des vecteurs $\boldsymbol{\delta}$: $f(\boldsymbol{\delta}) = \boldsymbol{\delta}$. Lorsque $\varphi = \pi$ il y a dégénérescence car la valeur propre -1 est racine double du polynome caractéristique et le sous-espace propre correspondant est un plan E_2 orthogonal à Δ et dans lequel chaque vecteur $\mathbf{x}$ est transformé en son opposé par la rotation d'angle π: $\forall\, \mathbf{x} \in \mathbf{E}_2 \perp \Delta: f(\mathbf{x}) = -\mathbf{x}$.

(*b*) Les OPS$^-$ ($\det \mathbf{A}_\perp = -1$) sont caractérisées par les racines du polynome caractéristiques -1, $e^{i\varphi}$, $e^{-i\varphi}$ et il s'agit d'une rotation–réflexion (produit commutatif de la rotation d'angle φ autour de l'axe Δ support des vecteurs propres $\boldsymbol{\delta}$ associés à la valeur propre -1 par la réflexion sur le miroir plan orthogonal à Δ). En écrivant $\varphi = \varphi' + \pi$ on vérifie qu'une rotation–réflexion est aussi une rotation–inversion.

(2) *Les OPS totalement dégénérées de* (E_nO) 1_n^1 *et* $\bar{1}_n^1$. Deux OPS de l'espace E_n ont une valeur propre qui est une racine multiple d'ordre n du polynome caractéristique: l'identité 1_n^1 ($\lambda = +1$) et l'inversion ($\lambda = -1$) qui est une symétrie par rapport à un point lorsque n est impair et une rotation lorsque n est pair. Les vecteurs propres associés sont alors *tous* les vecteurs de $\mathbf{E}_n$: $\forall\, \mathbf{x} \in \mathbf{E}_n: f(\mathbf{x}) = \pm\mathbf{x}$. Ces deux OPS sont des homothéties de rapport ± 1 et le produit de n'importe quelle OPS, élément du groupe orthogonal, O, de E_n par l'identité où l'inversion est alors commutatif. Ces deux OPS ($1_n^1 = e$, $\bar{1}_n^1$) constituent le groupe binaire $\bar{1}$ et le produit direct externe* de ce groupe par n'importe quel GPS sous-groupe de O est un GPS. Comme application de cette propriété dans E_3 rappelons la génération de 11 GPS cristallographiques centrosymétriques par produit direct externe des 11 GPS de rotation cristallographiques (1, 2, 3, 4, 6, 222, 32, 422, 622, 23, 432) par le GPS $\bar{1}$: on obtient ainsi les 11 sur-groupes centrosymétriques, chefs de file des 11 classes de Friedel–Laue, dont l'ordre est double de celui du groupe de rotation générateur (Weigel, 1972).

(3) *L'OPS$^-$ réflexion sur un miroir dans* E_n. *Definition intrinsèque*: c'est l'OPS$^-$ de E_n, presque totalement dégénérée qui est caractérisée par les deux valeurs propres: -1 et $+1$ qui sont, repectivement, racines simple et multiple d'ordre $n-1$ du polynome caractéristique.

Définition extrinsèque: on appelle réflexion dans E_n et on note m^1 toute OPS$^-$ ($\det \mathbf{A}_\perp = -1$) qui, dans une base orthonormée, peut s'exprimer par la matrice diagonale

$$\begin{vmatrix} -1 & & 0 \\ & +1 & \\ 0 & & +1 \end{vmatrix}.$$

Ces réflexions ont lieu sur les sous-espaces propres associés à la valeur $+1$, appelés *miroirs supports* de la réflexion, dans lesquels tous les vecteurs sont invariants par cette OPS$^-$ et qui sont: une droite dans E_2, un plan dans E_3, un hyperplan dans E_4, $E_5, \ldots, E_n$. On définit l'orientation du support miroir par la direction de la droite de E_n normale au miroir et qui supporte les vecteurs propres associés à la valeur propre -1: ainsi m_a^1 désigne la réflexion sur un miroir orthogonal à l'axe cristallographique a, dans $E_2, E_3, \ldots, E_n$. On note m le groupe binaire (e, m^1) et, à titre d'application dans E_3, rappelons que les dix GPS$^-$ cristallographiques non centrosymétriques sont obtenus en effectuant le produit semi direct de m par l'un des dix sous-groupes d'index 2 des huit groupes de rotations cristallographiques qui en possèdent (Weigel, 1972, p. 74). Les dix GPS$^-$ ainsi obtenus sont isomorphes aux huit GPS$^+$ générateurs. Dans le cas $\bar{4}$ il s'agit du produit semi direct de m par le groupe de classes de 4, modulo le sous-groupe 2 (Sivardière & Bertaut, 1970).

