

## 5- Axes cristallographiques et indices de Miller

### 5.1. Les axes cristallographiques

Pour des raisons pratiques, des axes cristallographiques sont toujours attribués à un cristal. Ces axes sont indispensables pour nommer les faces d'un cristal. En général, les axes cristallographiques sont choisis de façon à correspondre aux critères suivants :

1. Il y a trois axes cristallographiques.
2. Ils sont mutuellement perpendiculaires, si possible.
3. Ils coïncident avec les axes de symétrie du cristal. Si le cristal n'a pas d'axe de symétrie, les axes cristallographiques sont choisis perpendiculaires aux plans de symétrie.
4. Dans les cristaux qui n'ont pas suffisamment d'axes de symétrie et de plans de symétrie, les axes cristallographiques sont choisis de façon à correspondre aux lignes d'intersection des faces de plus grande surface (ou de façon à correspondre aux lignes d'intersection des prolongements des faces de plus grande surface).

#### Remarque :

$\alpha$  : angle entre l'axe cristallographique b et l'axe cristallographique c.  
 $\beta$  : angle entre l'axe cristallographique a et l'axe cristallographique c.  
 $\gamma$  : angle entre l'axe cristallographique a et l'axe cristallographique b.

Une des implications importantes du chapitre 4 et de ce qui précède est que les axes cristallographiques a, b et c sont parallèles aux arêtes a, b et c de la maille simple (sauf pour les cristaux du système rhomboédrique).

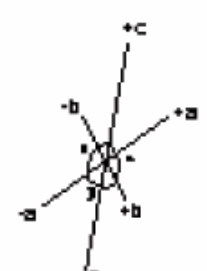
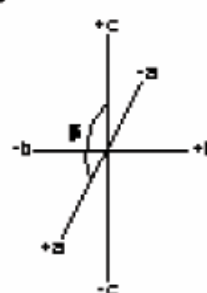
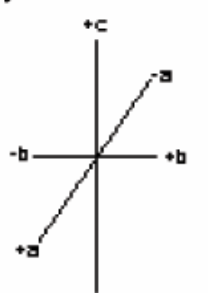
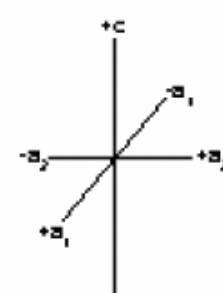
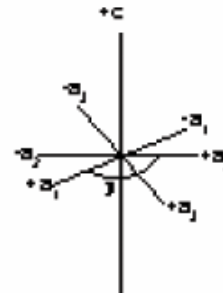
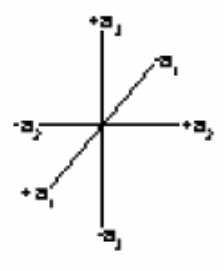
#### Relation entre les axes cristallographiques et les éléments de symétrie dans les systèmes cristallins

Nous allons voir dans ce paragraphe, comment on définit les axes cristallographiques en relation avec les éléments de symétrie de chaque système cristallin.

- **Triclinique** : ce système ne possède aucun élément de symétrie, les axes cristallographiques a, b et c sont choisis de façon à être parallèle aux intersections des plus grandes faces du cristal.
- **Monoclinique** : dans le système monoclinique, l'axe cristallographique b correspond à l'axe de symétrie d'ordre 2. Dans le cas où il n'y a qu'un plan de symétrie, l'axe b lui est perpendiculaire. Les axes cristallographiques a et c sont dans le plan de symétrie et coïncident avec les directions d'intersection des faces du cristal.
- **Orthorhombique** : dans ce système, le plus grand axe coïncide avec l'axe b, l'axe intermédiaire est l'axe a tandis que le petit axe est c. Dans l'ancien système, l'axe c coïncidait avec le plus grand axe, l'axe intermédiaire étant l'axe b et le petit axe

correspondait à l'axe a. Les axes cristallographiques des cristaux orthorhombiques sont inclus dans les plans miroirs et coïncident avec les axes de symétrie d'ordre 2.

