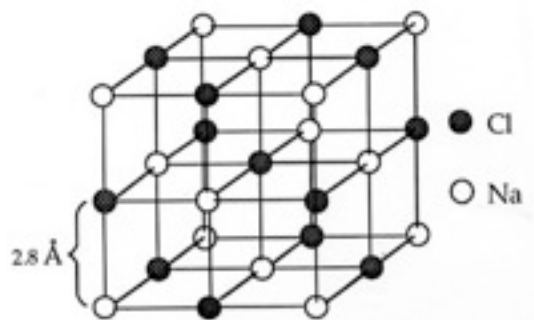


L'organisation des atomes

Jusqu'à présent, nous n'avons considéré que l'aspect extérieur des cristaux. Il est bien évident que la forme d'un cristal doit être le reflet de l'arrangement des atomes qui le constituent. Nous savons déjà que l'état cristallin est la conséquence de l'arrangement géométrique périodique des atomes. Comment donc pouvons-nous décrire ces arrangements?

Partons de l'exemple concret de la halite, le chlorure de sodium NaCl, plus connu encore sous le nom de sel de cuisine. Si nous faisons évaporer tranquillement une solution de NaCl, nous assistons à la formation de petits cristaux plus ou moins bien développés, aux faces orthogonales et qui tendent à former des cubes. Ce minéral cristallise donc dans le système cubique. La première idée qui vient à l'esprit est que, selon toute vraisemblance, les atomes de chlore et de sodium se disposent alternativement sur des rangées parallèles aux arêtes d'un cube.



Cristaux cubiques de halite et position des atomes dans la structure

Essayons tout d'abord d'exprimer la distance qui sépare un atome de chlore d'un atome de sodium. Ne tenons pas compte des rayons atomiques et calculons la distance qui sépare leurs centres. Connaissant le nombre d'Avogadro¹, le poids spécifique de la halite (2.16 gr/cm³) ainsi que son poids moléculaire (58.5 gr.), on obtient :

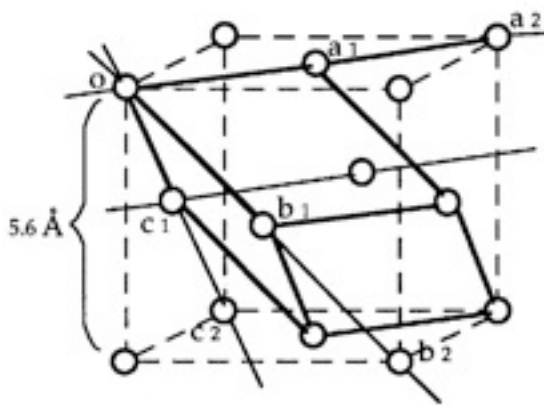
$$\text{nombre d'atomes dans un cm}^3 = \frac{2 \times 6.02 \times 10^{23} \times 2.16}{58.5} = 44.5 \times 10^{21}$$

$$\text{distance entre deux atomes} = \sqrt[3]{\frac{1}{44.5 \times 10^{21}}} = 2.8 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

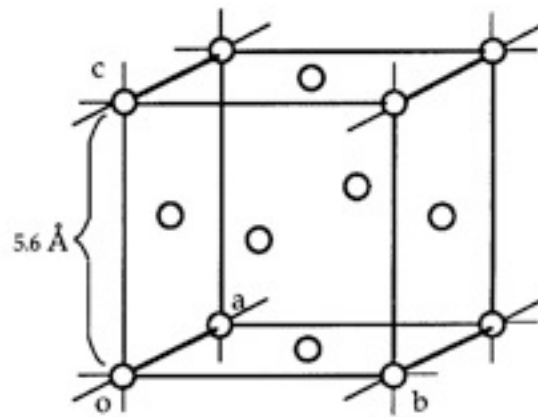
¹ C'est le nombre d'atomes contenus dans un atome-gramme ou de molécules contenues dans une molécule-gramme (dans le cas présent 58.5 gr). Ce nombre vaut 6.02×10^{23} .

Comment pouvons-nous décrire, en termes simples, la configuration atomique² de la halite ? Manifestement, on constate la répétition du groupement Na-Cl selon une loi à découvrir. Pour ce faire, remplaçons chaque Na-Cl par un point. On peut, par exemple, ne représenter que les atomes de sodium, avec cette convention qu'il faudra ajouter chaque fois un atome de chlore à 2.8 Å au-dessus du sodium pour reconstituer la structure. Les schémas suivants représentent donc des ensembles de points, chacun d'entre eux remplaçant un groupe Na-Cl. On appelle habituellement ces points des nœuds.

Dans les deux schémas, nous avons essayé de représenter graphiquement une loi de répartition des nœuds dans l'espace au moyen d'un réseau de droites. Pour construire un tel réseau³, il suffit de relier un nœud d'origine à trois autres nœuds non situés en ligne droite.



Maille simple, définie par un rhomboèdre dont les nœuds occupent les sommets.



Maille multiple, définie par un cube dont les nœuds occupent les sommets et le milieu des faces.

Représentation du schéma de répartition des nœuds dans l'espace.

Dans le premier exemple, nous avons relié le nœud o avec les nœuds les plus proches a_1 , b_1 et c_1 . On obtient trois directions. En prolongeant ces droites, on trouve d'autres nœuds indéfiniment répétés à égale distance les uns des autres. Ce réseau de droites détermine un parallélépipède, ici un rhomboèdre, dont les arêtes forment entre elles des angles de 60° et dont les longueurs sont égales à $5.6 \times \sqrt{2}/2$ Å.

On peut maintenant définir complètement la configuration atomique de la halite de la manière suivante :

² Représentation d'une structure atomique dans laquelle les atomes sont figurés par des points.

³ Nous appellerons dorénavant réseau l'ensemble des droites qui décrivent les alignements de nœuds.

La halite est constituée d'un groupement de deux atomes, chlore et sodium, répété périodiquement aux nœuds d'un réseau déterminé par un rhomboèdre, dont les arêtes forment entre elles des angles de 60° et dont les longueurs sont égales à $5.6 \times \sqrt{2}/2 \text{ \AA}$.

Motif, réseau et maille élémentaire

On nomme habituellement motif, le plus petit groupement d'atomes (ici Na et Cl) qui, indéfiniment répété dans les trois directions de l'espace, reconstitue tout le cristal.

On nomme réseau, l'ensemble des droites passant par les nœuds et qui constituent le schéma de répétition des motifs.

On nomme maille élémentaire, le parallélépipède élémentaire qui, par juxtaposition dans les trois directions de l'espace, reconstitue le réseau.

La maille élémentaire que nous venons de proposer pour la halite, le rhomboèdre, ne renferme qu'un seul nœud. En effet chaque nœud situé sur un sommet est partagé avec sept autres mailles élémentaires. Il ne compte donc que pour un huitième. Il s'agit d'une maille simple ou maille primitive. Elle présente l'inconvénient de ne pas refléter la symétrie cubique du cristal.

Sur le deuxième schéma, nous avons choisi une autre maille, plus grande que la précédente. Elle contient 4 nœuds (les nœuds des faces sont partagés avec la maille voisine). On dit que c'est une maille multiple, de multiplicité 4. On la définit comme une maille à faces centrées. Elle permet également de décrire la configuration atomique de la halite :

La halite est constituée d'un motif de deux atomes, le chlore et le sodium, répété périodiquement aux nœuds d'un réseau déterminé par un cube à faces centrées, dont les arêtes sont égales à 5.6 \AA .

Cette dernière définition est beaucoup plus commode que la précédente, car cette maille élémentaire multiple possède la symétrie du cristal, ce qui n'était pas le cas de la maille rhomboédrique. C'est le réseau cubique à faces centrées. Cela signifie qu'on trouve des nœuds aux sommets et au milieu des faces de la maille.

Le réseau

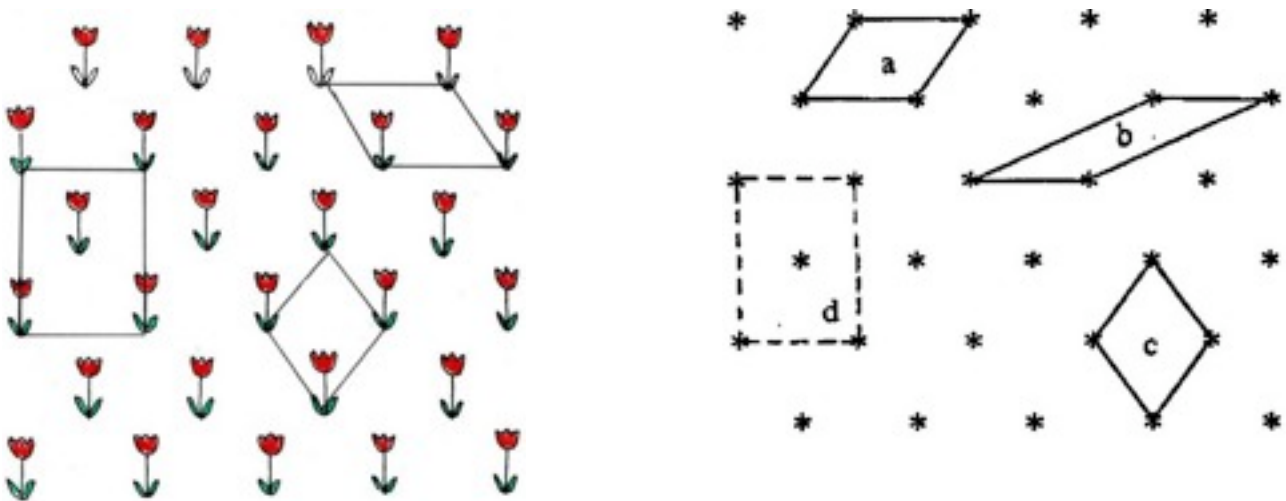
C'est un arrangement tridimensionnel de **nœuds** tel, qu'aucun de ces nœuds ne peut être distingué d'un autre : autour de chaque nœud existe exactement le même environnement.

