

Atelier : Symétries et Groupes

El-Eulmi BENDEIF

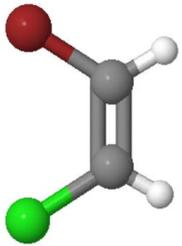
: el-eulmi.bendeif@univ-lorraine.fr



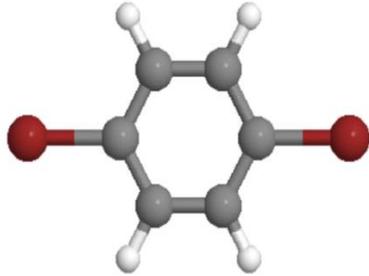
1. Élément de symétrie et groupes ponctuels

Représentez les éléments de symétrie et donnez le groupe ponctuel des molécules suivantes, considérées comme purement bidimensionnelles.

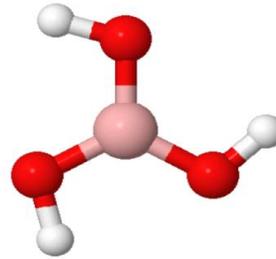
N. B. : Les niveaux de gris et les rayons atomiques différencient les espèces chimiques.



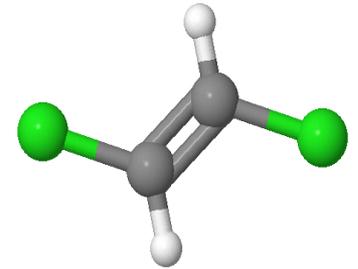
Ethylène-BrCl



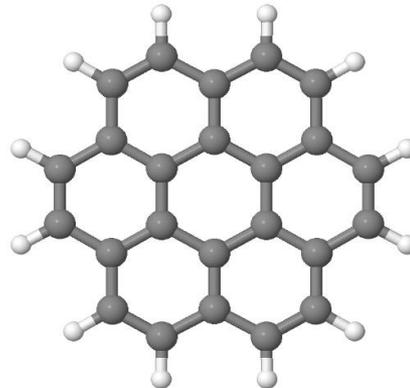
Dibromobenzène



Acide Borique



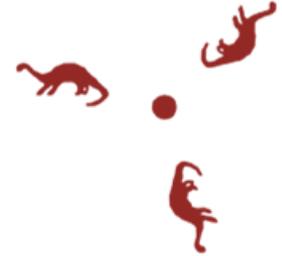
Dichloroéthylène



Coronène

1. Élément de symétrie et groupes ponctuels

Quels sont les éléments de symétrie de ces figures

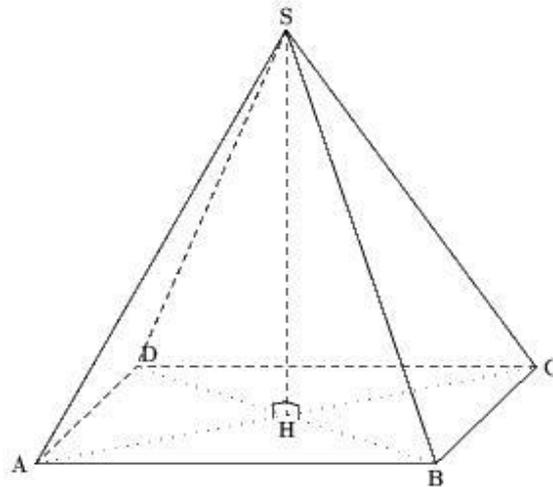


2. Symétrie et Groupe Ponctuel d'une pyramide à base carrée

Soit la pyramide à base carrée de la figure ci-dessous.

- Déterminer les éléments de symétrie de cette pyramide.
- Donner le groupe ponctuel correspondant. A quel système cristallin fait-il référence ?
- Dessiner la projection stéréographique des directions équivalentes.
- En déduire l'ordre du groupe.
- Déterminer dans ce système et par le calcul l'intersection des plans (110) et (-110)