* *Définition du produit cartésien de deux ensembles* d'éléments $x_i \in E_i$ et $x_j \in E_2$: c'est l'ensemble $E_1.E_2$ constitué de l'ensemble de tous les couples (x_i, x_j).

Définition du produit direct externe de deux sous-groupes G_1 et G_2 d'un même groupe G (par exemple G est le groupe de Poincaré de E_n): si $\forall\, g_i \in G_1$ et $\forall\, g_j \in G_2$, $g_i.g_j = g_j.g_i$, alors le produit $G_1 \otimes G_2 = G_2 \otimes G_1$ est un groupe qu'on appelle produit direct externe de G_1 (G_2) et de G_2 (G_1).

Définition du produit semi direct de deux sous-groupes G_1 et G_2 d'un même groupe G: si, $\forall\, g_i \in G_1$ et $\forall\, g_j \in G_2$, $\exists\, g_k \in G_2$ tel que $g_i.g_j = g_k.g_i$ (c'est à dire $g_i.G_2 = G_2.g_i$), alors le produit cartésien $G_2 \wedge G_1$ est un groupe qu'on appelle le produit semi direct de G_2 et de G_1.

APPENDICE II

Les opérations de symétrie dans les espaces E_1, E_2 et E_3

Après avoir dénombré, dans l'Appendice I, tous les types d'OPS possibles on rappelle que les opérations de symétrie (isométries) sont des produits d'OPS* par des translations, (*cf. Introduction*) qu'on note ici $\boldsymbol{\beta}$ en les décomposant en la composante parallèle ($\parallel$) au support de l'OPS (Δ ou M) et en la composante perpendiculaire ($\perp$) à ce support: $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}_\parallel + \boldsymbol{\beta}_\perp$.

A titre d'exemple, on considère quelques produits $f_2 \circ f_1$ et $f_1 \circ f_2$ de la relation (1″) possibles dans E_2 et E_3.

* ($\varphi\Delta$) la rotation d'angle φ autour de Δ, axe dans E_3, centre dans E_2; (sM) réflexion sur un miroir M; *etc.*

Deux exemples de produits non commutatifs

$[\boldsymbol{\beta} \perp \Delta).(\varphi\Delta) = (\varphi\Delta')$ avec $\Delta' \parallel \Delta$ (E_2 et E_3),
$(\varphi\Delta).(\boldsymbol{\beta} \perp \Delta) = (\varphi\Delta'')$ avec $\Delta'' \parallel \Delta$ (E_2 et E_3).

Propriété des produits non commutatifs $(OPS).\boldsymbol{\beta}$, *ou* $\boldsymbol{\beta}.(OPS)$

Tous ces produits correspondent en fait à un simple déplacement, par translation, du support de l'OPS (Weigel, 1972, p. 99 à 105).

Tous les types de produits commutatifs $(OPS).\boldsymbol{\beta}$ *se réduisent à deux dans* E_3 *et à un dans* E_2

$(\boldsymbol{\beta} \parallel M).(sM) =$ glissymétrie $(sM\beta)$ (E_2 et E_3),
$(\boldsymbol{\beta} \parallel \Delta).(\varphi\Delta) =$ hélirotation $(\varphi\Delta\beta)$ (E_3).

Propriété des produits commutatifs $(OPS).\boldsymbol{\beta}$:

Ils ne déplacent pas le support de l'OPS.

Supports des opérations de symétrie d'un groupe spatial de symétrie

L'origine et la base orthonormée de l'espace (E_3O) étant précisés, une telle isométrie conservant le cristal s'écrit de façon extrinsèque:

$$\mathbf{X}' = \mathbf{A}_{\perp i}\mathbf{X} + \mathbf{B}_i = \mathbf{A}_{\perp i}\mathbf{X} + \mathbf{B}_{i\parallel} + \mathbf{B}_{i\perp}$$

où l'on a décomposé la translation $\mathbf{B}_i$ en ses composantes $\parallel$ et $\perp$ au support de la symétrie (ponctuelle) d'orientation caractérisée par $\mathbf{A}_{\perp i}$.

On peut changer d'origine en translatant la base de l'espace (E_nO) d'un vecteur $\mathbf{OO}'$ égal au déplacement du support de l'OPS et l'isométrie s'écrit alors:

$$\mathbf{X}' = \mathbf{A}_{\perp i}\mathbf{X} + \mathbf{B}_{i\parallel}.$$

Le support de la symétrie d'orientation $(\mathbf{A}_{\perp i})$ passant par cette nouvelle origine est, par définition, le support de cette isométrie. Pour chacun des 230 groupes spatiaux cristallographiques de symétrie de E_3, et des 17 de E_2, le Tome I des *International Tables for X-ray Crystallography* (1965) représente tous les supports de toutes les isométries, éléments de chacun de ces groupes.