Si on relie deux nœuds par une droite, on trouve, de part et d'autre de ces nœuds et à égales distances sur cette droite, d'autres nœuds identiques. Une telle droite est une **rangée réticulaire**. Un réseau renferme une infinité de rangées réticulaires.

De même, par trois nœuds non en ligne droite on peut faire passer un plan qu'on appelle un **plan réticulaire**. Il existe également une infinité de plans réticulaires.

Nous constatons qu'on peut donc toujours reconstituer un réseau par juxtapositions parallèles sans interstices d'un parallélépipède, la **maille élémentaire**.

Prenons l'exemple familier d'un papier peint : il est constitué d'un motif, ici une fleur, répété selon une certaine loi géométrique. On peut remplacer les motifs par des points. Ce sont les nœuds d'un réseau à deux dimensions. Il est donc possible de générer ce réseau par juxtaposition de diverses mailles élémentaires. Les mailles a, b et c sont des **mailles simples**, alors que la maille d est une **maille multiple**.



Le papier peint, un exemple de réseau bidimensionnel avec motif et maille.

Du point de vue de la symétrie, les mailles a et b ne possèdent qu'un seul point⁴ de rotation d'ordre 2. Les mailles c et d possèdent en plus deux lignes de réflexion. Par ailleurs, les côtés de la maille d font entre eux des angles

⁴ Dans un monde à deux dimensions, on ne parle pas d'axes ou de plans, mais de points de rotation et de lignes de réflexion.

droits. C'est probablement la maille multiple d qui sera la plus commode à l'emploi. Pour effectuer le choix de la maille élémentaire la plus convenable, on se base sur les règles suivantes :

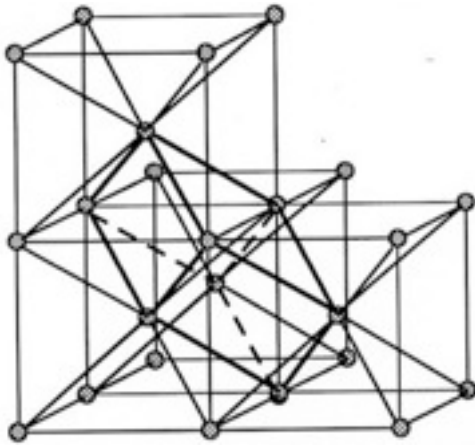
1. la forme de la maille élémentaire doit correspondre aux repères d'axes (axes de coordonnées) dicté par la symétrie du cristal,
2. l'origine de la maille élémentaire est prise en un point remarquable du réseau, un centre de symétrie, par exemple,
3. tout en tenant compte de la règle 1, on choisit la maille élémentaire de façon à rendre son volume minimal,
4. parmi les possibilités restantes, on choisit celle qui donne les paramètres (côtés de la maille) les plus petits.
5. En suivant ces règles, on constate que c'est la maille multiple à faces centrées qu'il faut choisir, dans l'exemple de la halite.
6. En se conformant à ces règles et en cherchant toutes les possibilités de mailles élémentaires, on en trouve quatorze. Ce sont les 14 modes de réseau de Bravais⁵. On trouve des mailles simples et des mailles multiples.

Il est remarquable de constater que toute maille possède la symétrie de l'holoédrie d'un des sept systèmes cristallins. Trois sont cubiques, une hexagonale, deux quadratiques, une rhomboédrique, quatre orthorhombiques, deux monocliniques et une triclinique.

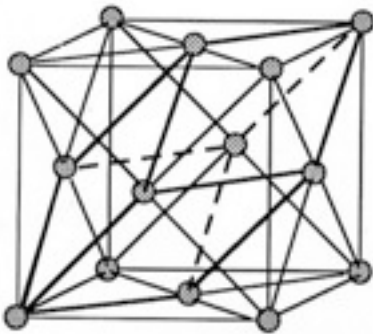
Il faut noter qu'on peut toujours remplacer, bien que ce soit très malcommode, une maille multiple par une maille simple. En lieu et place de la maille cubique centrée, on peut choisir une maille simple rhomboédrique dont les arêtes forment des angles de $109^{\circ} 28'$. La maille cubique à faces centrées peut être remplacée par un rhomboèdre dont les arêtes forment des angles de 60° . Remarquons en passant que le cube simple est un cas particulier du rhomboèdre !

Une maille hexagonale peut être remplacée par un prisme droit à base à base rhombique, l'angle obtus du rhombe (losange) étant de 120° .

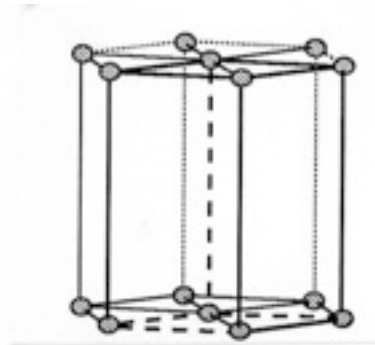
⁵ Auguste Bravais, 1811-1863, officier de marine et naturaliste français.



Maille cubique centrée et maille rhomboédrique simple.



Maille cubique à faces centrées et maille rhomboédrique simple.



Maille multiple hexagonale et maille simple rhombique.

Pour décrire complètement une maille, il faut indiquer si elle est simple ou multiple, préciser les longueurs de ses arêtes ainsi que les angles qu'elles font les unes par rapport aux autres. Le nombre de paramètres à déterminer varie entre un pour la maille cubique, et six pour la maille triclinique.

Caractéristiques des diverses mailles élémentaires

Symétrie	angles entre les arêtes	long. arêtes	Nombre de paramètres
cubique	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a = b = c$	1
quadratique	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a = b \neq c$	2
orthorhombique	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a \neq b \neq c$	3
hexagonale*	$\alpha = \beta = 90^\circ \quad \gamma = 120^\circ$	$a = b \neq c$	2
rhomboédrique*	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	$a = b \neq c$	2
monoclinique	$\alpha = \beta = 90^\circ \quad \gamma \neq 90^\circ$	$a \neq b \neq c$	4
triclinique	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	$a \neq b \neq c$	6

* dans le cas du choix d'une maille simple

Il est intéressant de comparer ces mailles avec les axes de coordonnées qui nous ont servi à indexer les faces des cristaux. Les directions des axes X, Y Z correspondent à celles des arêtes des mailles élémentaires, et les unités relatives choisies sur ces axes sont proportionnelles aux longueurs des arêtes de la maille.

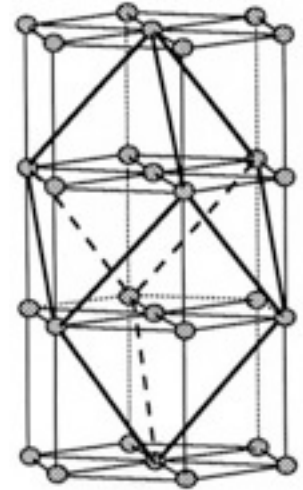
La seule exception est celle de la maille rhomboédrique dont les directions des arêtes ne sont pas utilisées comme axes de coordonnées. Pour des raisons de commodité on lui préfère une maille hexagonale. En effet, toute maille rhomboédrique simple possède une maille multiple hexagonale.

La recherche des axes de coordonnées et des unités relatives définies pour chacun d'eux nous renseigne presque complètement sur la maille élémentaire. Il ne manque que les dimensions absolues des arêtes dont nous ne connaissons jusqu'ici que les dimensions relatives.

Notons encore que la "molécule intégrante" d'Haüy était une maille élémentaire, mais il n'a pas su la discerner du motif !

