CRISTALOGRAFÍA

Ejes cristalográficos

Índices de Miller

Ley de la racionalidad o de los índices racionales

Descubierta por el científico Rene Haüy en el año 1784.

“La posición en el espacio de cualquier cara de un cristal ***puede determinarse por tres números enteros***, si como ejes de coordenadas se tomaron tres aristas del cristal y por unidad de longitud, los segmentos en que la cara elegida como unidad (cara fundamental), corta a estos ejes”

Ejes cristalográficos

Son ciertas líneas que pasan a través del cristal como ejes de referencia y se toman paralelas a las aristas de intersección de las caras cristalinas principales y/o a los elementos de simetría presentes en el cristal (ejes, normales a los planos).

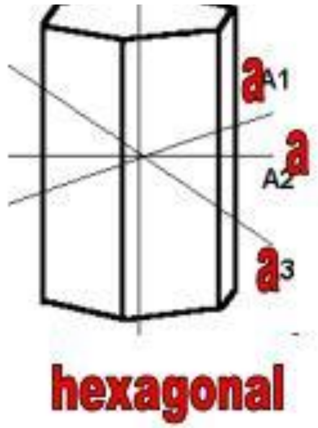
Los ejes cristalográficos son paralelos a las mismas direcciones que los valores de la celda unidad (a, b, c), y por tanto reciben los mismos nombres.

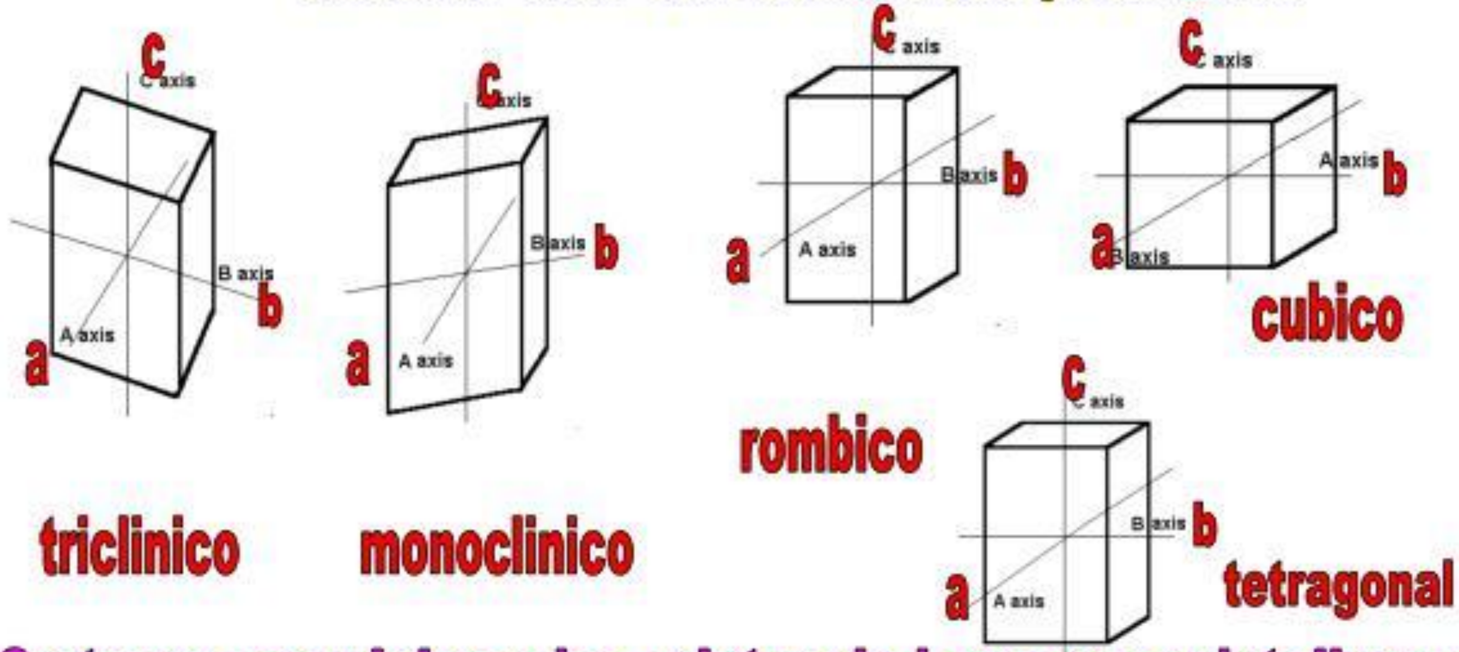
EJES CRISTALOGRAFICOS

EN LA DESCRIPCIÓN DE LOS CRISTALES RESULTA UTIL REFERIR LA MORFOLOGIA O LA SIMETRIA INTERNA A UNOS EJES DE REFERENCIA, SON LOS EJES CRISTALOGRAFICOS

Son tres ejes imaginarios a, b, c. que se cortan en un punto en el centro del cristal

Cada sistema cristalino tiene sus propios ejes de acuerdo a su caracteristicas peculiares

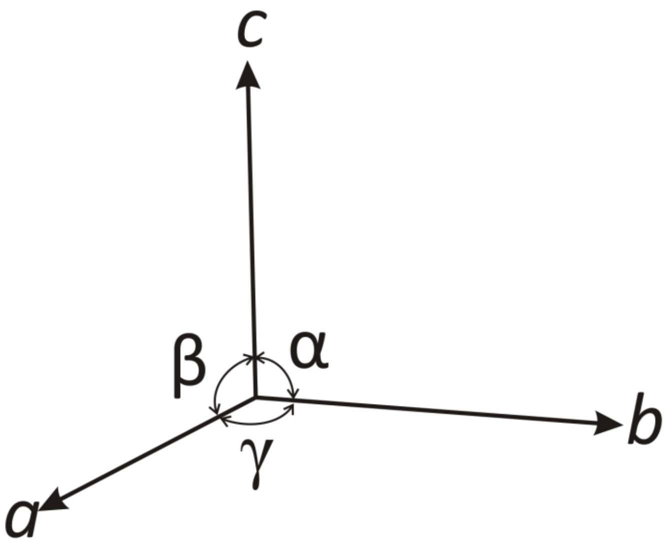




(Se toman paralelos a las aristas de las caras cristalinas principales)

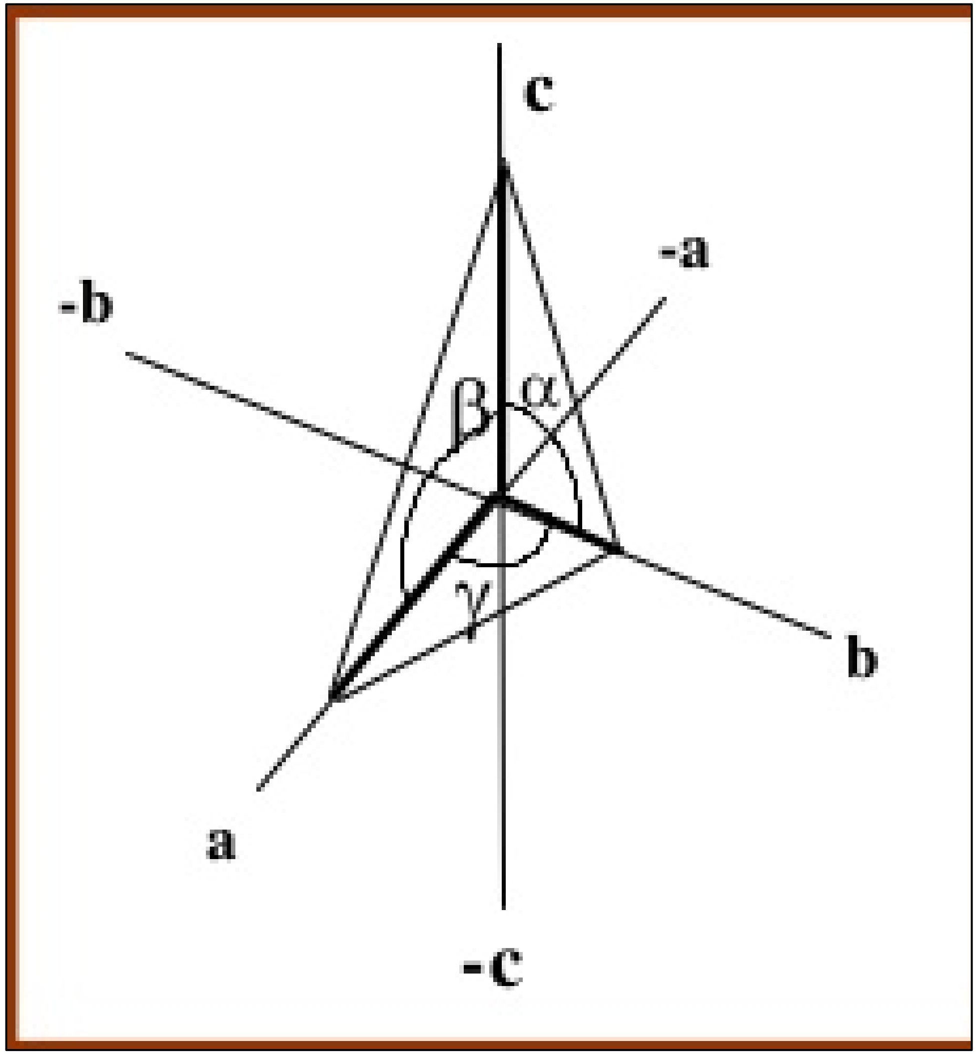
Sistemas Cristalinos de tres ejes cristalográficos

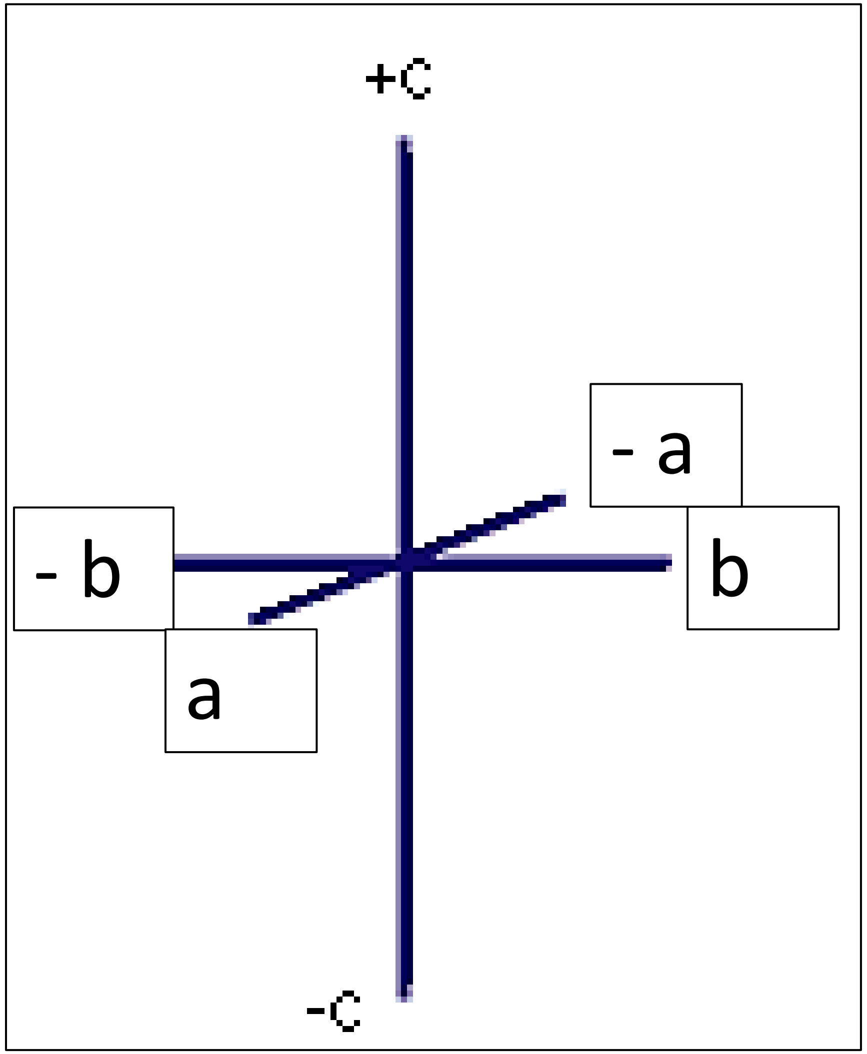
- Triclínico
- Monoclínico
- Rómbico
- Tetragonal
- Cúbico



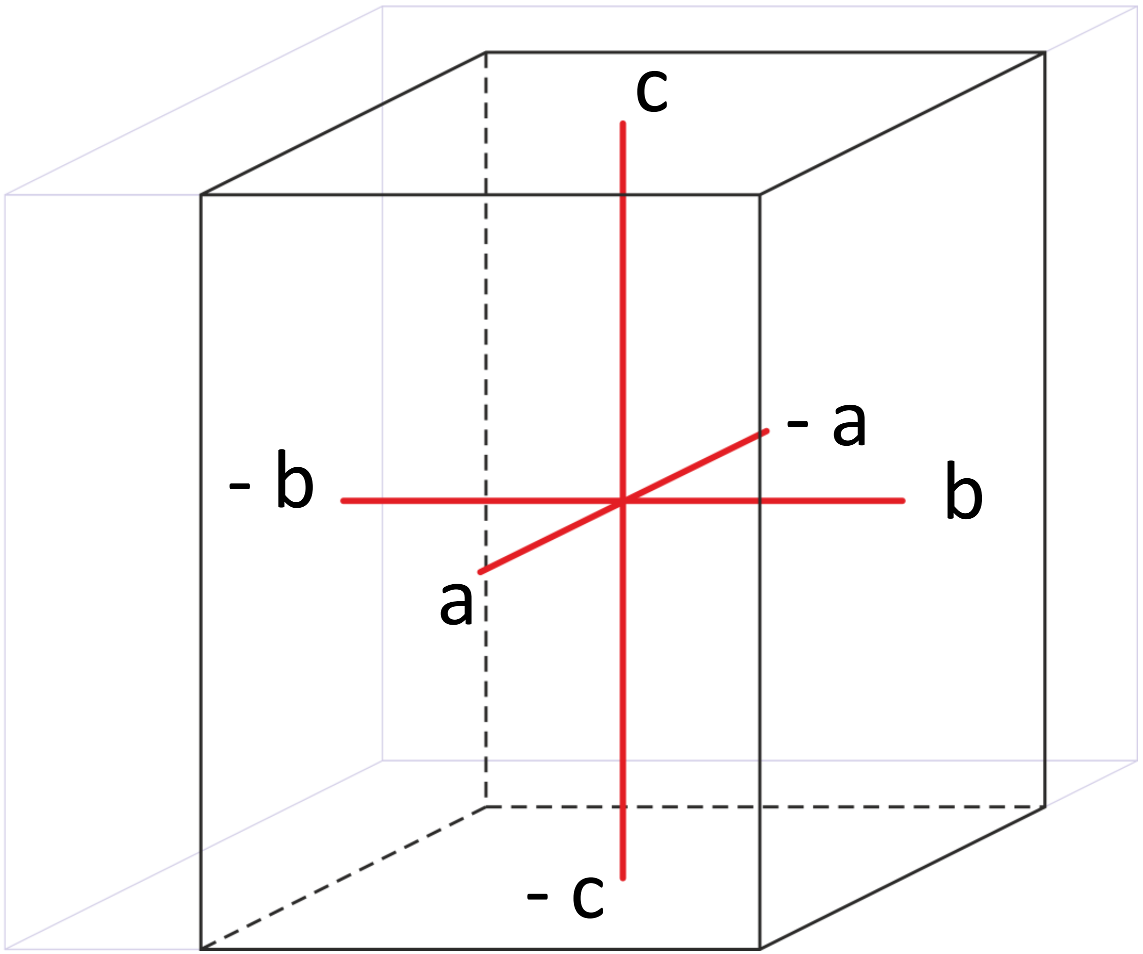
Tres ejes cristalográficos:
a, b, c

a: hacia el observador
b: de izquierda a derecha (+)
c: vertical hacia arriba


c
-a
-b
β
α
γ
b
a
-c


+c
- a
- b
b
a
-c

Forma simple prisma tetragonal + pinacoide
Sistema tetragonal
Clase de simetría: $A_4 4A_2 5PC$

