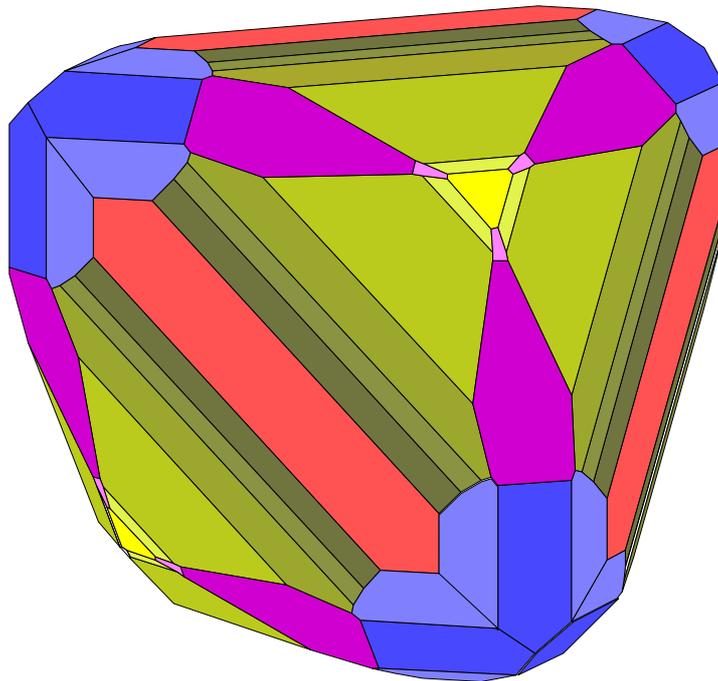


POURQUOI UTILISER UN LOGICIEL DE DESSIN DE CRISTAUX ?



François PERINET

SOMMAIRE :

- PARTIE 1 : INTRODUCTION**
- PARTIE 2 : STRUCTURE GEOMETRIQUE DES CRISTAUX**
- PARTIE 3 : NOTATION DE MILLER ET SOLIDES ELEMENTAIRES**
- PARTIE 4 : VISUALISATION DES SOLIDES DANS L'ESPACE**
- PARTIE 5 : REPRODUCTION DES DESSINS DES OUVRAGES DE MINERALOGIE**
- PARTIE 6 : DESSIN DE CRISTAUX OBSERVES**

POURQUOI UTILISER UN LOGICIEL DE DESSIN DE CRISTAUX ?

Partie 1 : Introduction

Les ouvrages de minéralogie comportent généralement quelques pages consacrées aux notions de cristallographie géométrique. Pour le débutant, les difficultés liées à la capacité à imaginer des solides dans l'espace et à la compréhension des indications chiffrées qui figurent sur les dessins de cristaux (notation de Miller) font que ces pages, bien qu'importantes, sont souvent escamotées car rébarbatives. Le passage du stade de l'observation des cristaux à celui de la compréhension de la géométrie des formes observées est difficile.

Aujourd'hui des progrès décisifs dans le domaine de la vulgarisation de la cristallographie géométrique ont été réalisés à l'aide de l'informatique, par la mise au point de logiciels à la portée du non professionnel.

L'atout majeur de ce type d'outil est la visualisation dans l'espace de solides conformes aux lois de la cristallographie, dont les formes sont modifiables à volonté.

Le microminéralogiste débutant pourra utiliser un logiciel de dessin de cristaux pour mieux :

- comprendre la structure géométrique des cristaux
- comprendre la notation de Miller et les solides élémentaires
- visualiser les solides dans l'espace
- comprendre en les reproduisant les dessins de cristaux des ouvrages de minéralogie
- comprendre et dessiner des solides correspondant aux cristaux observés

Ces différents domaines sont abordés dans les parties suivantes, par le développement de points particuliers illustrés à l'aide de dessins réalisés avec le logiciel FACES.

Ce logiciel est le plus facile à utiliser. Avec un manuel de minéralogie en support, il peut être employé comme outil d'apprentissage des formes cristallines.

Le principe d'utilisation de FACES est très simple. Il comprend deux étapes :

- constitution du prisme de base

Deux données sont à sélectionner dans les menus proposés : le système cristallin et la classe de symétrie du minéral dont on souhaite dessiner les cristaux. L'écran affiche un prisme ayant les symétries de la classe choisie.

Exemple : fluorite, système cubique, classe $4/m -3 2/m$

wulfénite, système quadratique, classe $4/m$

La troisième donnée à renseigner concerne les paramètres a, b, c de la maille élémentaire du minéral défini.

Exemple : fluorite, $a = b = c = 5.463$

wulfénite, $a = 5.435, b = 5.435, c = 12.11$

- ajout des troncutures

La quatrième donnée à afficher est l'indice de Miller des formes choisies pour tronquer le prisme de base et donc lui ajouter des faces.

Exemple : 111

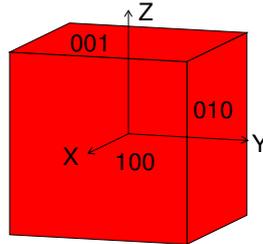
Il suffira ensuite d'ajuster les coupes à la profondeur voulue pour obtenir le solide désiré.

