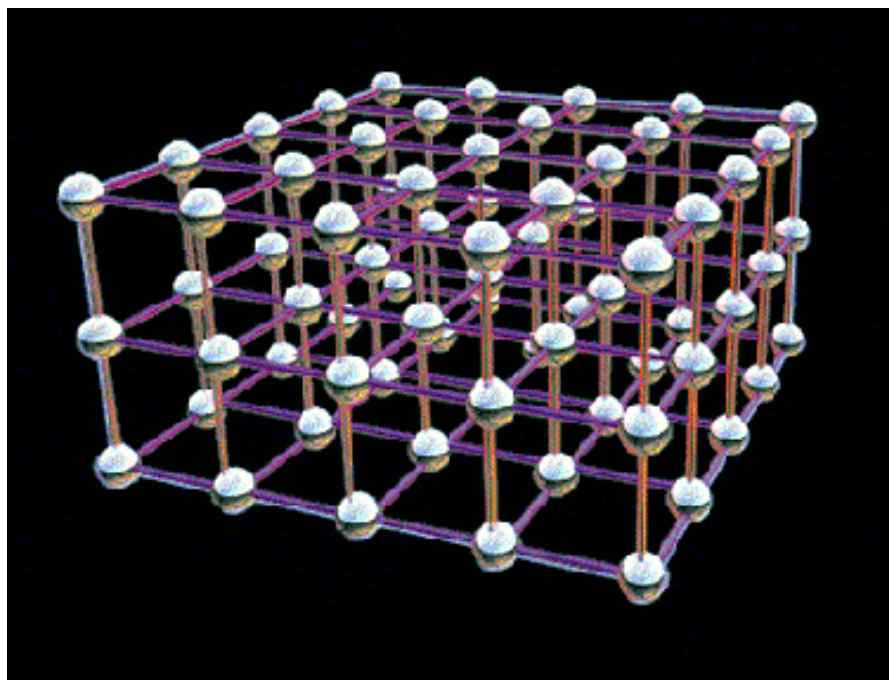


Conceitos Fundamentais

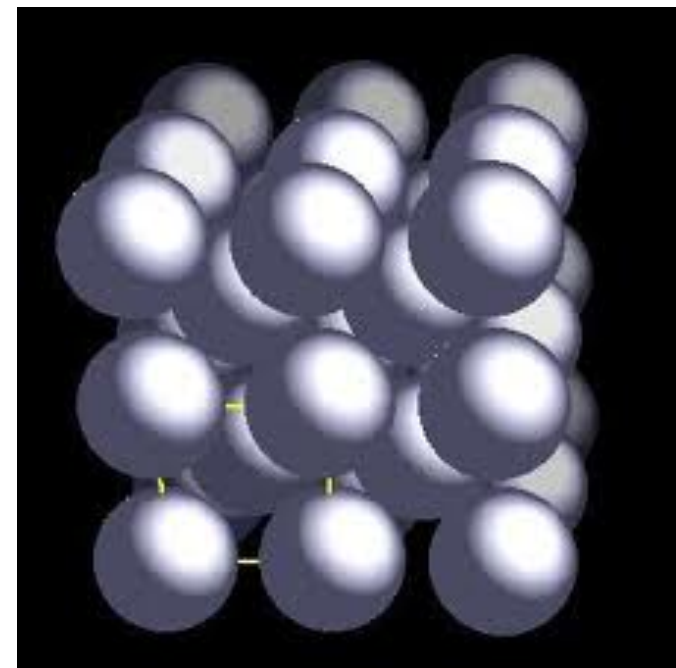
A forma como os átomos se arrancam para formar um sólido define uma estrutura tridimensional com certo grau de ordenamento.

Um material é considerado Cristalino quando seus constituintes (átomos/íons) se arrancam de forma ordenada produzindo um ordenamento de longo alcance. Entende-se por longo alcance uma distância muito maior que distância interatômica. Abaixo estão representadas duas estruturas cristalinas comuns

Obs: Distância interatômica $\approx 10^{-10}$ m.



(a) Estrutura Cúbica



(b) Estrutura Cúbica de Corpo Centrado.

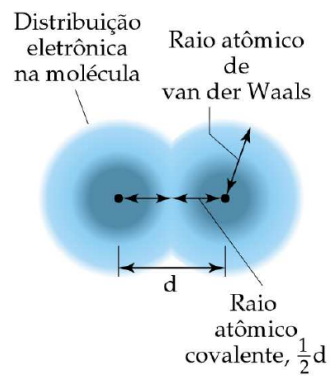
Como é comum, inicia-se uma abordagem científica considerando-se um modelo mais simples possível para a descrição do sistema estudado. Enquanto os valores experimentais concordam com o modelo teórico em questão se diz que o sistema funciona como o modelo que o descreve. À medida que os experimentos retornam valores mais distanciados daqueles propostos pelo modelo, então o modelo deve ser aprimorado introduzindo-se maior detalhamento; ou o modelo deve ser substituído.

⇒ Vamos estudar os sistemas cristalinos considerando-se o modelo de esferas rígidas: Os átomos (Íons) se agrupam como se fossem esferas rígidas.

Obs Como vimos nos estudos do modelo quântico dos átomos, efetivamente um átomo não é uma esfera rígida - Na verdade está bem longe disto - Contudo, ao ligar-se com um vizinho as nuvens eletrônicas se superpõem e o par de átomos atinge a estabilidade com um dado distanciamento interatômico. Para átomos do mesmo tipo pode-se definir seu raio atômico como sendo a metade desta distância. Veja Figura abaixo.



Vamos, portanto, assumir átomos como esferas rígidas cujos raios definem a distância entre vizinhos



Na Fig. ao Lado.

(a) Uma célula unitária representada no modelo de esferas rígidas.

(b) Uma célula unitária representada no modelo de esferas reduzidas.

(c) Um agregado de muitos átomos no modelo de esferas rígidas.

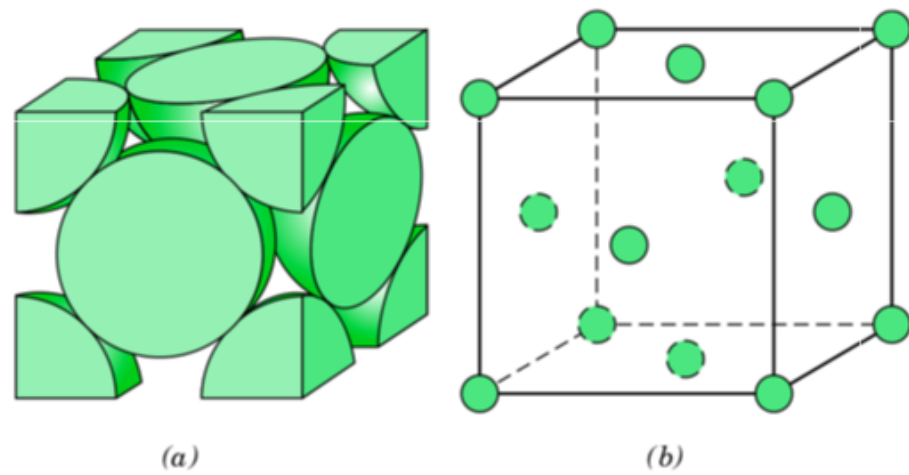
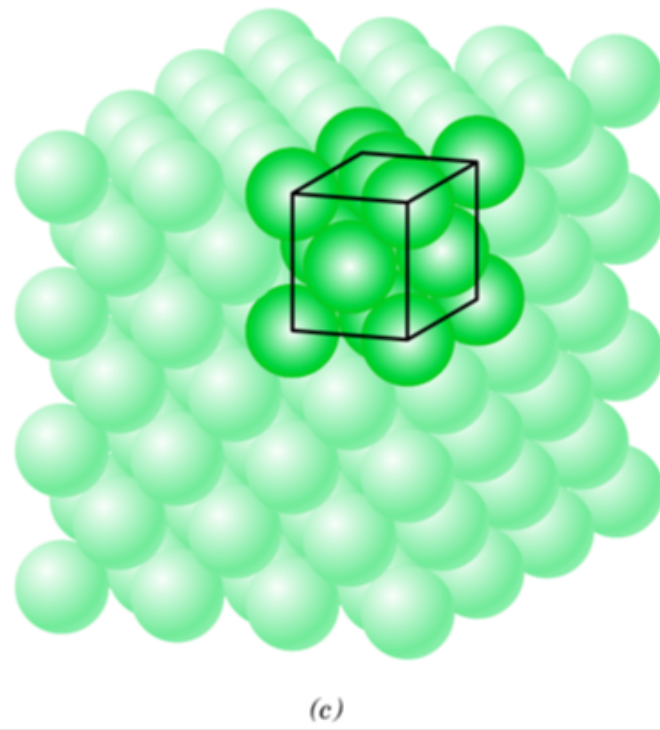


Figure 3.1 For the face-centered cubic crystal structure, (a) a hard-sphere unit cell representation, (b) a reduced-sphere unit cell, and (c) an aggregate of many atoms. [Figure (c) adapted from W. G. Moffatt, G. W. Pearsall, and J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. I, *Structure*, p. 51. Copyright © 1964 by John Wiley & Sons, New York. Reprinted by permission of John Wiley & Sons, Inc.]



