

De Miller-indices van kristalvlakken

Drs. E.A.J. Burke
 Instituut voor Aardwetenschappen
 Vrije Universiteit, Amsterdam.

Inleiding

In bijna alle publicaties over mineralen komt men bij de beschrijving van kristallen vreemd aandoende combinaties van tussen haakjes geplaatste cijfers tegen, bv. (210), (111), (010). Deze getallen worden gebruikt om de vlakken van een kristal op een eenvoudige en trefzekere wijze aan te duiden. Net zoals iedere positie op de wereldbol feilloos weergegeven kan worden met lengte- en breedtegraden kan de plaats van ieder vlak aan een kristal met een getallencombinatie aangeduid worden. De methode die daarvoor nu algemeen gebruikt wordt is al in 1839 ontworpen door de Engelse kristallograaf W.H. Miller. Naar hem worden deze getallencombinaties **Miller-indices** genoemd. Het is de bedoeling van dit artikel om de Miller-indices begrijpelijk te maken zodat het mogelijk wordt om vlakken met bekende indices aan een kristal terug te kunnen vinden. Als inleiding kan het nuttig zijn om het artikel van Drs. G. van Hierden, vooral het gedeelte over de kristalssystemen, in *Gea*, vol. 8 (1975), pp. 30-33, eerst nog eens door te lezen. Wie wat meer wil lezen over het systeem van de Miller-indices kan het best terecht bij J. Sinkankas, *Mineralogy for Amateurs*, pp. 106-127 (eventueel te bestellen via GEA-Boekenservice).

Kristalssystemen, Eenheidscellen en Assenstelsels

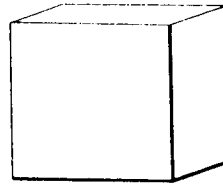
Zoals bekend kunnen alle natuurlijke en synthetische kristallen ingedeeld worden in zes (of zeven) kristalssystemen: kubisch, tetragonaal, hexagonaal, trigonaal, orthorhombisch, monoklien, en triklien. Vele auteurs vatten het hexagonale en het trigonale systeem samen in één enkel hexagonaal systeem omdat zij beide hetzelfde assenstelsel bezitten.

Kristallen zijn opgebouwd uit, of kan men zien als een verzameling eenheidscellen (zie artikel van Prof. Hartman in *Gea*, vol. 9, 1976, pp. 61-62). Ieder van de zes verschillende kristalssystemen heeft een eigen type eenheidscel met karakteristieke verhoudingen tussen de lengtes van de ribben en van de hoeken tussen de ribben. De ribben van de eenheidscellen vertegenwoordigen belangrijke richtingen in kristallen. Als men in kristallen met richtingen wil werken in plaats van met eenheidscellen doet men dat met behulp van de kristallografische assen; deze laat men samenvallen met de richtingen van de ribben van de eenheidscellen. In Fig. 1 staan de eenheidscellen van de diverse kristalssystemen afgebeeld. De dik getekende ribben worden geïsoleerd en daarna verschoven en verlengd tot zij lijnen vormen die elkaar in een gemeenschappelijk punt snijden: het resultaat zijn de assenkruisen, of assenstelsels, die in Fig. 1 rechts van de eenheidscellen getekend staan.

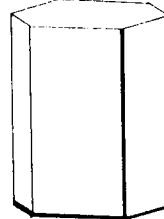
Lengte van de eenheden langs de assen, en hoeken tussen de assen

In Fig. 1 is duidelijk te zien dat de ribben van een eenheidscel gelijk of verschillend in lengte kunnen zijn, en dat de hoeken tussen de ribben verschillende waarden kunnen hebben. Dit laat men ook tot uiting komen in de kristallo-