POURQUOI UTILISER UN LOGICIEL DE DESSIN DE CRISTAUX ?

Partie 2 : Structure géométrique des cristaux

Forme de base des cristaux

Considérons le système cubique. Toutes les espèces minérales qui appartiennent à ce système constituent des cristaux avec une forme de base cubique. Le cube présent à l'écran est lui-même à considérer comme un assemblage de cubes de la dimension de la maille élémentaire (paramètres a , b , c). Les dimensions des côtés du cube sont des multiples de la dimension du paramètre $a = b = c$.



Ce dessin est celui proposé par l'écran initial de FACES.

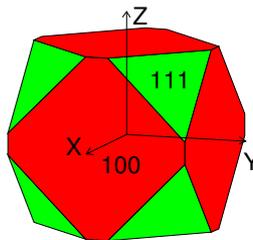
Troncatures élémentaires

Deux possibilités permettent d'effectuer des coupes (ou troncatures) sur un solide : tronquer les sommets ou bien tronquer les arêtes.

- troncature des sommets du cube

La troncature la plus élémentaire est celle définie par la coupe du même nombre de mailles élémentaires sur les trois arêtes issues du sommet considéré (en notation de Miller cette troncature est nommée $\{111\}$). Etant donné qu' $a = b = c$, les coupes sont de dimensions égales sur les trois arêtes.

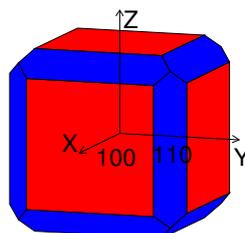
Exemple : cristal avec troncature $\{111\}$ de profondeur 30%



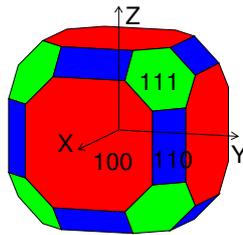
- troncatures des arêtes du cube

La troncature la plus élémentaire est celle définie par la coupe du même nombre de mailles élémentaires sur les faces qui forment l'arête considérée (en notation de Miller cette troncature est nommée $\{110\}$). Etant donné qu' $a = b = c$, les coupes sur les faces sont de dimensions égales.

Exemple : cristal avec troncature $\{110\}$ de profondeur 15%



Assemblage de la forme de base et des deux formes élémentaires



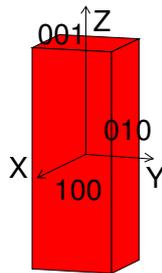
Ce dessin est la synthèse des trois dessins précédents. Les facettes des différentes formes ont leur contour modifié.

Avec le logiciel, il est possible d'attribuer à chaque forme une couleur distincte, ou bien de visualiser avec un ombrage, ou bien encore de visualiser les faces cachées.

Forme de base des cristaux pour les autres systèmes non isométriques

Considérons par exemple le système quadratique. Toutes les espèces minérales qui appartiennent à ce système constituent des cristaux avec une forme de prisme droit allongé. Le prisme présent à l'écran est lui-même à considérer comme un assemblage de prismes de la dimension de la maille élémentaire (paramètres a , b , c). Les dimensions des côtés du prisme sont des multiples de la dimension des paramètres a , b , c .

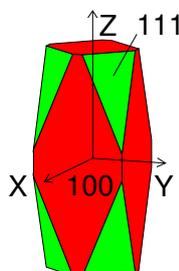
Exemple : wulfénite, classe $4/m$, $a = 5.435$, $b = 5.435$, $c = 12.11$, prisme de base



Impact de la valeur des paramètres a , b , c sur la forme élémentaire $\{111\}$

Pour les systèmes différents du système cubique, la troncature $\{111\}$ définie par la coupe du même nombre de mailles élémentaires sur les trois arêtes du sommet considéré aura un aspect qui sera fonction des valeurs des paramètres a , b , c .

Exemple : wulfénite, cristal avec troncature $\{111\}$ de profondeur 30%



POURQUOI UTILISER UN LOGICIEL DE DESSIN DE CRISTAUX ?

Partie 3 : Notation de Miller et solides élémentaires

La notation de Miller permet d'identifier n'importe quelle face ou arête par ses "indices" en prenant comme référence les trois axes cristallographiques x, y, et z.

Avec le logiciel, la notation de Miller peut être comprise par une visualisation instantanée de la coupe résultant des différents indices de faces choisis sur le prisme de base.

Indices pour les faces

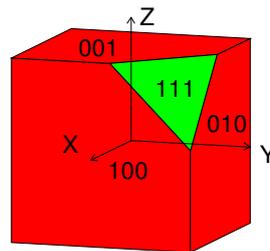
Toute troncature (ou face) sur un solide est reproduite par les éléments de symétrie présents (on obtient alors une forme). Avant d'observer l'effet global (la forme), il peut être intéressant de visualiser la troncature seule (la face), afin de comprendre la notation de Miller.

Nota : les indices de faces sont entre parenthèses et les indices de formes sont entre accolades.

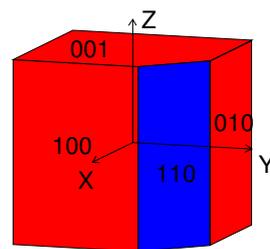
Le logiciel possède un avantage important : celui de pouvoir montrer n'importe quelle troncature isolément. L'utilisateur peut donc faire tous les essais possibles à partir des informations qu'il souhaite comprendre.

