

RELACIÓN ENTRE ÍNDICES DE MILLER (hkl), DENSIDAD PLANAR ρ_{hkl}^{2D} Y DISTANCIA INTERPLANAR d_{hkl}

Para los cristales cúbicos, la distancia interplanar d_{hkl} de planos de índices (hkl) vale:

$$d_{hkl} = a / \sqrt{(h^2 + k^2 + l^2)}$$

donde a es el parámetro de la celda cúbica. De aquí se deduce, para cristales cúbicos:

$$(hkl) \downarrow \leftrightarrow d_{hkl} \uparrow$$

Aceptemos, sin demostración, que esta última relación se cumple para cualquier tipo de celdas (incluyendo las no cúbicas).

Por otra parte, se demostrará más adelante que, en un cristal cualquiera dado, los planos de mayor distancia interplanar, d_{hkl} , son aquellos de mayor densidad planar, ρ_{hkl}^{2D} .

$$d_{hkl} \uparrow \leftrightarrow \rho_{hkl}^{2D} \uparrow$$

De esta manera, por transitividad, se llega a la siguiente importante conclusión global:

$$(hkl) \downarrow \leftrightarrow d_{hkl} \uparrow \leftrightarrow \rho_{hkl}^{2D} \uparrow$$

Una consecuencia importante es que cuando se tiene un listado ordenado de menor a mayor de los índices de Miller de los planos de un cristal, entonces los planos también están ordenados por distancias interplanares decrecientes y por densidades planares decrecientes. Así, por ejemplo, sabemos que en un cristal CCC, los planos (111) son los de menores índices de Miller y también los de mayor densidad. En efecto, tales planos son planos hexagonales compactos. Pues bien, esos planos (111), comparados con cualesquiera otros planos paralelos del cristal CCC (por ejemplo, los (220)), son los que presentan las mayores distancias

interplanares; esto es, particularmente: $d_{111} > d_{220}$.

Relación entre d_{hkl} y ρ_{hkl}^{2D}

Considérese un cristal cualquiera. Se demostrará, para un plano cualquiera del cristal, la relación entre la densidad interplanar y la distancia interplanar (ρ^{2D} versus d_{hkl}). Un cristal cualquiera tiene infinitos tipos de planos cristalinos paralelos, ver Fig. 1. Ese cristal puede ser expresado por un apilamiento regular de cualquiera de esos tipos de planos, ubicando esos planos paralelamente en la posición relativa que corresponda y a la pertinente distancia interplanar. En la Fig. 2 se ilustra la descripción alternativa de un mismo cristal sobre la base de dos distintos tipos de planos. Nótese que la densidad 3D del cristal, ρ^{3D} , es una propiedad del cristal mismo, y no del tipo de planos que se podría estar usando para representar a ese cristal. Así, independientemente del tipo de planos que se usen para describir un cristal dado, se debe llegar al mismo valor de ρ^{3D} .

Obviamente, por definición:

$$\rho^{3D} = [\text{Nro. de átomos en V}] / V,$$

donde V es un volumen de referencia que debe ser representativo del cristal.

La Fig. 3.a corresponde a un cristal 3D, de densidad ρ^{3D} , el cual será descrito sobre la base de unos planos genéricos (hkl), planos a los que corresponde una densidad ρ^{2D} y una distancia interplanar d_{hkl} . La densidad ρ^{3D} se puede calcular considerando un volumen V cualquiera representativo del cristal (a menudo usamos una celda). En este caso, sin perder generalidad, se considerará, el volumen de tres celdas 3D, como volumen de referencia.