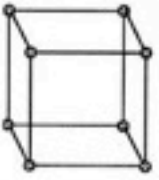

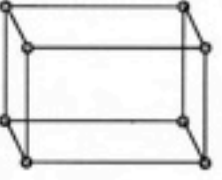
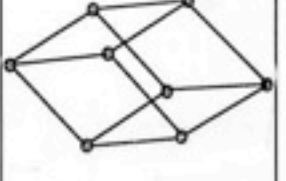
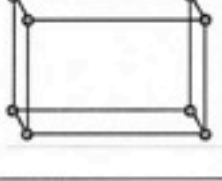
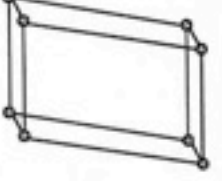

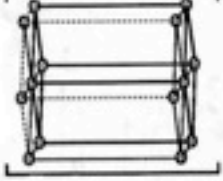
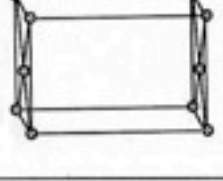
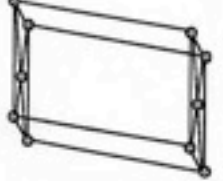
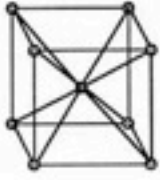
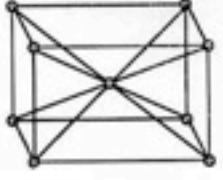
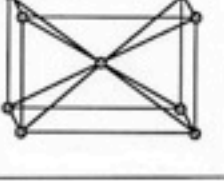

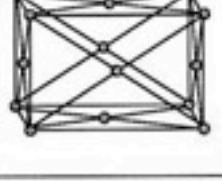
Il est possible maintenant de définir les plans réticulaires par les indices de Miller, puisque nous pouvons assimiler les axes de coordonnées à des rangées réticulaires parallèles aux arêtes de la maille élémentaire.

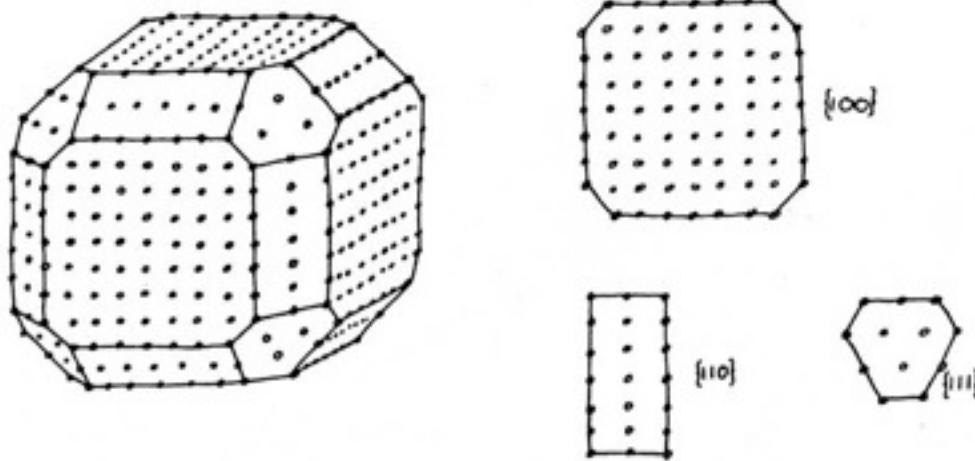
Le dessin de la page 59 montre un cristal cubique sur les faces duquel on a fait figurer les noeuds du réseau (cubique simple). Il s'agit d'une forme qui combine les faces du cube, de l'octaèdre et du dodécaèdre rhomboïdal.



Maille hexagonale multiple et maille rhomboédrique simple.

Les 14 mailles élémentaires de Bravais

maille	cubique	hexagonal	quadratique	rhomboédrique	orthorhombique	monoclinique	triclinique
P simple							
C à bases centrées							
I centrée							
F à faces centrées							



Cristal cubique et noeuds du réseau.

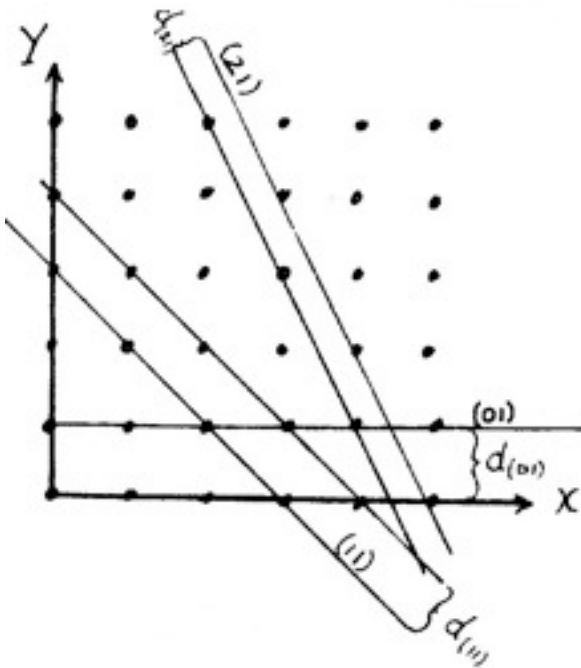
*On remarque que l'orientation des faces correspond à des orientations de plans réticulaires. On en tire une conclusion très importante : le réseau est responsable de l'orientation des faces d'un cristal. Comme les réseaux ont toujours la **symétrie holoédrique** du système auquel ils se rapportent, il devient évident que l'absence systématique d'une partie des faces dans les **mériédries**, est due à une autre raison.*

*Nous verrons plus loin que c'est dans la **symétrie du motif** qu'il faut rechercher la cause des **mériédries**.*

Fréquence d'apparition des faces

En examinant le dessin ci-dessus, on remarque que la densité réticulaire est maximum sur les faces $\{100\}$. Elle est plus faible sur les faces $\{110\}$ et elle diminue encore sur les faces $\{111\}$. La figure suivante montre un réseau à deux dimensions sur lequel on a tracé les rangées réticulaires (01) , (11) et (21) . La valeur de la distance réticulaire⁶ est donnée par la relation :

⁶ Distance qui sépare deux plans réticulaires parallèles successifs.



Appliquée au réseau cubique simple, cette formule devient :

$$d_{hk} = \frac{a_0}{\sqrt{h^2 + k^2}}$$

$$d_{hkl} = \frac{a_0}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

Si on étudie systématiquement la fréquence des faces des cristaux, on constate qu'elle est proportionnelle à la densité de noeuds du plan réticulaire correspondant, elle même proportionnelle à la distance réticulaire. Il est ainsi possible de prévoir la fréquence des faces. Pour un réseau réticulaire cubique simple, nous aurons :

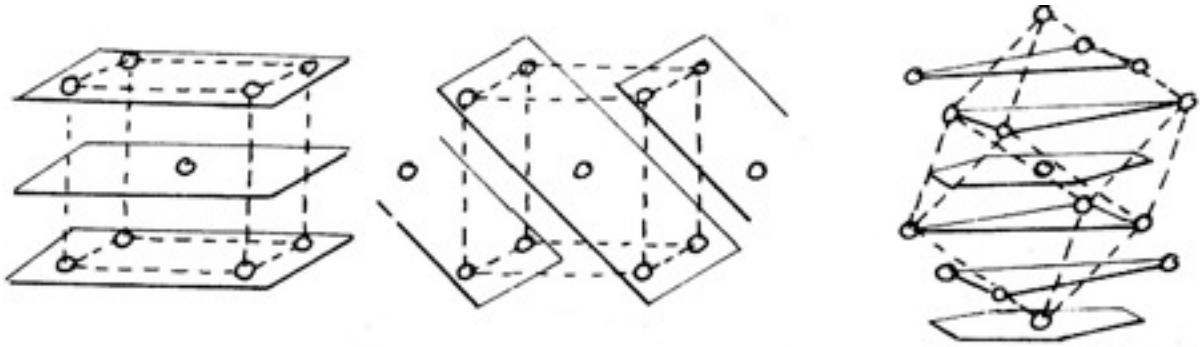
hkl	100	110	111	210	211	221	310	311	320	321	410 322	411
$h^2 + k^2 + l^2$	1	2	3	5	6	9	10	11	13	14	17	18

La forme la plus fréquente est le cube, puis viennent le dodécaèdre rhomboïdal, l'octaèdre, le cube pyramidé, le trapézoèdre etc...