Voici quelques exemples avec le système cubique pour des indices de Miller caractéristiques :

- cube avec une face (111) profondeur 30%

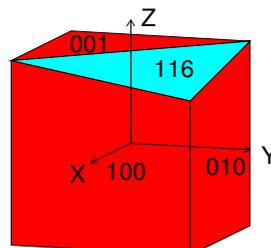


- cube avec une face (110) profondeur 30%



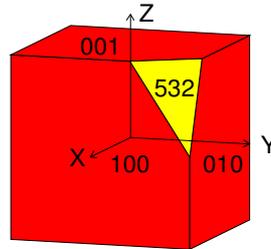
On peut remarquer que l'indice 0 est lié au parallélisme entre l'axe z et la face 110.

- cube avec une face (116) profondeur 25%



On peut remarquer que l'indice 6, lié à la coupe suivant l'axe z, correspond à une longueur de coupe de $1/6$ de l'arête concernée. Les indices 1, liés aux coupes suivant les axes x et y, correspondent à une longueur de coupe égale à celle des arêtes concernées. Les indices 1, 1, et 6 peuvent être traduits par des longueurs découpées suivant des proportions relatives de $1/1$, $1/1$, $1/6$. Ces indices sont inversement proportionnels aux longueurs découpées. Les longueurs découpées sont des nombres entiers de mailles élémentaires.

- cube avec une face (532) profondeur 20%



Il est un peu plus difficile dans ce cas d'observer les rapports de proportionnalité. En partant de l'exemple précédent, on peut considérer que les longueurs découpées à partir du sommet tronqué sont respectivement dans des proportions relatives de $1/5$ suivant l'axe x, $1/3$ suivant l'axe y et $1/2$ suivant l'axe z. Ces trois coupes doivent correspondre ensemble à des nombres entiers de mailles élémentaires.

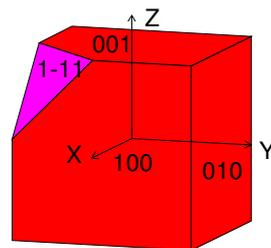
Le cube de dimension minimum pour lequel ces rapports de coupes seront des nombres entiers de mailles élémentaires est calculé en réduisant les trois fractions au même dénominateur. Le plus petit commun multiple (PPCM) de 5, 3 et 2 est 30. On obtient les fractions $6/30$, $10/30$, $15/30$ respectivement égales à $1/5$, $1/3$, $1/2$.

La plus petite coupe possible pour obtenir le plan (532) sera donc à partir du sommet tronqué, à 6 mailles suivant x, 10 mailles suivant y, 15 mailles suivant z.

En multipliant les 3 longueurs coupées par un nombre entier, on obtient un autre plan parallèle.

Tous ces plans parallèles constituent une famille ayant les mêmes indices de Miller.

- cube avec une face (1-11) profondeur 15%



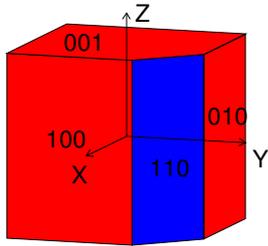
On peut remarquer que l'indice négatif -1 correspond à une coupe suivant l'axe y, dans le trièdre pour lequel y est négatif, x et z étant positifs.

Indices pour les arêtes

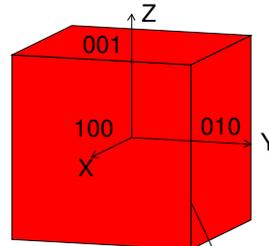
Considérons la face (110) qui coupe les faces (100) et (010) suivant des dimensions égales. Si la profondeur de (110) est réduite à 0%, la face est réduite à l'arête [110].

Les indices de ce type de face, qui coupe deux autres faces suivant des dimensions égales, sont la somme des indices des faces coupées.

Les indices de l'arête correspondent à la somme des indices des deux faces qui la constitue.



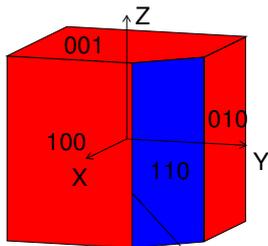
Face (110) profondeur 30%



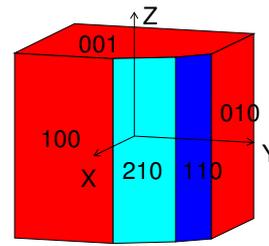
Face (110) profondeur 0%
arête [110]

Renouvelons l'opération avec les faces (100) et (110). L'arête formée par (100) et (110) correspond à la somme des indices soit [210].

Si on augmente la profondeur de (210) on obtient la face (210) qui coupe les faces (100) et (110) suivant des dimensions égales.

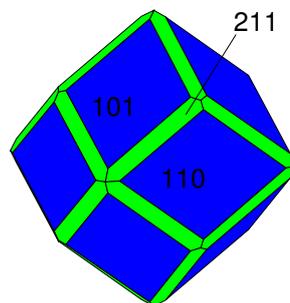


Face (110) profondeur 30%
arête [210]



Faces (110) et (210) profondeur 30%

Exemple : cristal de grenat de forme {110} avec arêtes coupées.