APPENDICE III

Mode de Bravais (Bravais types of cells)

Un mode (de description du réseau) de Bravais est caractérisé par un type de maille. Par définition une maille de Bravais est telle que le maximum d'arêtes, faces,... de cette maille soient parallèles à des axes de rotation ou d'hélirotation à des miroirs ou des glissmiroirs,... supports des isométries (*cf.* Appendice II), éléments du groupe spatial de symétrie du cristal. Les propriétés d'une telle maille sont: d'avoir le maximum d'angles droits tout en restant compatible avec la symétrie d'orientation (ponctuelle) du cristal; d'être parfois multiples c'est-à-dire non primitives.

Tableau 1. *Modes de Bravais du groupe de translation, T, dans l'espace* E_3: $\mathbf{t} \in T$

$$\mathbf{t} = u\frac{\mathbf{a}}{n} + v\frac{\mathbf{b}}{p} + w\frac{\mathbf{c}}{q} \text{ avec } (u,v,w) \in \mathbb{Z}^3, p,p',p'' \in \mathbb{Z} \quad (6)$$

Mode de Bravais	multiplicité de la maille	Restrictions sur (u,v,w)	n, p, q
P	1	néant	1, 1, 1
C	2	$u + v = 2p$	2, 2, 1
B	2	$w + u = 2p$	2, 1, 2
A	2	$v + w = 2p$	1, 2, 2
I	2	u, v, w tous pairs ou tous impairs	2, 2, 2
F	4	$u + v + w = 2p$	2, 2, 2
R	3	$\begin{cases} u + v = 3p \\ v + w = 3p' \\ w - u = 3p'' \end{cases}$	3, 3, 3

Dans E_2 il y a cinq modes de Bravais et quatre systèmes cristallins oblique p, rectangulaires p et c, carré p, hexagonal p (p = primitif, maille simple; c = centré, maille double).

Dans E_3 il y a 14 modes de Bravais et 6 systèmes cristallins* cubiques *PIF*, hexagonaux *PR*, quadratiques (ou tetragonaux) *PI*, orthorhombiques *PCIF*, monocliniques *PA*, triclinique P (P = primitif, C et A = deux faces centrées, F = toutes les faces centrées, I = corps centré, R = rhomboédrique). On trouve dans le Tableau 1 l'écriture des vecteurs $\mathbf{t} \in T$ en utilisant ces modes de Bravais.

Dans E_4 il y a 64 modes de Bravais et 23 systèmes cristallins qu'on appelle d'ailleurs familles cristallines (Wondratschek *et al.*, 1971).

* Appelés familles par Wondratschek *et al.* (1971); lire aussi Weigel (1972), p. 96 et 97.

Références

BROWN, G. H., DOANE, J. W. & NEEF, V. N. (1971). *A Review of the Structure and Physical Properties of Liquid Crystals*. London: Butterworths.

CURIEN, H. (1971). *Les Groupes en Cristallographie*, Edité par T. KAHAN, Tome 2, *Théorie des Groupes en Physique Classique et Quantique*. Paris: Dunod.

DIEUDONNE, J. (1964). *Algèbre Linéaire et Géométrie Elémentaire*, Chs. V et VII: *Géométries Euclidiennes Planes et à Trois Dimensions*. Paris: Hermann.

International Tables for X-ray Crystallography (1965). Vol. I, 3ème éd. Birmingham: Kynoch Press.

PACAULT, A. (1963). *Eléments de Thermodynamique Statistique*. Paris: Masson.

PICHON, G. (1973). *Les Groupes de Lie*. Paris: Hermann.

QUEYSANNE, M. (1964). *Algèbre, Collection U*. Paris: Armand Colin.

RIGAULT, G. (1977). *Metric Tensor and Symmetry Operations in Crystallography*. Summer School on Teaching Crystallography for Today's Sciences, 6–15 September 1977, Erice, Sicily, Italy.

SIVARDIÈRE, J. & BERTAUT, E. F. (1970). *Bull. Soc. Fr. Minéral. Cristallogr.* **93**, 515–526.

WEIGEL, D. (1972). *Cristallographie et Structure des Solides*, Tome I. Paris: Dunod.

WONDRATSCHEK, H., BULOW, R. & NEUBUSER, J. (1971). *Acta Cryst.* A**27**, 523–535.