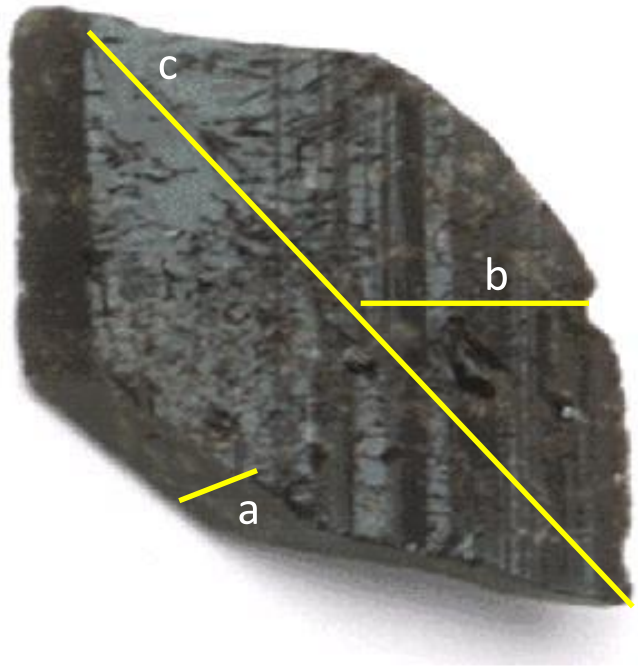


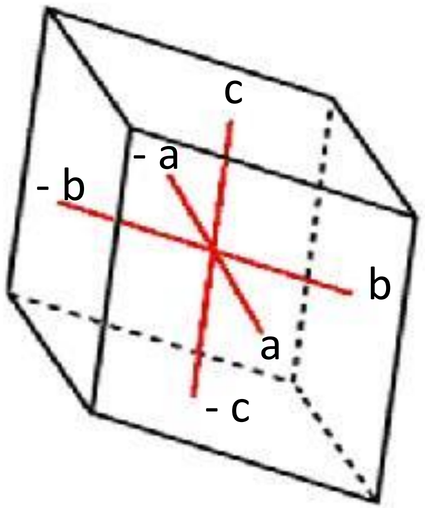
Eje A_4: se toma como eje cristalográfico **c**

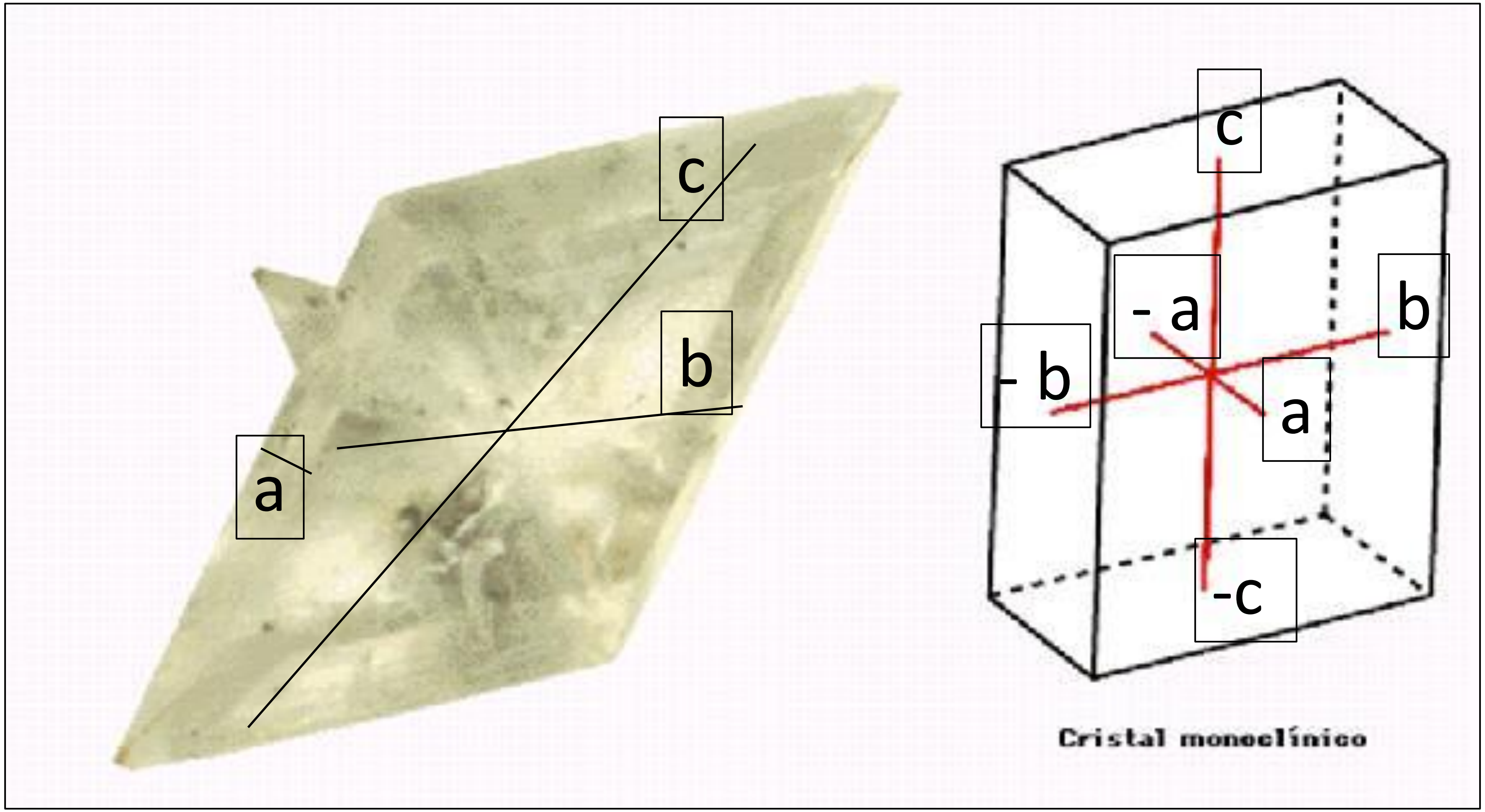
Ejes A_2: se toman como ejes cristalográficos **b y a**. Se tiene que cumplir la singonia de este sistema: $\alpha = \beta = \gamma = 90°$.

En los sistemas de símetría baja (Triclínico, Monoclínico, Rómbico)

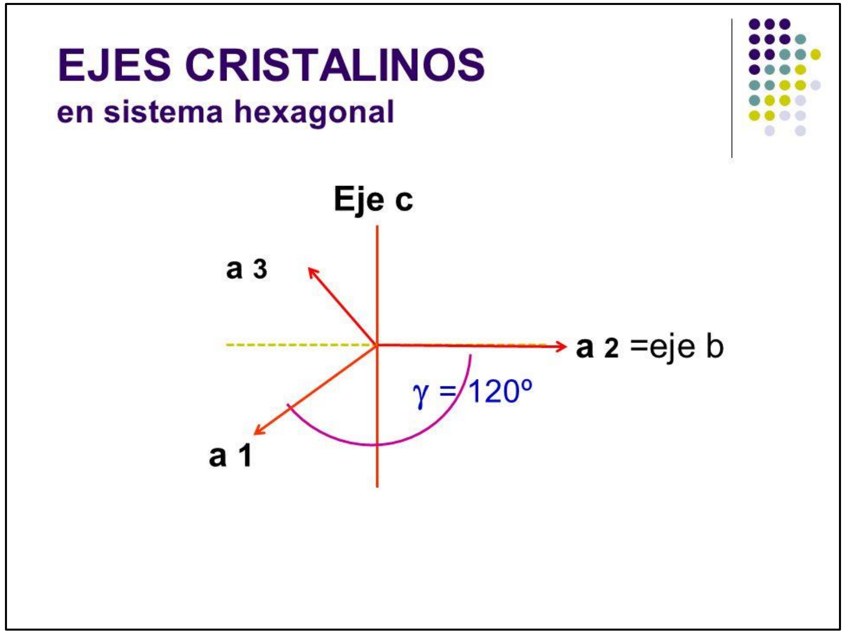
Se toman como ejes cristalográficos las direcciones de las aristas o las caras cuando no existen ejes A_2.

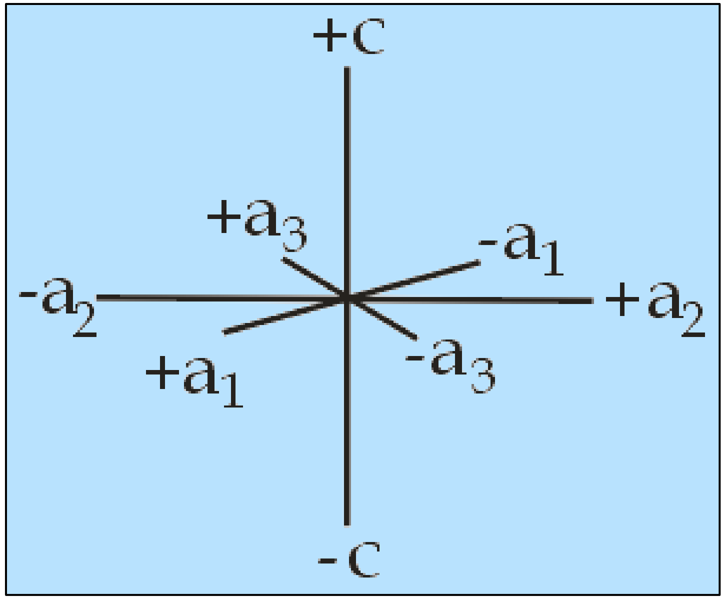





c
b
a
c
- a
b
- b
a
-c
Cristal monoclínico

Sistemas cristalinos Trigonal (o romboédrico) y Hexagonal (4 ejes cristalográficos)





Los sistemas trigonal y hexagonal, por tener los ejes a y b a 120°, no pueden encajar en un sistema de ejes cartesianos.

Por eso, estos sistemas tienen cuatro ejes: a1, a2 y a3, todos en un plano y a 120° entre sí, y el eje c vertical. El eje a2 es siempre hacia la derecha.

En estos sistemas, los ejes salen **por las aristas** de la celda unidad (prisma de primer orden).

Se denotan como:

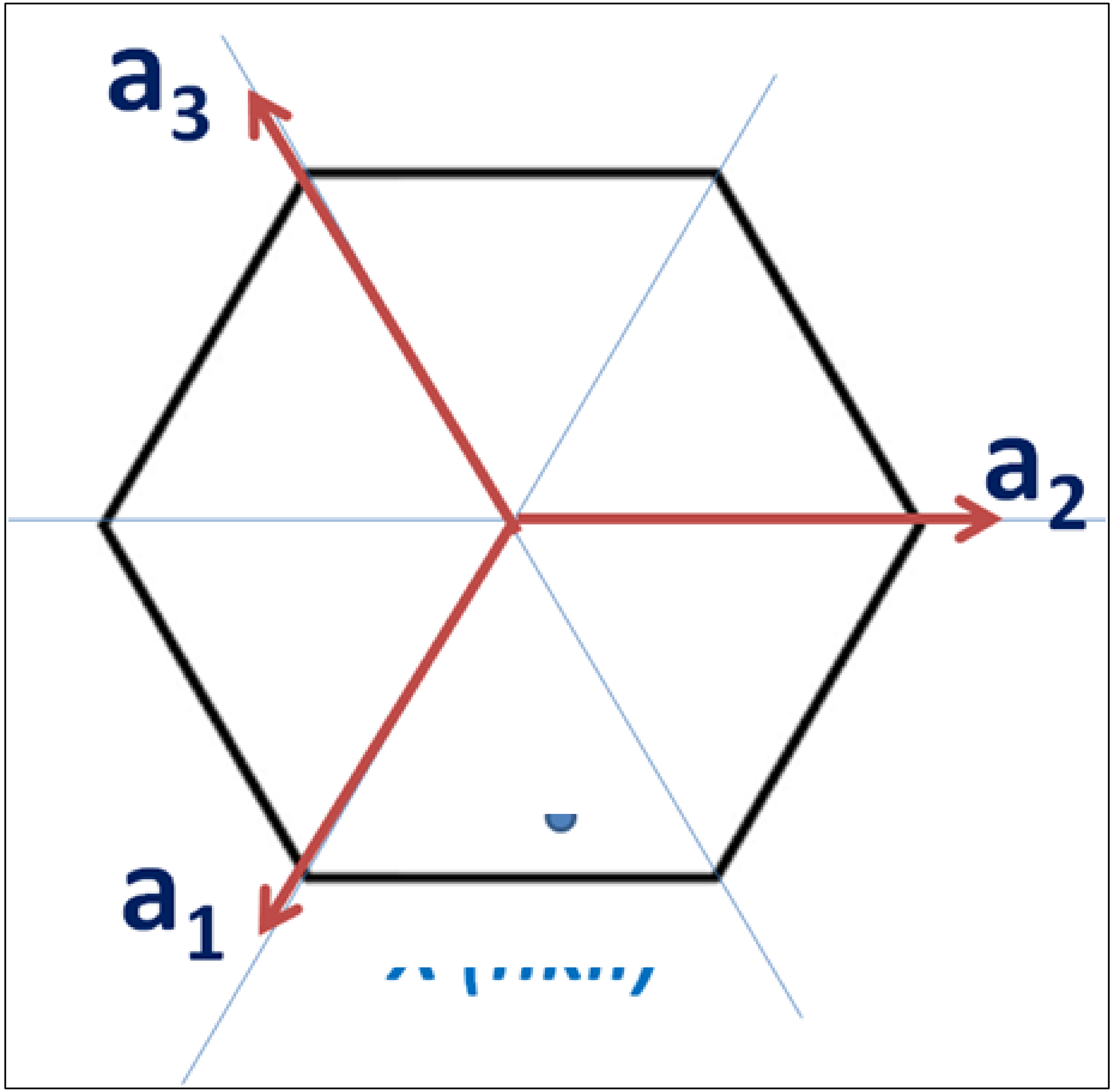
a1: Hacia el observador

a2: de izquierda a derecha

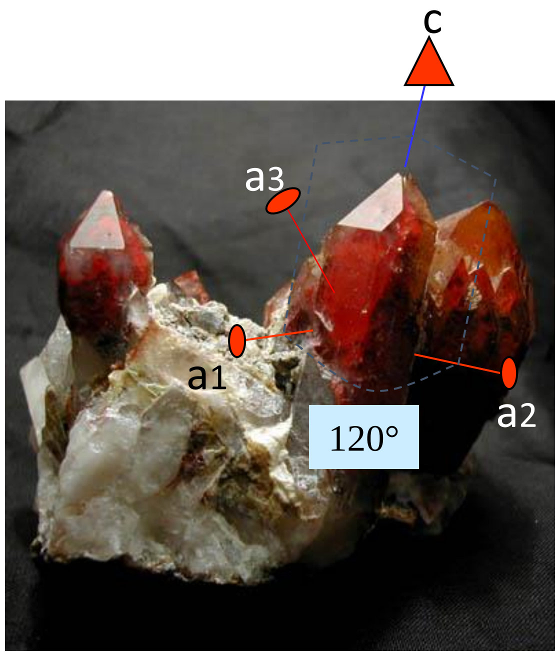
a3: saliendo del observador

c: vertical hacia arriba

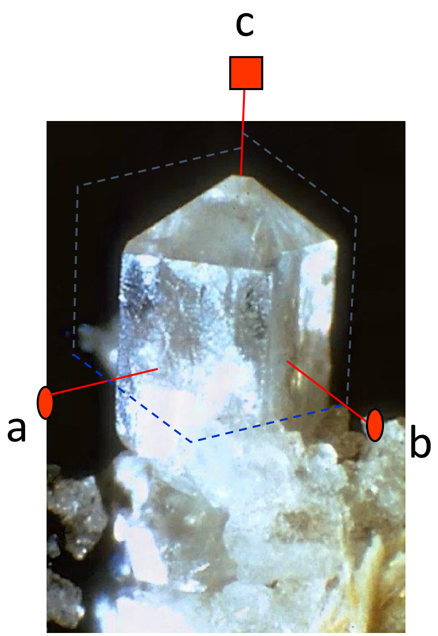
(+)