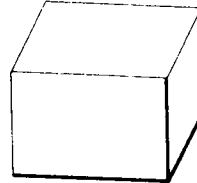
KUBISCH



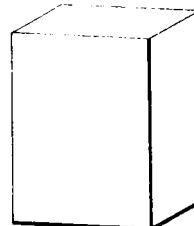
HEXAGONAAL



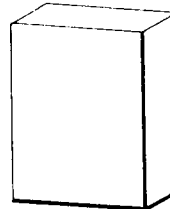
MONOKLIEN



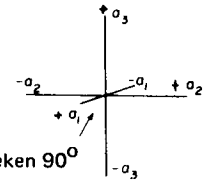
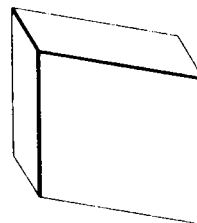
TETRAGONAAL



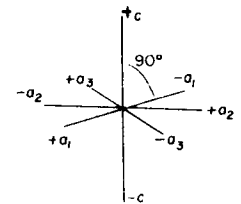
ORTHORHOMBISCH



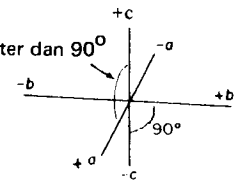
TRIKLIEN



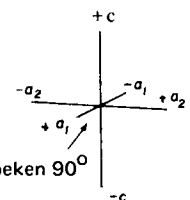
Alle hoeken 90°
 Alle assen gelijk in lengte



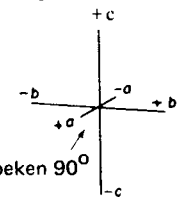
Alleen horizontale assen
 gelijk in lengte



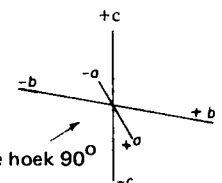
Alle assen verschillend in lengte



Alle hoeken 90°
 Alleen horizontale assen
 gelijk in lengte



Alle hoeken 90°
 Alle assen verschillend in lengte



Geen enkele hoek 90°
 Alle assen verschillend in lengte

Fig. 1
 Eenheidscellen (links) en assenstelsels (rechts)
 van de zes kristalssystemen.

grafische assen. In het kubisch systeem zijn de drie assen gelijk in lengte en staan zij loodrecht op elkaar; alle assen worden met dezelfde letter a aangeduid. Let er op dat a_1, a_2, a_3 in een bepaalde volgorde staan, en dat iedere as ten opzichte van het middelpunt een positieve en een negatieve kant heeft. In het tetragonale systeem zijn de twee horizontale assen a_1 en a_2 gelijk in lengte en is de verticale c -as langer of korter (in Fig. 1 langer) dan de a -assen; alle assen staan loodrecht op elkaar. In het hexagonale systeem worden 4 assen gebruikt: drie daarvan (a_1, a_2 , en a_3) zijn gelijk in lengte en liggen in één horizontaal vlak; de positieve kanten van de a -assen liggen 120° uit elkaar; de verticale c -as, die loodrecht op de a -assen staat, kan weer langer of korter zijn. De eenheidscel van het trigonale systeem (niet afgebeeld in Fig. 1) heeft een zelfde assenstelsel. In het orthorhombisch, monoklien, en triklien systeem zijn de drie assen verschillend in lengte: er worden dan ook drie verschillende letters gebruikt voor de assen, a, b , en c . De c -as wordt altijd verticaal geplaatst. In het orthorhombisch systeem staan de drie assen loodrecht op elkaar; in het monokliene systeem helt de positieve kant van de a -as naar de toeschouwer toe omdat de hoek tussen de $+c$ -as en de $+a$ -as groter dan 90° is; in het trikliene systeem is geen van de hoeken tussen de assen gelijk aan 90° .

Let er op dat de uitdrukking „de drie assen van het kubische systeem zijn even lang” in feite betekent dat de ribben van de kubische eenheidscel even lang zijn!

Verband tussen assen en vlakken

De basis-bouwsteen van ieder kristal, de eenheidscel, bepaalt de uiteindelijke vorm van het kristal (Fig. 2-A). Omdat de eenheidscel in werkelijkheid zeer klein van afmetingen is (slechts enkele Ångström!) kan men de uitstekende hoeken en kanten van de eenheidscellen in Fig. 2-A niet zien: we zien gladde platte vlakken (Fig. 2-B). De wijze van stapelen van de eenheidscellen bepaalt dus de ligging van de vlakken aan een kristal.