Le logiciel indique à l'écran les indices pour chaque face de la forme {110}. La petite facette qui coupe l'arête entre les faces (101) et (110) a pour indices la somme de ces deux indices soit (211).

Effets des degrés de symétrie sur le solide, holoédrie - hémiedrie

Les solides obtenus à partir d'une même forme sont fonction des degrés de symétrie.

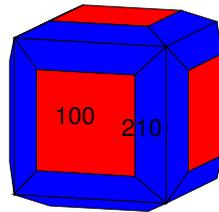
Lorsque tous les éléments de symétrie existent (axes, centre, et miroirs), on est en présence de la classe de symétrie holoédrique.

Les classes hémiedriques ont un degré de symétrie plus bas. Un des éléments de symétrie est absent. Les solides sont moins riches en faces.

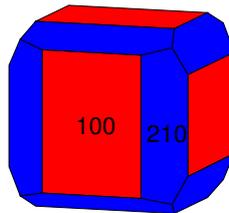
Exemples avec des solides du système cubique :

Solides avec forme {210} profondeur 15%

- **holoédrie** : fluorite, classe $4/m\bar{3}2/m$

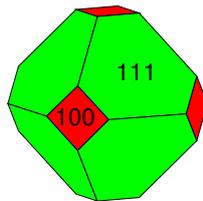


- **hémiedrie** : pyrite, classe $2/m\bar{3}$

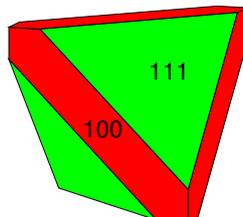


Solides avec forme {111} profondeur 55%

- **holoédrie** : fluorite, classe $4/m\bar{3}2/m$



- **hémiedrie** : tétraédrite, classe $\bar{4}3m$



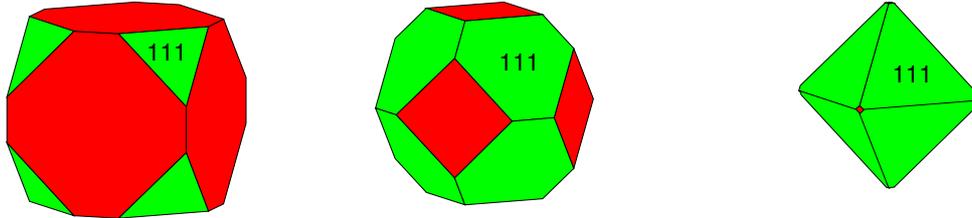
Importances des formes - Formes simples

L'importance de la profondeur de coupe des troncatures peut être telle que le solide de base disparaisse. On obtient à partir des solides de base d'autres solides caractéristiques désignés par l'indice de Miller de leur forme, comme l'octaèdre {111} par exemple.

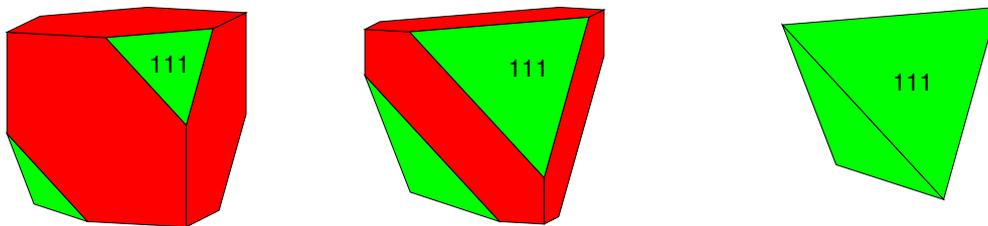
Les touches de raccourci du clavier sont utilisables pour observer les variations d'aspect du solide d'une forme à l'autre, en continu suivant un pas choisi.

Quelques formes donnent des solides caractéristiques rencontrés pour des espèces courantes :