a3
a2
a1

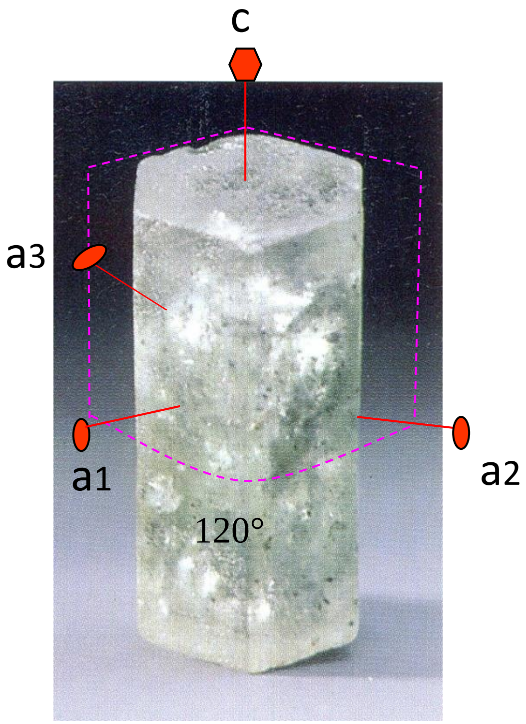
Orientación de los cristales



trigonal:
Cuarzo SiO_2

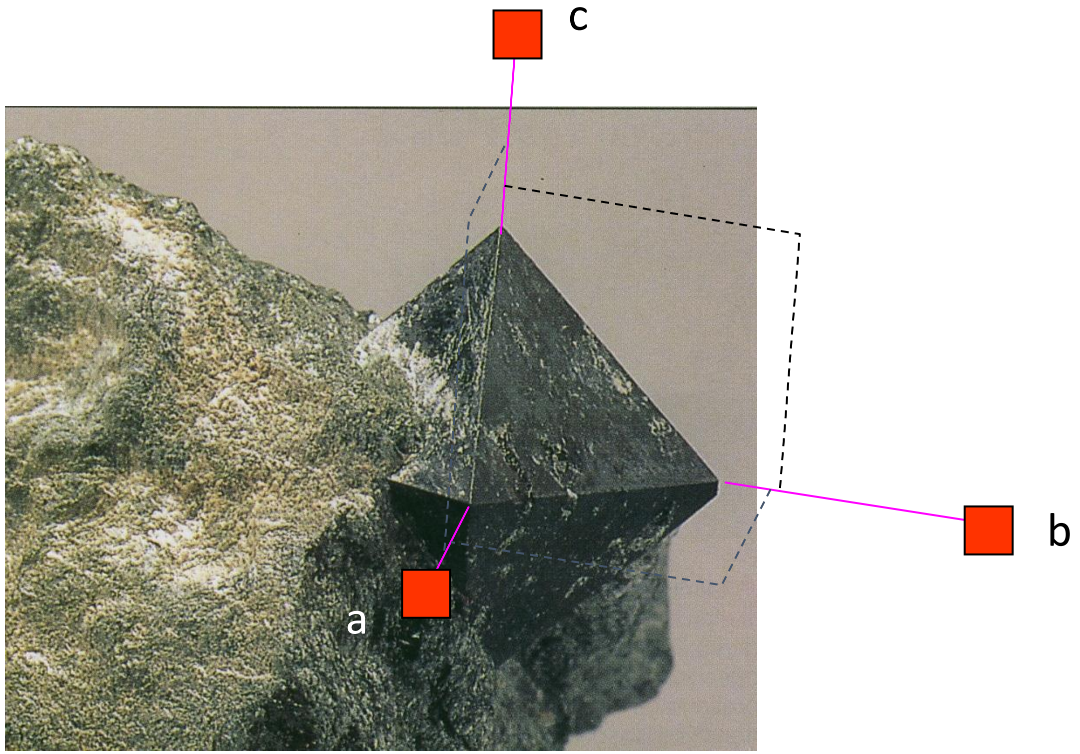


tetragonal:
Zircon $ZrSiO_4$



hexagonal:
Berilo $Be_3Al_2Si_6O_{18}$

Orientación de los cristales



cúbico:
Magnetita $Fe^{3+}_2Fe^{2+}O_4$

Orientación de los ejes cristalográficos por sistema cristalino

Sistema cristalino	Constantes geométricas	Orientación del cristal (según el Klein y Hurlbut)
Triclínico	$a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$	La razón más desarrollada se toma como la vertical y como el eje c; a y b son direcciones de aristas, donde b es más largo que a. Para nuevos cristales triclínicos, c < a.
Monoclínico	$a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90°$, $\beta \neq 90°$	El eje b es paralelo al eje binario o perpendicular al plano de simetría; a y c perpendiculares a b; c es la dirección alargada en cristales de hábito prismático, o a es la dirección alargada en caras inclinadas. Para nuevos cristales monoclínicos, c < a.
Rómbico	$a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$	Los ejes a, b y c son paralelos a los ejes binarios. Por lo general, c < a < b. Antiguamente, si el cristal es tabular, el eje c es el más corto, pero si era alargado, el eje c es el más largo.
Trigonal (Romboédrico)	$a1 = a2 = a3 \neq c$, $\alpha = \beta = 90°$, $\gamma = 120°$	El eje c es paralelo al eje senario; a1, a2 y a3 paralelos a ejes binarios. En bipirámides, las hay de dos tipos: de primer orden, donde los ejes a1, a2 y a3 salen por vértices, y de segundo orden, donde salen por el centro de aristas.
Hexagonal	$a1 = a2 = a3 \neq c$, $\alpha = \beta = 90°$, $\gamma = 120°$	El eje c es paralelo al eje senario; a1, a2 y a3 paralelos a ejes binarios. En bipirámides, las hay de dos tipos: de primer orden, donde los ejes a1, a2 y a3 salen por vértices, y de segundo orden, donde salen por el centro de aristas.
Tetragonal	$a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$	El eje c es paralelo al eje cuaternario; a y b paralelos a los ejes binarios. En bipirámides, las hay de dos tipos: de primer orden, donde los ejes a y b salen por vértices, y de segundo orden, donde salen por el centro de aristas.
Cúbico	$a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$	Los ejes a, b y c son paralelos a los ejes cuaternarios o, en su ausencia, ejes binarios

Orientación de los ejes cristalográficos por sistema cristalino

Sistema cristalino	Elementos de simetría	Orientación de los ejes
Triclínico	Centro o nada	Ejes paralelos a las aristas.
Monoclínico	Un eje binario	Eje b paralelo al eje A_2. El resto de ejes, paralelos a las aristas.
Rómbico	Tres ejes binarios	Ejes a, b y c paralelos a los ejes A_2.
Romboédrico	Un eje ternario	Eje c paralelo al eje A_3. Ejes a1, a2 y a3 por las aristas; eje a2 de izquierda a derecha.
Hexagonal	Un eje senario	Eje c paralelo al eje A_6. Ejes a1, a2 y a3 por las aristas; eje a2 de izquierda a derecha.
Tetragonal	Un eje cuaternario	Eje c paralelo al eje A_4. Ejes a y b paralelos a los ejes A_2.
Cúbico	Cuatro ejes ternarios	Ejes a, b y c paralelos a los ejes A_4 o A_2.

Determinación de los índices de las caras de un cristal

- ✓ Notación de Weiss
- ✓ Índices de Miller-Bravais

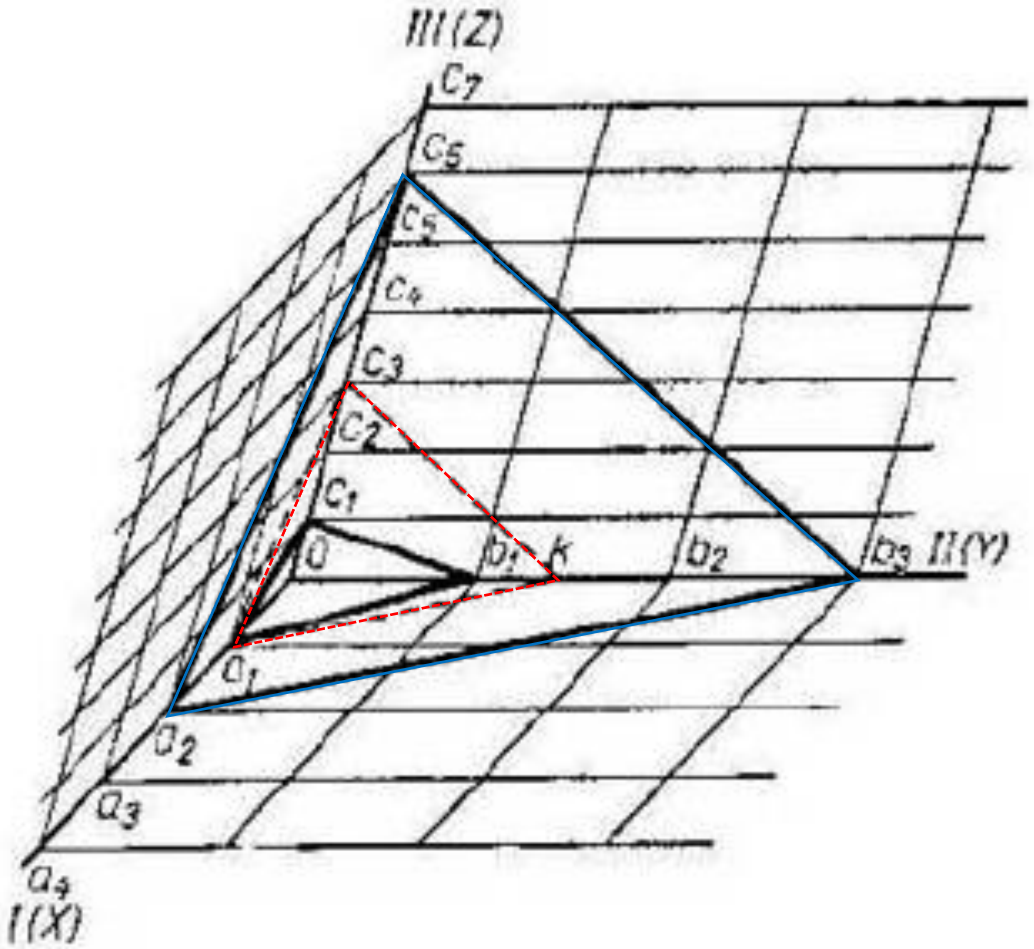


Fig. 72. Gráfico para deducir la ley de la racionalidad

<u>Cara Negra</u>
Corta a los ejes cristalográficos en los puntos (a1, b1, c1)

<u>Cara Roja</u>
Corta a los ejes cristalográficos en los puntos (a1, k, c3)

<u>Cara Azul</u>
Corta a los ejes cristalográficos en los puntos (a2, b3, c6)

A estos segmentos donde la cara corta a los ejes cristalográficos se les llama <u>**PARÁMETROS LINEALES DE LAS CARAS** (distancia en que la cara corta al eje)</u>

<u>Cara Negra</u>
Corta a los ejes cristalográficos
en los parámetros (1a : 1b : 1c) =(1 : 1 : 1)

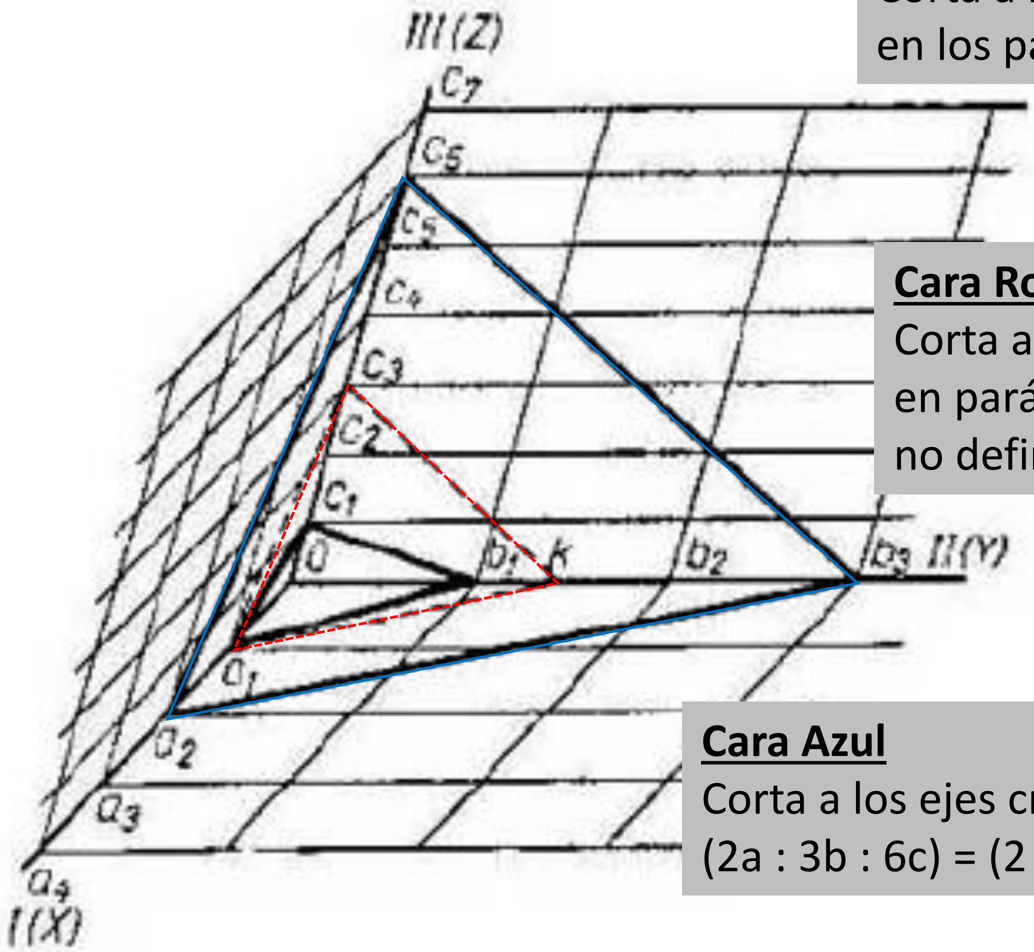


Fig. 72. Gráfico para deducir la ley de la racionalidad

<u>Cara Roja</u>
Corta a los ejes cristalográficos
en parámetros que, en el eje Y,
no definen números enteros

