

NOMENCLATURA DE ÍNDICES DE MILLER, para planos y direcciones cristalográficos.

Entendemos por planos y direcciones cristalográficos a planos y direcciones que contienen átomos de un cristal dado. Consideramos que un átomo pertenece a un plano (dirección) cuando el centro de ese átomo está en dicho plano (dirección).

Supongamos que interesa medir la susceptibilidad magnética o el módulo de Young de un monocristal de Cu. Se obtienen diferentes valores de la propiedad según la dirección cristalina en que se haga la medición, por ejemplo, según una arista o una diagonal de la celda. Se dice que un material es anisótropo cuando sus propiedades dependen de la dirección según la cual se hace la medida; claramente los monocristales son anisótropos, en tanto que los materiales amorfos son isótropos. En efecto, en los cristales, al variar la dirección cristalográfica, cambia la distancia entre los átomos alineados, lo cual es un indicador de que hay diferencias en cómo se ha satisfecho el enlace; por tanto, habrá diferencia en el comportamiento de las distintas direcciones. Por otra parte, podríamos estar interesados en la deformación plástica por deslizamiento, como en el caso de un monocristal de Zn traccionado. En tal situación, el deslizamiento se hace según un plano cristalográfico específico y una dirección cristalográfica específica.

De lo expuesto en el párrafo anterior, resulta evidente que necesitamos un procedimiento para designar planos y direcciones cristalográficos. Además, para analizar los diagramas de difracción, con el propósito de determinar las estructuras cristalinas, también se necesita denominar

apropiadamente a planos y direcciones. Así es como a continuación se presenta el procedimiento para determinar los índices de Miller; en tres dimensiones, se trata simplemente de tríos ordenados de números. El procedimiento de Miller es aplicable a todo tipo de celdas, si bien nuestras simples aplicaciones corresponderán preferentemente a cristales cúbicos. Para cristales hexagonales en ocasiones se prefiere otra nomenclatura denominada de índices de Miller-Bravais, a la cual corresponden, en tres dimensiones, cuartetos ordenados; no veremos ese procedimiento.

Como los cristales son regulares, todos los planos paralelos entre sí son idénticos y equidistantes; por ejemplo, todos los planos hexagonales de un cristal HC. Por ello, en el contexto de los índices de Miller todos los planos (direcciones) paralelos(las) reciben una misma denominación. Así frecuentemente, en lugar de precisar cada vez “un conjunto de planos paralelos” diremos “un plano”.

Los índices de Miller de un plano contienen como información la distancia interplanar del conjunto de planos paralelos correspondiente. Para lograr esto, se aplica un procedimiento que no es evidente a primera vista. Aplicar integral y correctamente este procedimiento es fundamental para el análisis de difractogramas. En el caso de los índices de direcciones, el procedimiento es bastante sencillo, pues se trata básicamente de una notación vectorial. Como es evidente, los resultados de la aplicación del procedimiento son fuertemente dependientes del tipo de red analizado; así, por ejemplo, la notación para una arista de celda es diferente en una red C que en una CC.

Cabe señalar que, dado un cristal, podemos determinar la celda convencional y entonces conocer los ejes de referencia convencionales, con los cuales aquí siempre trabajaremos.

En ese sistema de ejes, las distancias se miden en números que son múltiplos de los respectivos parámetros de celda. Así por ejemplo, en un cristal CCC la distancia correspondiente a dos aristas según el eje Z vale 2.

Determinación de índices de Miller de planos.

Sea un cristal dado y un conjunto dado de planos cristalográficos de ese cristal. Para determinar los índices de Miller de esos planos se procede así.

1) Considere un plano de ese conjunto y dese el origen del sistema de referencia. El origen estará centrado en algún átomo.

2) Determine un plano cristalográfico paralelo al anterior que sea el más próximo al origen pero sin pasar por este último. Este plano podría ser el mismo plano original.

(Note que en el origen hay un átomo; por tanto, por ahí pasa un plano cristalográfico del conjunto de interés. En consecuencia, la distancia entre el origen y el plano determinado en 2) es la distancia interplanar)

3) Calcule ordenadamente las intersecciones del plano determinado en 2) con cada uno de los ejes de referencia.

4) Calcule los inversos de los números anteriores y póngalos entre paréntesis redondos. Tales son los índices de Miller de los planos de interés, genéricamente denominados (hkl).

Atendiendo a la simetría de cada cristal, es posible encontrar planos no paralelos que son cristalográficamente equivalentes. Tal es el caso de los

planos correspondientes a las tres caras esencialmente diferentes no paralelas de un cristal C. En ese caso se hace referencia a la familia de planos {100}, que incluye a los planos (100), (010) y (001), una familia de multiplicidad 3 (contiene 3 elementos).

Direcciones cristalinas.

Para las direcciones cristalinas se emplea un sistema de índices que en lo fundamental es simplemente vectorial. Se usan paréntesis cuadrados: [hkl]. Por ejemplo, las direcciones según aristas X de un cristal C se llaman [100], igual para los CC y CCC.

En un cristal, una familia de planos equivalentes se denomina por paréntesis de llave. Por ejemplo, las tres aristas no paralelas de un cubo constituyen la familia <100>, cuyos tres elementos son las direcciones [100], [010] y [001].

Propiedades de índices de Miller en cristales del sistema cúbico.

1. Dado un plano (hkl), los índices de su normal son [hkl]. Esta propiedad no siempre se cumple para cristales no cúbicos.

2. Para un plano cristalográfico {hkl} de un cristal de parámetro de celda a[nm], la respectiva distancia interplanar d_{hkl} vale:

$$d_{hkl}[\text{nm}] = a[\text{nm}] / (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$$

Comentarios:

La Propiedad 1 no siempre se cumple en cristales no cúbicos, por ejemplo, en cristales HC. Considere un cristal HC, determine los índices de Miller: a) de un plano basal y de su normal (se cumple) y b) de un plano de prisma y de su normal (no se cumple).

Para que se cumpla siempre la Propiedad 1 en cristales HC, se ha

desarrollado un sistema de índices de Miller-Bravais, empleando 4 índices. Esto significa utilizar un sistema de referencia de 4 ejes en un espacio 3D; por ello, los tres primeros ejes, contenidos en el plano basal, no son linealmente independientes. El cuarto eje corresponde al eje c, perpendicular al plano basal. En el texto de Smith está la materia de estos índices, pero no es parte de este curso su empleo.

Según la Propiedad 2, si el trío $\{h\ k\ l\}$ es grande, entonces $d_{hkl}[\text{nm}]$ es pequeño. Que $\{h\ k\ l\}$ sea grande corresponde a que $(h^2 + k^2 + l^2)$ sea grande. La ecuación anterior que refleja esta Propiedad 2 no se cumple en cristales no cúbicos; pero, en cristales no cúbicos siempre existe una ecuación, aunque más compleja que la de los cúbicos, cuyo análisis también lleva a concluir: los planos de índices menores son los que presentan las mayores distancias interplanares.

Nótese que si en la ecuación de la Propiedad 2 no se ingresan los valores de $\{h\ k\ l\}$ correctamente calculados, entonces el resultado de la distancia interplanar será erróneo; esto es muy grave al estar resolviendo problemas de difracción. Por ejemplo, para un cristal CCC no es raro que en vez de los índices correctos $\{200\}$ se asignen los índices incorrectos, para el propósito de calcular la distancia interplanar, $\{100\}$. Sin embargo, en ambos casos se obtiene la correcta dirección de la normal. En efecto, las direcciones $[200]$ y $[100]$ son paralelas.