Modélisation d'un cristal de zircon

François Périnet

INTRODUCTION

Cette note décrit la modélisation d'un cristal de zircon qui présente, malgré des distorsions importantes, une combinaison bien lisible d'un nombre de formes assez peu courant. Les dessins ont été réalisés avec le logiciel FACES à partir d'une photographie. Le cristal mesure 1 mm et provient du ruisseau de Métou à Vergonzac près de Siaugues-Sainte-Marie, Haute-Loire.

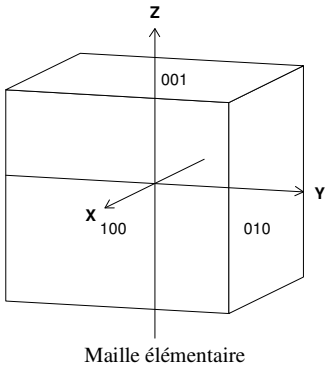
PHOTOGRAPHIE

Le cristal a été positionné au plus près de l'orientation clinographique conventionnelle, tout en tenant compte de l'exposition la plus favorable pour la photographie (optimisation de la restitution des arêtes et moindres reflets).

ETABLISSEMENT DU DESSIN DU MODELE

DONNEES CRISTALLOGRAPHIQUES DE BASE

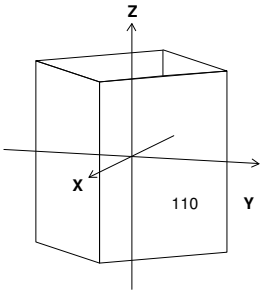
Le zircon appartient à la classe de symétrie 4/m 2/m 2/m du système quadratique. Les paramètres de maille sont, a = b = 6.607 Å, c = 5.982 Å.



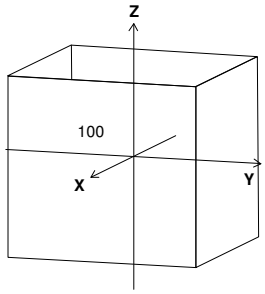
Maille élémentaire

Le solide de base est limité par :

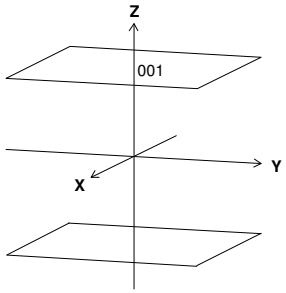
- un prisme (forme ouverte) à 4 faces constitué par la forme {110} (dit du 1er ordre) ou par la forme {100} (dit du 2ème ordre)
- et un pinacoïde (forme ouverte à 2 faces) constitué par la forme {001}.



Prisme {110}



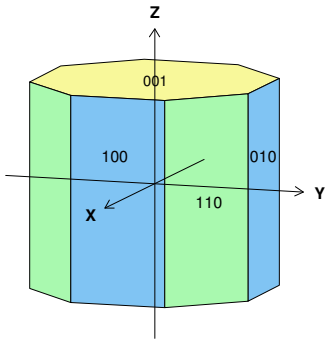
Prisme {100}



Pinacoïde {001}

PRISME ET PINACOÏDE SUR LE CRISTAL

Sur le cristal, le prisme principal, qui possède 8 faces, est une combinaison des formes {100} et {110}. Le pinacoïde est également présent avec la forme {001}.



Prisme et pinacoïde sur le cristal

DIPYRAMIDES SUR LE CRISTAL

Le solide de base est aussi limité par d'autres formes (dipyramides) avec des faces inclinées qui font la liaison entre le pinacoïde et les faces de chacun des prismes, {110} d'une part et {100} d'autre part. Ces dipyramides résultent, au niveau du dessin, de coupes ou troncatures des formes principales.

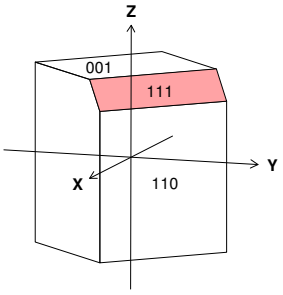
Des essais successifs sont nécessaires pour déterminer ces formes pyramidales, en commençant par les formes les plus probables qui correspondent aux indices de Miller les plus simples (et aux plans qui ont la densité atomique la plus élevée).