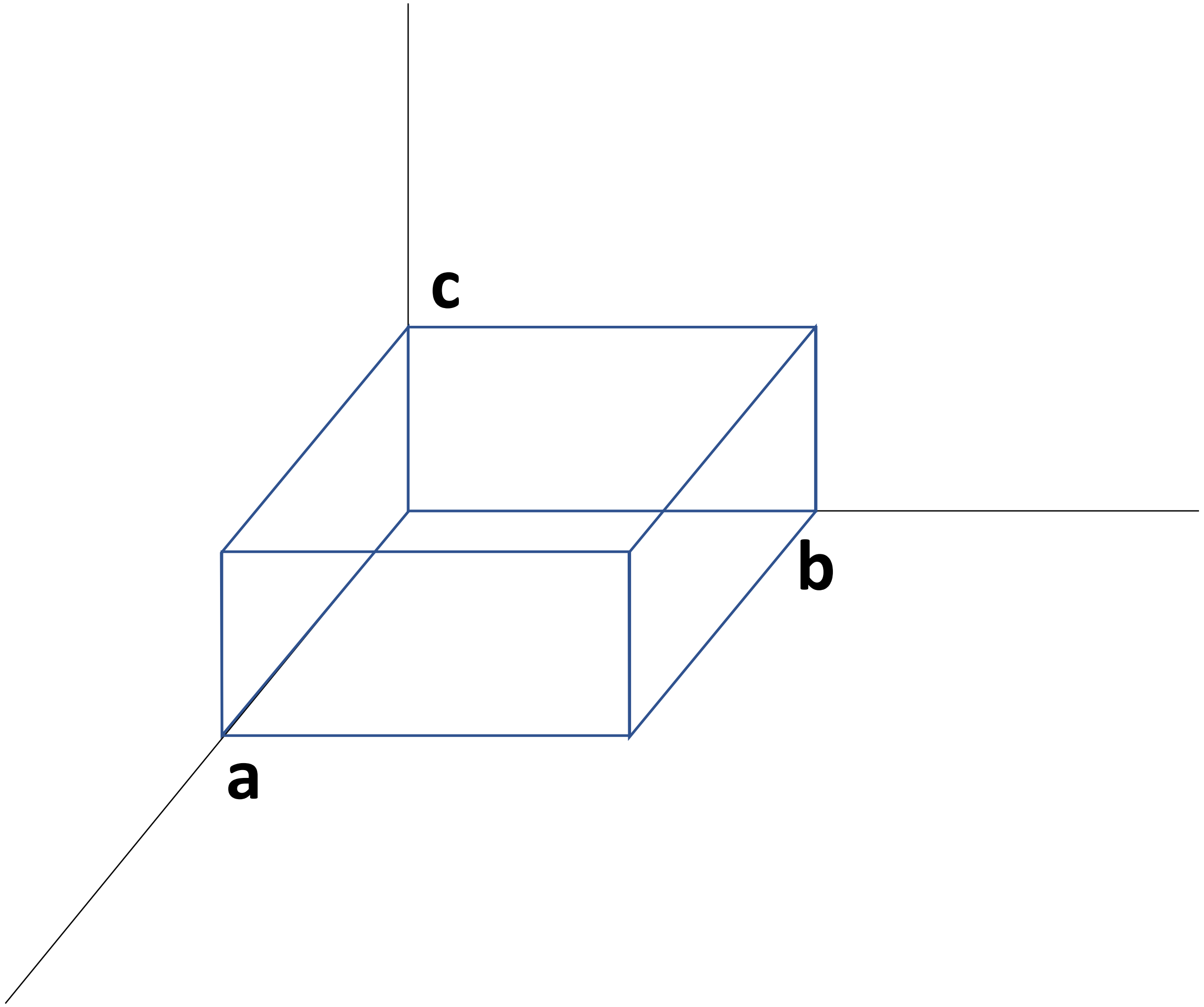
<u>Cara Azul</u>
Corta a los ejes cristalográficos en los segmentos
(2a : 3b : 6c) = (2 : 3 : 6)

A estos números donde la cara corta a los ejes cristalográficos se les llama
<u>PARÁMETROS NÚMERICOS DE LAS CARAS</u> <u>(intervalo de fila en que la cara corta al eje)</u>

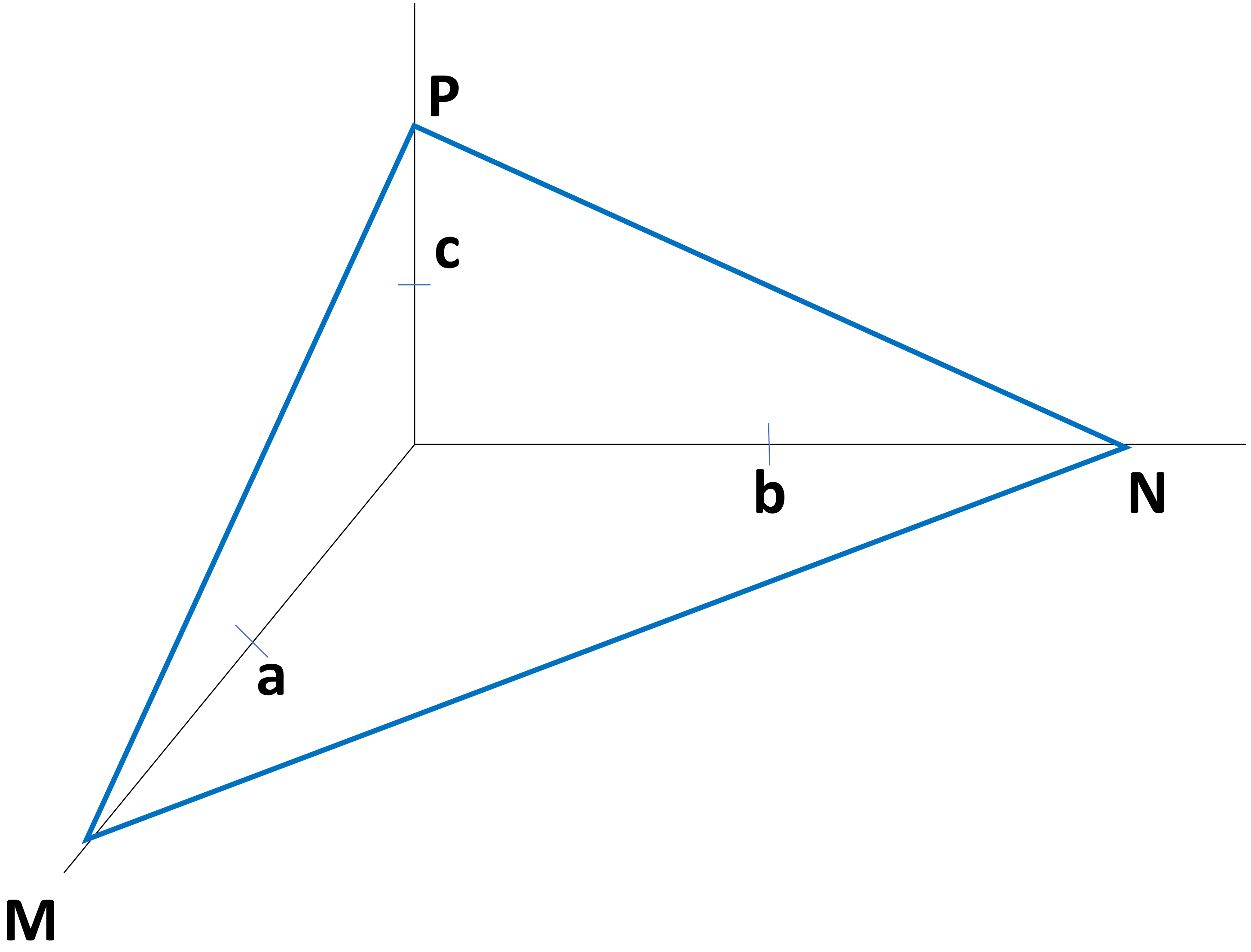
Notación de Weiss

Weiss en 1818 usó una notación para determinar los índices de las caras de un cristal teniendo en cuenta las distancias y los parámetros númericos en los cuales las caras cortaban a los ejes coordenados.

Sea la celda unidad de un cristal. Los parámetros a, b y c de la celda cortan los ejes cristalográficos.



Sea MNP una cara cualquiera. Intercepta los ejes cristalográficos en los puntos M, N y P.



Los parámetros numéricos m, n, p son números sencillos como 1, 2, 3, 4, 5 y 6. Rara vez mayor que 6.

Las fracciones 1/2, 1/3 y 1/4 se eliminan multiplicando por el común denominador de las fracciones.

También se usa el infinito (∞) cuando la cara es paralela a un eje.

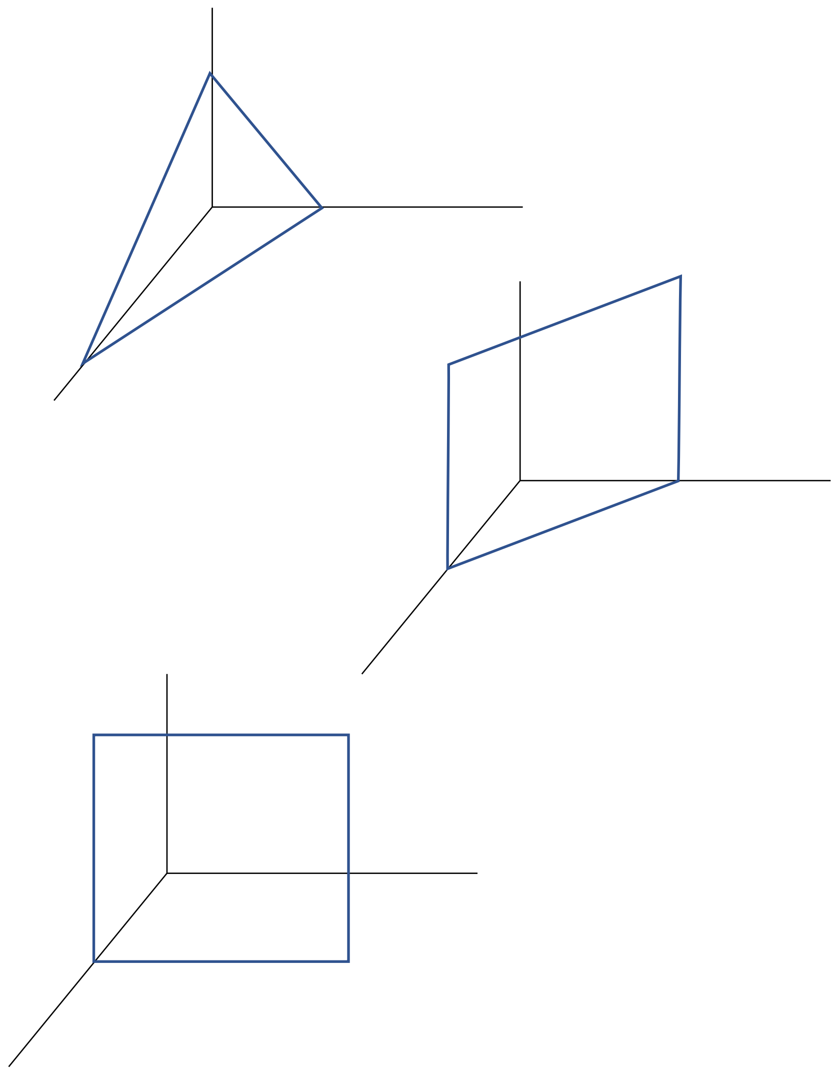
Se elige el plano más cercano al centro de coordenadas: se simplifican los parámetros numéricos al menor valor posible (ejemplo: 4a:2b:3c, pero no 8a:4b:6c).

Clasificación de las caras según su intercepción con los ejes cristalográficos

Si la cara corta a los tres o cuatro ejes: Cara piramidal

Si la cara corta a sólo dos ejes: Cara prismática

Si la cara corta a sólo un eje: Cara pinacoidal



Notación de Miller-Bravais

La notación de Miller se usa ampliamente sobre la de Weiss, ya que es más práctica y sencilla.

Miller tomó los parámetros inversos de Weiss y creó una notación práctica para denotar los índices de las caras de un cristal.

Si invertimos los parámetros de Weiss, la notación se queda como sigue:

$1/ma = h$; $1/nb = k$; $1/pc = l$ símbolo de Miller **(hkl)**

Eje a: índice h;   eje b: índice k;   eje c: índice l.

h, k y l deben ser números enteros: se calcula el mínimo común denominador de las fracciones y se toman los numeradores.

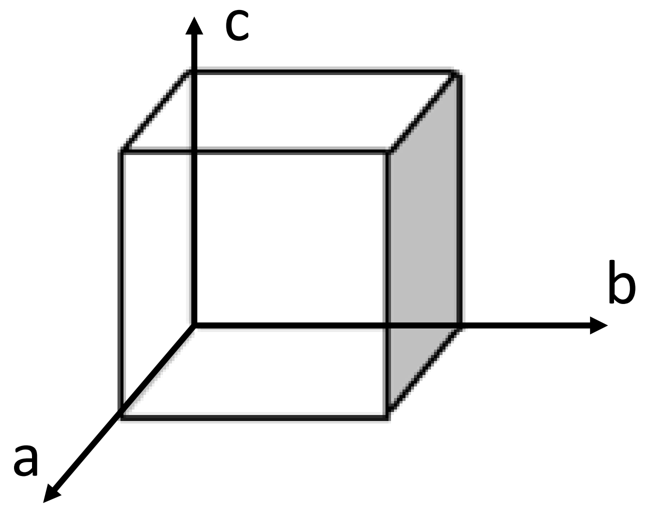
La notación constituye números enteros y se encierra entre paréntesis (hkl).

Si la cara corta al eje en la parte negativa se pone un signo negativo encima del número.

(123) La cara corta al eje a en 1/1, al eje b en 1/2 y al eje c en 1/3. Todos en las partes positivas.

($1\bar{3}0$) la cara corta al eje a en 1/1 y al eje b en -1/3. No corta al eje c ($1/0 = \infty$).

Ejemplo sencillo de determinación de los índices de Miller para la cara gris



1. <u>Orientar correctamente el cristal.</u>

2. <u>Calcular los intersectos con los ejes cristalográficos</u>

- Intersecto de la cara en el eje a: ∞ (es paralela al eje)
- Intersecto de la cara en el eje b: 1 (corta al eje en la parte positiva)
- Intersecto en el eje c: ∞ (es paralela al eje)

2. <u>Hallar los recíprocos (inversos)</u>

(1/∞, 1/1, 1/∞) índice de Miller……………… (010)

Tipo de cara PINACOIDAL: corta a un eje (b) y es paralela a dos ejes (a, c).