Pour les mailles multiples il faut tenir compte des noeuds supplémentaires. Pour le réseau cubique centré, on voit apparaître des plans réticulaires intermédiaires entre les anciens plans {001} qui deviennent alors des plans {002}. Par contre les distances réticulaires des plans {011} restent inchangées. On constate encore que les plans {111} deviennent des plans {222}. On en tire la conclusion que tous les plans dont la somme des indices $h + k + l$ est impaire, sont deux fois plus rapprochés que dans la maille simple. Pour tenir compte de cette modification, il suffit de doubler les indices des plans réticulaires concernés. La fréquence de face devient alors :

hkl	200	110	222	420	211	442	310	622	640	321	411	332	431
$h^2 + k^2 + l^2$	4	2	12	20	6	36	10	44	52	14	18	22	26

La forme la plus fréquente est donc le dodécaèdre rhomboïdal, puis viennent le cube, le trapézoèdre, le cube pyramide, l'octaèdre etc...



les plans $\{001\}$ deviennent des plans $\{002\}$

les plans $\{011\}$ demeurent inchangés

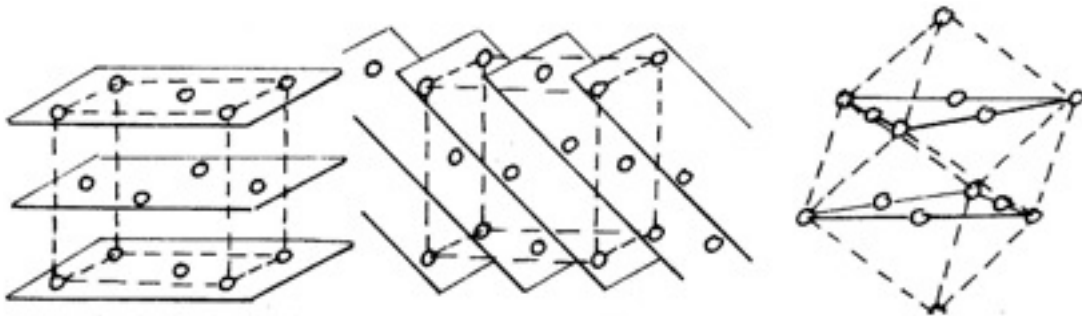
les plans $\{111\}$ deviennent des plans $\{222\}$

Plans réticulaires supplémentaires générés par le réseau cubique centré

Quant au réseau cubique à faces centrées, par un raisonnement semblable, on peut démontrer que les plans réticulaires qui possèdent des indices mixtes, pairs et impairs, sont deux fois plus rapprochés qu'ils ne l'étaient dans le réseau cubique simple. On double donc leurs indices :

hkl	200	220	111	420	422	442	620	311	640	642	331	511	531
$h^2 + k^2 + l^2$	4	8	3	20	24	36	40	11	52	56	19	27	35

La forme la plus fréquente est alors l'octaèdre, suivie du cube, du dodécaèdre rhomboïdal, du trapézoèdre etc... Les figures suivantes montrent le comportement des plans $\{001\}$, $\{011\}$ et $\{111\}$.



les plans $\{001\}$ deviennent des plans

les plans $\{011\}$ deviennent des plans

les plans $\{111\}$ demeurent inchangés.

Plans réticulaires supplémentaires générés par le réseau cubique à faces centrées.

Pour une espèce cristalline, l'étude systématique de la fréquence des formes sous lesquelles elle se présente habituellement peut permettre d'identifier son réseau. Le diamant et la fluorine qui montrent une prédominance des formes octaédriques, ont un réseau cubique à faces centrées. Le grenat et la leucite qui cristallisent fréquemment en dodécaèdres, montrent par là que

leur réseau est cubique centré. Cette étude peut être étendue aux autres systèmes. Toutefois les formules se compliquent rapidement à cause de l'augmentation du nombre des paramètres des mailles.

Le motif

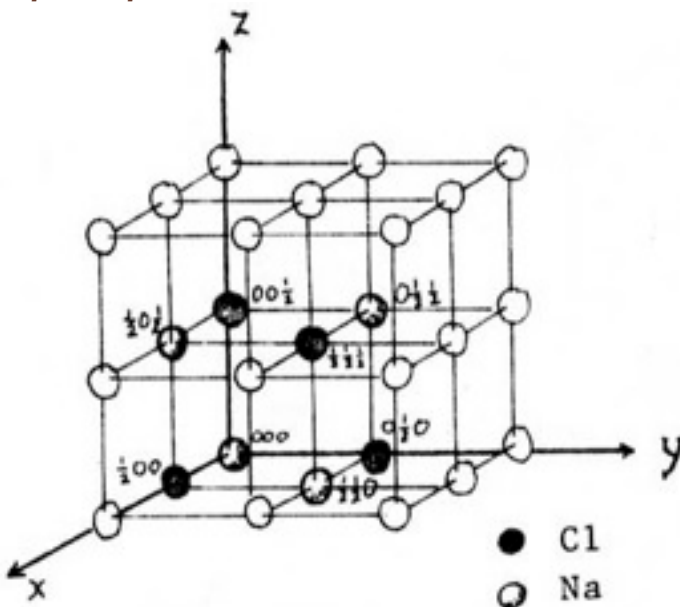
Nous avons considéré un cristal comme étant généré par une répartition tripériodique de motifs atomiques. On peut définir le motif comme étant le plus petit groupement d'atomes qui, répété indéfiniment dans les trois directions de l'espace, reconstitue tout le cristal. L'ensemble des motifs réalise donc le remplissage hétérogène de l'espace tripériodique de la maille élémentaire.

Nous admettons que les atomes sont sphériques. Nous ne tenons pas compte, pour l'instant de leur taille et nous les représentons par des points qui figurent leur position. Nous pouvons décrire les positions des atomes à l'intérieur de la maille élémentaire en nous servant des trois côtés de cette maille comme axes de référence, et en prenant comme unités, des fractions de longueurs des arêtes. Ainsi les positions des atomes de chlore et de sodium à l'intérieur de la maille élémentaire s'écrivent :

$$\begin{array}{l} \text{Na : } 0 \ 0 \ 0 \quad \frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ 0 \quad \frac{1}{2} \ 0 \ \frac{1}{2} \quad 0 \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \\ \text{Cl : } \frac{1}{2} \ 0 \ 0 \quad 0 \ \frac{1}{2} \ 0 \quad 0 \ \frac{1}{2} \ 0 \quad \frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \end{array}$$

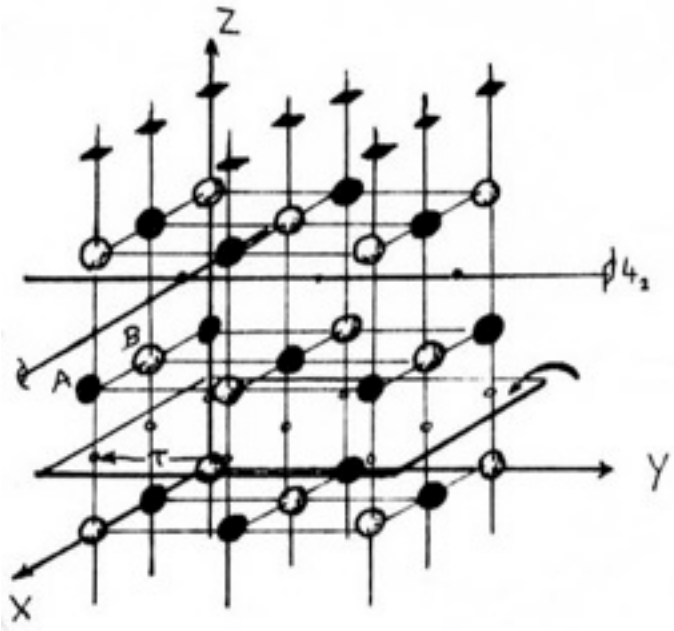
Les autres atomes ne font plus partie de cette maille, mais de la suivante. Le motif, constitué ici d'un atome de sodium et d'un atome de chlore, est répété quatre fois à l'intérieur de la maille, car elle renferme quatre nœuds

(multiplicité 4). On peut maintenant décrire complètement la structure en disant que la halite possède une maille cubique à faces centrées de 5.6 Å d'arête, à l'intérieur de laquelle les atomes se répartissent suivant les coordonnées mentionnées ci-dessus.



Structure de la halite.

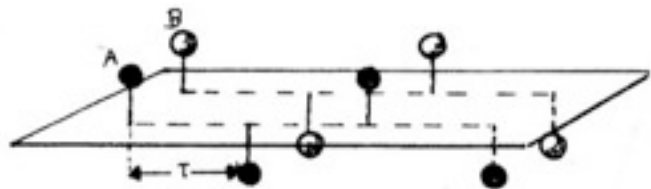
Les atomes sont répétés périodiquement à travers tout le cristal, obéissant à des lois de symétrie identiques à celles que nous connaissons déjà. Il y a toutefois une différence fondamentale entre les lois de symétrie des polyèdres et celles des motifs. En examinant la figure ci-contre, nous voyons des axes A_4 verticaux parallèles à Z et passant par tous les atomes. La particularité de ces axes est de ne plus passer par un point commun. Ce n'est donc plus une symétrie ponctuelle. Pour reproduire tous les atomes, il faut ajouter un nouvel opérateur de symétrie : la translation. Cette nouvelle composante a pour conséquence de faire apparaître deux opérateurs composés nouveaux : le plan avec glissement qui associe un plan et une translation, et l'axe hélicoïdal qui associe une rotation avec un glissement le long de cet axe.



Translation τ , axe hélicoïdal, plan avec glissement, dans la structure de la

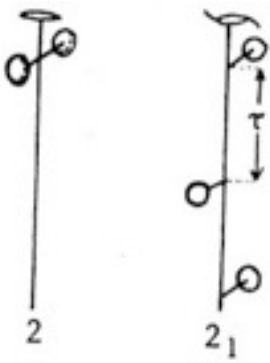
Plan avec glissement

Il s'agit d'une opération qui associe la réflexion suivie d'une translation t . Le plan est un des plans principaux du réseau et la direction de translation est parallèle à une rangée du réseau contenue dans ce plan. La translation t est obligatoirement égale à une demi-translation du réseau : deux opérations successives effectuées par un plan avec glissement, équivalent à une translation du réseau. La fig. 6.18 montre comment s'effectue la répétition par un plan avec glissement. Un tel plan existe dans la structure de la halite et la figure ci-contre ne fait que reprendre une partie de la figure précédente.