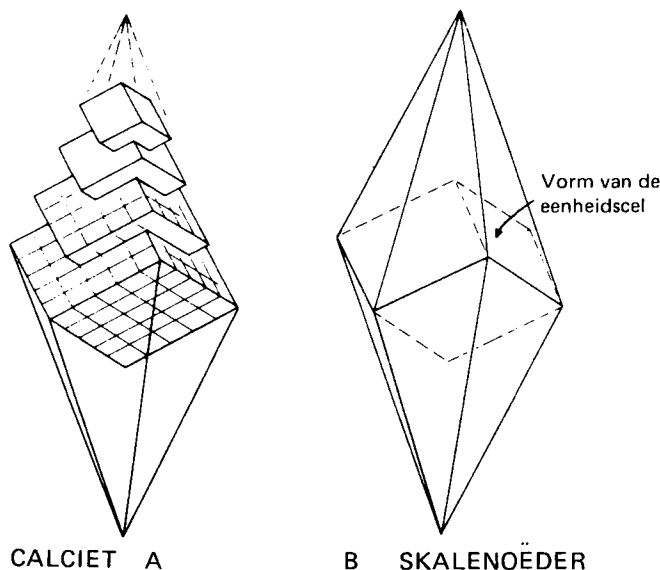


Fig. 2
Een voorbeeld van stapelen van eenheidscellen (A) met als resultaat kristalvlakken (B).

Hoe de kristalvlakken in verband staan met het stapelen van de eenheidscellen en met de kristallografische assen wordt uitgelegd in Fig. 3. Daarin worden in twee dimen-

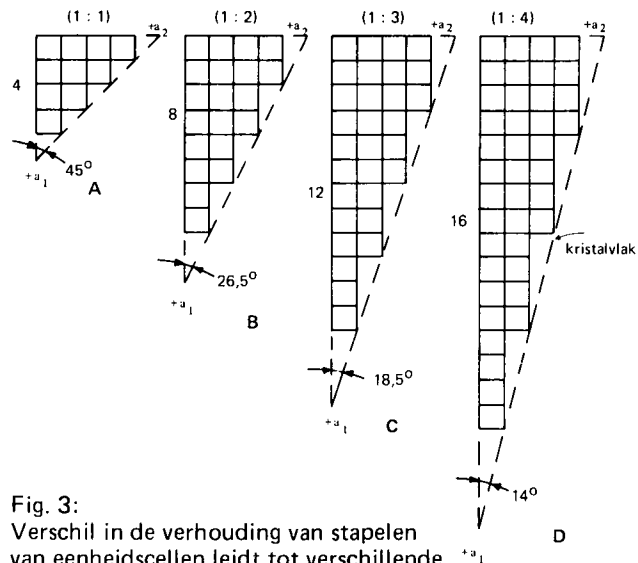


Fig. 3:
Verschil in de verhouding van stapelen van eenheidscellen leidt tot verschillende kristalvlakken.

sies vierkante kubische eenheidscellen op verschillende manieren (A, B, C, D) gestapeld. In het kubische assenstelsel (vgl. Fig. 1) kijken we van boven af langs de $+a_3$ -as naar beneden neer op het horizontale vlak waarin de $+a_1$ - en de $+a_2$ -assen liggen. In Fig. 3 zien we dan een aantal dwarsdoorsneden door kristallen; in de vier gevallen zijn dezelfde eenheidscellen gestapeld, maar door de verschillende verhouding van stapeling langs de assen ontstaan er verschillende vlakken, die als streepjeslijnen staan getekend.

In Fig. 3-A zijn 4 cellen gestapeld langs de ene as ($+a_1$) en 4 cellen langs de andere as ($+a_2$). Omdat er langs iedere as 4 cellen gestapeld zijn is de verhouding 4:4, of vereenvoudigd, 1:1. Als wij, zoals Haüy het als eerste deed, een streepjeslijn tekenen langs de punten van de uitstekende cellen zien wij dat de lijn een kristalvlak kan voorstellen; dit vlak maakt een bepaalde hoek (45° in Fig. 3-A) met de kristallografische assen.