★ Células Unitárias:

Acima utilizamos exemplos de estruturas cristalinas monoatômicas simples, algo como bolinhas de gude empilhadas. A estrutura da Fig. acima é denominada **Cúbica de Face Centrada**. De um ponto de vista mais geral, uma estrutura pode conter em vez de átomos que se repetem – estruturas (conjuntos de átomos) que se repetem (veja Fig. abaixo)



Sistema Cúbico 2D.

Obs: três átomos A, B e C formam um pequeno aglomerado sem ordem. Este pequeno aglomerado pode se "empilhar" de forma ordenada produzindo um sistema cristalino.

O sistema representado ao lado é um sistema cúbico. A base que forma o sistema não é necessariamente ordenada

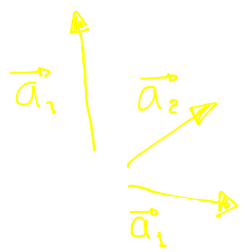
A disposição espacial do aglomerado segue alguma simetria. Define-se uma rede abstrata (ferramenta matemática) como

$$\vec{R} = m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{a}_2 + m_3 \vec{a}_3 \quad \text{com } m_i = \text{inteiro} \quad , \text{ neste caso em três dimensões.}$$

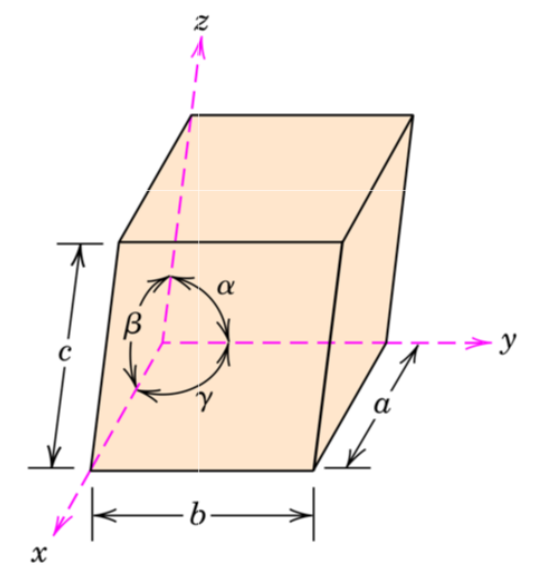
$\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ e $\vec{a}_3$ são vetores definidos como abaixo.

Note que $\vec{R} = m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{a}_2 + m_3 \vec{a}_3$ corresponde a uma posição sobre algum ponto da rede.

Vale frisar que, de uma forma geral, os vetores unitários não são ortogonais (não necessariamente)



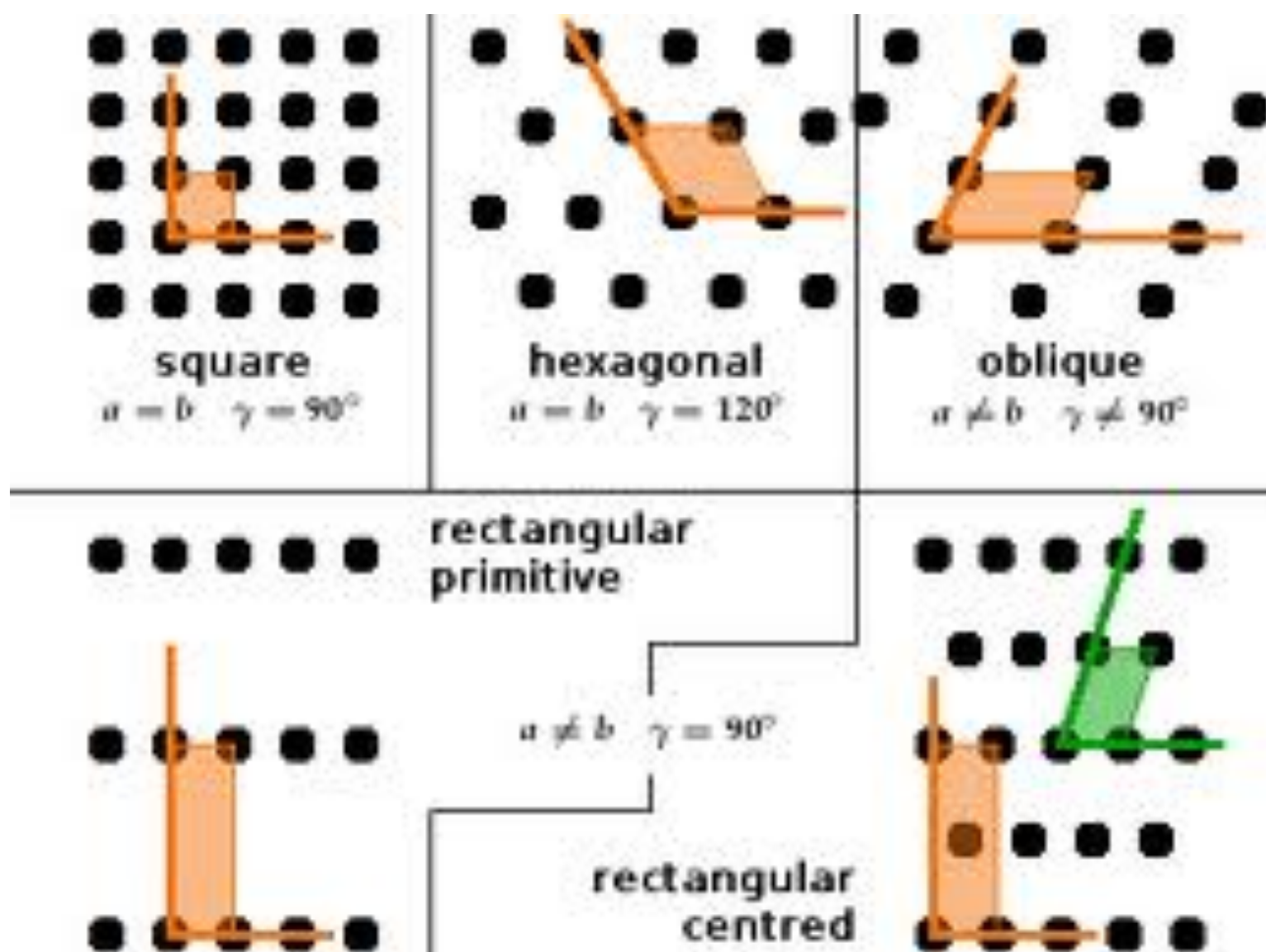
— — —



²Also called *trigonal*.