Plan avec glissement

Axes hélicoïdaux



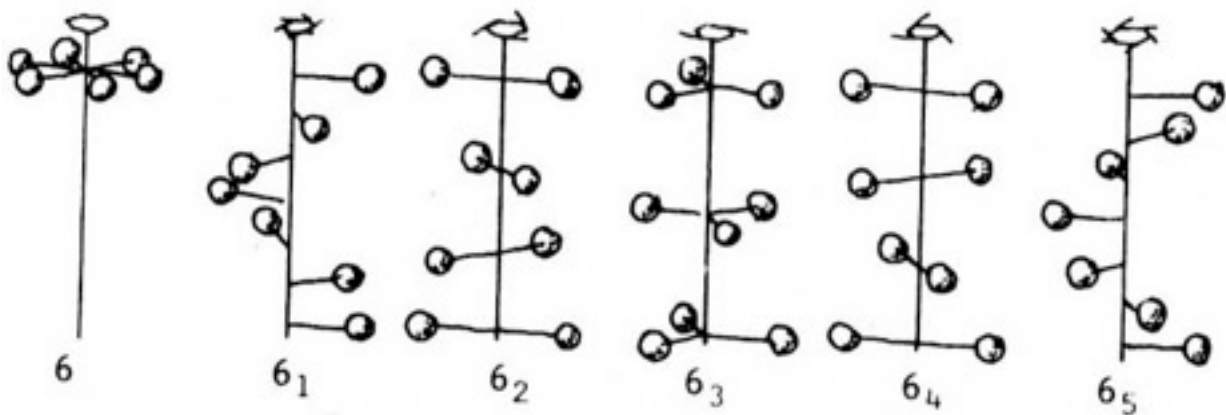
Il s'agit d'une opération qui associe une rotation avec une translation le long de l'axe. L'axe est une des directions principales du réseau et la translation t est obligatoirement une fraction entière de la période de la rangée.

Il n'existe qu'un **seul axe hélicoïdal binaire**. La translation est égale à une demi-période de la rangée correspondante. Deux opérations effectuées successivement équivalent à une translation du réseau.

On trouve ensuite deux axes hélicoïdaux ternaires. La rotation est d'un tiers de tour et la translation est égale à $1/3$ de période (31) ou à $2/3$ de période (32). Le premier est dextrogyre (la spirale tourne à droite en descendant ou tourne dans le sens positif, en montant), le second est lévogyre. Remarquons que $2/3$ de période dans le sens positif correspondent à $1/3$ de période dans le sens négatif. Ces deux axes sont énantiomorphes.

Par un même raisonnement, on trouve **trois axes hélicoïdaux d'ordre 4**, caractérisés par une rotation d'un quart de tour, associés à une translation de $1/4$, $2/4$ ou $3/4$ de la période du réseau dans la direction de l'axe. Leur symbole est 4_1 , 4_2 et 4_3 . Le premier est dextrogyre, le dernier lévogyre. L'axe 4_2 n'a pas de sens de rotation particulier.

Nous trouvons encore **cinq axes hélicoïdaux d'ordre 6** : 6_1 , 6_2 , 6_3 , 6_4 et 6_5 . Les deux premiers sont dextrogyres, les deux derniers lévogyres et 6_3 n'a pas de sens particulier. La translation vaut $1/6$ de la période du réseau dans la direction de l'axe.



Les divers axes hélicoïdaux

Les groupes de symétrie

Ces nouveaux opérateurs de symétrie qui admettent la translation, se combinent avec ceux que nous connaissons déjà dans le cadre de la symétrie ponctuelle. Leur présence implique des théorèmes nouveaux. A cause du plus grand nombre d'opérateurs et par le fait que la symétrie n'est plus ponctuelle, les combinaisons sont beaucoup plus nombreuses et les raisonnements plus compliqués. A titre d'exemple citons quelques uns de ces théorèmes :

- Les éléments de symétrie du motif doivent se répéter par des translations du réseau périodique, sans se multiplier à l'infini, dans le volume fini de chaque maille.
- Axes binaires et centres non concourants engendrent des plans avec glissement perpendiculaires aux axes et passant par les centres.
- Les centres de symétrie se répètent périodiquement dans les trois dimensions avec des périodes égales à la moitié des périodes principales du réseau.
- Deux axes binaires non concourants, séparés par une distance d et faisant entre eux un angle α , engendrent un axe hélicoïdal passant par la perpendiculaire commune aux deux axes, caractérisé par une rotation de 2α , suivie d'une translation égale à $2d$.

On se rend compte de la complexité des raisonnements qu'il faut tenir pour connaître toutes les combinaisons possibles. On en dénombre 230. Ce sont les **230 groupes de symétrie** qu'on appelle aussi **groupes d'espace**.

Ils ont été étudiés par le cristallographe russe E. Fédorov et le mathématicien allemand A. Schoenflies.

Ces 230 groupes se répartissent dans les divers systèmes de la manière suivante :

système triclinique :	2	système hexagonal :	28
système monoclinique :	13	système quadratique :	68
système orthorhombique :	59	système cubique :	36
système rhomboédrique :	25		

Il sont décrits en détails dans les *Tables internationales de cristallographie*. On les représente graphiquement par un plan de la maille élémentaire sur lequel figurent, d'une manière symbolique, tous les éléments de symétrie du groupe.