In Fig. 3-B wordt het aantal cellen langs één as ($+a_1$) verdubbeld: de verhouding van de cellen langs de twee assen is nu 4:8, of 1:2. In Fig. 3-C en 3-D wordt de verhouding respectievelijk 1:3 en 1:4. Men kan tevens zien hoe de hoeken die de vlakken maken met de $+a_1$ - en $+a_2$ -assen veranderen als de verhouding in de stapeling van de cellen langs de assen gewijzigd wordt. De hoeken die een kristalvlak maakt met de assen zijn duidelijk afhankelijk van het aantal eenheidscellen dat langs de verschillende assen gestapeld is, of beter gezegd, van de verhouding tussen het aantal cellen.

Het benoemen van kristalvlakken: de Weissparameters

In kristallen zijn de eenheidscellen niet in twee, maar in drie dimensies gestapeld langs de drie (of vier) kristallografische assen. Ieder kristalvlak ontstaat dan door een bepaalde verhouding van stapelen van eenheidscellen langs de drie (of vier) assen. Het benoemen van kristalvlakken met cijfers is direct afgeleid van deze stapelingsverhoudingen.

Voordat Miller in 1839 zijn systeem invoerde werd er sinds 1818 een ander systeem gebruikt, dat van de Duitse kristallograaf C.S. Weiss. Om het systeem van Miller te kunnen begrijpen moet eerst dat van Weiss uitgelegd worden.

In Fig. 4 staat een orthorhombisch assenkruis afgebeeld waarop langs ieder van de assen een aantal lengtes van de ribben van een eenheidscel is aangegeven.

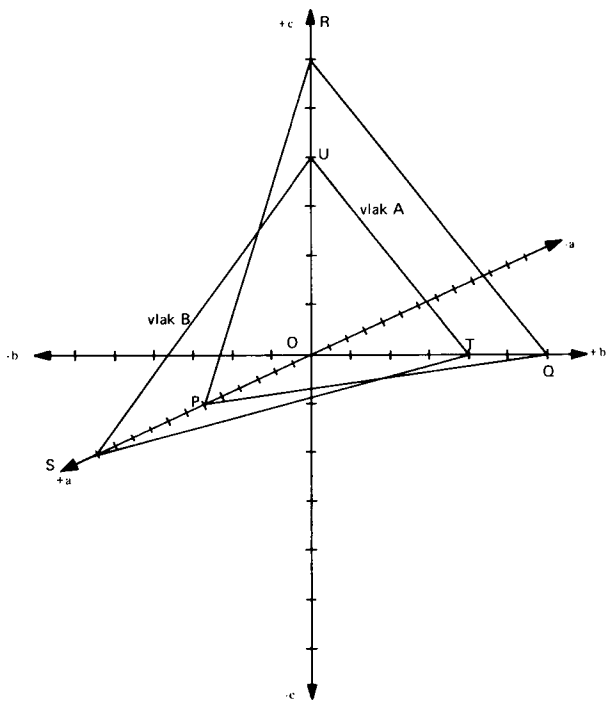


Fig.4:
Orthorhombisch assenkruis met de vlakken A (PQR)
en B (STU)