- **Quadratique** : l'axe c coïncide avec l'axe de symétrie d'ordre 4 ou avec l'axe de symétrie inverse d'ordre 4. Les deux autres axes cristallographiques a et b sont perpendiculaires entre eux et sont situés dans un plan perpendiculaire à l'axe c.
- **Rhomboédrique** : l'axe cristallographique c coïncide avec l'axe de symétrie d'ordre 3 ou avec l'axe de symétrie inverse d'ordre 3. Les axes cristallographiques a et b sont parallèles aux axes de symétrie d'ordre 2.
- **Hexagonal** : l'axe cristallographique c coïncide avec l'axe de symétrie d'ordre 6 ou avec l'axe de symétrie inverse d'ordre 6. Les axes cristallographiques a et b sont parallèles aux axes de symétrie d'ordre 2.
- **Cubique** : les axes a d'égales longueurs coïncident avec les 3 axes de symétrie d'ordre 4 ou de symétrie inverse d'ordre 4. Dans le cas où ces derniers n'existent pas, les axes a coïncident avec les 3 axes de symétrie d'ordre 2.

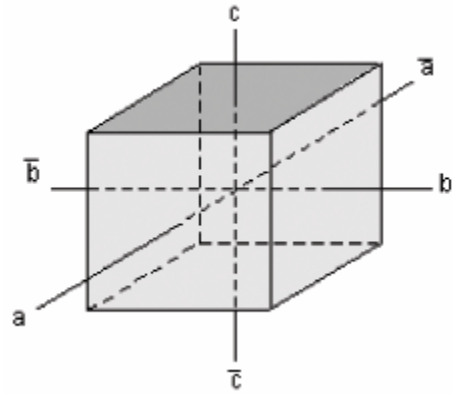
<p style="text-align: center;"><b>Système triclinique</b></p>  <p style="text-align: center;"><math>a \neq b \neq c \quad \alpha \neq \beta \neq \gamma</math></p>	<p style="text-align: center;"><b>Système monoclinique</b></p>  <p style="text-align: center;"><math>a \neq b \neq c \quad \alpha = \gamma = 90^\circ, \beta &gt; 90^\circ</math></p>	<p style="text-align: center;"><b>Système orthorhombique</b></p>  <p style="text-align: center;"><math>a \neq b \neq c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ</math></p>
<p style="text-align: center;"><b>Système quadratique</b></p>  <p style="text-align: center;"><math>a_1 = a_2 \neq c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ</math></p>	<p style="text-align: center;"><b>Système hexagonal</b></p>  <p style="text-align: center;"><math>a_1 = a_2 \neq a_3 \neq c \quad \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ</math></p>	<p style="text-align: center;"><b>Système cubique</b></p>  <p style="text-align: center;"><math>a_1 = a_2 = a_3 \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ</math></p>

## 5.2. Les paramètres de Weiss

Les faces cristallines peuvent être définies par leurs intersections avec les axes cristallographiques. Pour les cristaux autres que ceux du système hexagonal (et rhomboédrique), on distingue trois cas :

1. Intersection de la face cristalline avec un seul des axes cristallographiques.

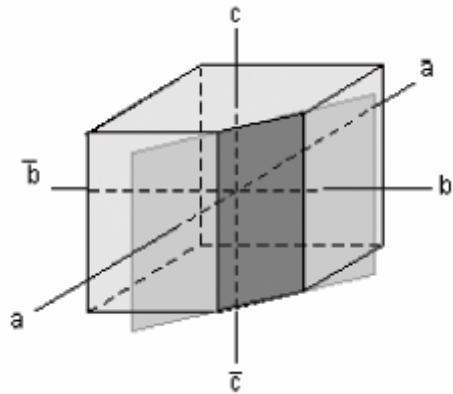
Dans l'exemple de la figure à droite, la face supérieure du cristal coupe l'axe cristallographique  $c$ , mais ne coupe pas les axes cristallographiques  $a$  et  $b$ . Si nous considérons que l'intersection de cette face avec l'axe  $c$  se fait à une distance unité, les points d'intersection de cette face avec les axes, appelés paramètres de Weiss ou paramètres de la face sont :  $\infty a$ ,  $\infty b$ ,  $1c$



2. Intersection d'une face cristalline avec deux axes cristallographiques.

Dans l'exemple montré ici, la face cristalline en noir, coupe les axes  $a$  et  $b$ , mais pas l'axe  $c$ . Si nous supposons que l'intersection de la face avec les axes  $a$  et  $b$  se fait à une distance unité, les paramètres de cette face seront :