Dicho volumen V se puede expresar como el producto del área A de la base del poliedro respectivo por la altura de ese volumen, altura que corresponde a d_{hkl} . Obsérvese que el área A no está contenida en el plano del papel de las figuras citadas. Entonces, reemplazando y reordenando:

$$\begin{aligned}\rho^{3D} &= [\text{Nro. de átomos en } V] / [A \cdot d_{hkl}] \\ &= [\text{Nro. de átomos en } V / A] / [d_{hkl}]\end{aligned}$$

Pero, como lo muestra bien la Fig.3.b, se cumple:

$$[\text{Nro. de átomos en } V / A] = \rho^{2D}$$

Así, queda demostrada la importante relación:

$$\rho^{3D} = \rho_{hkl}^{2D} / d_{hkl}$$

En consecuencia, como ρ^{3D} es una constante del cristal, entonces se tiene:

$$d_{hkl} \uparrow \leftrightarrow \rho_{hkl}^{2D} \uparrow$$

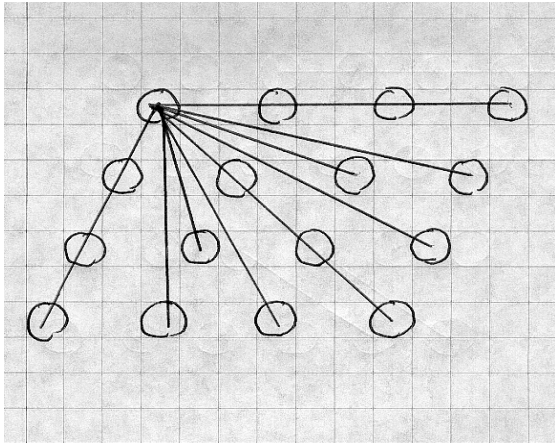


Fig. 1 Algunos tipos de planos cristalinos de un cristal 3D. Suponga que este cristal se prolonga hacia fuera del plano de papel. Todos estos planos están en zona con un mismo eje de zona, el cual es perpendicular al papel y pasa por el centro del átomo que está en la parte superior derecha de la figura.

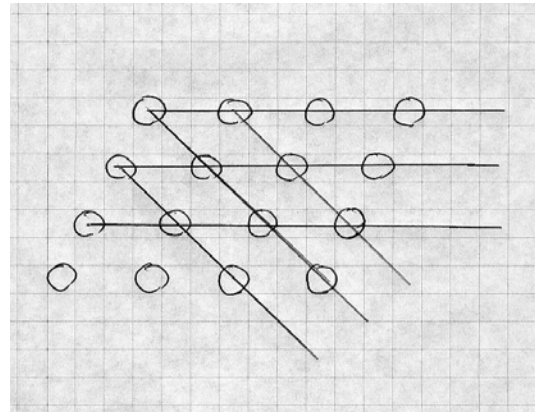


Fig. 2 Un cristal 3D puede ser descrito por el apilamiento de infinitos planos paralelos de un tipo cualquiera. En la figura se ilustran dos posibilidades.

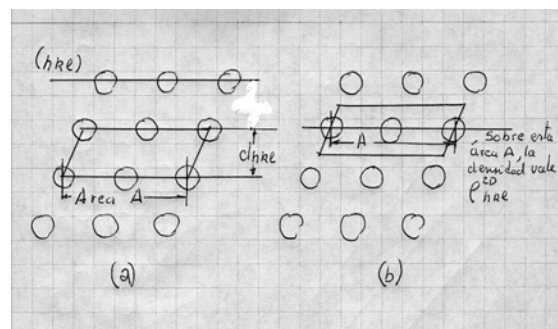


Fig. 3 Cristal 3D descrito por el ordenamiento de planos (hkl) . Ver texto. Se ha definido un volumen de referencia V para el cálculo de densidades. Se cumple $V = \text{Base} \cdot \text{Altura} = A \cdot d_{hkl}$. La base es un área A que sale de papel. En este caso, ese volumen representativo V se ha tomado, sin perder generalidad y para facilitar la comprensión, como un múltiplo entero de volumen de la celda correspondiente.
a) Representación usual del volumen V .
b) Representación desplazada del volumen, también para facilitar la comprensión.