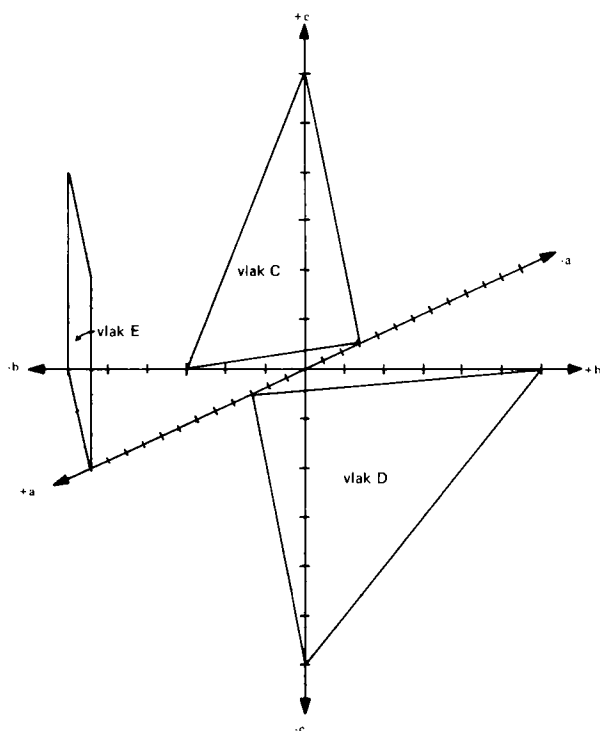


Fig.5:
Orthorhombisch assenkruis
met de vlakken C,D en E

Het kristalvlak A in Fig. 4 (PQR) snijdt van de $+a$ -as, van de $+b$ -as, en van de $+c$ -as ieder 6 eenheden vanaf het middelpunt O af, of anders gezegd, langs ieder van de assen zijn 6 eenheidscellen gestapeld om vlak A te vormen. In Weiss-parameters (zoals de getallen in dat systeem genoemd werden) wordt het vlak A daarom $6a:6b:6c$ genoemd, of vereenvoudigd door er de gemeenschappelijke factor uit te halen, $1a:1b:1c$. Voluit kan men zeggen: het vlak A snijdt van iedere as een gelijk aantal eenheden af. Daarbij is het absolute aantal eenheden eigenlijk niet belangrijk, wel de onderlingen verhouding: het vlak A zal immers dezelfde hoek met de assen maken, ongeacht of er langs ieder van de assen nu 6, 10, of 1000 eenheidscellen gestapeld zijn. Zoals in het twee-dimensionale voorbeeld (Fig.3) gaat het n.l. om de relatieve verhoudingen. Het vlak B in Fig. 4 (STU) snijdt van de $+a$ -, $+b$ -, en $+c$ -assen respectievelijk 12, 4, en 4 eenheden af; de Weiss-parameters van vlak B zijn dan $12a:4b:4c$, of vereenvoudigd na deling door de gemeenschappelijke factor 4, $3a:1b:1c$; dit betekent dat het vlak B driemaal zoveel eenheden afsnijdt van de $+a$ -as als het van de $+b$ - en $+c$ -assen afsnijdt.

Snijdt een kristalvlak een as aan zijn negatieve kant, dan wordt er bij de betreffende parameter een min-teken geplaatst. Vlak C in Fig. 5 snijdt 6 eenheden af van de $+c$ -as, en drie eenheden van zowel de $-a$ -as als van de $-b$ -as: de Weiss-parameters worden dus $-3a:-3b:6c$, of vereenvoudigd, $-1a:-1b:2c$. Vlak D in Fig. 5 wordt op dezelfde manier $3a:6b:-6c$, of vereenvoudigd, $1a:2b:-2c$.

Als een vlak evenwijdig loopt aan een as zoals bv. vlak E in Fig. 5, dan wordt in de parameters het oneindig-teken ∞ bij de betreffende as geplaatst omdat het vlak deze as niet snijdt; de Weiss-parameters van vlak E zijn dan $12a:-6b:\infty c$, of vereenvoudigd, $2a:-1b:\infty c$.

Het benoemen van kristalvlakken: de Miller-indices

In 1839 voerde W.H. Miller een systeem van benoemen van kristalvlakken in dat veel voordelen had (althans voor kristallografen) t.o.v. de Weiss-parameters en dat sindsdien bij voorkeur gebruikt wordt. De Miller-indices, zoals zij genoemd worden, zijn eenvoudigweg de reciproken (= de omgekeerde getallen) van de Weiss-parameters, waarvan verder de breuken weggewerkt worden en tevens de letters van de assen weggelaten worden. Een paar voorbeelden van omrekening: vlak B in Fig. 4 heeft de Weiss-parameters $3a:1b:1c$; de reciproke getallen zijn daarvan in volgorde: $1/3, 1/1, 1/1$; ieder van deze getallen moeten we nu met drie vermenigvuldigen om de breuken weg te werken: $1/3 \times 3, 1/1 \times 3, 1/1 \times 3$, dit geeft als resultaat 1, 3, 3. Miller plaatste deze drie getallen tussen haakjes, liet de komma's weg, en ook de letters van de assen, zodat het resultaat uiteindelijk (133) werd, de Miller-indices van vlak B.