Planos y direcciones

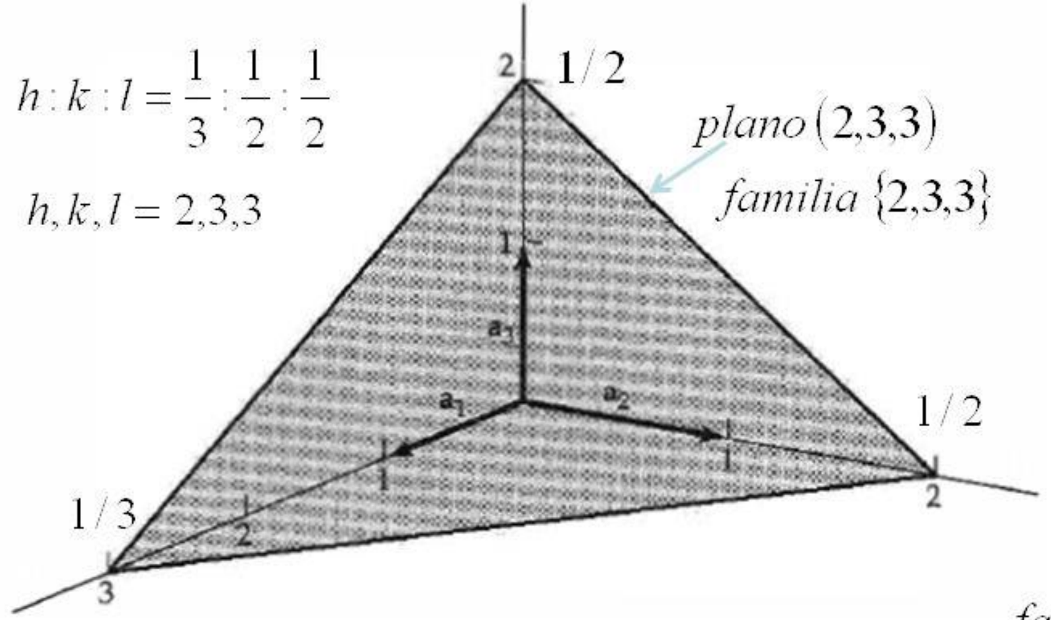
"Índices de **Miller**" de un plano cristalino

$$h, k, l$$

Son los menores enteros, proporcionales a las recíprocas de las intersecciones que hace el plano con los ejes de la red.
Para designar una familia de planos paralelos se toma el plano más próximo al origen.

$$h : k : l = \frac{1}{3} : \frac{1}{2} : \frac{1}{2}$$

$$h, k, l = 2,3,3$$



$$familias\ \{h, k, l\}$$

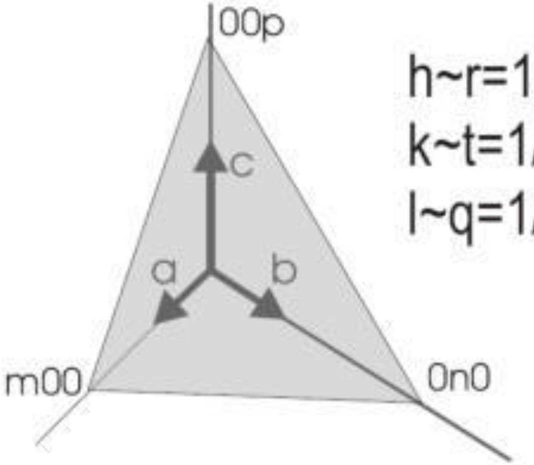
Plano cristalino: (hkl)

Familia de planos cristalinos, todos ellos paralelos entre sí: {hkl}

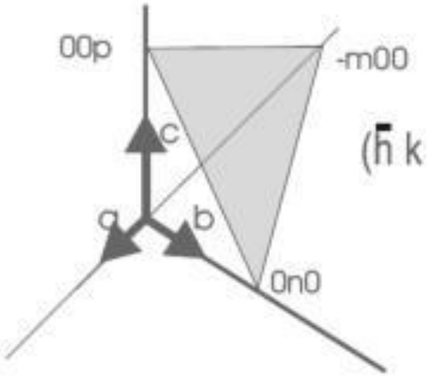
Por lo general, un cristal sólo muestra dos planos en una familia de planos: a uno y otro lado del centro de coordenadas. Por eso se usa a veces la notación (hkl), con paréntesis, como representativa de la familia de planos y se deja la notación {hkl}, con corchetes, para las formas simples.

Cristales fantasma dentro de un cristal de cuarzo, marcando la posición previa de las caras durante su crecimiento. Tomada de: https://www.phantom-quartz.com/?lightbox=dataItem-jw89gzfu5

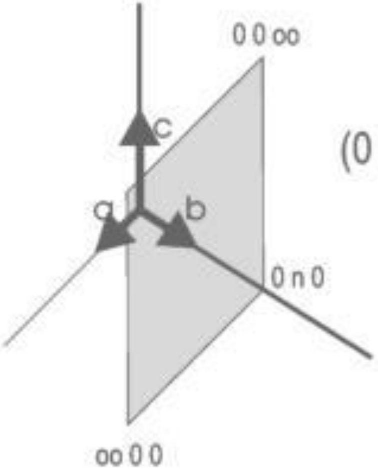
Índices de Miller

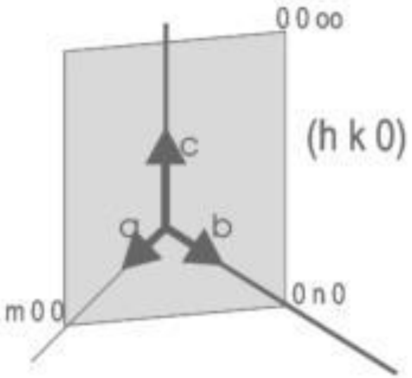


h~r=1/m
k~t=1/n
l~q=1/p



Un índice de Miller negativo indica que el plano intercepta al correspondiente eje cristalográfico en un valor negativo





Un índice de Miller igual a cero significa que el plano es paralelo al eje correspondiente

Si no se conocen los valores de intersección de los planos con los ejes cristalográficos, se utilizan letras en lugar de números.

(hkl): la cara corta a los tres ejes. Es una cara piramidal.

(0kl), (h0l) y (hk0): la cara corta sólo a dos ejes. Es una cara prismática.

(100), (010) y (001): la cara corta sólo a un eje. Es una cara pinacoidal. Aquí no se usan letras porque se considera que el plano corta al eje a la distancia unidad.

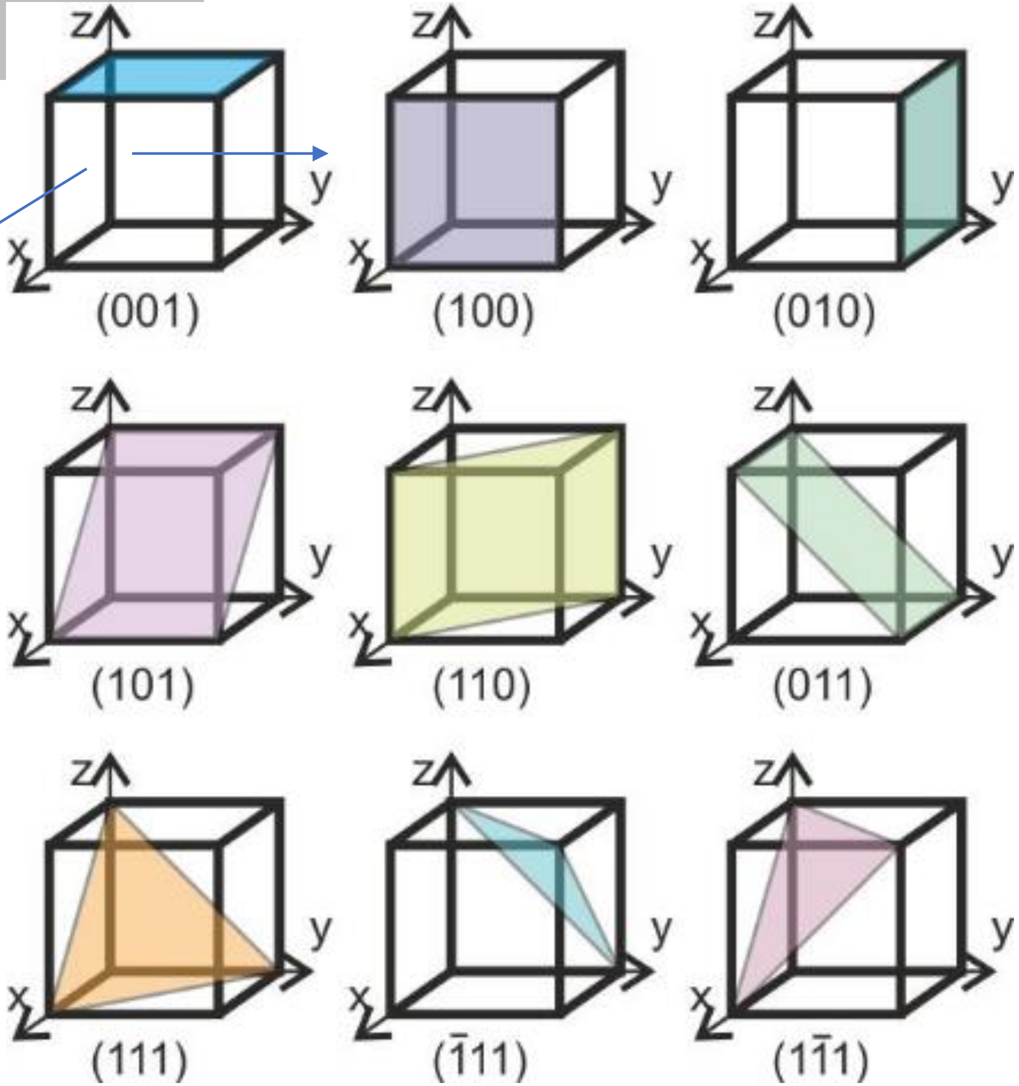
Ejemplos

Infinito en el eje b

$1/\infty = 0$

Infinito en el eje a

$1/\infty = 0$



Volvamos a la siguiente figura y veamos cómo se resuelve el dilema de la cara roja que no corta a los ejes en un intervalo de fila entero.

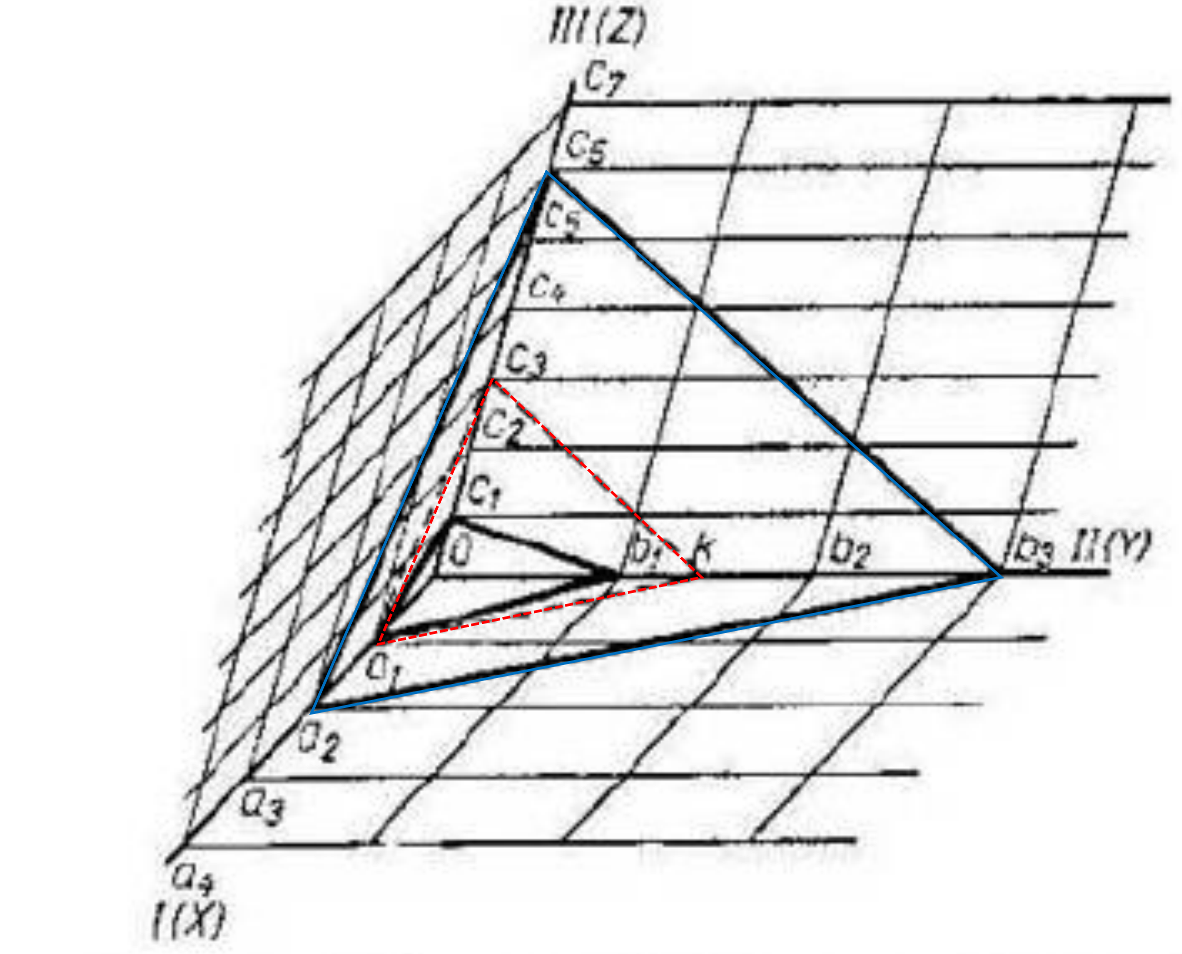


Fig. 72. Gráfico para deducir la ley de la racionalidad

Cara Negra
Corta a los ejes cristalográficos en los segmentos (a1, b1, c1)

Cara Roja
Corta a los ejes cristalográficos en los segmentos (a1, k, c3)

Cara Azul
Corta a los ejes cristalográficos en los segmentos (a2, b3, c6)

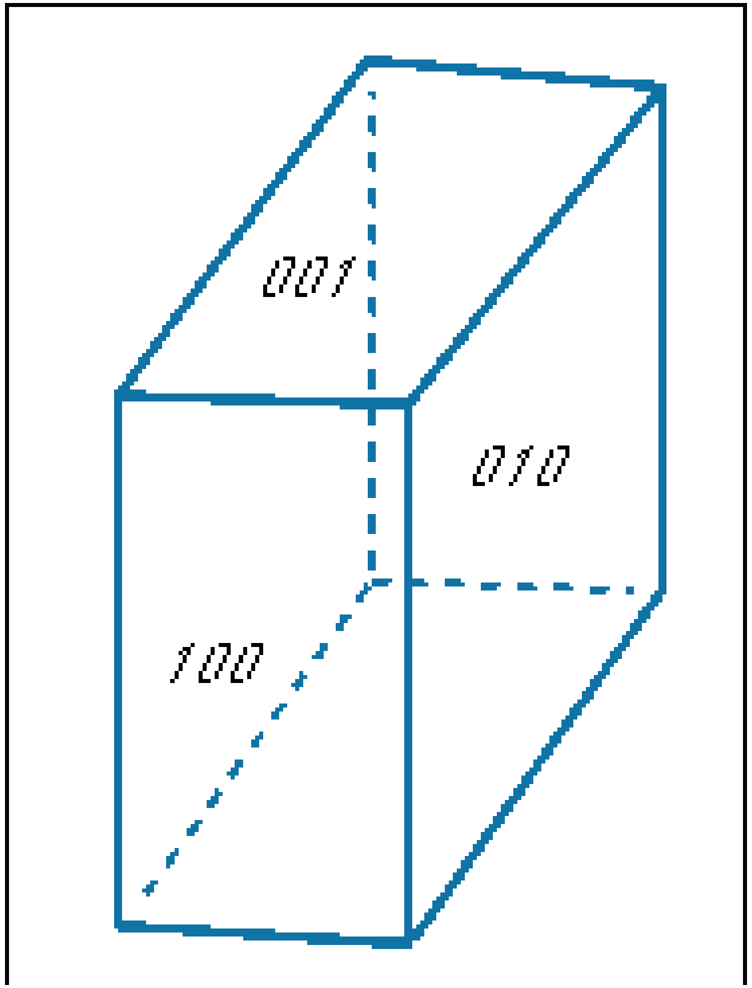
La cara roja (a1, b1.5, c3) se traslada perpendicularmente hasta que intercepte a los ejes en intervalos de fila enteros. Se obtendría la cara (a2, b3, c6):

- Notación de Weiss: 2a:3b:6c.
- Índice de Miller: (1/2 1/3 1/6) = (321)

El modo matemático de resolverlo (sin necesidad de trasladar la cara hasta alcanzar parámetros a,b,c enteros):

Cara roja: (a1, b1.5, c3).
Inverso: (1/1 1/1.5 1/3) = (3/3 2/3 1/3) = (321) Índice de Miller.