Rapport de coupe de 1/1

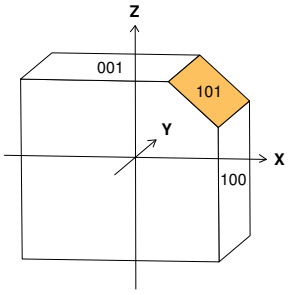
Les troncatures sont obtenues par des coupes de nombres entiers de mailles élémentaires. La troncature la plus simple consiste en une coupe d'un nombre égal de mailles élémentaires sur les plans considérés.

On obtient :

- la face (111) par troncature des faces (001) et (110) : 001 + 110 = 111,
- la face (101) par troncature des faces (001) et (100) : 001 + 100 = 101.



Face (111)

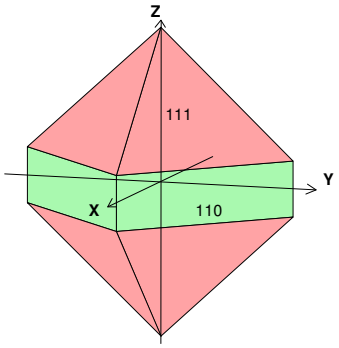


Face (101) – Orientation non clinographique

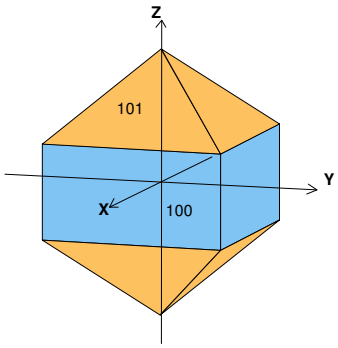
Ce qui donne :

- avec le prisme du 1er ordre {110}, la dipyramide {111},
- avec le prisme du 2ème ordre {100}, la dipyramide {101}.

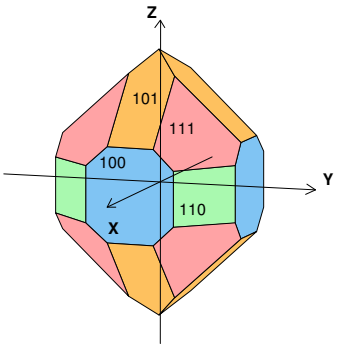
Essai avec les dipyramides {111} et {101}



{110} et {111}



{100} et {101}



Combinaison

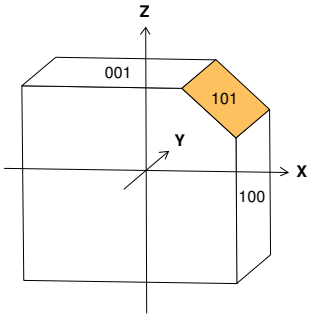
Ce couple de formes ne convient pas. La pente des faces inclinées est trop faible. Des formes avec des indices de Miller plus élevés sont à rechercher.

Rapports de coupe possibles avec les nombres entiers 1 et 2

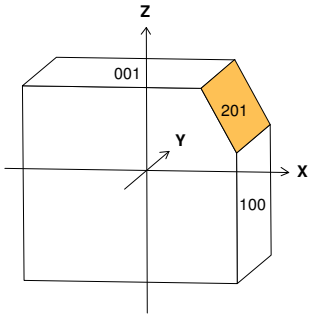
Les longueurs découpées sont dans le rapport ½, ou dans le rapport 2/1. La solution qui permet d'obtenir un plan plus pentu qu'avec les formes précédentes est celle avec le rapport ½, c'est à dire de 1 sur X pour 2 sur Z. Les indices de Miller étant les inverses des longueurs découpées, un rapport de 1/2 entre X et Z produit le plan avec les indices de Miller (201).