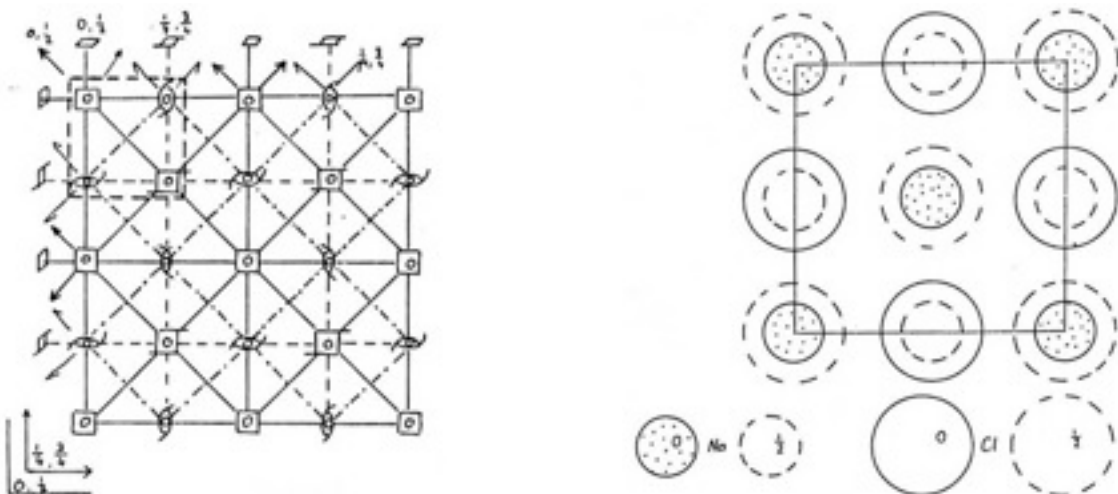
$Fm\bar{3}m$	<i>Symbole Hermann-Mauguin</i>	No. 225	$F4/m\bar{3}2/m$	<i>Symbole cristallographique de la classe (ou holoédrie)</i>	$m\bar{3}m$ Cubic	<i>symbole abrégé</i>																																																																								
O_h^5	<i>Symbole de Schoenflies</i>			Origin at centre ($m\bar{3}m$)																																																																										
Number of positions, Wyckoff notation, and point symmetry		Co-ordinates of equivalent positions			Conditions limiting possible reflections																																																																									
<i>multiplicité d'un atome</i>		$(0,0,0; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)+$			General:																																																																									
<i>position du premier atome</i>					$hkl: h+k, k+l, (l-h) \quad 2n$																																																																									
<i>position générale</i>		<table border="0"> <tr> <td>192</td> <td>l</td> <td>l</td> <td>x, y, z</td> <td>z, x, y</td> <td>y, z, x</td> <td>x, z, y</td> <td>y, x, z</td> <td>z, y, x</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td></td> <td>x, \bar{y}, \bar{z}</td> <td>z, \bar{x}, \bar{y}</td> <td>y, \bar{z}, \bar{x}</td> <td>x, \bar{z}, \bar{y}</td> <td>y, \bar{x}, \bar{z}</td> <td>z, \bar{y}, \bar{x}</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td></td> <td>\bar{x}, y, \bar{z}</td> <td>\bar{z}, x, \bar{y}</td> <td>\bar{y}, z, \bar{x}</td> <td>\bar{x}, z, \bar{y}</td> <td>\bar{y}, x, \bar{z}</td> <td>\bar{z}, y, \bar{x}</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td></td> <td>\bar{x}, \bar{y}, z</td> <td>\bar{z}, \bar{x}, y</td> <td>\bar{y}, \bar{z}, x</td> <td>\bar{x}, \bar{z}, y</td> <td>\bar{y}, \bar{x}, z</td> <td>\bar{z}, \bar{y}, x</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td></td> <td>$\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$</td> <td>$\bar{z}, \bar{x}, \bar{y}$</td> <td>$\bar{y}, \bar{z}, \bar{x}$</td> <td>$\bar{x}, \bar{z}, \bar{y}$</td> <td>$\bar{y}, \bar{x}, \bar{z}$</td> <td>$\bar{z}, \bar{y}, \bar{x}$</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td></td> <td>\bar{x}, y, z</td> <td>\bar{z}, x, y</td> <td>\bar{y}, z, x</td> <td>\bar{x}, z, y</td> <td>\bar{y}, x, z</td> <td>\bar{z}, y, x</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td></td> <td>x, \bar{y}, z</td> <td>z, \bar{x}, y</td> <td>y, \bar{z}, x</td> <td>x, \bar{z}, y</td> <td>y, \bar{x}, z</td> <td>z, \bar{y}, x</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td></td> <td>x, y, \bar{z}</td> <td>z, x, \bar{y}</td> <td>y, z, \bar{x}</td> <td>x, z, \bar{y}</td> <td>y, x, \bar{z}</td> <td>z, y, \bar{x}</td> </tr> </table>			192	l	l	x, y, z	z, x, y	y, z, x	x, z, y	y, x, z	z, y, x				x, \bar{y}, \bar{z}	z, \bar{x}, \bar{y}	y, \bar{z}, \bar{x}	x, \bar{z}, \bar{y}	y, \bar{x}, \bar{z}	z, \bar{y}, \bar{x}				\bar{x}, y, \bar{z}	\bar{z}, x, \bar{y}	\bar{y}, z, \bar{x}	\bar{x}, z, \bar{y}	\bar{y}, x, \bar{z}	\bar{z}, y, \bar{x}				\bar{x}, \bar{y}, z	\bar{z}, \bar{x}, y	\bar{y}, \bar{z}, x	\bar{x}, \bar{z}, y	\bar{y}, \bar{x}, z	\bar{z}, \bar{y}, x				$\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$	$\bar{z}, \bar{x}, \bar{y}$	$\bar{y}, \bar{z}, \bar{x}$	$\bar{x}, \bar{z}, \bar{y}$	$\bar{y}, \bar{x}, \bar{z}$	$\bar{z}, \bar{y}, \bar{x}$				\bar{x}, y, z	\bar{z}, x, y	\bar{y}, z, x	\bar{x}, z, y	\bar{y}, x, z	\bar{z}, y, x				x, \bar{y}, z	z, \bar{x}, y	y, \bar{z}, x	x, \bar{z}, y	y, \bar{x}, z	z, \bar{y}, x				x, y, \bar{z}	z, x, \bar{y}	y, z, \bar{x}	x, z, \bar{y}	y, x, \bar{z}	z, y, \bar{x}	$hhl: (l-h-2n); C$	
192	l	l	x, y, z	z, x, y	y, z, x	x, z, y	y, x, z	z, y, x																																																																						
			x, \bar{y}, \bar{z}	z, \bar{x}, \bar{y}	y, \bar{z}, \bar{x}	x, \bar{z}, \bar{y}	y, \bar{x}, \bar{z}	z, \bar{y}, \bar{x}																																																																						
			\bar{x}, y, \bar{z}	\bar{z}, x, \bar{y}	\bar{y}, z, \bar{x}	\bar{x}, z, \bar{y}	\bar{y}, x, \bar{z}	\bar{z}, y, \bar{x}																																																																						
			\bar{x}, \bar{y}, z	\bar{z}, \bar{x}, y	\bar{y}, \bar{z}, x	\bar{x}, \bar{z}, y	\bar{y}, \bar{x}, z	\bar{z}, \bar{y}, x																																																																						
			$\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$	$\bar{z}, \bar{x}, \bar{y}$	$\bar{y}, \bar{z}, \bar{x}$	$\bar{x}, \bar{z}, \bar{y}$	$\bar{y}, \bar{x}, \bar{z}$	$\bar{z}, \bar{y}, \bar{x}$																																																																						
			\bar{x}, y, z	\bar{z}, x, y	\bar{y}, z, x	\bar{x}, z, y	\bar{y}, x, z	\bar{z}, y, x																																																																						
			x, \bar{y}, z	z, \bar{x}, y	y, \bar{z}, x	x, \bar{z}, y	y, \bar{x}, z	z, \bar{y}, x																																																																						
			x, y, \bar{z}	z, x, \bar{y}	y, z, \bar{x}	x, z, \bar{y}	y, x, \bar{z}	z, y, \bar{x}																																																																						
<i>position par rapport aux opérateurs de symétrie</i>					$OkI: (k, l-2n); C$																																																																									
<i>dans un plan P₁</i>		<table border="0"> <tr> <td>96</td> <td>k</td> <td>m</td> <td>x, x, z</td> <td>z, x, x</td> <td>x, z, x</td> <td>$\bar{x}, \bar{x}, \bar{z}$</td> <td>$\bar{z}, \bar{x}, \bar{x}$</td> <td>$\bar{x}, \bar{z}, \bar{x}$</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td></td> <td>x, \bar{x}, \bar{z}</td> <td>z, \bar{x}, \bar{x}</td> <td>x, \bar{z}, \bar{x}</td> <td>\bar{x}, x, z</td> <td>\bar{z}, x, x</td> <td>\bar{x}, z, x</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td></td> <td>\bar{x}, x, z</td> <td>\bar{z}, x, \bar{x}</td> <td>\bar{x}, z, \bar{x}</td> <td>x, \bar{x}, z</td> <td>z, \bar{x}, x</td> <td>\bar{x}, \bar{z}, x</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td></td> <td>\bar{x}, \bar{x}, z</td> <td>\bar{z}, \bar{x}, x</td> <td>\bar{x}, \bar{z}, x</td> <td>x, x, \bar{z}</td> <td>z, x, \bar{x}</td> <td>\bar{x}, z, \bar{x}</td> </tr> </table>			96	k	m	x, x, z	z, x, x	x, z, x	$\bar{x}, \bar{x}, \bar{z}$	$\bar{z}, \bar{x}, \bar{x}$	$\bar{x}, \bar{z}, \bar{x}$				x, \bar{x}, \bar{z}	z, \bar{x}, \bar{x}	x, \bar{z}, \bar{x}	\bar{x}, x, z	\bar{z}, x, x	\bar{x}, z, x				\bar{x}, x, z	\bar{z}, x, \bar{x}	\bar{x}, z, \bar{x}	x, \bar{x}, z	z, \bar{x}, x	\bar{x}, \bar{z}, x				\bar{x}, \bar{x}, z	\bar{z}, \bar{x}, x	\bar{x}, \bar{z}, x	x, x, \bar{z}	z, x, \bar{x}	\bar{x}, z, \bar{x}	Special: as above, plus																																					
96	k	m	x, x, z	z, x, x	x, z, x	$\bar{x}, \bar{x}, \bar{z}$	$\bar{z}, \bar{x}, \bar{x}$	$\bar{x}, \bar{z}, \bar{x}$																																																																						
			x, \bar{x}, \bar{z}	z, \bar{x}, \bar{x}	x, \bar{z}, \bar{x}	\bar{x}, x, z	\bar{z}, x, x	\bar{x}, z, x																																																																						
			\bar{x}, x, z	\bar{z}, x, \bar{x}	\bar{x}, z, \bar{x}	x, \bar{x}, z	z, \bar{x}, x	\bar{x}, \bar{z}, x																																																																						
			\bar{x}, \bar{x}, z	\bar{z}, \bar{x}, x	\bar{x}, \bar{z}, x	x, x, \bar{z}	z, x, \bar{x}	\bar{x}, z, \bar{x}																																																																						
<i>dans un plan P₂</i>		<table border="0"> <tr> <td>96</td> <td>j</td> <td>ym</td> <td>$0, y, z$</td> <td>$z, 0, y$</td> <td>$y, z, 0$</td> <td>$0, z, y$</td> <td>$y, 0, z$</td> <td>$z, y, 0$</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td></td> <td>$0, \bar{y}, \bar{z}$</td> <td>$\bar{z}, 0, \bar{y}$</td> <td>$\bar{y}, \bar{z}, 0$</td> <td>$0, \bar{z}, \bar{y}$</td> <td>$\bar{y}, 0, \bar{z}$</td> <td>$\bar{z}, \bar{y}, 0$</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td></td> <td>$0, y, \bar{z}$</td> <td>$\bar{z}, 0, \bar{y}$</td> <td>$y, z, 0$</td> <td>$0, z, y$</td> <td>$y, 0, \bar{z}$</td> <td>$\bar{z}, y, 0$</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td></td> <td>$0, \bar{y}, z$</td> <td>$z, 0, \bar{y}$</td> <td>$\bar{y}, \bar{z}, 0$</td> <td>$0, \bar{z}, \bar{y}$</td> <td>$\bar{y}, 0, z$</td> <td>$z, \bar{y}, 0$</td> </tr> </table>			96	j	ym	$0, y, z$	$z, 0, y$	$y, z, 0$	$0, z, y$	$y, 0, z$	$z, y, 0$				$0, \bar{y}, \bar{z}$	$\bar{z}, 0, \bar{y}$	$\bar{y}, \bar{z}, 0$	$0, \bar{z}, \bar{y}$	$\bar{y}, 0, \bar{z}$	$\bar{z}, \bar{y}, 0$				$0, y, \bar{z}$	$\bar{z}, 0, \bar{y}$	$y, z, 0$	$0, z, y$	$y, 0, \bar{z}$	$\bar{z}, y, 0$				$0, \bar{y}, z$	$z, 0, \bar{y}$	$\bar{y}, \bar{z}, 0$	$0, \bar{z}, \bar{y}$	$\bar{y}, 0, z$	$z, \bar{y}, 0$	no extra conditions																																					
96	j	ym	$0, y, z$	$z, 0, y$	$y, z, 0$	$0, z, y$	$y, 0, z$	$z, y, 0$																																																																						