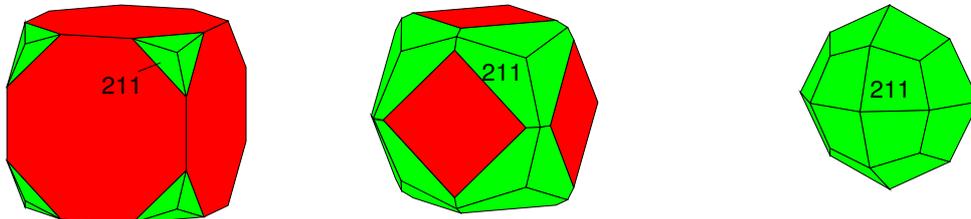
- **octaèdre** {111} cuprite



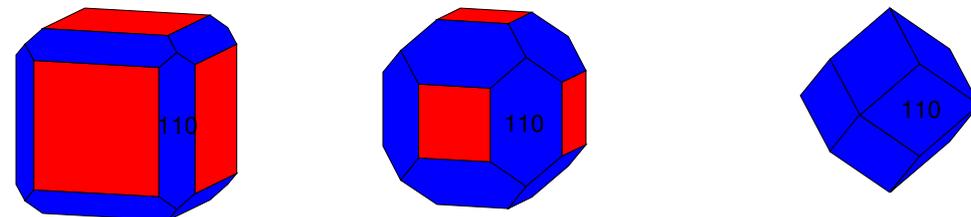
- **tétraèdre** {111} tétraédrite



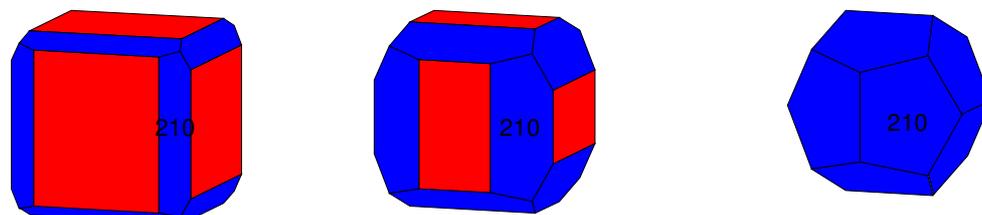
- **tétraèdre** {211} grenat



- **dodécaèdre rhomboïdal** {110} fluorite



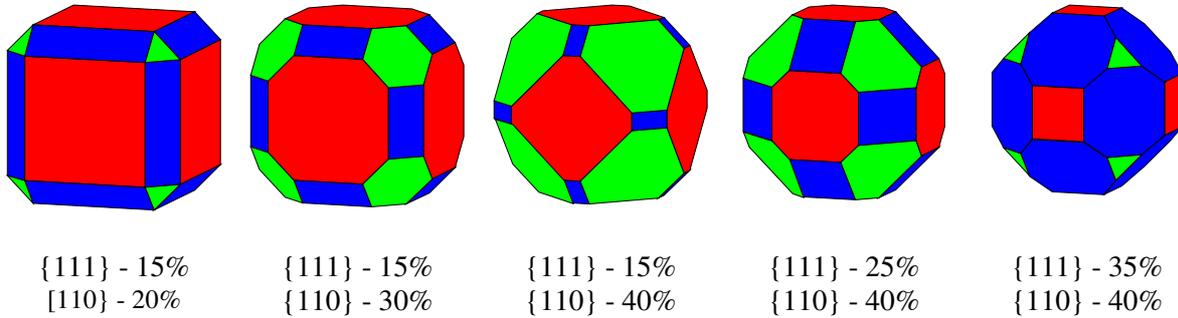
- **dodécaèdre pentagonal** {210} pyrite



Importance d'une forme par rapport à l'autre

Lorsque plusieurs formes sont en présence, les variations de l'importance d'une forme par rapport à une autre génèrent des changements d'aspect complets du solide.

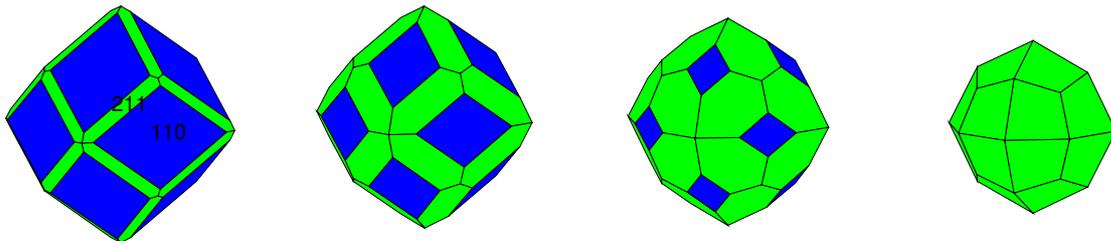
Exemple : variation de l'importance des formes {111} et {110} sur un cube



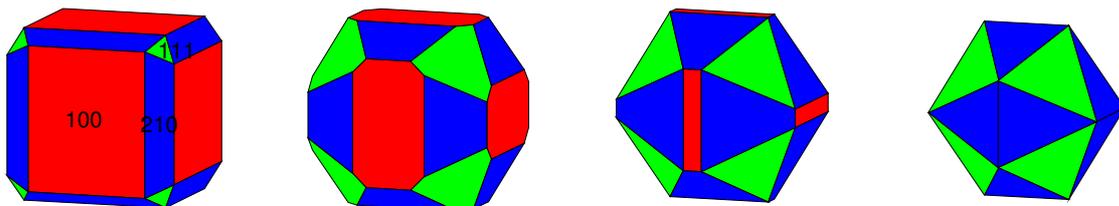
Combinaisons remarquables

Voici deux exemples de combinaisons de formes remarquables.