A rede gerada por $\vec{R} = m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{a}_2 + m_3 \vec{a}_3$ é denominada rede de Bravais e trata-se de uma rede abstrata (um conjunto de pontos imaginários no espaço) utilizada para se representar a simetria de algum sistema real

Abaixo relacionamos algumas redes de Bravais 2D

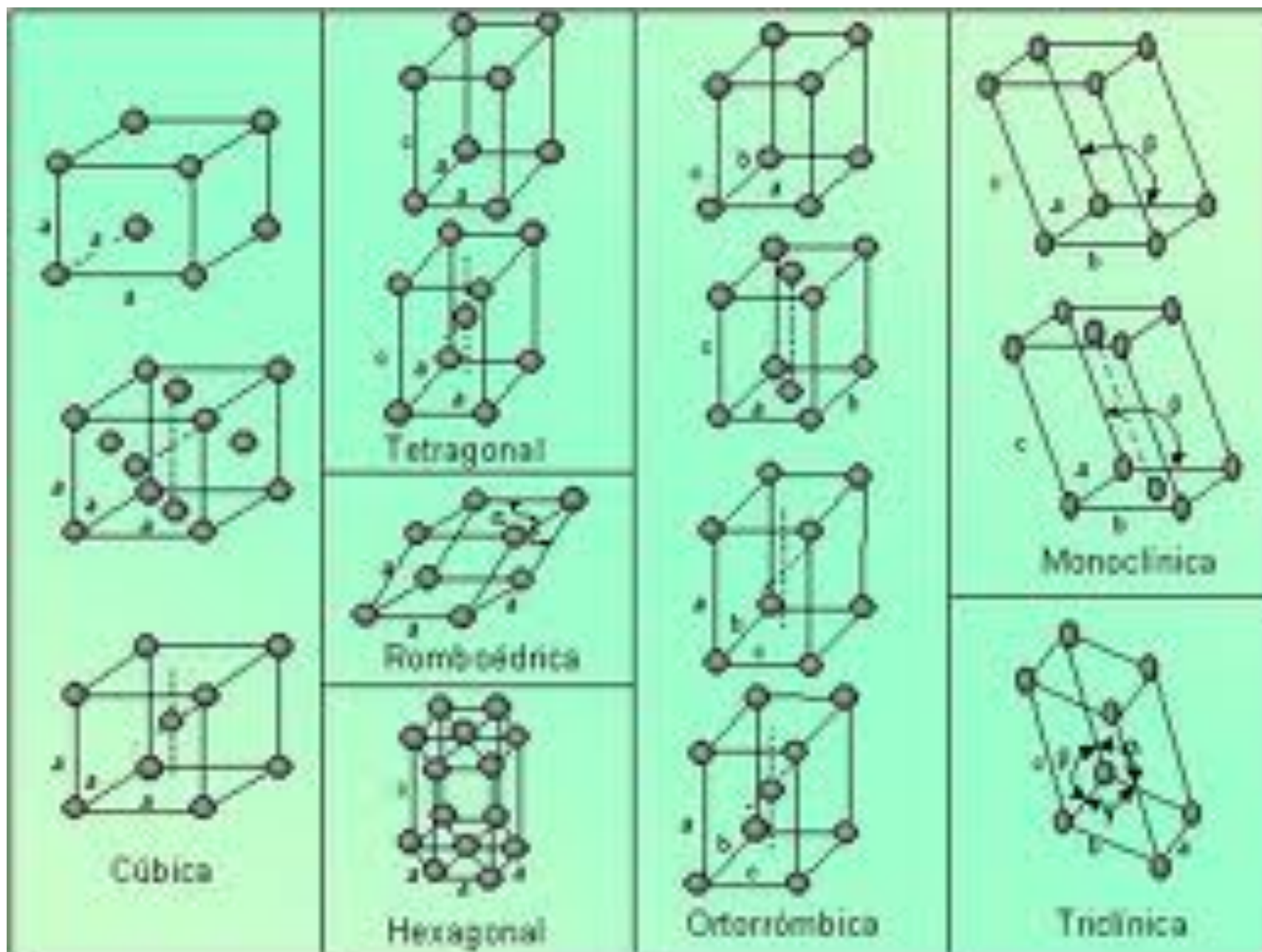


Obs: Note que é possível definir uma rede com pontos centrados (comum).

Célula unitária.

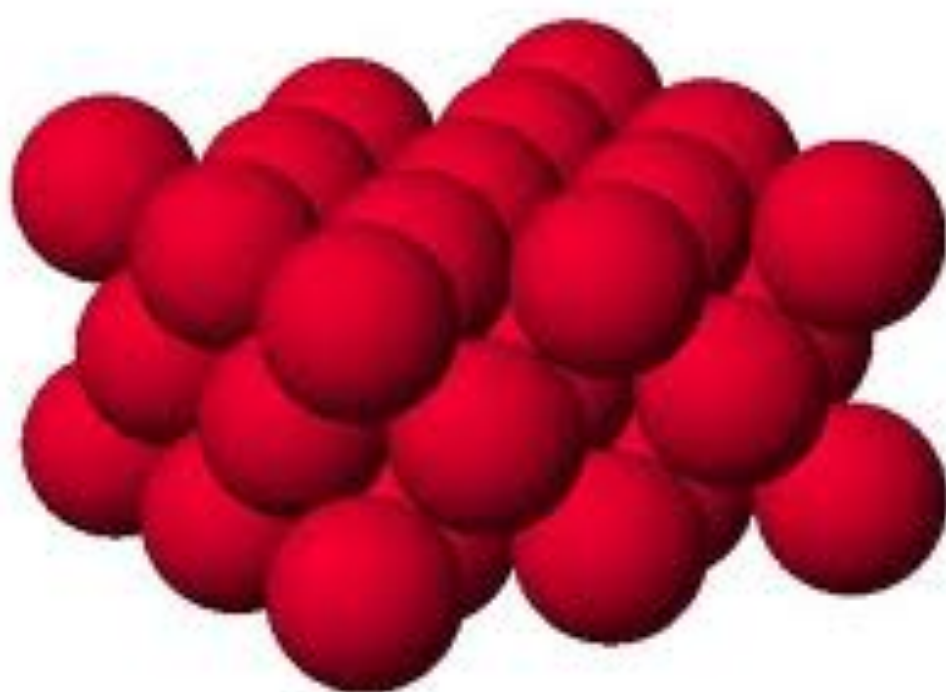
Qualquer bloco da rede de Bravais capaz de ser empilhado de forma a reproduzir o sistema completo é denominado de Bloco unitário - Comumente chamado de **Célula Unitária**.

Abaixo estão representados alguns tipos de Células unitárias.



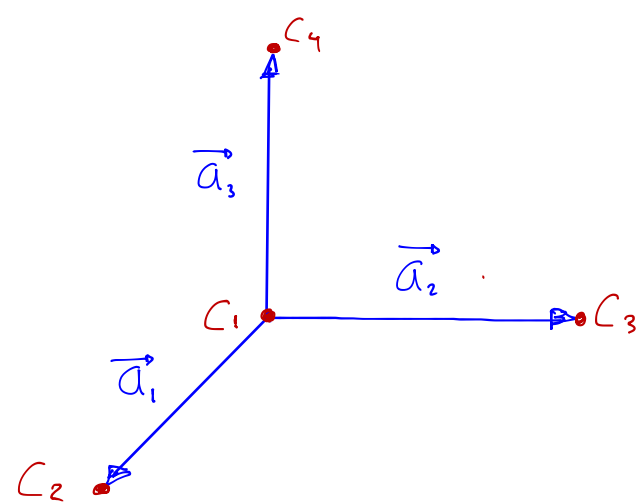
Muitos metais apresentam estrutura cúbica com átomos posicionados em seus vértices e, possivelmente, centrados no centro do cubo ou de suas faces.

Estrutura Cúbica de Face Centrada - Compacta.