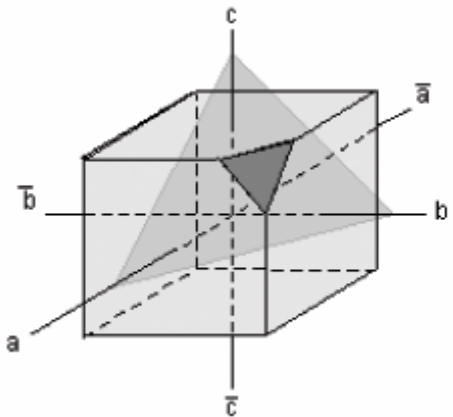
**$1a$ ,  $1b$ ,  $\infty c$**



3. Intersection d'une face cristalline avec les trois axes cristallographiques.

Dans cet exemple, la face triangulaire en noir coupe les trois axes cristallographiques en une distance que nous supposerons comme unité. Alors les paramètres de cette face sont :

**$1a$ ,  $1b$ ,  $1c$**

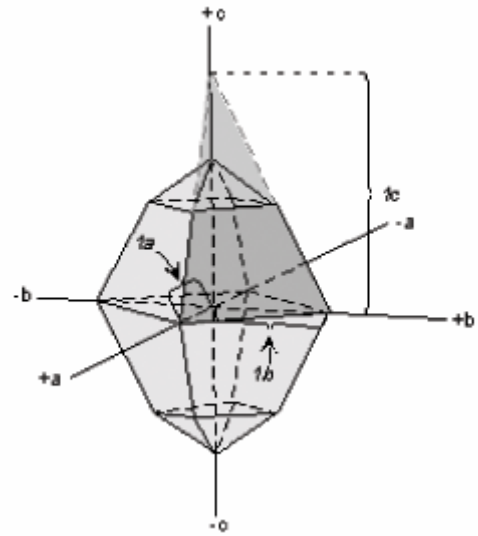


Deux points importants doivent être indiqués concernant les paramètres de Weiss :

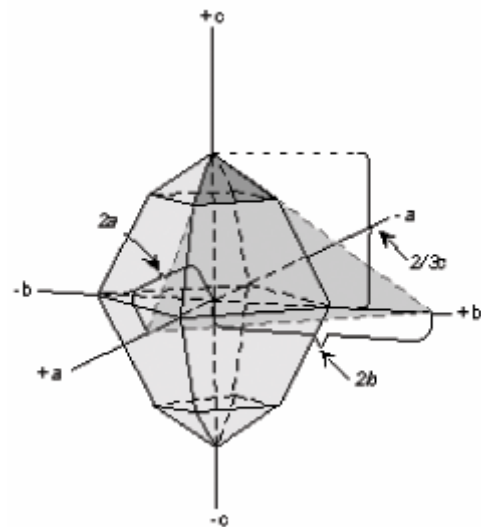
- les paramètres sont des valeurs relatives ;
- puisqu'elles sont relatives, une face parallèle à une autre possède les mêmes paramètres de Weiss.

Puisque les dimensions de la maille ne sont généralement pas connues, il est difficile de savoir quel nombre donner à l'intersection d'une face avec un axe, à moins qu'on choisisse l'intersection d'une face égale à l'unité. Par convention, on donne à la plus grande face qui coupe les trois axes cristallographiques les paramètres :  $1a$ ,  $1b$  et  $1c$ . Cette face est dite *face unité*.

Par exemple, dans le cristal orthorhombique montré ici, la face en gris foncé est la plus grande face qui coupe les trois axes cristallographiques. C'est la face unité, et donc ses paramètres sont  $1a$ ,  $1b$  et  $1c$ .



Une fois la face unité définie, les paramètres de la petite face peuvent être déterminés. Ces paramètres sont  $2a$ ,  $2b$  et  $2/3c$ . Notons que nous pouvons diviser ces paramètres par le facteur commun 2. Il résulte que le déplacement d'une face parallèle à elle-même ne change pas les valeurs relatives des paramètres.



En spécifiant les paramètres d'une face cristalline, nous avons là un moyen d'identifier chaque face du cristal. Mais cette notation est gênante, les cristallographes ont développé une autre façon d'identifier les faces cristallines. Cette notation conventionnelle est appelée indices de Miller et fera l'objet de notre prochain paragraphe.