Interpretemos los índices de Miller de la siguiente figura



Cara 100: corta al eje a en la parte positiva (1), no corta al eje b ni c (0), es paralela a los ejes (infinitas) en esas direcciones.

Cara 010: no corta el eje a (0), corta al eje b en la parte positiva (1), no corta al eje c (0).

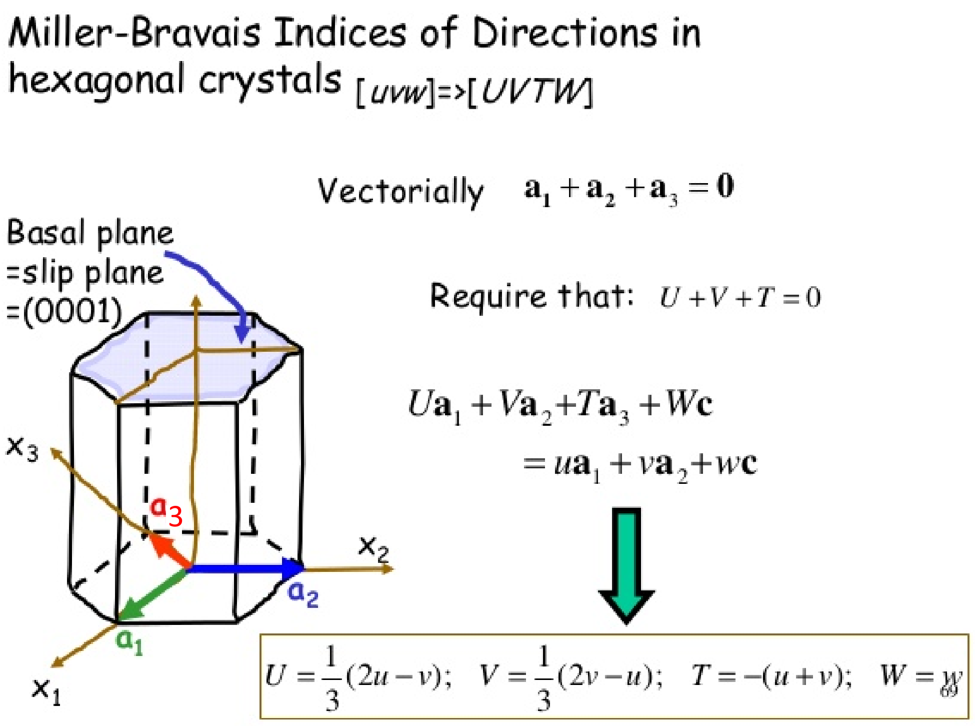
Cara 001: no corta al eje a (0), no corta al eje b (0). Corta al eje c en la parte positiva (1).

Indices de Miller para los sistemas Romboédrico y Hexagonal (4 ejes)

En estos sistemas se toman los ejes a1, a2, a3 en el plano basal , y el eje c perpendicular.

Los símbolos de Miller para las caras de estos sistemas son **(hkil)**

Eje a1: índice h.
Eje a2: índice k.
Eje a3: índice i.
Eje c: índice l.

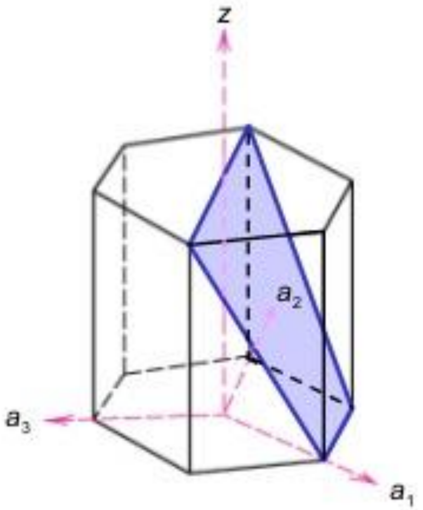


Crystallographic Planes (HCP)

- In hexagonal unit cells the same idea is used

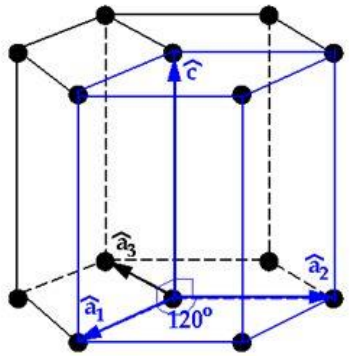
example	a_1	a_2	a_3	c
1. Intercepts	1	∞	-1	1
2. Reciprocals	1	$1/\infty$	-1	1
	1	0	-1	1
3. Reduction	1	0	-1	1

4. Miller-Bravais Indices $(10\bar{1}1)$

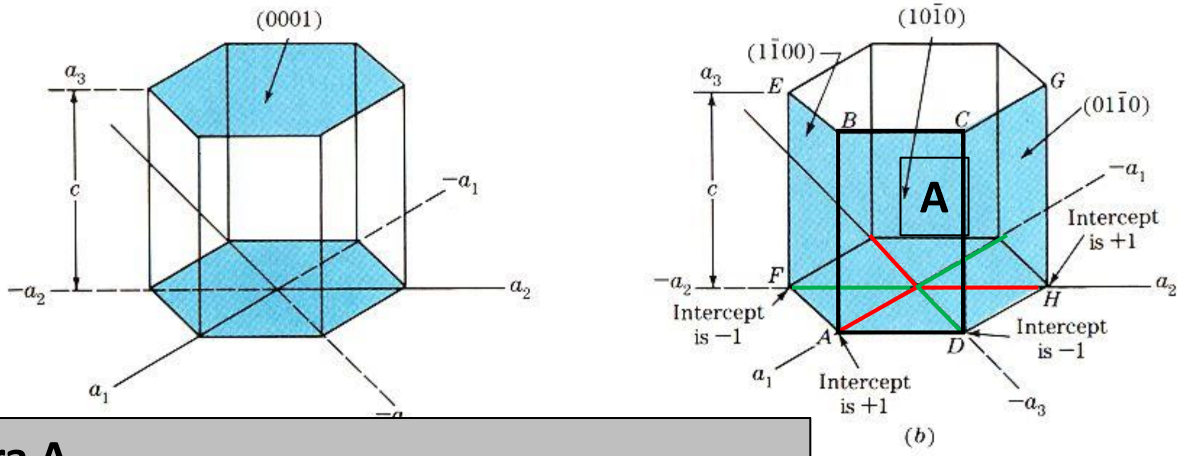


Adapted from Fig. 3.8(b), *Callister & Rethwisch 8e.*

Set of four Miller indices for hexagonal crystals



first three Miller indices add up to zero



Partes positivas de los ejes

Partes negativas de los ejes

<u>Cara A</u>

Intercepta al eje a1 en parte positiva (1)

No intercepta al eje a2 (0)

Intercepta al eje a3 en la parte negativa ($\bar{1}$)

No intercepta al eje c (0)

(10$\bar{1}$0)

Resumen de determinación de los índices de Miller

1. Determinar el sistema cristalino:
   1. Triclínico, monoclínico, rómbico, tetragonal y cúbico: (hkl)
   2. Romboédrico y hexagonal: (hkil)
2. Orientar el cristal
3. Eje a:
   1. ¿Corta el plano al eje a?
   2. ¿En qué valores lo corta? Si corta en el lado negativo del eje, se pone un guion encima del número. Si no corta al eje, el valor es ∞.
   3. Se calcula el inverso del valor.
4. Se repite el proceso para los ejes b y c (ejes a1, a2, a3 y c para sistemas romboédrico y hexagonal).
5. Si algún índice es una fracción, se normalizan todos los índices al mínimo común denominador y se elimina el denominador.

Indices de Miller para las formas simples

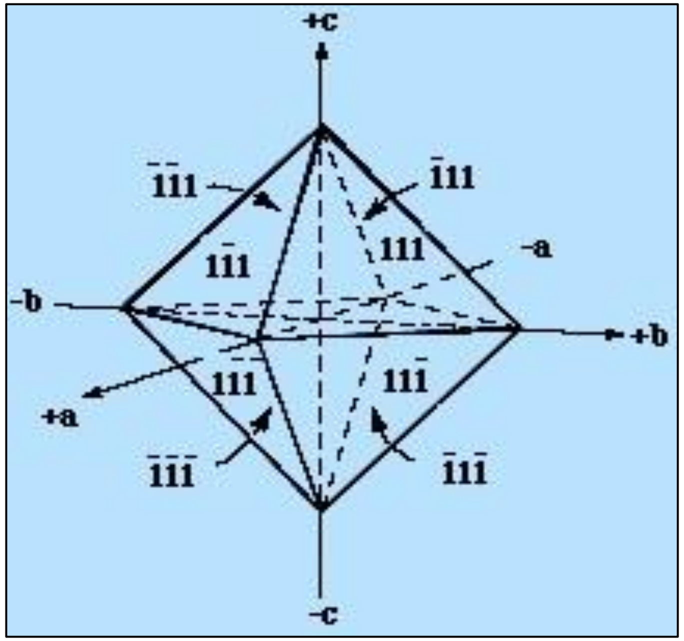
Al igual que para las caras, se pueden usar los índices de Miller para denotar las formas simples: si todas las caras están relacionadas entre sí por un mismo elemento de simetría, bastan los índices de una cara para determinar el resto de caras.

Entre paréntesis se denotan las caras (hkl) y entre corchetes las formas simples {hkl}. Significa todos los planos homólogos que resultan de aplicar todos los elementos de símetria sobre un plano.

Ejemplo:

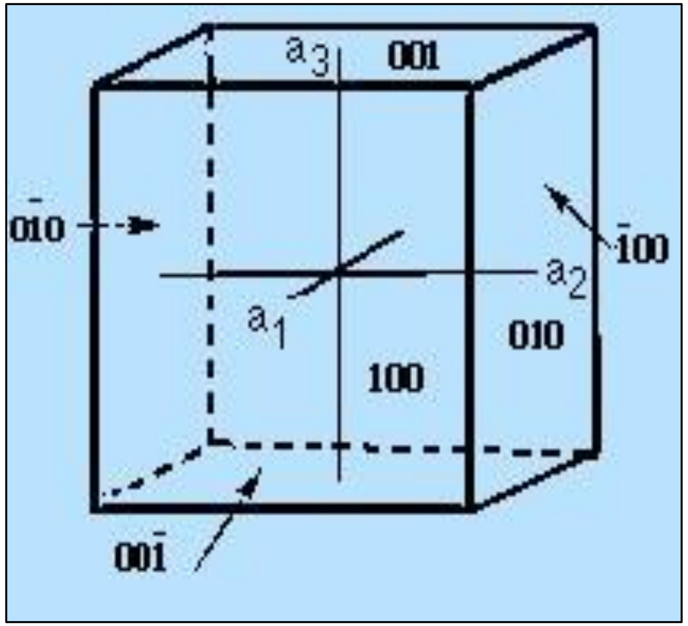
Octaedro: {hkl}   cubo: {100}

Indices de Miller de las caras de un octaedro



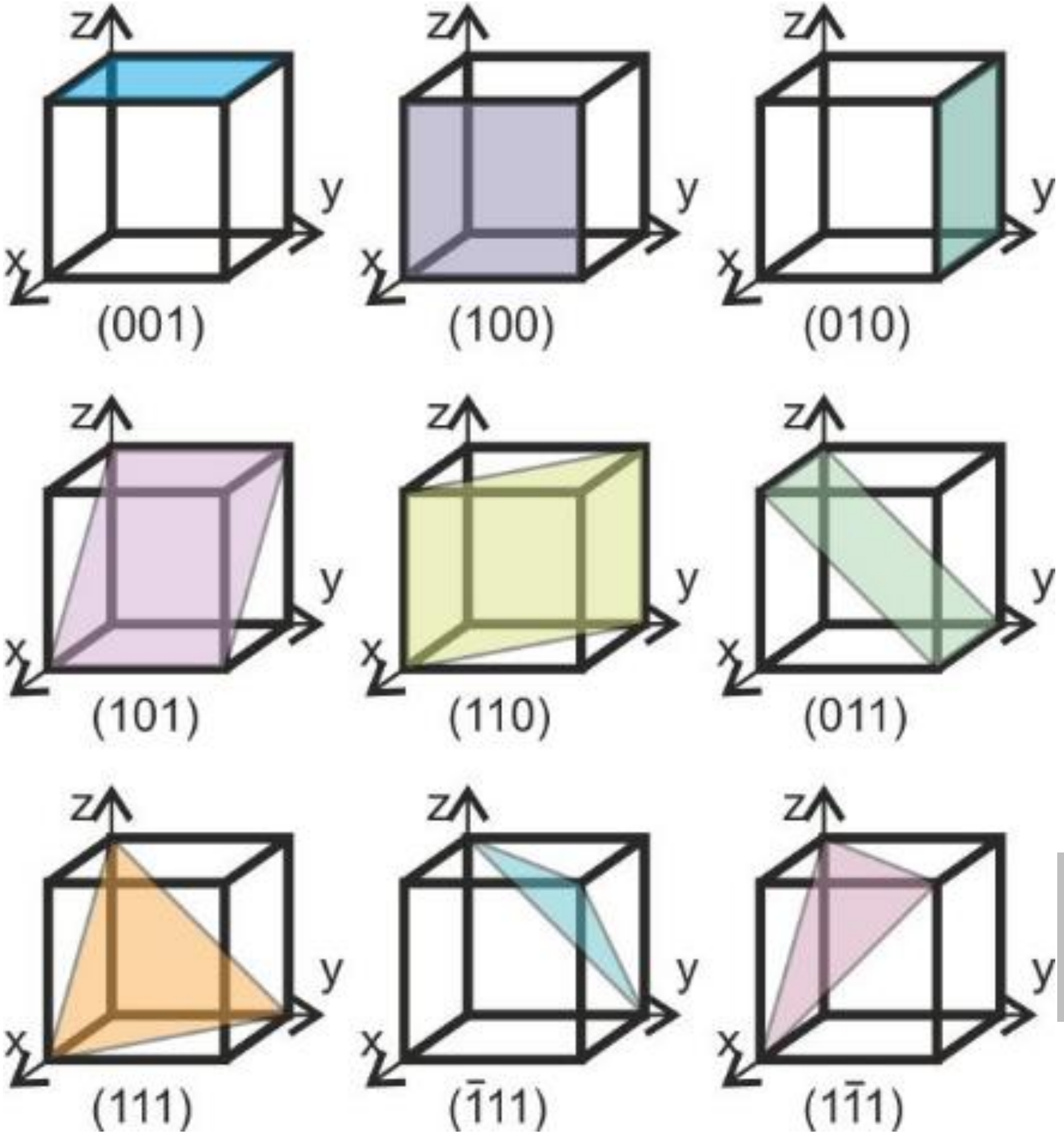
{111} Abarca las 8 caras del octaedro

Indices de Miller de las caras de un cubo



{011} Abarca las 6 caras del cubo

Clasificación del tipo de cara según los índices de Miller



Caras pinacoidales
(cortan a un solo eje)

