

ÍNDICES DE MILLER PARA PLANOS Y DIRECCIONES CRISTALINOS.

Introducción

Los índices de Miller, para planos cristalinos y direcciones cristalinas, se aplican en todo tipo de cristales, aunque nosotros trabajaremos preferentemente con cristales cúbicos. En 3D estos índices corresponden a tríos ordenados de números.

Índices para planos

Son trío de números asignados a un conjunto de planos cristalinos, los cuales son paralelos, equiespaciados e indistinguibles entre sí.

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. Tal error es inaceptable cuando estos índices se emplean para determinar la estructura cristalina de un material, en el marco de la difracción de cristales, un tema que veremos pronto.

Asignar índices 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:

(El procedimiento del texto de Smith NO es suficientemente claro).

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

1) Determine un plano cristalino que sea paralelo al plano especificado y que esté lo más próximo posible al origen, pero sin pasar por este último.

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

3) Calcule los recíprocos 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 pertinente conjunto de planos paralelos y equiespaciados.

La nomenclatura para un plano dado y de índices h,k,l es (hkl) . La familia de planos cristalográficos no paralelos y equivalentes a un plano (hkl) se anota $\{hkl\}$. Por ejemplo, las tres caras de una celda cúbica corresponden a tres planos cristalográficamente equivalentes.

Índices para direcciones cristalinas

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

En un cristal, una familia de direcciones equivalentes se denomina $\langle hkl \rangle$. Así, en un cristal del sistema cúbico, la familia de direcciones $\{100\}$, incluye las tres aristas no paralelas del cubo: 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 cúbico.

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

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

Comentarios:

La Propiedad 1 no siempre se cumple en cristales no cúbicos. Ejemplo, para un cristal HC, ver Fig. 1, 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).

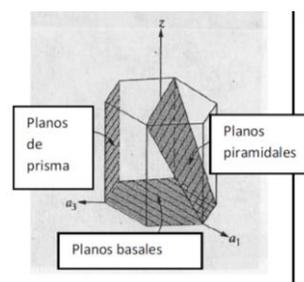


Fig. 1. Planos basales, de prisma y piramidales de un cristal HC.

Para que la Propiedad 1 se cumpla siempre en cristales HC, existe un sistema de índices de Miller-Bravais, con 4 índices $\{h\ k\ l\ m\}$. Al utilizarse un sistema de referencia de 4 ejes en un espacio 3D, los tres primeros ejes, contenidos en el plano basal, no son linealmente independientes, $h+k+l=0$. El cuarto eje c es perpendicular al plano basal. En el texto de Smith aparece esta materia, la cual no es parte de este curso.

Según la Propiedad 2, si el trío de la familia $\{h\ k\ l\}$ es grande, entonces $d_{hkl}\ [nm]$ es pequeño. Que $\{h\ k\ l\}$ sea grande implica que $(h^2 + k^2 + l^2)$ es grande. La ecuación antes indicada para la Propiedad 2 no se cumple en cristales no cúbicos; sin embargo, en cristales no cúbicos siempre existe una ecuación, aunque más compleja que la de los cúbicos, cuyo análisis también lleva a concluir que los planos de índices menores son los con 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. 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.