Se situarmos os pontos de uma rede de Bravais cúbica nos centros de átomos na forma

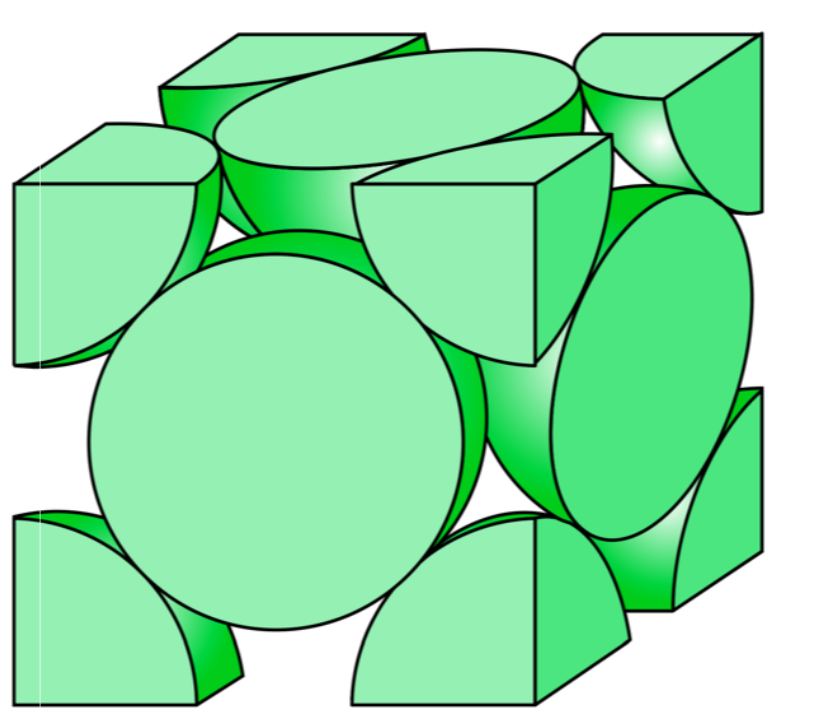




C_1 = Centro de um dos átomos escolhidos para coincidirem com pontos da rede de Bravais.

Seja $a_1 = a_2 = a_3$ "módulos" $|\vec{a}_i| = a_i$

Estes vetores delinham uma célula unitária cúbica. Dentro desta célula temos, portanto, partes de átomos como representamos abaixo. (para um sistema compacto).



Conhecendo o tipo de estrutura (o que é possível experimentalmente e com apoio de um ferramental teórico) diversas características do sólido podem ser obtida.

Exemplo - cálculo da densidade de um sólido com estrutura cúbica de face centrada e com parâmetro de rede a .

Solução:

Como se calcula densidade (ρ)?

$\Rightarrow \rho = \frac{\text{Massa em um Volume}}{\text{Volume}}$, portanto podemos trabalhar com uma célula unitária bastando calcular o seu volume e a massa contida na célula.

$\Rightarrow \text{Volume} = a^3$ "para uma célula cúbica"

$\text{Massa}(M) = (\text{Massa de cada átomo}) \times (\text{quantos átomos estão dentro da célula})$

$\Rightarrow$ Para uma estrutura CFC (cúbica de face centrada) temos 4 átomos dentro da célula, cada um com massa m_a .

$$M = m_a \times 4$$

$$\Rightarrow \rho = \frac{4 \cdot m_a}{a^3}$$



Escrevendo a massa de um átomo como função da unidade de massa atômica u.

⇒ Uma unidade de massa atômica é definida a partir do átomo de carbono-12, tal que:

$$1u = \frac{\text{massa de um átomo de carbono-12}}{12}, \text{ pois assume-se que a massa atômica do carbono é}$$

igual ao número de nucleons (prótons + Neutrons) em seu núcleo que é 12 u.

O número de Avogrado.

Uma vez calculada a massa de um átomo de Carbono (Experimentalmente determinada) encontrou-se que o átomo de Carbono possui massa igual a $19,93 \times 10^{-24} \text{ g}$

Pareceu conveniente trabalhar-se com uma quantidade de átomos normalmente utilizada na rotina dos laboratórios. Como um átomo de Carbono possui massa $m = 12u$ (por definição) Quantos átomos seriam necessários para uma massa $m^* = 12 \text{ g}$?

Vamos então agrupar as informações:

$$m_c = 19,93 \times 10^{-24} \text{ g} \quad \text{e} \quad m_c = 12u \quad (1)$$

Quero que $N \cdot m_c = 12 \text{ g}$, sendo N o número de átomos.

$$\Rightarrow N = \frac{12}{19,93} \times 10^{24} = 0,602 \times 10^{24}$$

$$\Rightarrow N = 6,02 \times 10^{23}$$

— " —

De uma forma geral se um átomo possui massa atômica = Xu

Queremos que $N \cdot Xu = X \text{ g}$

$$\Rightarrow N = \frac{1}{u}$$

Das relações (1) temos que

$$12u = 19,93 \times 10^{-24} \text{ g}$$

$$u = 1,66 \times 10^{-24} \text{ g}$$

$$\Rightarrow N = \frac{1}{1,66} \times 10^{24}$$

↑ $N = 6,02 \times 10^{23}$, Chamado de número de Avogrado ou de 1 mol.

Significa que dada uma quantidade de massa atômica $\Rightarrow N \times \underbrace{(\text{quantidade de massa atômica})}_X$ mos da
 X em gramas que corresponde à massa que $6,02 \times 10^{23}$ grupos com Xu possui.

Obs: O número de Avogrado será denotado por N_A .

— " —

Voltemos ao problema original:

tenhamos que $\rho = \frac{4 \cdot m_a}{a^3}$, para uma célula CFC.

m_a = massa de um átomo em gramas. Devemos escrever m_a em função da quantidade de massa atômica (X) que um átomo possui, afinal, este é o dado que temos mais comumente (que é aproximadamente o número de Nucleons de um átomo - prótons + Neutrons).

temos que $6,02 \times 10^{23} \cdot m_a = Xg$

$$m_a = \frac{X}{6,02 \times 10^{23}} g$$

$$\Rightarrow \rho = \frac{4}{a^3} \cdot \frac{X}{N_A} g$$

Portanto podemos calcular a densidade de um sólido cristalino se conhecermos o tipo de átomo que compõe o sólido, o tipo de estrutura cristalina e o volume da célula unitária.

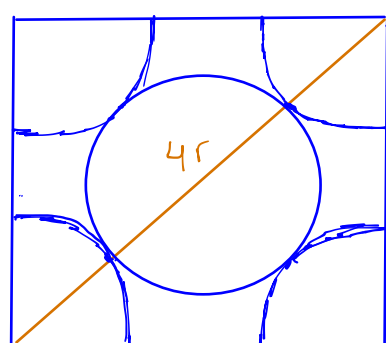
Como exemplo vamos calcular a densidade do Alumínio.

Alumínio apresenta uma estrutura CFC (4 átomos na célula)

" possui massa atômica $X = 26,98$

O átomo Al possui raio $r \approx 143 \text{ pm} = 143 \times 10^{-12} \text{ m}$

Cálculo do volume:



$$\Rightarrow a = 4r \cos(45^\circ)$$

$$a = \frac{4r \sqrt{2}}{2}$$

$$a = 2\sqrt{2} \cdot r$$

$$\text{Neste caso } a = 2\sqrt{2} \cdot 143 \times 10^{-12} \text{ m}$$

$$a = 286\sqrt{2} \times 10^{-12} \text{ m}$$

$$\Rightarrow a^3 = (286\sqrt{2})^3 \cdot 10^{-36} \text{ m}^3$$



$$\Rightarrow \rho_{Al} = \frac{4 \times 26,98}{(286,17)^3 \cdot 10^{-36} \times 6,02 \times 10^{23}} \quad \text{g/m}^3$$

$$\rho_{Al} = \frac{107,92}{3,98 \times 10^8 \times 10^{-36} \times 10^{23}} \quad \text{g/m}^3$$

$$\rho_{Al} \cong 26,36 \times 10^5 \text{ g/m}^3$$

$$\Rightarrow \rho_{Al} \cong 2,64 \times 10^6 \text{ g/m}^3 \quad \text{ou} \quad \rho_{Al} \cong 2,64 \times 10^3 \text{ kg/m}^3 \quad (\text{SI}).$$

ou ainda $\rho_{Al} \cong 2,64 \text{ g/cm}^3$

Obs:

Conferir com a literatura

— " —

Generalizando o cálculo da densidade para outras estruturas.

$$\Rightarrow \text{Note que } \rho_{CFC} = \frac{4}{a^3} \times \frac{X}{N_A}$$

Não está associado ao tipo de estrutura.

Este fator está conectado com o tipo de estrutura e corresponde a número de átomos dentro da célula dividido pelo volume da célula $\left(\frac{N_{cel}}{V_{cel}}\right)$.

$$\Rightarrow \rho_{geral} = \frac{N_{cel}}{V_{cel}} \cdot \frac{X}{N_A} \quad \text{Para qualquer estrutura.}$$

O fator $\frac{N_{cel}}{V_{cel}}$ corresponde a uma densidade numérica (quantidade de átomos por unidade de volume).