Caras prismáticas
(cortan dos ejes)

Caras piramidales
(cortan a los tres ejes)

Ejercicios

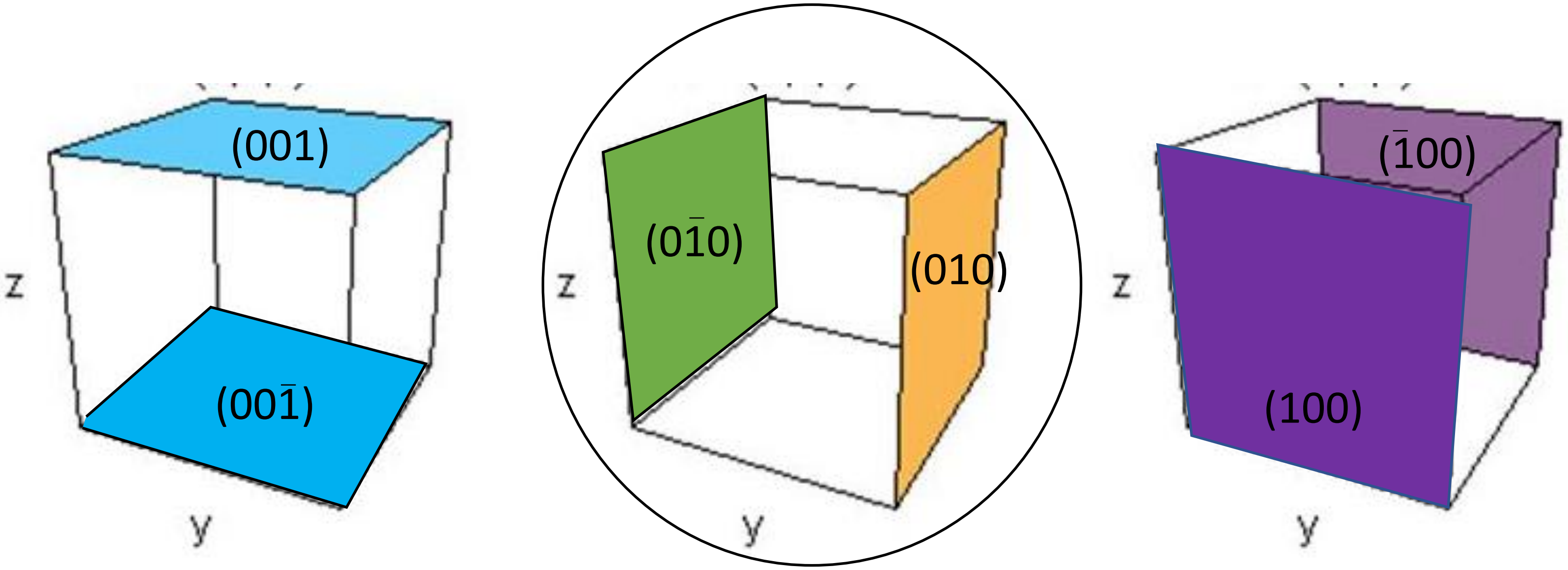
Discuta las siguientes notaciones

$(h0l)$

$(h0k\bar{l})$

$(\bar{1}\bar{1}0)$

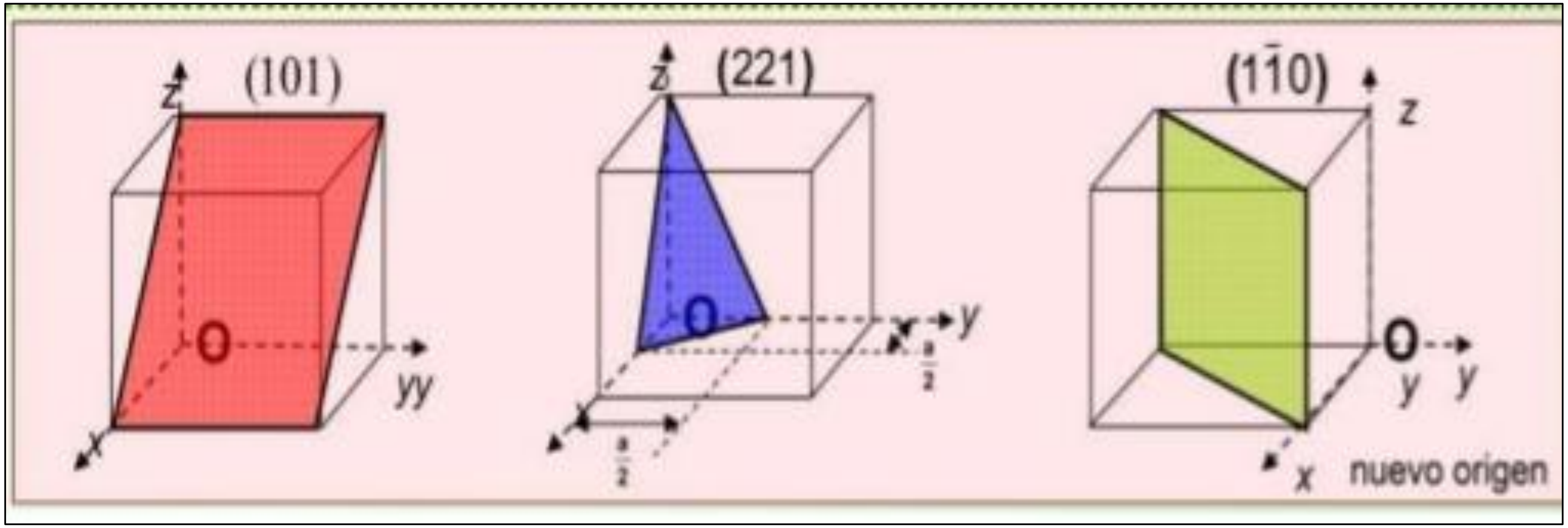
a) Determine los índices de las caras coloreadas



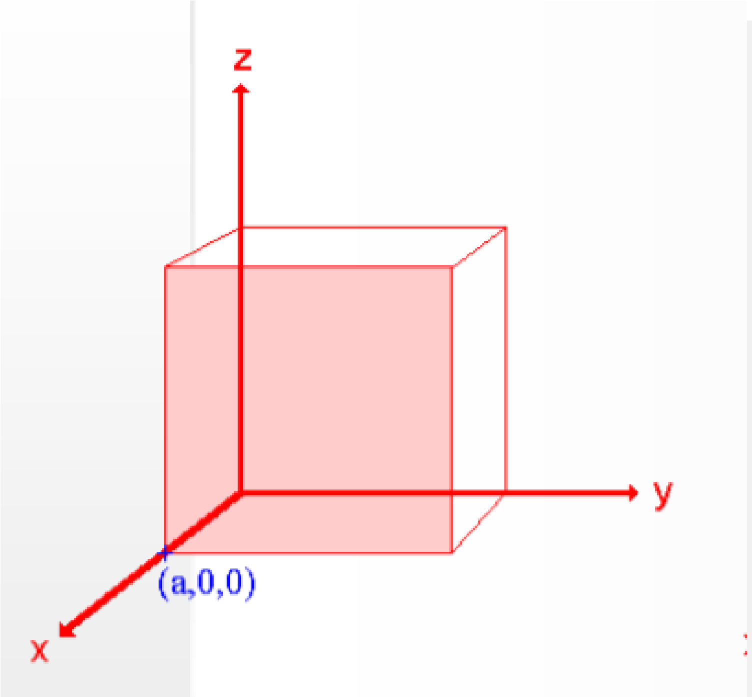
b) Si un mineral tiene exfoliacion paralela a (010), ¿cuál de los casos anteriores se correspondería a la situación planteada?

c) ¿Considera Ud que en el caso B varíe la dirección de exfoliación si cambia la cara? Explique

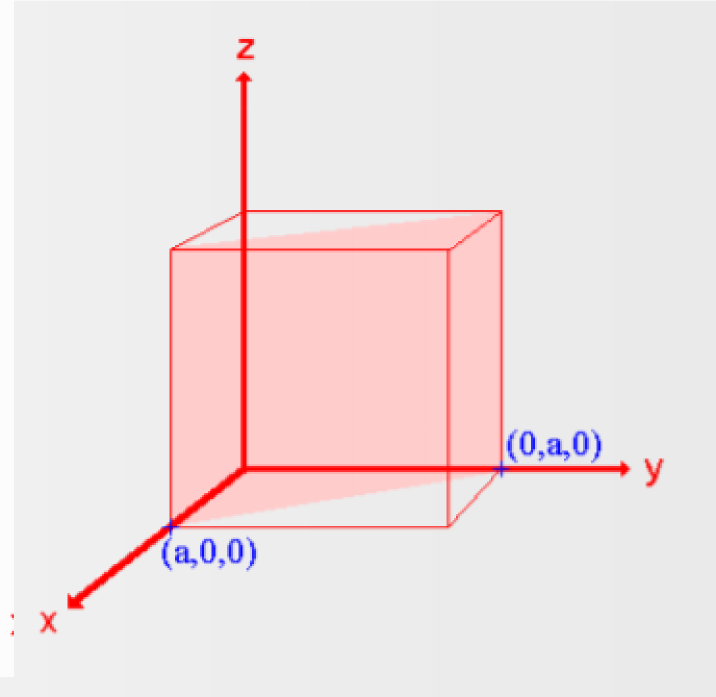
Clasifique el tipo de cara según los índices de Miller dados



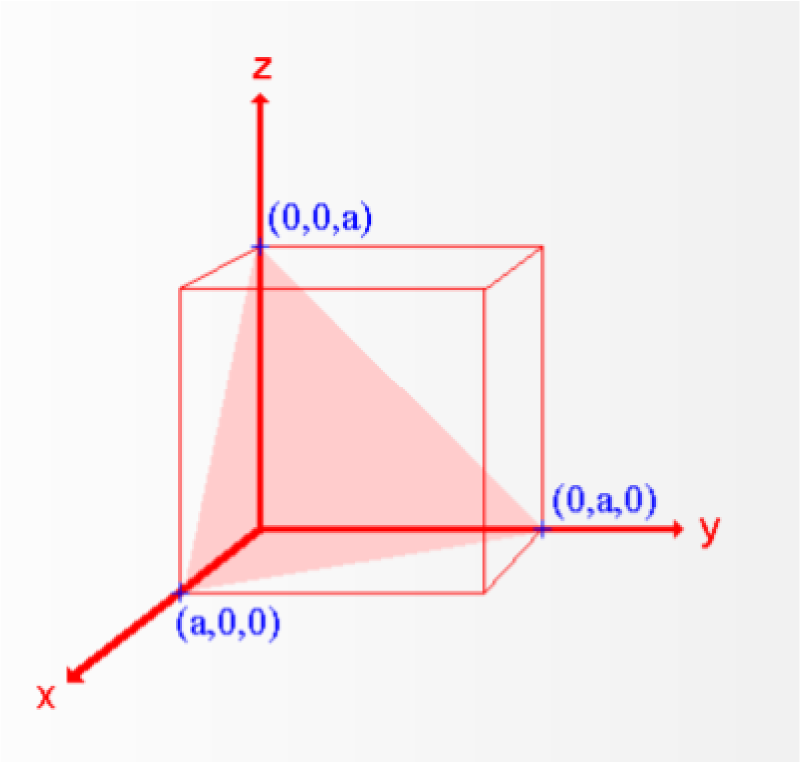
Ejercicio



(100)

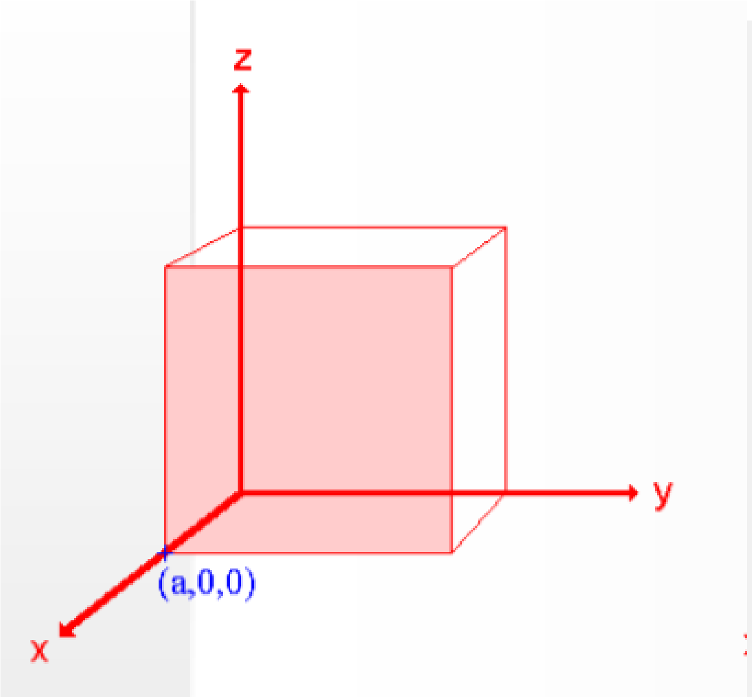


(110)

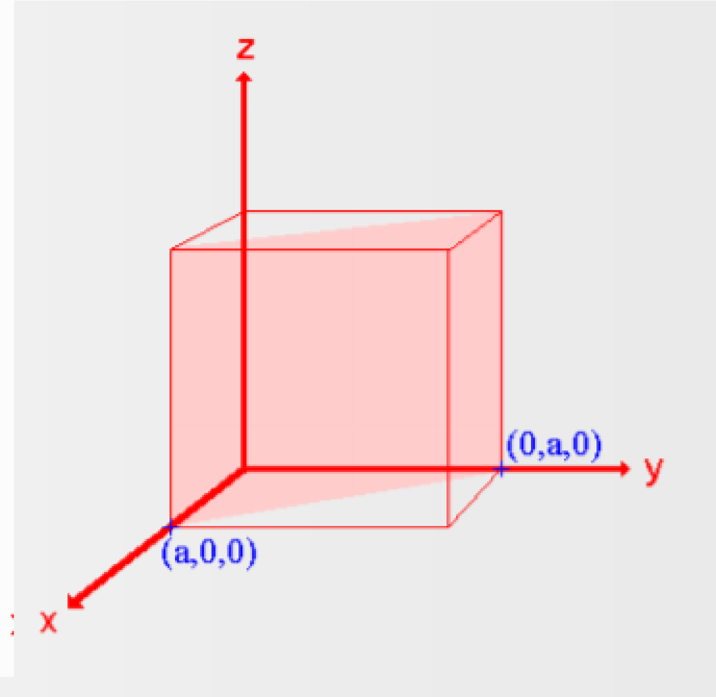


(111)