Grenat : passage du dodécaèdre rhomboïdal {110} au trapézoèdre {211}



Pyrite : passage du cube à l'icosaèdre avec les formes {111} et {210}



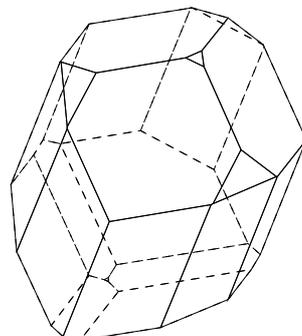
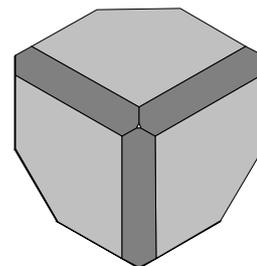
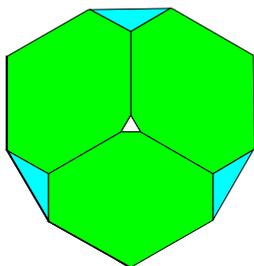
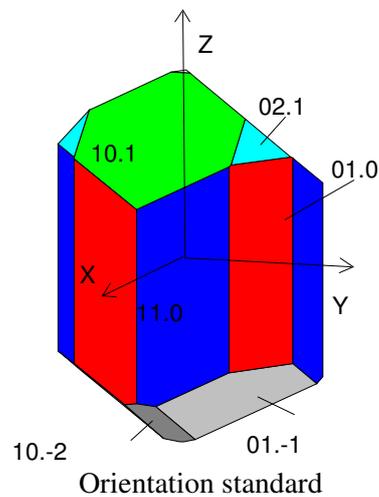
POURQUOI UTILISER UN LOGICIEL DE DESSIN DE CRISTAUX ?

Partie 4 : Visualisation des solides dans l'espace

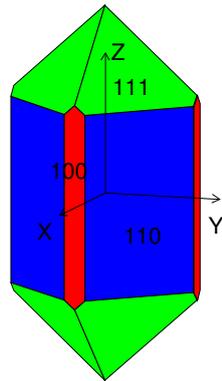
La vision 3D d'objets orientables à volonté améliore considérablement la compréhension des formes cristallines.

Le logiciel propose à l'écran un solide orienté conformément au standard international. Plusieurs possibilités permettent de faire tourner le solide dans l'espace pour l'observer sous tous les angles possibles et mieux comprendre ainsi la géométrie de la mosaïque des différentes facettes. Les axes cristallographiques peuvent être affichés pour mieux se situer dans l'espace.

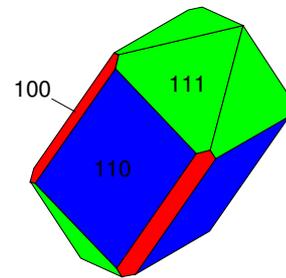
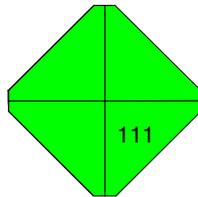
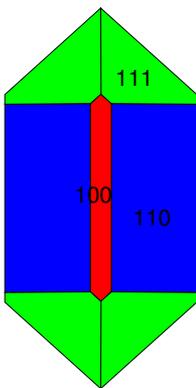
Exemple : tourmaline avec les formes $\{01.0\}$, $\{11.0\}$ pour le prisme, $\{10.1\}$, $\{02.1\}$ pour l'extrémité supérieure, $\{01.-1\}$, $\{10.-2\}$ pour l'extrémité inférieure



Exemple : zircon avec les formes {100}, {110}, {111}



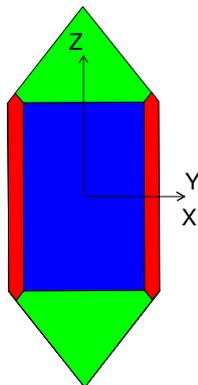
Orientation standard



Approche de la mesure des angles

Le solide peut être orienté de manière à obtenir un dessin sur lequel des angles préalablement choisis seront représentés en vraie grandeur. Le dessin imprimé peut alors être utilisé comme gabarit pour tester la validité de la forme choisie sur des cristaux suffisamment volumineux.

Exemple : zircon, cristal orienté avec l'angle entre faces de la forme {111} en vraie grandeur

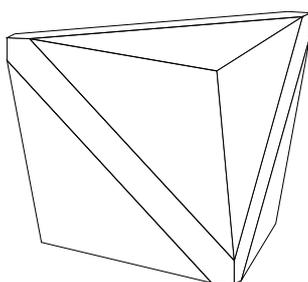
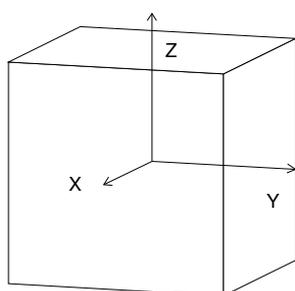


POURQUOI UTILISER UN LOGICIEL DE DESSIN DE CRISTAUX ?

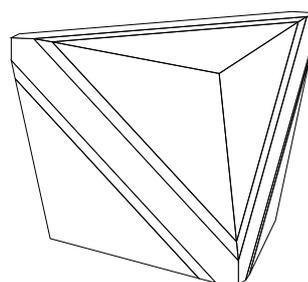
Partie 5 : Reproduction des dessins des ouvrages de minéralogie

Pour exercer sa capacité à comprendre les formes des cristaux, chacun pourra chercher à reproduire les dessins parus dans les ouvrages de minéralogie.

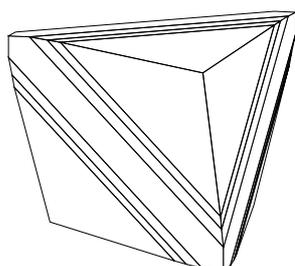
Voici avec FACES, les étapes de construction de la structure d'un cristal de tétraédrite d'Urbeis (Bas-Rhin), dessiné à l'origine par H. Ungemach et publié dans le Bulletin de la Société Française de Minéralogie en 1906.