— " —

FATOR DE EMPACOTAMENTO ($\equiv$ FE)

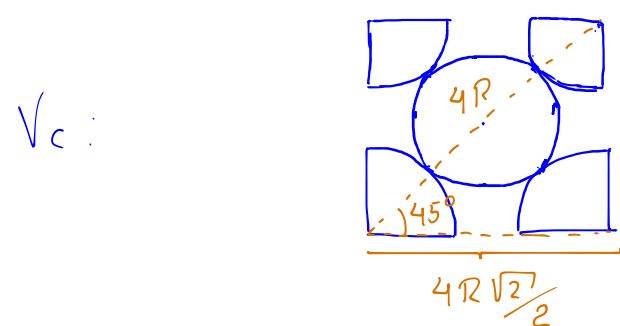
$$\text{Define-se } FE = \frac{V_s}{V_c} = \frac{\text{Volume dos átomos em uma célula unitária}}{\text{Volume de uma célula unitária}}$$

Exemplo: Obter o FE para uma estrutura CFC.

$$FE_{CFC} = \frac{V_s}{V_c}$$

Vamos assumir que o raio do átomo seja conhecido (R).

$$\Rightarrow V_s = N_{\text{átomos}} \cdot V_{\text{átomo}} = 4 \cdot \frac{4}{3} \pi R^3, \text{ para uma estrutura CFC.}$$



$$\Rightarrow V_c = (2R\sqrt{2})^3$$

$$\Rightarrow FE_{CFC} = \frac{4 \cdot \frac{4}{3} \pi R^3}{8 \sqrt{2}^3 R^3} = \frac{16\pi}{24 \sqrt{2}^3}$$

$$\boxed{FE_{CFC} = 0,74.}$$

Note que não depende do raio R - PQ?

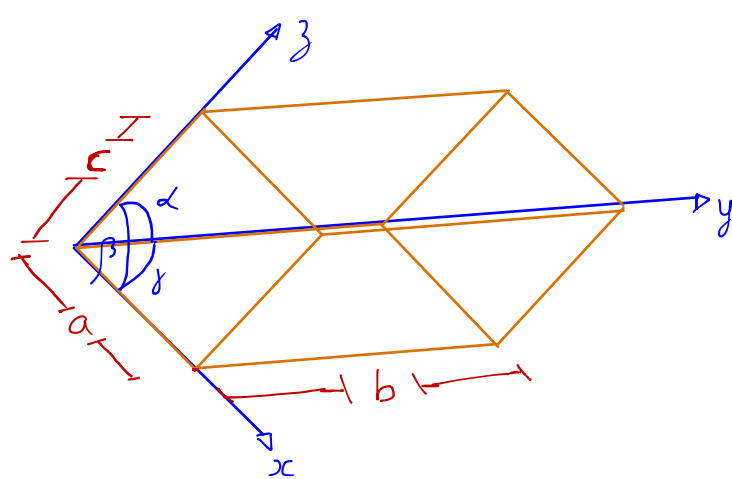
— " —

★

Sistemas Cristalinos

★

Existem muitas possibilidades para diferentes estruturas cristalinas. É conveniente dividir-se em grupos com simetrias similares. A forma mais comum de agrupamento é baseada nas células unitárias em forma de paralelepípedo. Abstraindo a forma como os átomos ocupam uma célula unitária uma célula deste tipo é descrita como segue:

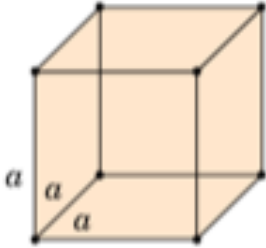
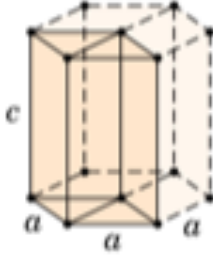
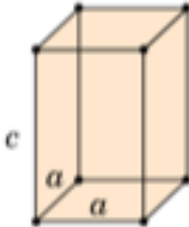
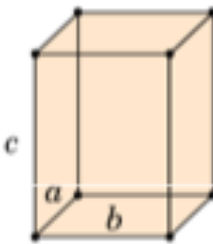
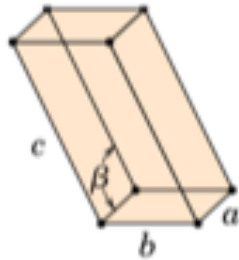
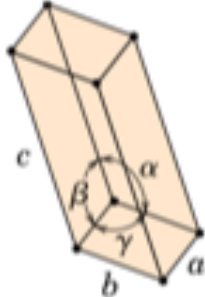


Assim, dados os seis parâmetros a, b, c, α, β e γ , relativamente a um eixo coordenado, a célula fica definida.

Existem apenas sete combinações dos parâmetros acima que representam sete formas estruturais diferentes.

Obs: São consideradas formas iguais aquelas que diferem apenas em tamanho.

As sete formas estão representadas abaixo

<i>Crystal System</i>	<i>Axial Relationships</i>	<i>Interaxial Angles</i>	<i>Unit Cell Geometry</i>
Cubic	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	
Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Rhombohedral (Trigonal)	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	
Orthorhombic	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Monoclinic	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	
Triclinic	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	

Obs: Estas são as estruturas em forma de paralelepipedo encontradas na natureza

Pergunta: Seriam possíveis outras formas? (justifique).