N. B. : on placera respectivement a et b selon l'axe horizontal et vertical de la projection.



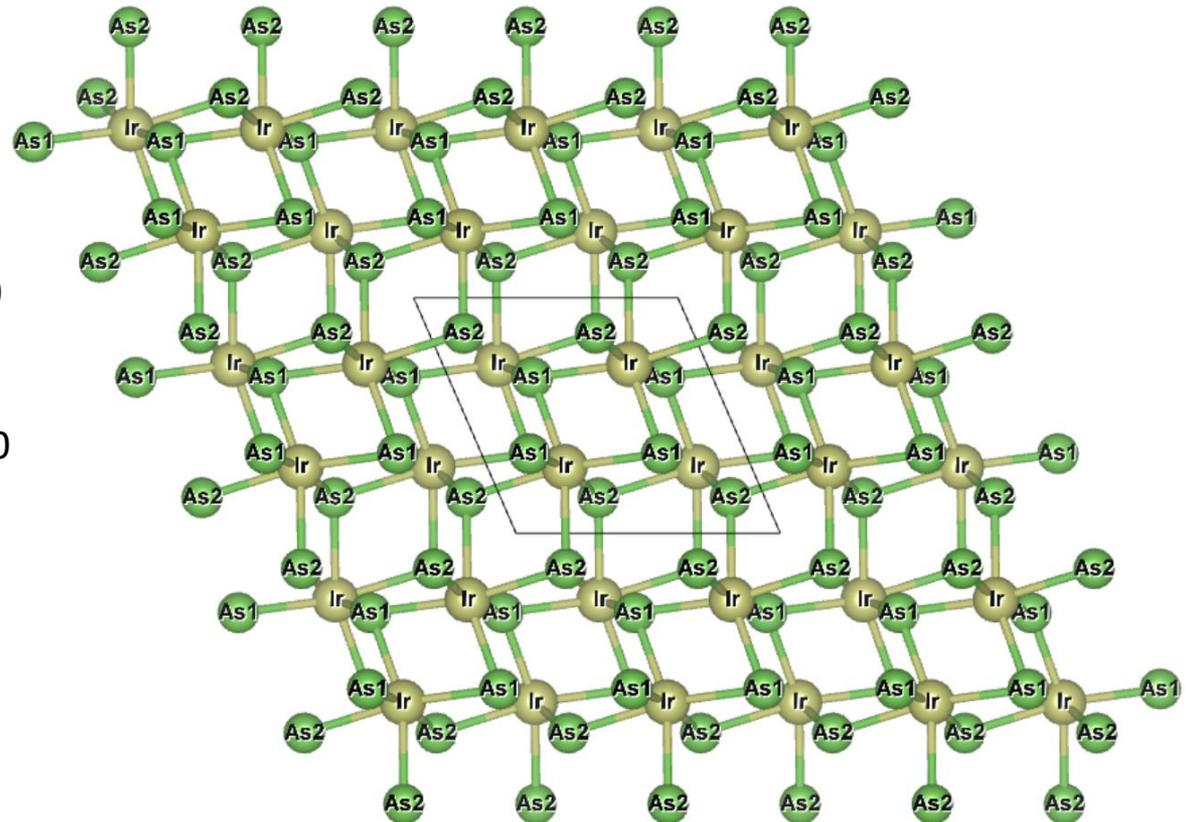
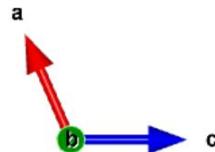
3. Symétrie et Groupe d'Espace

Déterminer le groupe d'espace de la structure de ***IrAs2***

- maille: ($a=6,05490 \text{ \AA}$, $b=6,07170 \text{ \AA}$, $c=6,15870 \text{ \AA}$, $\alpha=\gamma=90^\circ$, $\beta=113.1970^\circ$)

- Quel est le groupe ponctuel de symétrie et la classe de Laue

	x	y	z
Ir	0.28200	0.00000	0.29300
As1	0.33800	0.36600	0.18200
As2	0.15100	0.62500	0.37000



4. Structure de la marcassite FeS_2

L'expérience de diffraction des rayons X réalisée sur la marcassite (FeS_2) montre comme symétrie uniquement l'existence de 3 miroirs mutuellement perpendiculaires.

- 1- Quel est le groupe de Laue du cristal, et quels sont les groupes ponctuels possibles?
- 2- Donner les projections stéréographiques de la classe de Laue et des groupes ponctuels possibles.
- 3- Quels sont les groupes d'espace possibles si on relève les extinctions systématiques suivantes:

Sur $(0, k, l)$: $k + l = 2n + 1$; sur $(h, 0, l)$: $h + l = 2n + 1$.

La marcassite est centrosymétrique et possède les paramètres de maille suivants:

$a = 4,45 \text{ \AA}$, $b = 5,40 \text{ \AA}$ et $c = 3,38 \text{ \AA}$. En sachant que la masse volumique de la marcassite est de $4,9 \text{ g/cm}^3$

et que les masses atomiques du Fe et du S sont respectivement 55,7 et 32,1 g.

- 5- Calculer le nombre de molécules par maille.