On obtient :

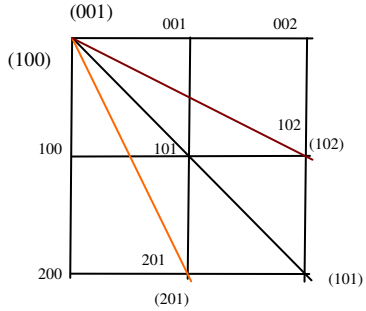
- avec le prisme du 1er ordre {110}, la dipyramide {221} : 001 + (2 x 110),
- avec le prisme du 2ème ordre {100}, la dipyramide {201} : 001 + (2 x 100).



Face (101) - Orientation non clinographique

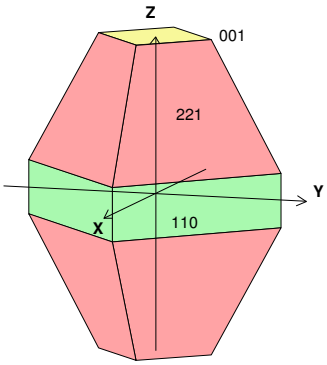


Face (201) - Orientation non clinographique

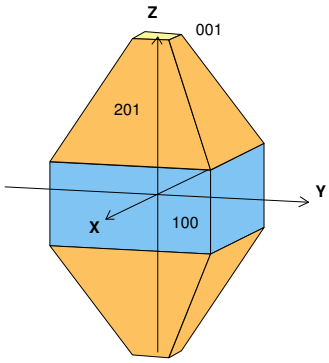


Pentes relatives des plans (101), (102) et (201)

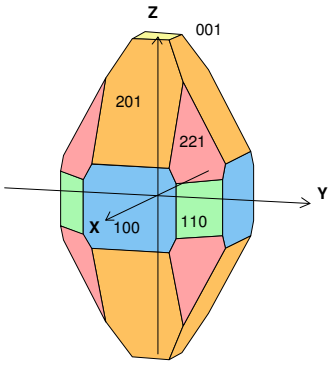
Essai avec les dipyramides {221} et {201}



{110} et {221}



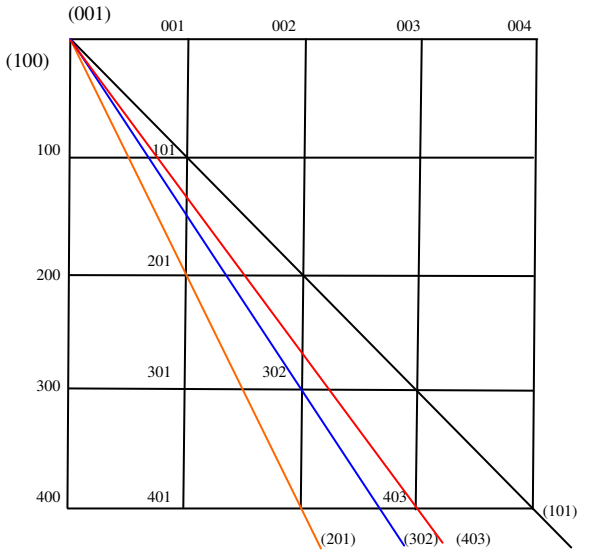
{100} et {201}



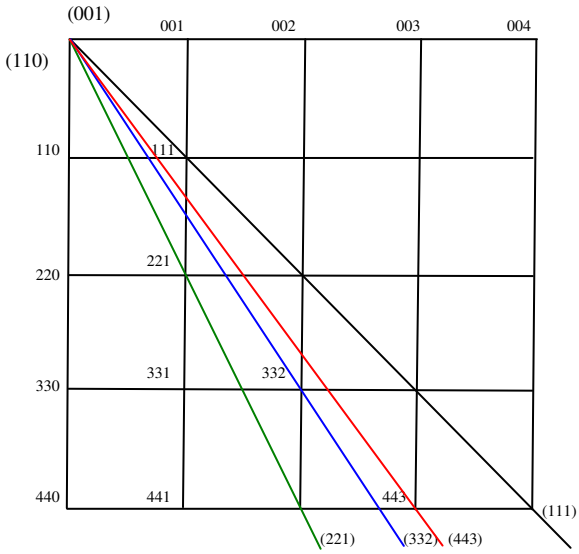
Combinaison

Le résultat ne convient pas. Cette fois les faces sont trop pentues par rapport à celles du cristal. Le couple de plans à identifier a donc des indices intermédiaires entre (111) / (101) et (221) / (201). Des formes avec des indices de Miller encore plus élevés sont à rechercher.