—————

PONTOS, DIREÇÕES E PLANOS CRISTALOGRAFICOS

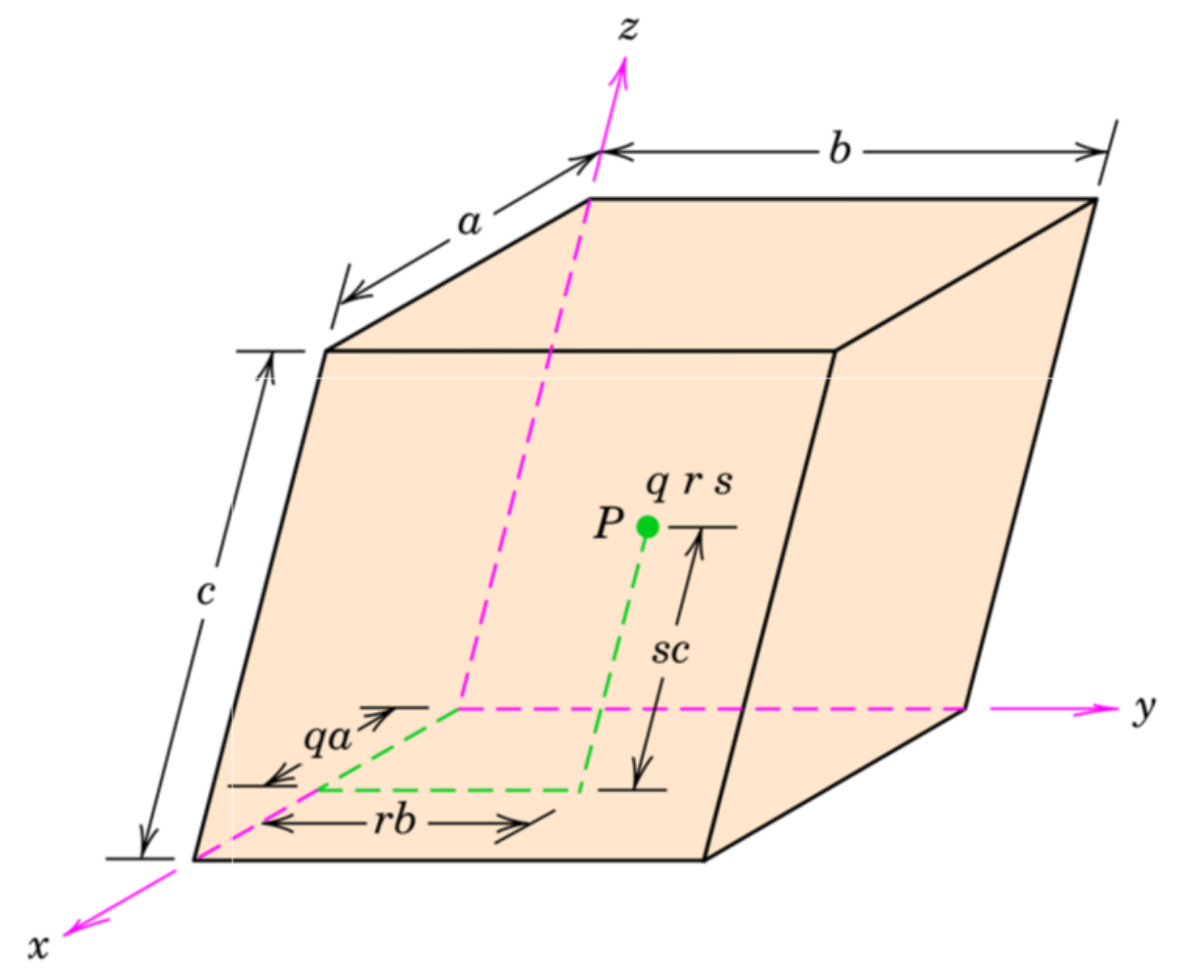
*

PONTOS, DIREÇÕES E PLANOS CRIStALOGRAFICOS

Materiais cristalinos possuem características e/ou propriedades que podem depender da posição (ponto) dentro do cristal, da direção e/ou do plano cristalino. Para um cristal, pelo fato de que a célula unitária + sua base (átomos que a compõem) é idêntica em qualquer ponto do cristal — então as características podem ser totalmente especificadas em termos de uma única célula unitária.

★ Pontos Cristalográficos

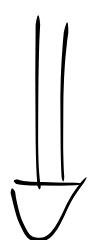
Como comentado no parágrafo acima, vamos trabalhar tendo como referência uma célula unitária. Desta forma, um ponto cristalográfico fica bem especificado como um ponto dentro de uma célula, logo os índices associados a pontos cristalográficos são frações dos vetores unitários como representado abaixo.



Vetorialmente $\vec{OP} = q\vec{a} + r\vec{b} + s\vec{c}$

Exemplo: $q = \frac{1}{2}$, $r = \frac{1}{2}$ e $s = \frac{1}{2}$ representa um ponto no centro do paralelepípedo.

— " —



* Direções cristalográficas.

Uma direção cristalográfica é definida por uma linha ou vetor entre dois pontos cristalográficos.

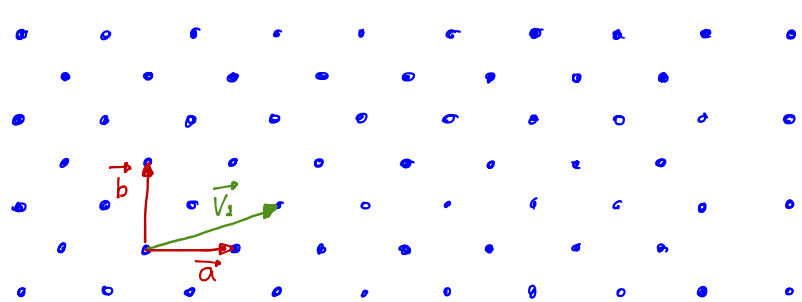
Por simplicidade e associação com a célula unitária utiliza-se índices no formato abaixo:

- 1) O vetor deve ser relativo à origem do sistema coordenado associado à célula unitária
- 2) Os índices devem ser postos com relação aos vetores unitários.
- 3) Estes índices devem ser multiplicados por um fator comum de forma a levá-los aos menores inteiros possíveis.
- 4) São representados na forma $[uvw]$ "sem vírgulas e entre colchetes".

Exemplos:

Consideremos uma rede cúbica de corpo centrado. Uma direção na rede pode, em princípio, ser qualquer. Contudo, quando se especifica alguma direção em uma rede cristalina esta direção geralmente está associada à simetrias da rede. Sendo assim, uma vez definido o referencial, as direções serão vetores com base na origem do sistema referencial e extremidade em algum ponto pertencente à rede cristalina. Veremos, à frente, que essas direções são, geralmente, perpendiculares à planos cristalinos.

Em uma estrutura de corpo centrado - 2D



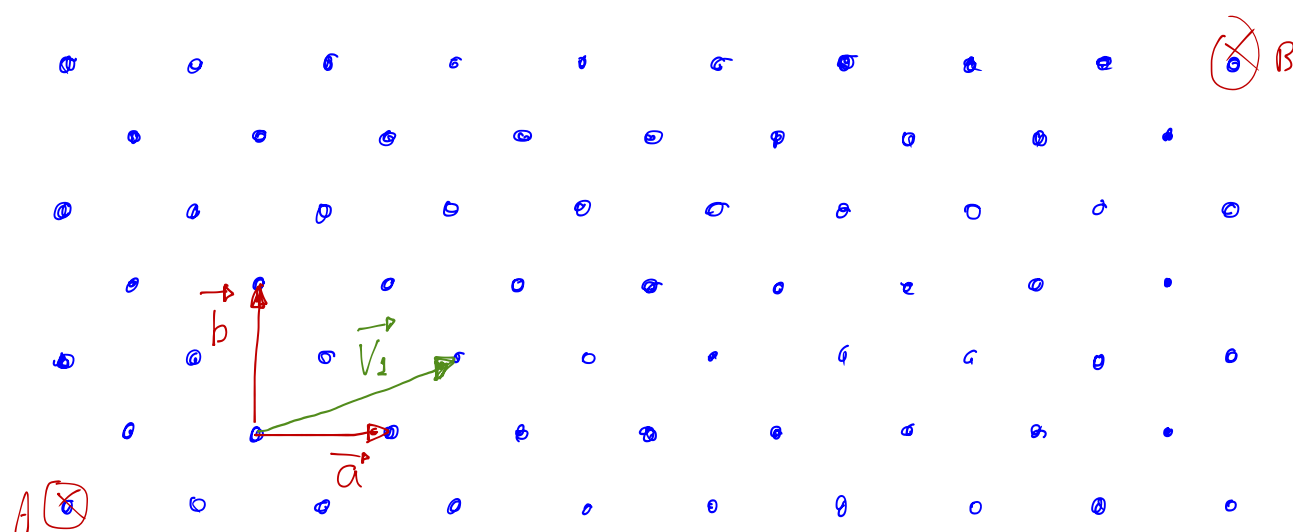
O vetor $\vec{V}_1$ é escrito como $\vec{V}_1 = \frac{3}{2}\vec{a} + \frac{1}{2}\vec{b}$. Os índices correspondem aos coeficientes $\frac{3}{2}$ e $\frac{1}{2}$. Como estamos interessados apenas na direção, então qualquer vetor com esta mesma proporcionalidade entre os coeficientes será paralelo à este e representará a mesma direção cristalográfica. Pelos requerimentos acima (definições) queremos representar direções por números inteiros; devemos então multiplicar $\frac{3}{2}$ e $\frac{1}{2}$ por um fator comum de forma a remanejá-los para inteiros proporcionais.

$$\Rightarrow \left[\frac{3}{2} \quad \frac{1}{2} \right] \times 2 = [3 \ 1]$$

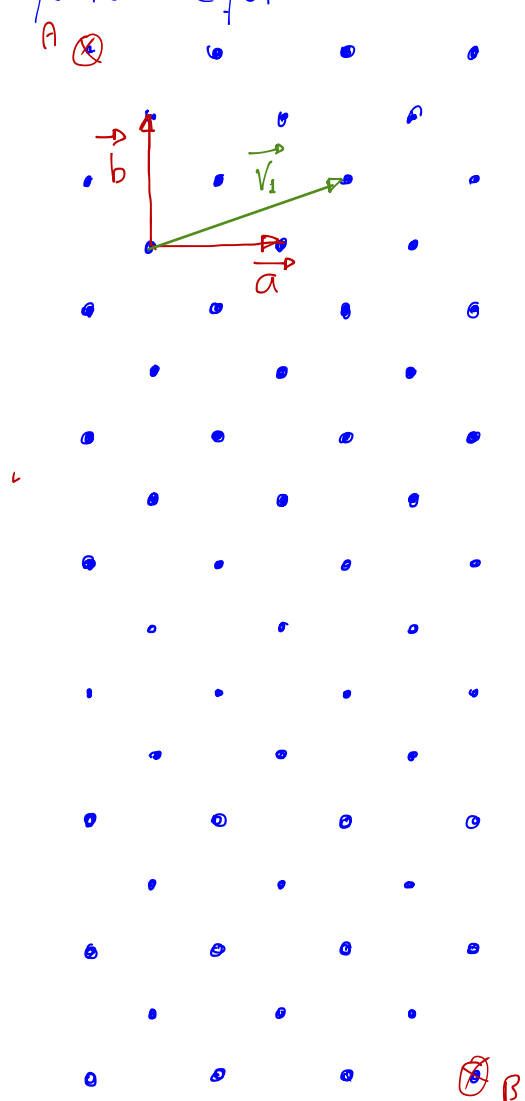
$\Rightarrow$ A direção ilustrada acima é, portanto, $[3 \ 1]$.