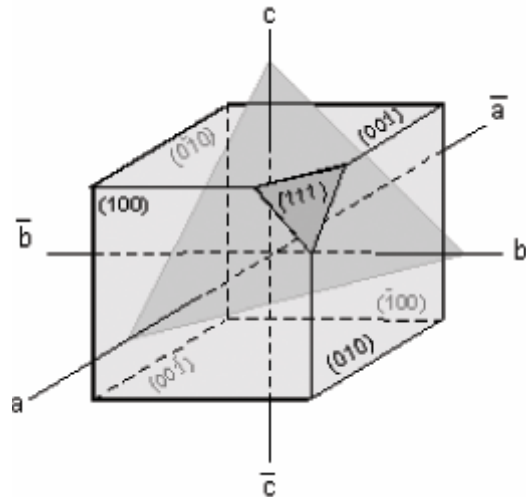
### 5.3. Les indices de Miller

Les indices de Miller d'une face cristalline sont déterminés de la manière suivante :

- on doit d'abord déterminer les paramètres ;
- il faut ensuite prendre l'inverse des paramètres ;
- et enfin réduire les trois fractions au plus petit dénominateur commun;

Par exemple, si les paramètres d'une face sont  $1a$ ,  $1b$  et  $\infty c$ , l'inversion de ces paramètres nous donne :  $1/1$ ,  $1/1$  et  $1/\infty$  ce qui équivaut à  $1, 1, 0$ . Les indices de Miller s'écrivent entre parenthèses et sans virgule :  $(110)$

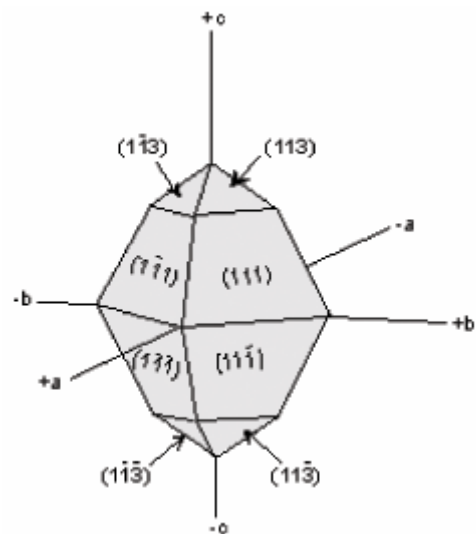
Comme exemple supplémentaire, prenons le cas du cristal de la figure à droite. Toutes les faces de ce cristal sont relativement simples. La face notée (111) qui coupe les trois axes cristallographiques à 1 unité de longueur possède les paramètres 1a, 1b et 1c. En inversant ces paramètres on obtient 1/1, 1/1, 1/1 qui nous donne les indices de Miller (111).



La face carrée qui coupe l'axe positif a possède les paramètres 1a, ∞b, ∞c. L'inversion de ces paramètres donne 1/1, 1/∞, 1/∞ et les indices de Miller de la face seront (100).

La face du côté opposé du cristal qui coupe l'axe négatif a possède les paramètres -1a, ∞b, ∞c. Donc ses indices de Miller sont (1̄00). Notons que le point d'intersection avec l'axe négatif est symbolisé par une barre au dessus du chiffre. On lit « moins un, zéro, zéro ». Donc, les 4 autres faces visibles du cristal possèdent les indices de Miller (001), (00̄1), (010) et (01̄0).

Examinons maintenant quelques exemples plus compliqués. La figure ci-contre représente le même cristal orthorhombique que nous avons vu dans le paragraphe précédent. Rappelons que les paramètres de la petite face triangulaire près du sommet qui coupe les trois axes cristallographiques sont 1a, 1b et 1/3c. L'inversion de ces paramètres donne 1/1, 1/1 et 3/1. Les indices de Miller de cette face sont donc (113).



De la même façon, les indices de Miller de la petite face triangulaire qui coupe l'axe positif a et l'axe négatif b sont (11̄3), ceux de la face similaire qui coupe les axes positifs a et b, et l'axe négatif c sont (11̄3̄).

Notez encore une fois, que le déplacement d'une face parallèle à elle-même ne change ni ses paramètres ni ses indices de Miller.

Pour faire référence à une face qui coupe les trois axes cristallographiques et dont les paramètres ne sont pas connus, nous utilisons la notation (hkl). Pour une face qui coupe les axes cristallographiques b et c la notation est (0kl), pour celle qui coupe les faces a et c et qui est parallèle à l'axe b la notation devient (h0l), tandis que la face qui coupe les axes a et b mais qui est parallèle à l'axe c, on utilise la notation (hk0).