Rapports de coupe supplémentaires possibles avec les nombres entiers 3 et 4



plans d'inclinaison intermédiaire entre (101) et (201) - pentes relatives

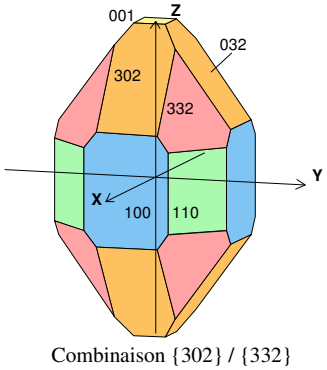


plans d'inclinaison intermédiaire entre (111) et (221) - pentes relatives

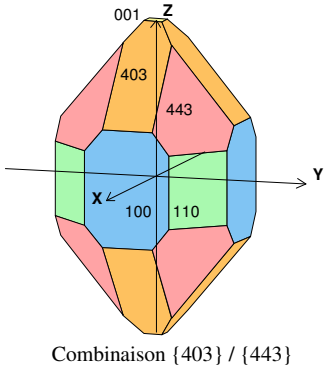
Avec les plans d'inclinaison intermédiaire entre (101) et (201), on obtient d'abord le plan aux indices les plus simples (302), puis le plan (403). Puis, avec les plans d'inclinaison intermédiaire entre (111) et (221), on obtient d'abord le plan aux indices les plus simples (332), puis le plan (443).

Essai avec les dipyramides {302} / {332} et {403} / {443}

Cristal

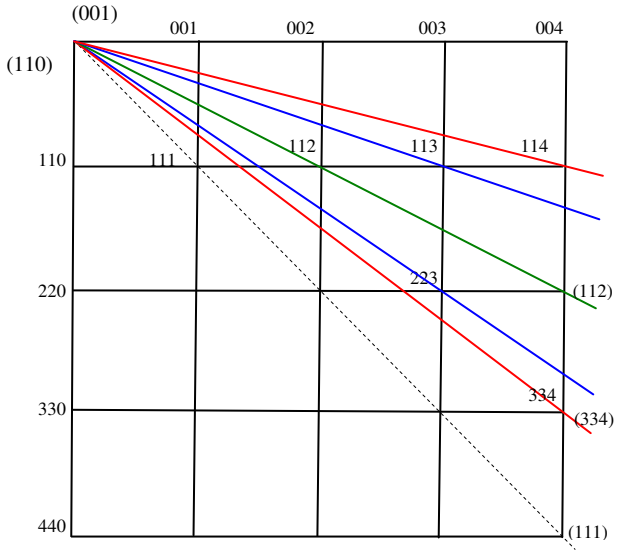


Combinaison {302} / {332}



Combinaison {403} / {443}

Les couples de formes {302} / {332} et {403} / {443} constituent des dipyramides aux aspects peu différents. Le choix est porté sur le couple {302} / {332} qui correspond le mieux à la morphologie du cristal.