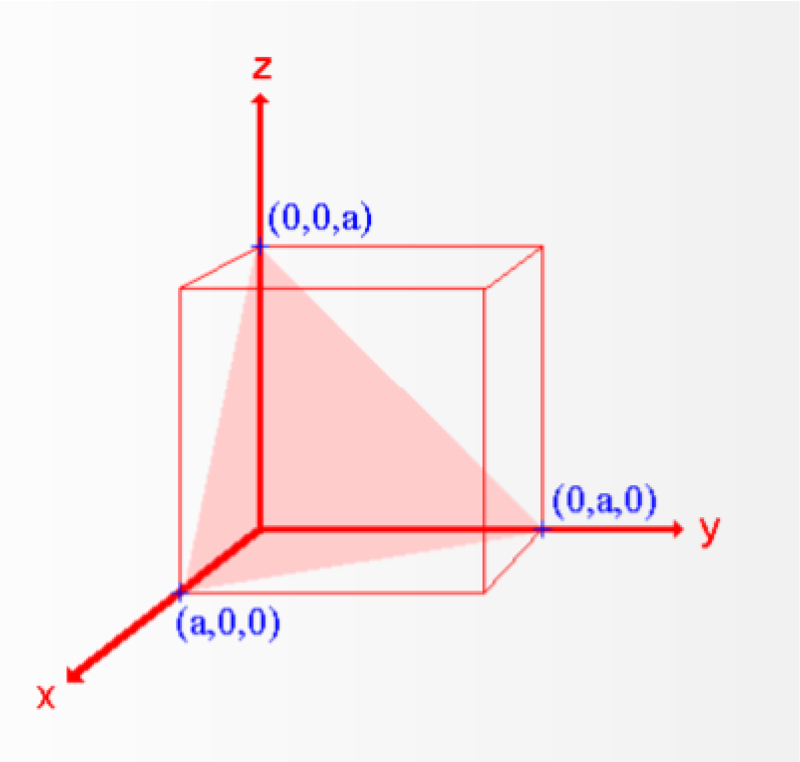
Ejercicio



(100)

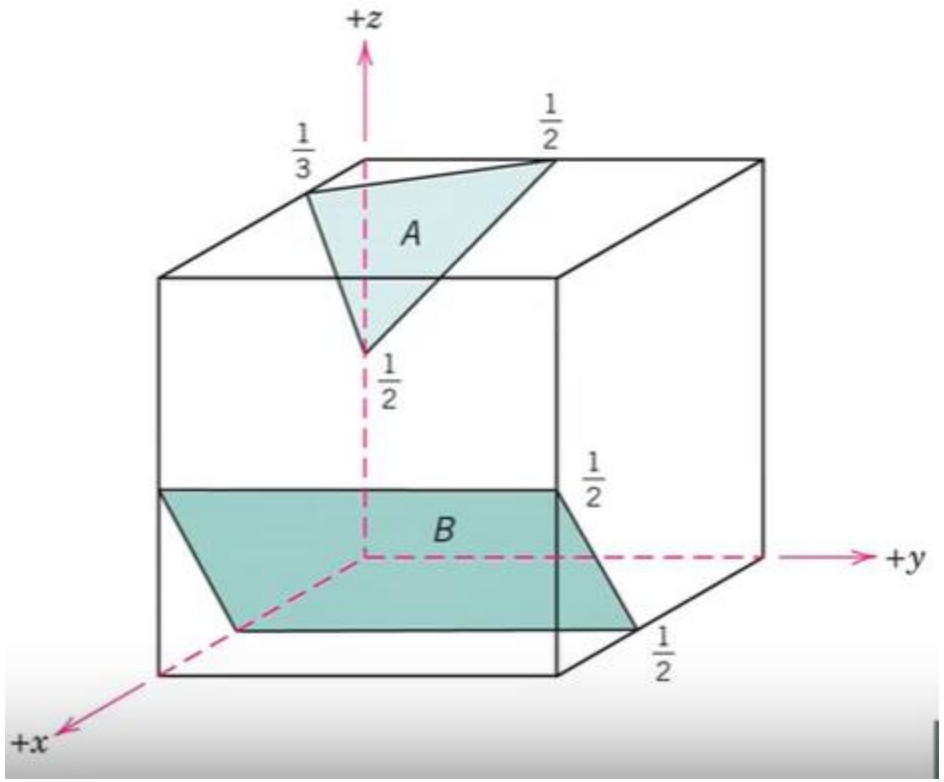


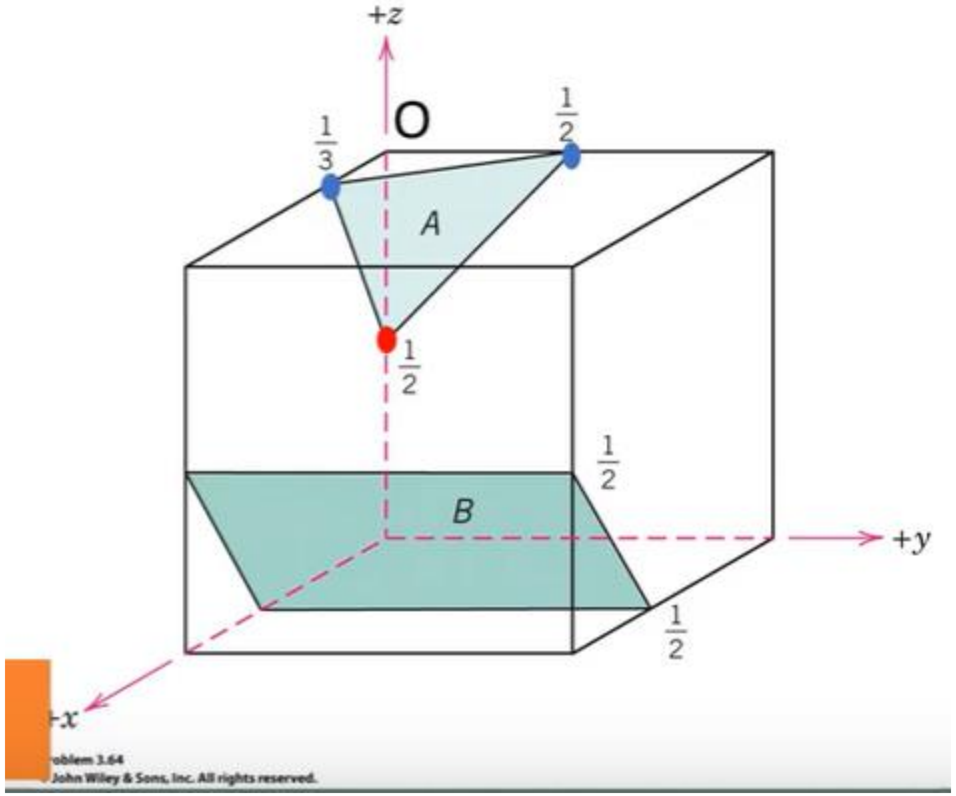
(110)



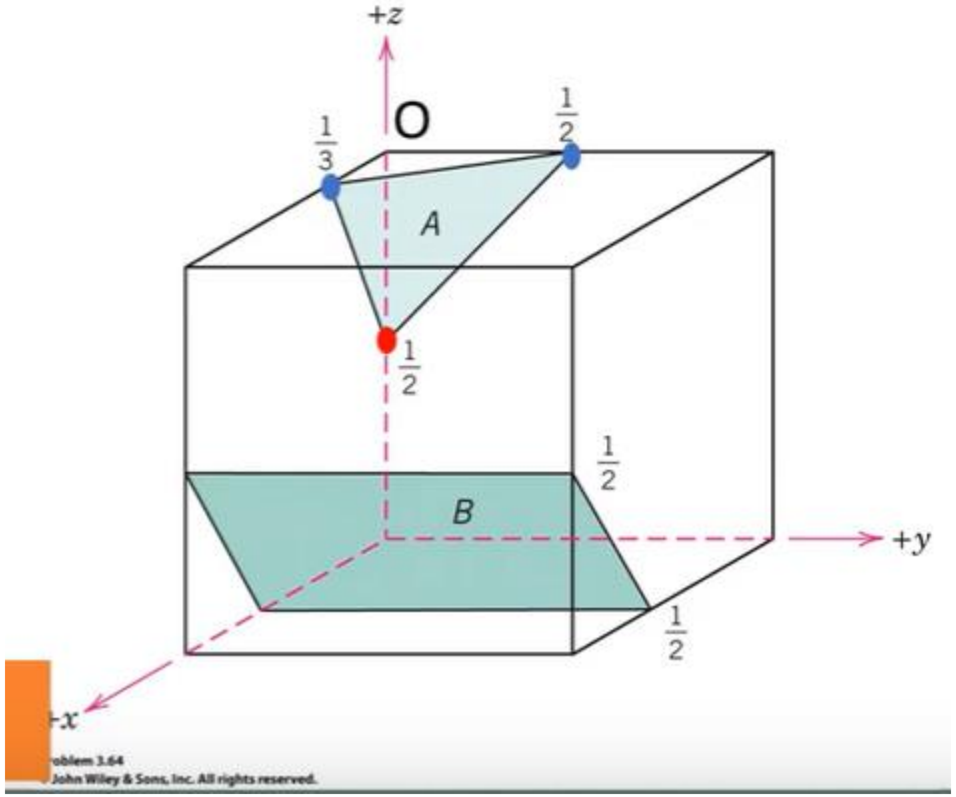
(111)

Ejercicio


+z
1
3
1
2
A
1
2
1
2
B
+y
1
2
+x

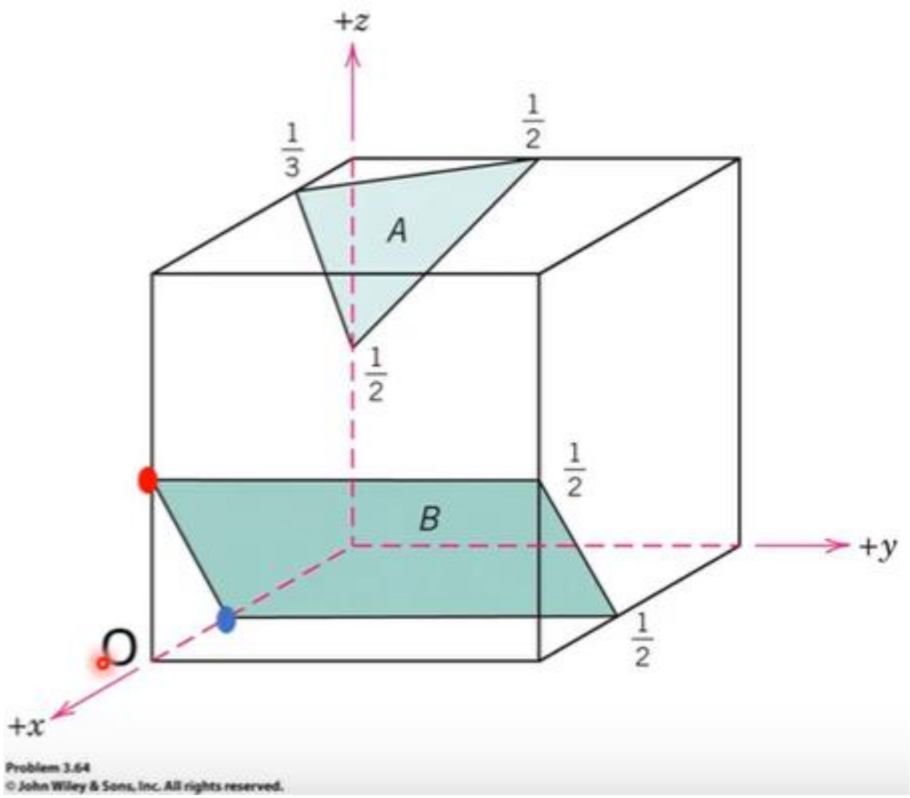

+z
O
1
3
1
2
A
1
2
1
2
B
+y
1
2
+x
roblem 3.64
John Wiley & Sons, Inc. All rights reserved.

Ejercicio



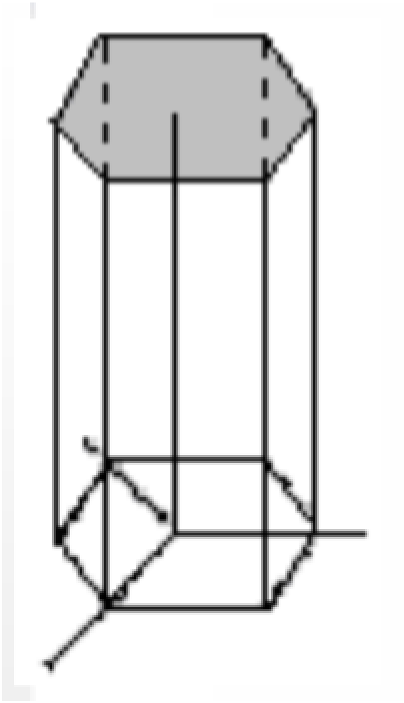
a	*b*	*c*
$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
$\frac{1}{1/3}$	$\frac{1}{1/2}$	$-\frac{1}{1/2}$
3	2	-2

Ejercicio

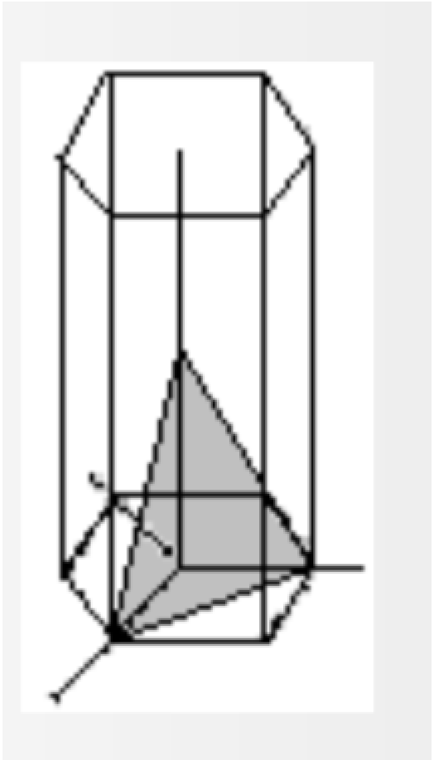


		a	b	c
1.	Reposition origin			
2.	Intercepts	$-\frac{1}{2}$	∞	$\frac{1}{2}$
3.	Reciprocals	$-\frac{1}{\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{\infty}$	$\frac{1}{\frac{1}{2}}$
		-2	0	2
4.	Reduction	-1	0	1
5.	Miller Indices	$\left(\bar{1}01\right)$		

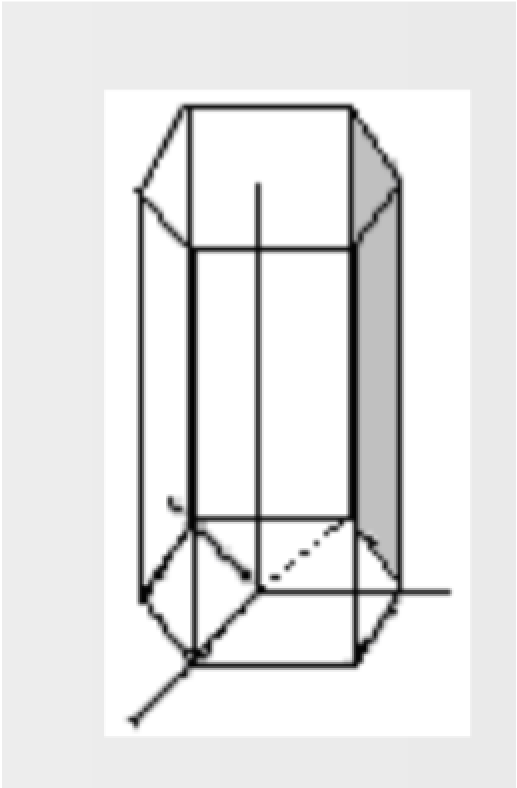
Ejercicio



(0001)



(1102)



($\bar{1}100$)