

Relaciones en un cristal dado entre:

Índices de Miller, Distancias Interplanares y Densidades Geométricas

Relación entre (hkl) y d_{hkl} .

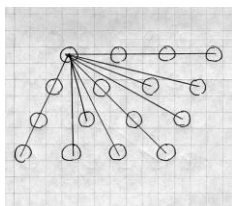
Para los cristales cúbicos, la distancia interplanar d_{hkl} de planos de índices (hkl) vale:

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

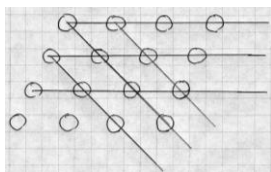
donde $a[nm]$ es el parámetro de la celda.

Así, para un cristal cúbico dado:

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



Algunos de los infinitos tipos de planos en un cristal



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

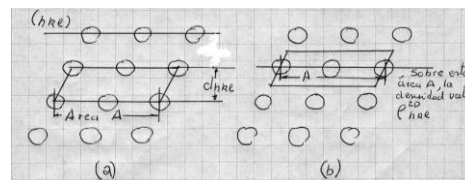
Propiedades de índices de Miller en cristales del sistema cúbico.

- 1) Dado un plano (hkl) , los índices de su normal son $[hkl]$. (Para las direcciones la nomenclatura es simplemente vectorial)
- 2) Para un plano cristalográfico (hkl) de un cristal de parámetro de celda $a[nm]$, la respectiva distancia interplanar d_{hkl} vale:

$$d_{hkl}[nm] = a[nm] / \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$$

Relación entre d_{hkl} y ρ_{hkl}^{2D}

- Considérese un cristal cúbico cualquiera.
 - Se demostrará, para un plano cualquiera del cristal, la relación entre la distancia interplanar y la densidad interplanar.
- $(d_{hkl} \text{ versus } \rho_{hkl}^{2D})$.



- Cristal 3D descrito por el ordenamiento de planos (hkl) . Además, se ha definido un volumen de referencia V para el cálculo de densidades.
 - Se cumple $V = \text{Base} \cdot \text{Altura} = A \cdot d_{hkl}$. El área A sale perpendicular al papel.
- a) Representación inicial del volumen V .
b) Representación desplazada del volumen, para facilitar la comprensión del paso de la pantalla siguiente.

- Dicho volumen V se puede expresar como el producto del área A de la base por la altura de ese volumen, altura que corresponde a d_{hkl} .

- Entonces, reemplazando y reordenando:

$$\rho^{3D} = \frac{[\text{Nro. de átomos}] / [A \cdot d_{hkl}]}{[\text{Nro. de átomos} / A] / [d_{hkl}]}$$

- Pero: $[\text{Nro. de átomos} / A] = \rho_{hkl}^{2D}$

- Finalmente:

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

- Así, queda demostrada la importante relación:

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

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

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

RESUMEN GENERAL

En un cristal dado:

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

y

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

Listados de planos cristalográficos

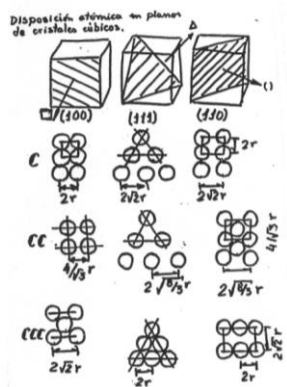
- A cada cristal se le asocia, como una huella digital, un **listado específico de planos cristalinicos** ordenados según índices de Miller crecientes:

En tal listado, los planos también estarán ordenados por distancias interplanares decrecientes y por densidades planares decrecientes.

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

INDICES DE LAS PRIMERAS FAMILIAS DE PLANOS CRISTALOGRAFICOS PARA ESTRUCTURAS CUBICAS (n=1)

Cúbico Simple, C	Cúbico centrado en el cuerpo, CC	Cúbico centrado en las caras, CCC
• {100}	-	-
• {110}	{110}	-
• {111}	-	{111}
• {200}	{200}	{200}
• {210}	-	-
• {211}	{211}	-
• {220}	{220}	{220}
• {221}	-	-
• {300}	-	-
• {310}	{310}	-
• {311}	-	{311}
• {222}	{222}	{222}



Problema

La tabla adjunta muestra el arreglo atómico sobre tres planos de alta simetría de cristales C, CC y CCC. Para cada cristal, uno de los tres planos ilustrados es el más denso.

SE PIDE:

- Identificar e indexar correctamente el plano más denso de cada cristal.
- Para cada cristal, ¿por qué el plano que usted identificó en a) es el primero del listado correspondiente de la pantalla anterior?

Problemas conceptuales

- Para un cristal CC: ¿Cuáles son los índices de Miller de los primeros planos del listado? ¿A qué corresponderían los índices {100}?
- Según el MEDC ¿cuál es el plano más denso de un cristal CCC? ¿Concuerda esto con el listado de planos pertinente? ¿Por qué?
- ¿Cómo calcularía la densidad geométrica de los planos tercero más densos de un cristal C? Proponga dos métodos.