			$0, \bar{y}, \bar{z}$	$\bar{z}, 0, \bar{y}$	$\bar{y}, \bar{z}, 0$	$0, \bar{z}, \bar{y}$	$\bar{y}, 0, \bar{z}$	$\bar{z}, \bar{y}, 0$																																																																						
			$0, y, \bar{z}$	$\bar{z}, 0, \bar{y}$	$y, z, 0$	$0, z, y$	$y, 0, \bar{z}$	$\bar{z}, y, 0$																																																																						
			$0, \bar{y}, z$	$z, 0, \bar{y}$	$\bar{y}, \bar{z}, 0$	$0, \bar{z}, \bar{y}$	$\bar{y}, 0, z$	$z, \bar{y}, 0$																																																																						
<i>intersection P₁ et P₂</i>		<table border="0"> <tr> <td>48</td> <td>i</td> <td>mym</td> <td>$\frac{1}{2}, x, x$</td> <td>$x, \frac{1}{2}, x$</td> <td>$x, x, \frac{1}{2}$</td> <td>$\frac{1}{2}, x, \bar{x}$</td> <td>$\bar{x}, \frac{1}{2}, x$</td> <td>$x, \bar{x}, \frac{1}{2}$</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td></td> <td>$\frac{1}{2}, \bar{x}, \bar{x}$</td> <td>$\bar{x}, \frac{1}{2}, \bar{x}$</td> <td>$\bar{x}, \bar{x}, \frac{1}{2}$</td> <td>$\frac{1}{2}, \bar{x}, x$</td> <td>$x, \frac{1}{2}, \bar{x}$</td> <td>$\bar{x}, x, \frac{1}{2}$</td> </tr> </table>			48	i	mym	$\frac{1}{2}, x, x$	$x, \frac{1}{2}, x$	$x, x, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, x, \bar{x}$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, x$	$x, \bar{x}, \frac{1}{2}$				$\frac{1}{2}, \bar{x}, \bar{x}$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, \bar{x}$	$\bar{x}, \bar{x}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \bar{x}, x$	$x, \frac{1}{2}, \bar{x}$	$\bar{x}, x, \frac{1}{2}$	no extra conditions																																																							
48	i	mym	$\frac{1}{2}, x, x$	$x, \frac{1}{2}, x$	$x, x, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, x, \bar{x}$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, x$	$x, \bar{x}, \frac{1}{2}$																																																																						
			$\frac{1}{2}, \bar{x}, \bar{x}$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, \bar{x}$	$\bar{x}, \bar{x}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \bar{x}, x$	$x, \frac{1}{2}, \bar{x}$	$\bar{x}, x, \frac{1}{2}$																																																																						
<i>sur axe tétraédral 2₃</i>		<table border="0"> <tr> <td>48</td> <td>h</td> <td>mm</td> <td>$0, x, x$</td> <td>$x, 0, x$</td> <td>$x, x, 0$</td> <td>$0, x, \bar{x}$</td> <td>$\bar{x}, 0, x$</td> <td>$x, \bar{x}, 0$</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td></td> <td>$0, \bar{x}, \bar{x}$</td> <td>$\bar{x}, 0, \bar{x}$</td> <td>$\bar{x}, \bar{x}, 0$</td> <td>$0, \bar{x}, x$</td> <td>$x, 0, \bar{x}$</td> <td>$\bar{x}, x, 0$</td> </tr> </table>			48	h	mm	$0, x, x$	$x, 0, x$	$x, x, 0$	$0, x, \bar{x}$	$\bar{x}, 0, x$	$x, \bar{x}, 0$				$0, \bar{x}, \bar{x}$	$\bar{x}, 0, \bar{x}$	$\bar{x}, \bar{x}, 0$	$0, \bar{x}, x$	$x, 0, \bar{x}$	$\bar{x}, x, 0$	$hkl: h, (k, l) - 2n$																																																							
48	h	mm	$0, x, x$	$x, 0, x$	$x, x, 0$	$0, x, \bar{x}$	$\bar{x}, 0, x$	$x, \bar{x}, 0$																																																																						
			$0, \bar{x}, \bar{x}$	$\bar{x}, 0, \bar{x}$	$\bar{x}, \bar{x}, 0$	$0, \bar{x}, x$	$x, 0, \bar{x}$	$\bar{x}, x, 0$																																																																						
<i>sur axe A₂</i>		<table border="0"> <tr> <td>48</td> <td>g</td> <td>mm</td> <td>$x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$</td> <td>$\frac{1}{2}, x, \frac{1}{2}$</td> <td>$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, x$</td> <td>$x, \frac{1}{2}, \bar{z}$</td> <td>$\bar{z}, x, \frac{1}{2}$</td> <td>$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{x}$</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td></td> <td>$\bar{x}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$</td> <td>$\frac{1}{2}, \bar{x}, \frac{1}{2}$</td> <td>$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{x}$</td> <td>$\bar{x}, \frac{1}{2}, z$</td> <td>$z, \bar{x}, \frac{1}{2}$</td> <td>$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, x$</td> </tr> </table>			48	g	mm	$x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, x, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, x$	$x, \frac{1}{2}, \bar{z}$	$\bar{z}, x, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{x}$				$\bar{x}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \bar{x}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{x}$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, z$	$z, \bar{x}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, x$	no extra conditions																																																							
48	g	mm	$x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, x, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, x$	$x, \frac{1}{2}, \bar{z}$	$\bar{z}, x, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{x}$																																																																						
			$\bar{x}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \bar{x}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{x}$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, z$	$z, \bar{x}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, x$																																																																						
<i>sur A₄</i>		<table border="0"> <tr> <td>32</td> <td></td> <td>$3m$</td> <td>x, x, x</td> <td>x, \bar{x}, \bar{x}</td> <td>\bar{x}, x, \bar{x}</td> <td>\bar{x}, \bar{x}, x</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td></td> <td>$\bar{x}, \bar{x}, \bar{x}$</td> <td>$\bar{x}, x, x$</td> <td>$x, \bar{x}, x$</td> <td>$x, x, \bar{x}$</td> <td></td> <td></td> </tr> </table>			32		$3m$	x, x, x	x, \bar{x}, \bar{x}	\bar{x}, x, \bar{x}	\bar{x}, \bar{x}, x						$\bar{x}, \bar{x}, \bar{x}$	\bar{x}, x, x	x, \bar{x}, x	x, x, \bar{x}			no extra conditions																																																							
32		$3m$	x, x, x	x, \bar{x}, \bar{x}	\bar{x}, x, \bar{x}	\bar{x}, \bar{x}, x																																																																								
			$\bar{x}, \bar{x}, \bar{x}$	\bar{x}, x, x	x, \bar{x}, x	x, x, \bar{x}																																																																								
<i>sur A₃</i>		<table border="0"> <tr> <td>24</td> <td>c</td> <td>$4mm$</td> <td>$x, 0, 0$</td> <td>$0, x, 0$</td> <td>$0, 0, x$</td> <td>$\bar{x}, 0, 0$</td> <td>$0, \bar{x}, 0$</td> <td>$0, 0, \bar{x}$</td> </tr> </table>			24	c	$4mm$	$x, 0, 0$	$0, x, 0$	$0, 0, x$	$\bar{x}, 0, 0$	$0, \bar{x}, 0$	$0, 0, \bar{x}$	no extra conditions																																																																
24	c	$4mm$	$x, 0, 0$	$0, x, 0$	$0, 0, x$	$\bar{x}, 0, 0$	$0, \bar{x}, 0$	$0, 0, \bar{x}$																																																																						
<i>intersection P₁ et P₂</i>		<table border="0"> <tr> <td>24</td> <td>d</td> <td>mm</td> <td>$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$</td> <td>$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$</td> <td>$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$</td> <td>$0, \frac{1}{2}, \bar{z}$</td> <td>$\bar{z}, 0, \frac{1}{2}$</td> <td>$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$</td> </tr> </table>			24	d	mm	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$	$0, \frac{1}{2}, \bar{z}$	$\bar{z}, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$	$hkl: h, (k, l) - 2n$																																																																
24	d	mm	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$	$0, \frac{1}{2}, \bar{z}$	$\bar{z}, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$																																																																						
<i>intersection P₁ et P₂</i>		<table border="0"> <tr> <td>8</td> <td>c</td> <td>$3m$</td> <td>$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$</td> <td>$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{z}$</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> </table>			8	c	$3m$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{z}$					no extra conditions																																																																
8	c	$3m$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{z}$																																																																										
<i>position Cl</i>		<table border="0"> <tr> <td>4</td> <td>b</td> <td>$m\bar{3}m$</td> <td>$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> </table>			4	b	$m\bar{3}m$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$						no extra conditions																																																																
4	b	$m\bar{3}m$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$																																																																											
<i>position Na</i>		<table border="0"> <tr> <td>4</td> <td>a</td> <td>$m\bar{3}m$</td> <td>$0, 0, 0$</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> </table>			4	a	$m\bar{3}m$	$0, 0, 0$						no extra conditions																																																																
4	a	$m\bar{3}m$	$0, 0, 0$																																																																											