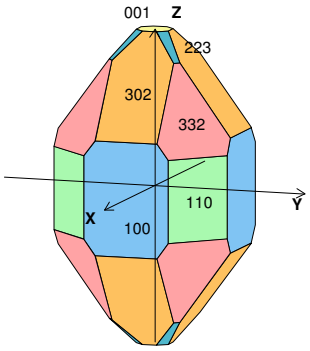
plans d'inclinaison intermédiaire entre (001) et (110)
et moins pentus que (334) – pentes relatives

Dipyramide secondaire

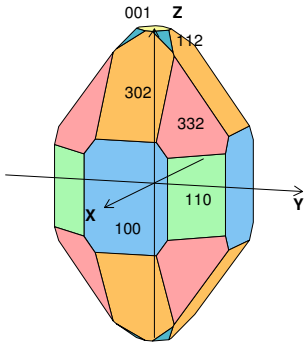
Sur le haut du cristal une autre forme dipyramidale affecte, par une petite facette triangulaire, la liaison entre la face (332) et la face (001) constituée par l'arête de jonction des faces (302) et (032) (cf. dessin précédent). Cette arête est la plus simple expression de la face (334) : 302 + 032.

Le plan recherché qui tronque cette arête, est donc moins pentu que (334). On obtient suivant les rapports de coupe et les indices de Miller des plus simples aux plus élevés : d'abord la forme {112}, puis {113} ou {223} et puis {114}.

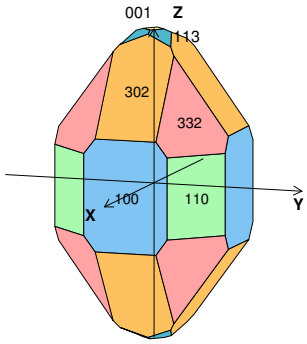
Essai avec les dipyramides {223}, {112} et {113}



{223}



{112}



{113}

La restitution de l'aspect le plus proche de la photo est obtenue avec la forme {112}, la plus simple.

Par contre la forme {432} ne convient pas. Le dessin ci-dessous montre que l'orientation de l'arête d'intersection de la face (432) avec la face (110) n'est pas restituée de manière convenable (pente trop faible). Une forme avec des indices de Miller plus élevés est à rechercher.

Autres dipyramides secondaires

Sur le cristal, deux faces étroites (↙) tronquent d'une part l'arête commune aux faces (100) et (302) et d'autre part l'arête commune aux faces (100) et (332).

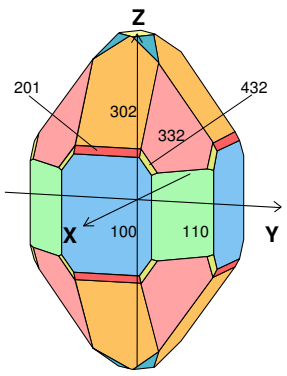
Le rapport de coupe le plus simple de 1/1 est d'abord pris en compte pour déterminer ces faces et les formes auxquelles elles appartiennent.

Ce qui donne :

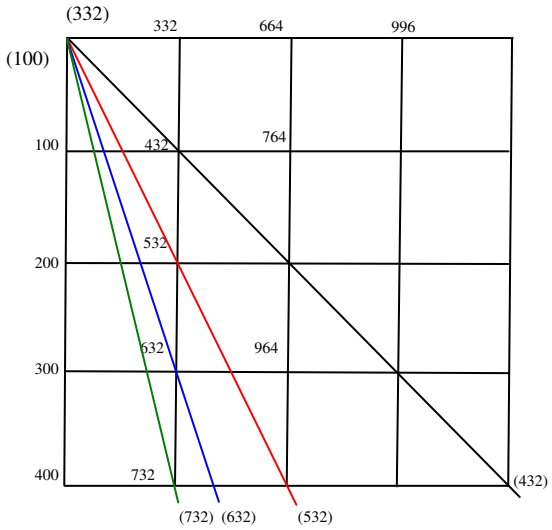
- la face (402) : 100 + 302, et la forme {402}, simplifiée en {201},
- la face (432) : 100 + 332, et la forme {432}.

La forme {201} est considérée acceptable compte-tenu de la faible dimension de la seule face observable et de la difficulté d'appréciation de certaines de ses arêtes de jonction avec les faces attenantes.