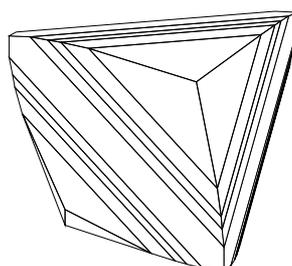
{611} - 22.55%



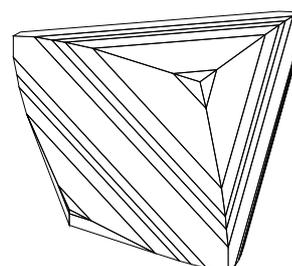
{511} - 25.45%



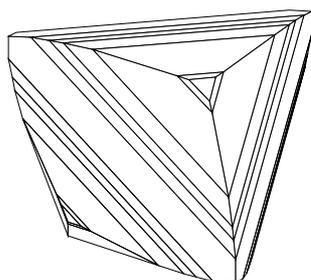
{411} - 29%



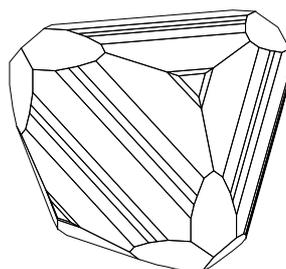
{211} - 39%



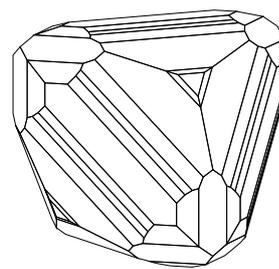
{13.77} - 39.28%



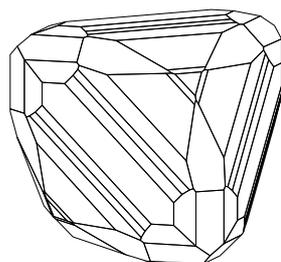
{111} - 40.6%



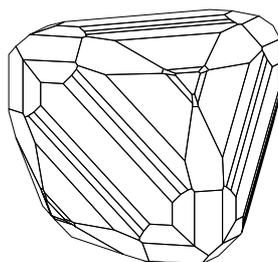
{110} - 15.1%



{310} - 10.5%



{221} - 38%



{885} - 39.1%

POURQUOI UTILISER UN LOGICIEL DE DESSIN DE CRISTAUX ?

Partie 6 : Dessin de cristaux observés

Bien que les cristaux récoltés semblent souvent fournir des solides parfaits, l'observation fine montre qu'en fait la perfection est relative. Les cristaux observés sont généralement dissymétriques. Ils peuvent être néanmoins référencés à un modèle symétrique. Lorsque ce modèle est construit, le cristal observé peut être dessiné tel qu'il se présente effectivement.

Exemples

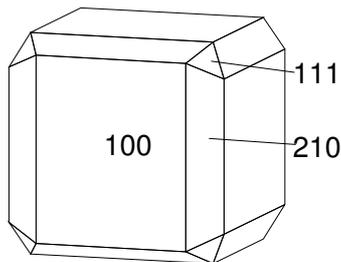
- cristaux de pyrite de Peyrebrune, Tarn, France.

Ces cristaux sont inframillimétriques, brillants, en semis sur des cristaux de dolomie. Les sommets et les arêtes sont toujours tronqués par une facette simple. La seule solution pour la troncature du sommet est $\{111\}$. Deux formes simples sont envisageables pour la troncature des arêtes : $\{110\}$, ou $\{210\}$ fréquente pour la pyrite. La modélisation donne le résultat suivant.

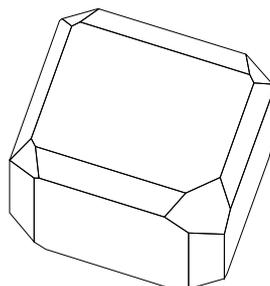


C'est la combinaison des formes $\{210\}$ et $\{111\}$ qui amène l'aspect observé pour les facettes de $\{111\}$.

Sur quelques cristaux, la forme $\{111\}$ peut se réduire jusqu'à montrer seulement des facettes triangulaires.



Les cristaux observés sont fréquemment allongés, parallélépipédiques, avec des troncatures $\{111\}$ dissymétriques comme sur le cristal modélisé ci-dessous.



- cristaux de dravite des alluvions du Salat, St Sernin, Ariège, France

Ces cristaux de couleur miel, gemmes, ont été récoltés en triant des fonds de batée à la recherche de paillettes d'or.

Les arêtes des deux cristaux modélisés sont bien nettes. Toutes les faces sont présentes et brillantes.

