

ÍNDICES DE MILLER DE PLANOS CRISTALINOS. (PARA CUALQUIER TIPO DE CELDA)

Introducción

Estos índices se aplican a todo tipo de cristales, aunque nosotros trabajaremos preferentemente con cristales cúbicos. Los primeros corresponden a un trío de números que se asigna a un conjunto de planos cristalográficos, los cuales son paralelos y equiespaciados.

Tales índices contienen dos tipos de información:

- la normal al plano
- y la distancia interplanar

La aplicación no estricta del procedimiento que se indica a continuación lleva frecuentemente a un cálculo incorrecto de la distancia interplanar.

Recuerde que en un cristal, todos los planos cristalográficos paralelos son idénticos e indistinguibles. Asignar índices o nombre a un plano es hacerlo para él y para todos los que le son paralelos. En este marco, cuando hablamos de un plano, frecuentemente estamos haciendo referencia a un conjunto enorme de planos paralelos.

Procedimiento:

(Este procedimiento riguroso permite captar correctamente los dos tipos de información que deben contener estos índices. El procedimiento del texto de Smith NO es suficientemente riguroso).

0) Considere los ejes de referencia asociados a la celda convencional en uso y un plano cristalino específico a indexar. Considere que en el origen siempre hay un átomo.

1) Determine un plano cristalino paralelo al plano especificado y que esté lo más próximo posible al origen, sin pasar por el origen. (Este plano

cristalográfico está a una (1) distancia interplanar del plano que pasa por el átomo que está en el origen).

2) Calcule las intersecciones del plano determinado en 1) con cada uno de los ejes de coordenadas.

3) Calcule los inversos de tales intersecciones.

4) Ponga el trío ordenado entre paréntesis redondos. Tales son los índices de Miller del plano especificado.

Si en un cristal 3D se considera un plano cristalino y un átomo no contenido en ese plano, entonces por dicho átomo pasa un plano cristalino paralelo al anterior. Teniendo esto presente es evidente que la distancia entre el origen y el plano más próximo al origen sin pasar por este último, corresponde a la distancia interplanar del correspondiente conjunto de planos paralelos y equiespaciados.

Para las direcciones cristalinas se emplea un sistema de índices que en lo fundamental es simplemente vectorial. Se usan paréntesis cuadrados: $[hkl]$.

En un cristal, una familia de direcciones equivalentes se denomina $\langle hkl \rangle$ y de planos equivalentes se denomina $\{hkl\}$.

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 cúbico.

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

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

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 $\{hkl\}$ es grande, entonces $d_{hkl}[\text{nm}]$ es pequeño.

Que $\{hkl\}$ sea grande corresponde a que $(h^2 + k^2 + l^2)$ sea grande. La ecuación antes presentada 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 $\{hkl\}$ correctamente calculados, entonces el resultado de la distancia interplanar será erróneo. 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.