Page des Tables Internationale décrivant le groupe Fm3m auquel appartient la halite

Ces groupes sont désignés par les symboles Hermann-Mauguin et ceux de Schoenflies. Les principes de ces notations sont décrits aussi dans les Tables internationales de cristallographie. Les conventions graphiques qui symbolisent les opérateurs de symétrie y figurent également. La figure suivante montre le plan général des opérateurs de symétrie du groupe spatial auquel appartient la halite. On n'a représenté que les opérateurs normaux et parallèles au plan (001) du dessin. A cause de la symétrie cubique une représentation sur les plans (010) ou (100) serait parfaitement identique. Il s'agit du groupe d'espace N° 225. La symétrie est très élevée et le grand nombre des opérateurs ne permet pas de les faire tous figurer sur le plan. Aussi, les opérateurs obliques, A_3 , A_2 , P_2 et certains axes binaires hélicoïdaux ont été placés sur des projections stéréographiques. On voit aussi les positions des atomes Na et Cl à l'intérieur de la maille avec leur élévation respective.

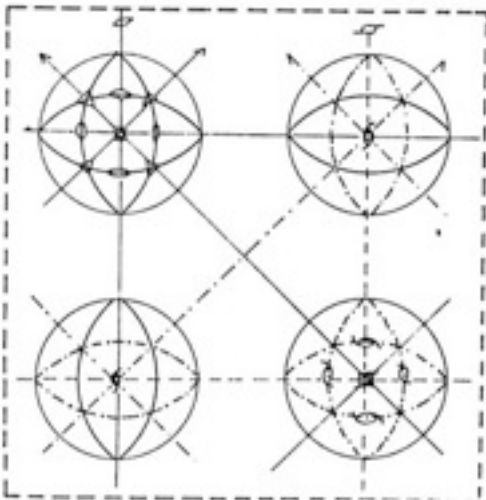
Position des atomes

Dans l'holoédrie du système cubique, la multiplicité de la forme oblique est de 48, ce qui signifie qu'une face placée de manière quelconque, ni perpendiculaire, ni parallèle à un élément de symétrie, est reproduite 48 fois. Une face parallèle à un axe A_2 est répétée 24 fois, perpendiculaire à un axe A_3 , 8 fois etc... D'une manière analogue, un atome placé en position quelconque à l'intérieur de la maille sera répété un certain nombre de fois par les opérateurs de symétrie du groupe d'espace. Si l'atome est dans une position privilégiée, sur un axe, dans un plan, ou à l'intersection de plusieurs opérateurs de symétrie, sa multiplicité va alors diminuer.



Projection sur le plan (001) des opérateurs de symétrie du groupe N°225, Fm3m.

Projection des atomes de Na et Cl sur le plan (001)



Eléments de symétrie inclinés sur le plan (001).

Les tables internationales indiquent quelles sont ces multiplicités et donnent les coordonnées de l'atome à l'intérieur de la maille. Le tableau de la page précédente est la reproduction d'une page des ces tables. Il s'agit du groupe N° 225 auquel NaCl appartient. En haut à gauche, figurent les symboles des groupes selon les notations de Hermann-Mauguin et de Schoenflies".

Au milieu de la première ligne figure la notation de la classe de symétrie ponctuelle à laquelle se rapporte le groupe; à droite on trouve le même symbole, mais en notation abrégée. La première liste indique les coordonnées des positions multiples d'un atome en position quelconque. Dans le cas présent cette liste comprend 48 termes. Toutefois il ne faut pas oublier que nous sommes dans une réseau à faces centrées qui renferme 4 noeuds en positions $0, 0, 0$, $0, 1/2, 1/2$, $1/2, 0, 1/2$ et $1/2, 1/2, 0$. Cela signifie que chacune des 48 positions décrites dans le tableau est reproduite quatre fois, en lui additionnant chaque fois les coordonnées d'un des nœuds de la maille ! Par exemple, en considérant le premier terme de la liste, x, y, z , nous aurons 4 atomes dont les positions seront les suivantes :

$$\begin{array}{cccc}
 \begin{array}{ccc} x & y & z \\ + & 0 & 0 & 0 \\ \hline x & y & z \end{array} &
 \begin{array}{ccc} x & y & z \\ + & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline x & y + \frac{1}{2} & z + \frac{1}{2} \end{array} &
 \begin{array}{ccc} x & y & z \\ + & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \hline x + \frac{1}{2} & y & z + \frac{1}{2} \end{array} &
 \begin{array}{ccc} x & y & z \\ + & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \hline x + \frac{1}{2} & y + \frac{1}{2} & z \end{array}
 \end{array}$$

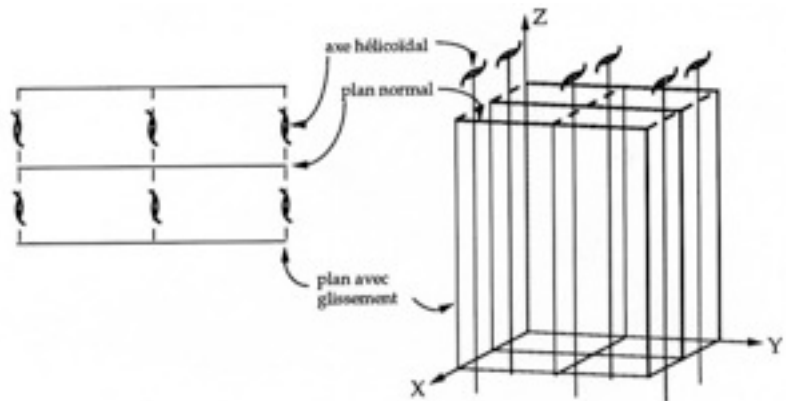
Un atome en position quelconque est donc répété 192 fois à l'intérieur de la maille. Ce chiffre élevé est dû à la symétrie élevée du groupe. Les listes suivantes donnent les positions des atomes situés dans des positions spéciales : sur un axe, dans un plan etc...

Les atomes de Na et de Cl occupent des positions très privilégiées et ne sont répétés chacun que 4 fois à l'intérieur de la maille.

Holoédrie et méridries

Dans l'exemple choisi, on constate que le groupe de symétrie contient tous les éléments de symétrie ponctuelle de l'holoédrie du système cubique plus une quantité d'autres opérateurs. Dans le cas présent, la symétrie du motif est plus élevée que celle du réseau : le cristal appartient à la classe holoédrique.

Prenons un autre exemple, le groupe de symétrie N° 31, $Pmn2_1$ qui correspond à une maille simple du système orthorhombique. On distingue des plans simples parallèles à (100), des plans avec glissement parallèles à (010) et des axes hélicoïdaux binaires verticaux.



Plan et élévation de la maille orthorhombique N° 31, $Pmn2_1$

On n'y retrouve pas tous les opérateurs de symétrie ponctuels de l'holoédrie du système orthorhombique : la symétrie du motif est inférieure à celle du réseau. En effet, la symétrie du cristal comportera un plan vertical parallèle à (100). Comme les plans avec glissement deviennent des plans normaux, en symétrie ponctuelle, le cristal possédera aussi un plan vertical parallèle à (010). En appliquant le théorème de symétrie qui veut qu'à l'intersection de n plans passant par une droite on trouve un axe d'ordre n , on aura encore un axe binaire vertical. La symétrie du cristal est alors $A_2 P P'$, une méridrie du système orthorhombique.

En conclusion, on constate que si l'orientation d'une face est déterminée par la géométrie du réseau (forme de la maille élémentaire), la présence ou l'absence de cette face dépend de la symétrie du groupe d'espace.

la symétrie du groupe d'espace contient
au moins tous les opérateurs du réseau \Rightarrow **Holoédrie**

la symétrie du groupe d'espace
est inférieure à celle du réseau \Rightarrow **Méridrie**