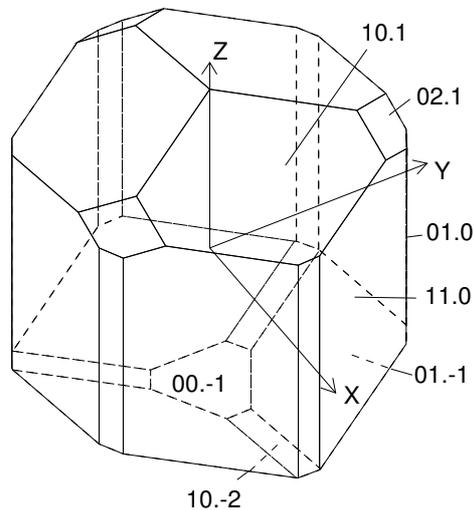
Les deux extrémités du prisme sont différentes. Elles caractérisent la tourmaline. La couleur et le lieu de récolte permettent de préciser la variété dravite.

Les dimensions des différentes facettes, ainsi que celles du contour du prisme, ont été relevées sous la binoculaire. Des vues en projection dessinées sur papier, ont permis d'orienter les cristaux et de reconnaître les formes en présence.

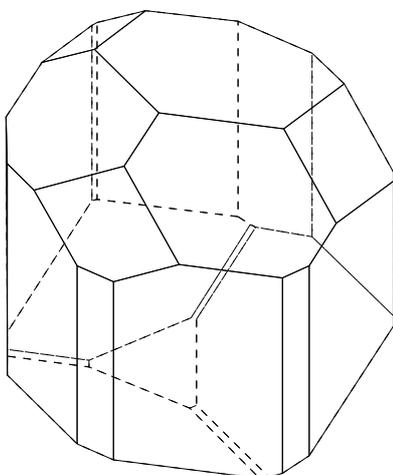
Le prisme de référence a été produit avec FACES. Les formes courantes de la tourmaline ont été identifiées (voir partie 4).

Avec FACES, chaque face du solide de référence a été reprise en modifiant sa profondeur. Il a été ainsi possible d'obtenir des solides qui correspondent aux cristaux observés.

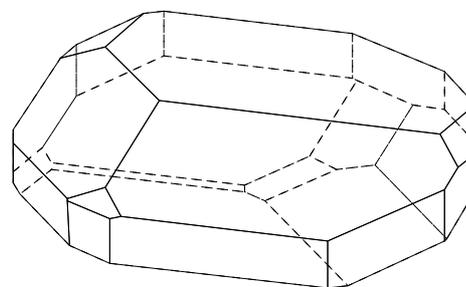
Les deux cristaux modélisés, bien que de morphologie différente, sont constitués par les mêmes formes.



Solide de référence

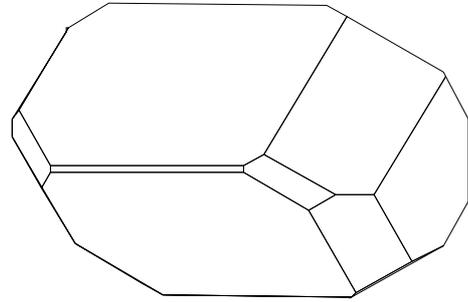
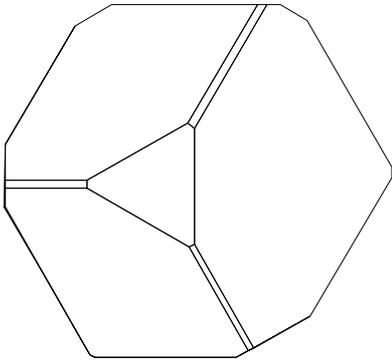


Cristal de 0.5 mm

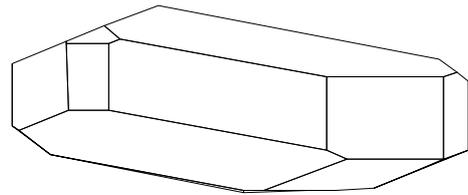
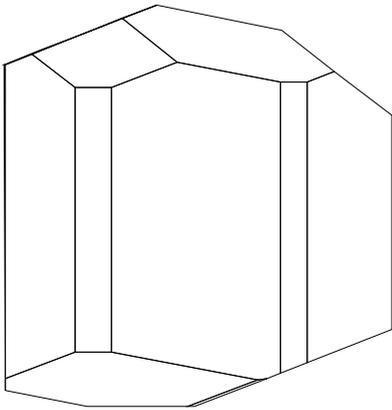


Cristal de 0.6 mm de plus grande dimension

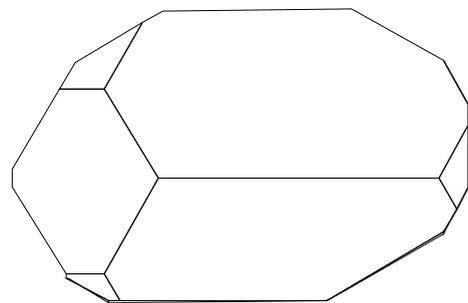
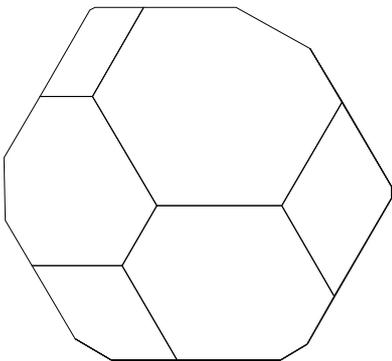
Vues en projection - Comparaison de la morphologie



Extrémité inférieure



Prisme



Extrémité supérieure