De Weiss-parameters $1a:1b:1c$ van vlak A in Fig. 4 krijgen na omrekening vanzelfsprekend de vorm (111). Vlak C in Fig. 5, $-1a:-1b:2c$ wordt aldus omgerekend: $-1/1, -1/1, 1/2$; vermenigvuldigen met twee geeft $-2, -2, 1$; de Miller-indices van vlak C zijn dan $(\bar{2}\bar{2}1)$ omdat de min-tekenen in Miller-indices boven het cijfer geplaatst worden in plaats van er voor. Vlak D in Fig. 5 wordt na omrekening (211). Het reciproke getal van oneindig, dus $1/\infty$, is 0 zodat vlak E in Fig. 5 de Miller-indices (120) krijgt.

De Miller-indices (110) worden uitgesproken als „een, een, nul“, en niet als „honderdtien“, en de indices $(\bar{2}\bar{2}1)$ als „min twee, min twee, een“.

In Fig. 6 kan men een vergelijking zien tussen Weiss-parameters en Miller-indices van de vlakken van een zelfde zwavel-kristal; de indices van het vlak (001) betekenen dat dit vlak evenwijdig loopt aan zowel de a - als de b -as.

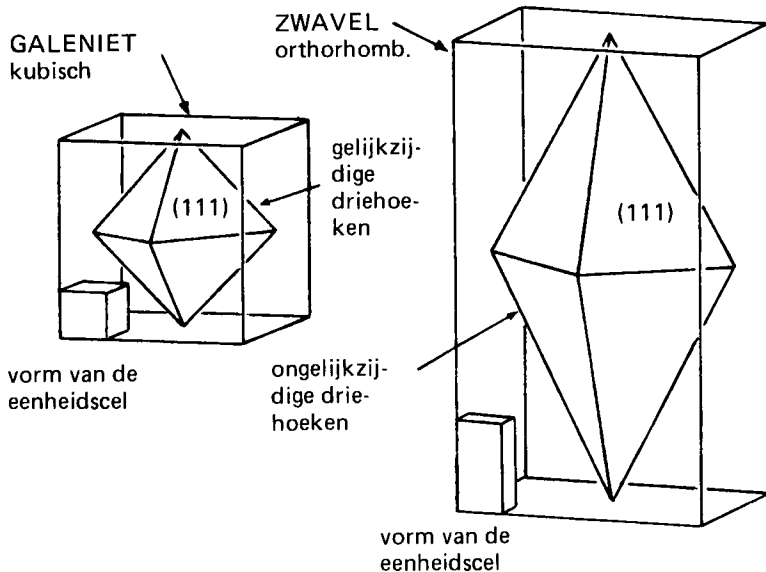


Fig. 8
Identieke Miller-indices in verschillende kristalssystemen

De figuren 2,3,4,5,8,9 en de kristalmodellen zijn getekend door A.Grijpink

de drie zijden verschillend van lengte zijn. Door de gelijke verhoudingen krijgen ze dezelfde indices.

Het terugvinden van vlakken met bekende Miller-indices

Als men zich een voorstelling wil maken hoe een vlak met bekende Miller-indices ligt ten opzichte van de kristallografische assen van een kristal kan men het best eerst de Miller-indices terugrekenen naar de overeenkomstige Weiss-parameters: men krijgt dan immers de verhouding tussen het aantal eenheidscellen die voor het verkrijgen van dit vlak langs ieder van de assen gestapeld zijn. Een voorbeeld: is in Fig. 9-A het vlak met de indices (110) nu vlak \underline{a} , vlak \underline{d} , of vlak \underline{o} van het galeniet-kristal? De reciproken zijn in dit geval eenvoudig: $1a_1 : 1a_2 : \infty a_3$ (het reciproke getal van nul is ∞); het vlak snijdt dus gelijke stukken af van de $+a_1$ -as en de $+a_2$ -as, en loopt evenwijdig aan de a_3 -as. Hoe het vlak ligt kan men zich voorstellen met behulp van het kubische assenkruis (galeniet behoort tot het kubische systeem) in Fig. 9-B.