Obs: Para o caso 3D o raciocínio é análogo.

Direções Equivalentes ou Famílias de direções.

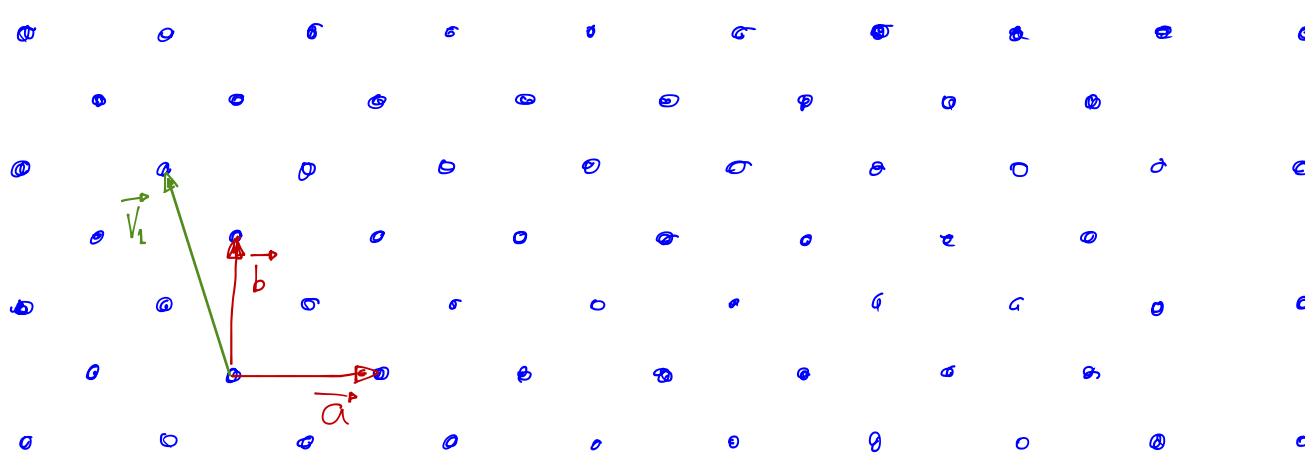
 $\langle uvw \rangle$


Na ilustração acima note que se mantivermos os vetores fixos e girarmos a rede (pontos) ao redor do centro do sistema em 90° (use os pontos A e B como referência) teremos uma situação totalmente equivalente.


 $\Rightarrow$

"A Fig. acima girada em 90° , mantendo fixos os vetores"

Logicamente, o mesmo ocorre se mantivermos os pontos, os vetores da base ($\vec{a}$ e $\vec{b}$) e girarmos $\vec{V}_1$ em 90° ↙

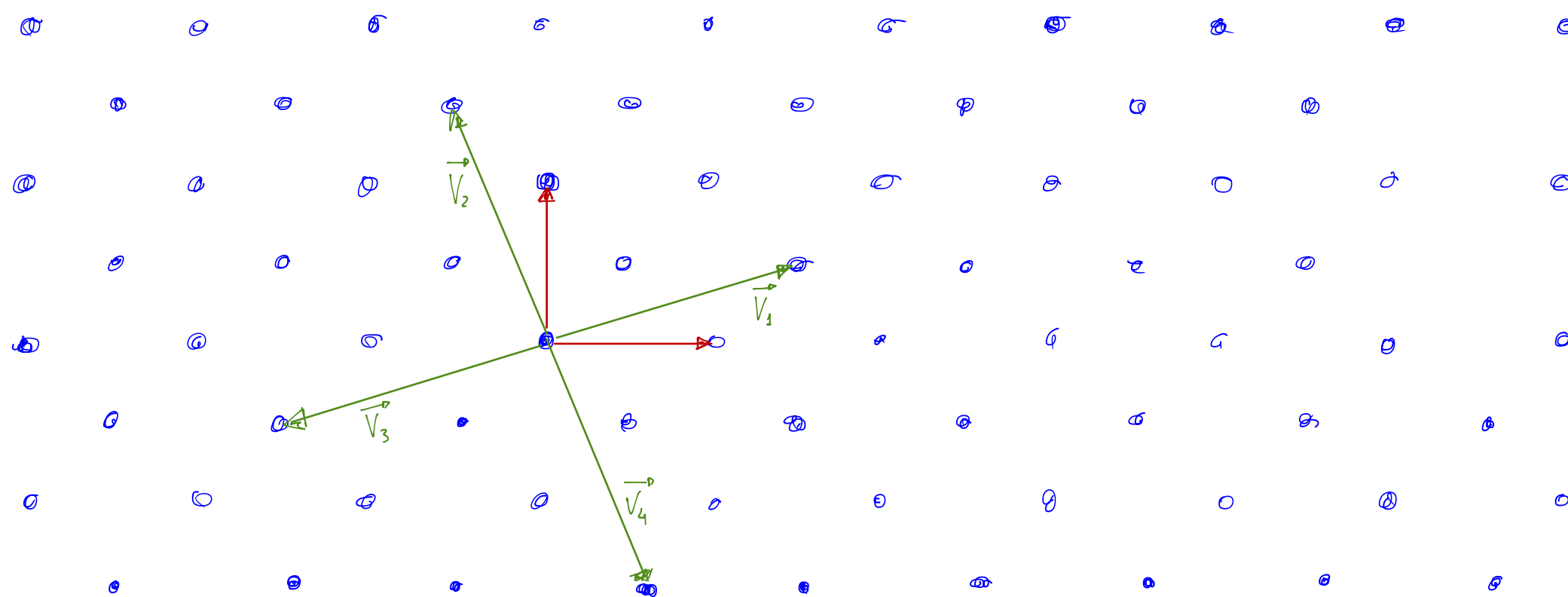


Neste caso, como mantivemos a base, o vetor $\vec{V}_1$ teve seus índices alterados para $\vec{V}_1 = -\frac{1}{2}\vec{a} + \frac{3}{2}\vec{b}$ que faz resultar na direção $[-1\ 3]$.

As direções $[3\ 1]$ e $[-1\ 3]$ são, portanto, equivalentes do ponto de vista cristalográfico. Isto porque produzem mesmos efeitos experimentais.