Dipyramides secondaires



Aspect de {201} et de {432}

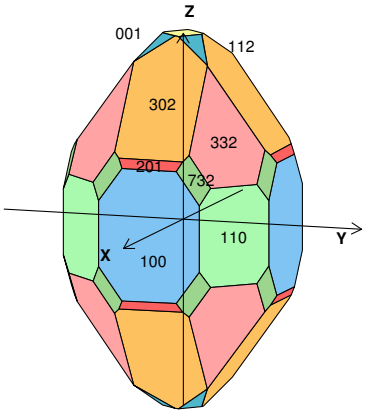


plans d'inclinaison intermédiaire entre (100) et (332) et plus pentus que (432) – pentes relatives

La série de plans aux indices les plus simples à partir de (432) est constituée par (532), puis (632),… Le plan (632) ne convient pas (pente encore insuffisante). Le choix est fait sur le plan (732) qui donne une restitution relativement satisfaisante de l'orientation de l'arête d'intersection de la face (732) avec la face (110).

MODELE FINAL

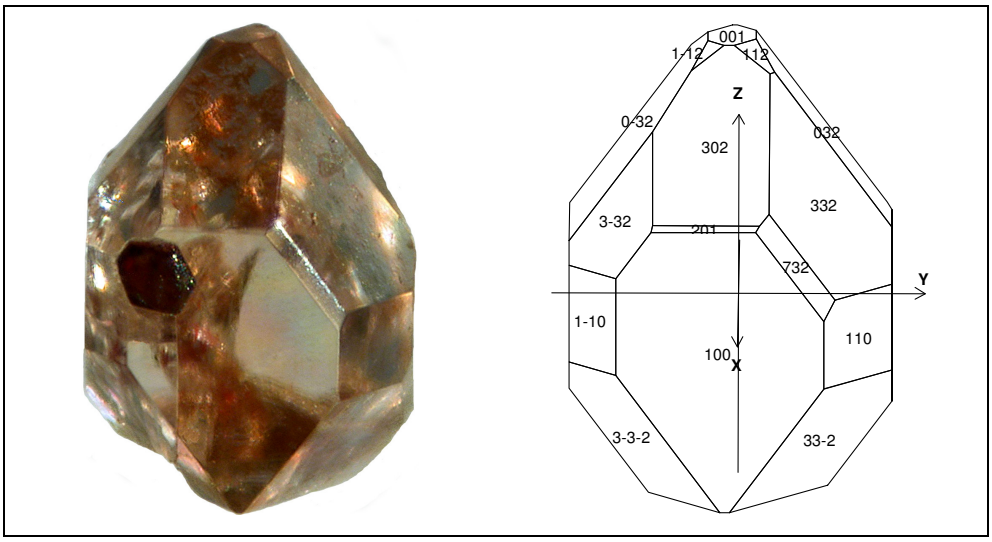
Le modèle final est ainsi obtenu avec 8 formes : {001}, {100}, {110}, {112}, {302}, {332}, {201} et {732}.



Modèle final

DU MODELE AU CRISTAL OBSERVE

Sur le modèle, la dimension de chaque face est ajustée pas à pas, par modification de la distance au centre du volume, afin d'obtenir des intersections des faces entre elles et un dessin d'ensemble conformes au cristal tel qu'il se présente sur la photographie.



CONCLUSION

La modélisation a permis de bien identifier les formes aux indices de Miller les plus simples qui correspondent aux données principales du cristal.

Pour les données secondaires concernant les faces aux dimensions réduites et les indices de Miller élevés, il faut admettre que ce procédé utilisé seul ne permet d'obtenir que des résultats approchés.

Malgré cela, le résultat global obtenu est très acceptable pour la compréhension de la géométrie du cristal.

BIBLIOGRAPHIE

OFFERMANN E. (2004), Kristalle und ihre Formen, Band 1 : Theoretische Kristallmorphologie, Band 2 : Praktische Kristallmorphologie, KristalloGraphik Verlag.

ROTH P. (1996), Apprentissage ludique de la cristallographie, Le Cahier des Micromonteurs 4-1996, pp. 22 à 27.

ROTH P. (1997), La modélisation de la morphologie des cristaux, Le Cahier des Micromonteurs 1-1997, pp. 5 à 8.

http://www.micromineral.org/Placer