Het vlak (110) is dus het vlak \underline{d} in Fig. 9-A; vlak \underline{o} heeft als indices (111), en vlak \underline{a} is (100). Een ander voorbeeld: van het eveneens kubische mineraal pyriet wordt vaak het vlak (210) beschreven. Is dit het vlak \underline{a} , \underline{e} , \underline{s} , of \underline{o} in

Fig. 9
Kristallen van galeniet (A) en pyriet (C) met het kubische assenkruis (B)

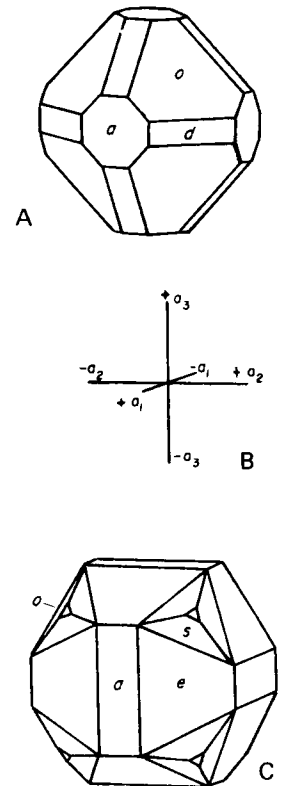


Fig. 9-C? De reciproken van (210) zijn respectievelijk $1/2$, $1/1$, $1/0$; vermenigvuldigen met 2 om de breuken weg te werken en het bijvoegen van de letters van de assen in de juiste volgorde geeft $1a_1 : 2a_2 : \infty a_3$. Het vlak loopt volgens deze Weiss-parameters dus evenwijdig aan de a_3 -as, en snijdt tweemaal zoveel eenheden af van de $+a_2$ -as als van de $+a_1$ -as. Als men zich dat voorstelt aan de hand van het assenkruis in Fig. 9-B moet men tot de conclusie komen dat het vlak met de Miller-indices (210) overeenkomt met het vlak \underline{e} in Fig. 9-C; vlak \underline{a} heeft als Miller-indices (100), \underline{o} is (111), en \underline{s} is (321).

Men moet er dus altijd aan blijven denken dat de getallen in de Miller-indices reciproken zijn van het relatieve aantal eenheden dat een vlak van de assen afsnijdt: in het voorbeeld betekent (210) dat dit vlak van de $+a_1$ -as het halve aantal eenheden afsnijdt van dat van de $+a_2$ -as! In ditzelfde Gea-nummer zijn een aantal knip-, vouw- en plak-modellen van kristallen opgenomen. Op ieder vlak van deze kristallen zijn de Miller-indices reeds vermeld. Met behulp van het assenkruis van de betreffende mineralen kan men een goed inzicht krijgen in het systeem van de Miller-indices.

Bouwplaten voor kristalmodellen

EEN HULPMIDDEL BIJ DE RUIMTELIJKE VOORSTELLING VAN KRISTALLEN

Al is papier nog zo geduldig, waar het erom gaat om ruimtelijke beelden aanschouwelijk te maken schiet het toch tekort. De derde dimensie, daar gaat het immers om. Velen, die zich de vorm van kristallen willen oproepen met behulp van een afbeelding, krijgen al gauw last van „ruimtegebrek“.

In de winter van 1976-'77 werd door de schrijver van het artikel over de Miller-indices in dit nummer, drs. E.A.J. Burke, in GEA-verband een cursus Kristalmorfologie gehouden. Elke avond weer verschenen er laden vol kristalmodellen, in hout of plastic uitgevoerd, ten tonele. Deze modellen waren onmisbaar om de symmetrielementen van de kristallen te leren herkennen en om de kristalvormen „aan den lijve“ te ervaren.