Les indices de Miller s'appliquent bien pour les cristaux des systèmes triclinique, monoclinique, orthorhombique, quadratique et cubique, mais pour le système hexagonal (et rhomboédrique), il est nécessaire d'effectuer quelques modifications à ces notations.

**Remarque :** les indices de Miller sont mis entre parenthèse avec la virgule dans le cas ou un indice comprend deux ou plusieurs chiffres. Exemple : (1,14,3).

#### 5.4. Les indices de Miller-Bravais

Étant donné que les systèmes hexagonal et rhomboédrique possèdent trois axes « a » perpendiculaires à l'axe c, les paramètres d'une face ainsi que ses indices de Miller doivent être modifiés. Les paramètres modifiés et les indices de Miller doivent refléter l'existence d'un axe supplémentaire. Cette notation modifiée est connue sous le nom d'indices de Miller-Bravais, avec la notation général (hkil).

Pour voir comme on procède, examinons la face en noir du cristal hexagonal de la figure ci-contre. Cette face coupe l'axe positif  $a_1$  à l'unité, l'axe négatif  $a_3$  à l'unité, mais ne coupe pas les axes  $a_2$  et c. Cette face possède donc les paramètres suivants :

$$1a_1, \infty a_2, -1a_3, \infty c$$

L'inversion et la suppression des fractions nous donne les indices de Miller-Bravais de cette face :

$$(10\bar{1}0)$$

Une règle importante à se souvenir lors de l'utilisation de cette notation dans le système hexagonal, est que quelque soit les indices déterminés pour h, k et i :

$$h + k + i = 0$$

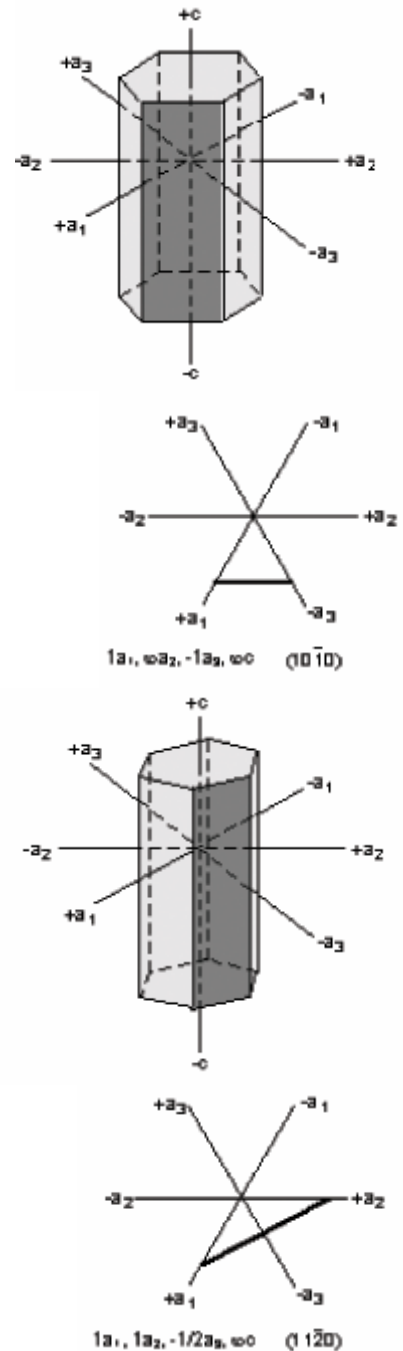
Pour le même cristal, mais cette fois avec une face qui coupe les trois axes cristallographiques nous trouverons pour la face en noir de la figure ci-contre les paramètres :  $1a_1, 1a_2, -1/2a_3, \infty c$ . L'inversion de ces paramètres donne :

$$1/1, 1/1, -2/1, 1/\infty$$

Les indices de Miller-Bravais de la face sont donc :

$$(11\bar{2}0)$$

Remarquez que la règle  $h + k + i = 0$  s'applique dans cet exemple.



## 5.5. Loi de Haüy

Les longueurs interceptées sur les axes de références par une face sont proportionnelles à des nombres entiers simples.

Ce qui revient à dire que les coordonnées  $(h\ k\ l)$  de toutes les faces d'un cristal sont des nombres entiers, premiers entre eux et petits. Cette loi, d'abord formulée par l'abbé René Just Haüy (1743-1826), est parfois appelée loi des indices rationnels ou loi des caractéristiques entières. Les faces d'un cristal seront donc représentées par des indices de Miller qui seront des nombres entiers.