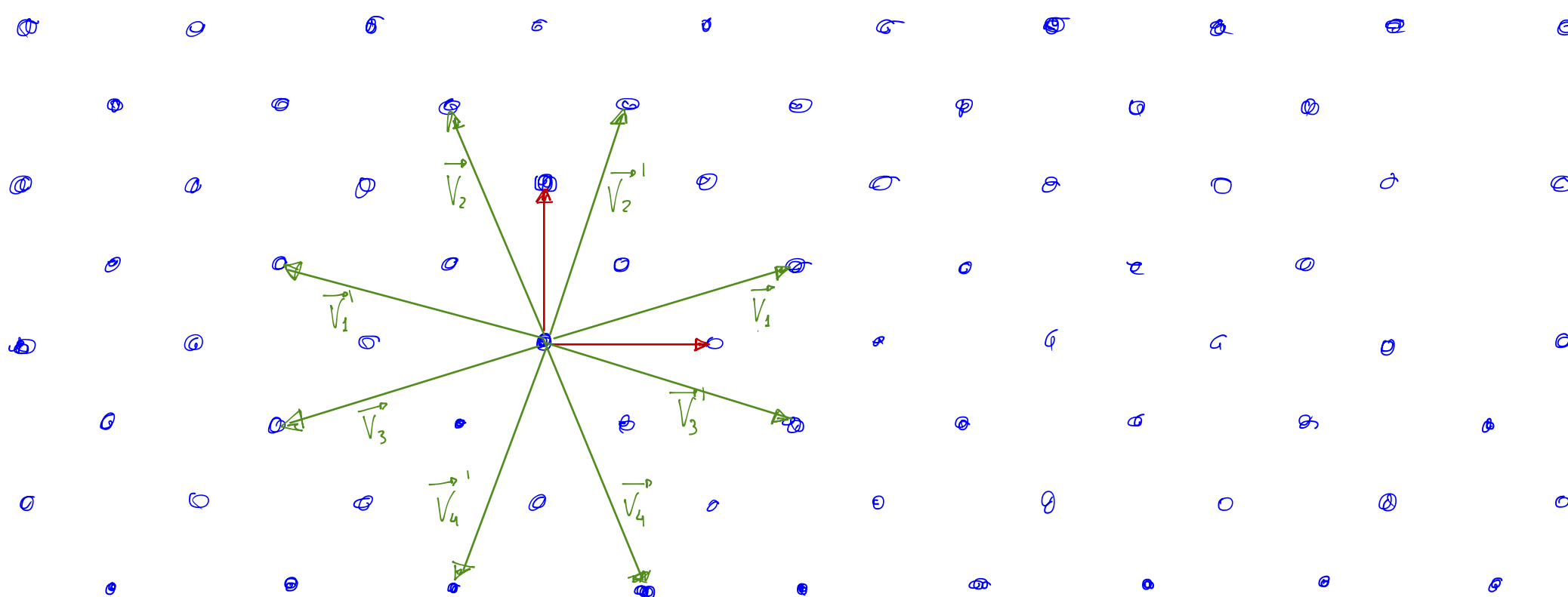
Adicionalmente ↓



$\vec{V}_1, \vec{V}_2, \vec{V}_3$ e $\vec{V}_4$ pertencem à mesma família.

Os quatro vetores citados acima são os mais facilmente determinados - Existiriam outros?

Note que se posiciomarmos um espelho paralelo ao eixo y e perpendicular ao plano da página os vetores seriam refletidos como abaixo:



onde usamos a linha para especificar os vetores espelhados. Importante observar que ao "refletir" os pontos da rede se posiciona exatamente onde estão os pontos reais da rede - Este é o fator que torna os vetores linhas equivalentes.

Desta forma, todos os vetores ilustrados acima são equivalentes e pertencem a uma mesma família $\langle uvw \rangle$, tal que:

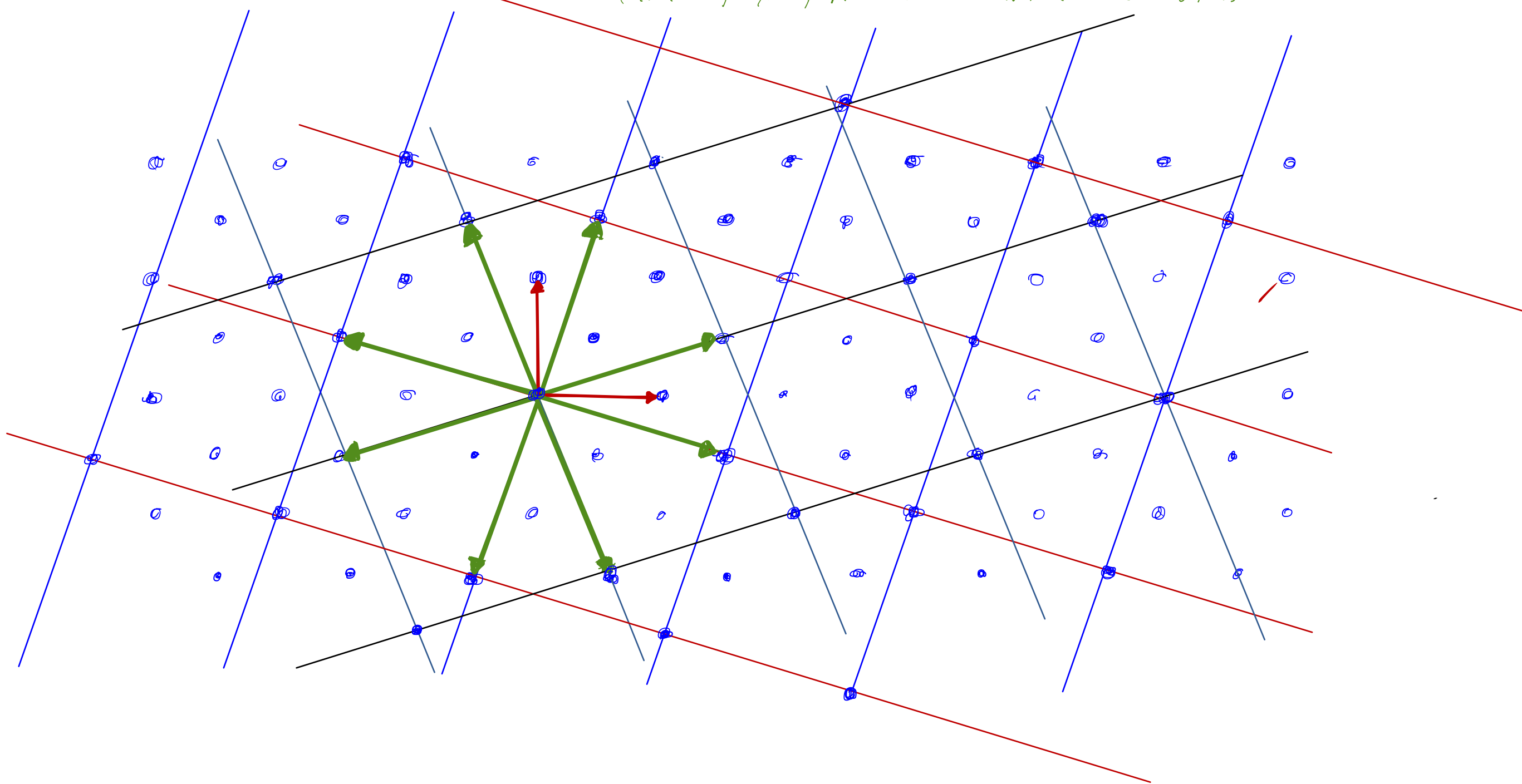
$$\langle 31 \rangle = [31], [13], [\bar{1}3], [\bar{3}1], [\bar{3}\bar{1}], [\bar{1}\bar{3}], [1\bar{3}] \text{ e } [3\bar{1}]$$

são direções cristalográficas equivalentes ou da mesma família.

★ Os números com barra representam valores negativos $\rightarrow \bar{3} = -3$, etc...

Note que os vetores, tal como definidos acima, definem planos (linhas no caso 2D) cristalográficos de mesma distância interplanar $\perp$

(traçar "planos" perpendiculares às extremidades dos vetores)



Obs: Os vetores usados para acima não foram normalizados para valores inteiros [3 1] ...
A ilustração acima apenas evidencia que as direções cristalográficas são, em geral, perpendiculares a alguma família de planos.

Ângulos entre dois vetores que determinam direções diferentes:

$$\text{Vamos considerar } \vec{V}_1 = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} \quad \text{e} \quad \vec{V}_2 = u'\vec{a} + v'\vec{b} + w'\vec{c}$$

O ângulo entre $\vec{V}_1$ e $\vec{V}_2$ pode ser determinado através do produto escalar $\vec{V}_1 \cdot \vec{V}_2 = V_1 V_2 \cos(\alpha)$

$$\Rightarrow (u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}) \cdot (u'\vec{a} + v'\vec{b} + w'\vec{c}) = V_1 V_2 \cos(\alpha)$$

$$\Rightarrow \cos(\alpha) = \frac{uu'a^2 + vv'b^2 + ww'c^2}{[(ua)^2 + (vb)^2 + (wc)^2]^{1/2} \cdot [(u'a)^2 + (v'b)^2 + (w'c)^2]^{1/2}}$$

Obs: A equação acima é aplicável para um sistema cristalino cuja célula possui vetores base ortogonais.

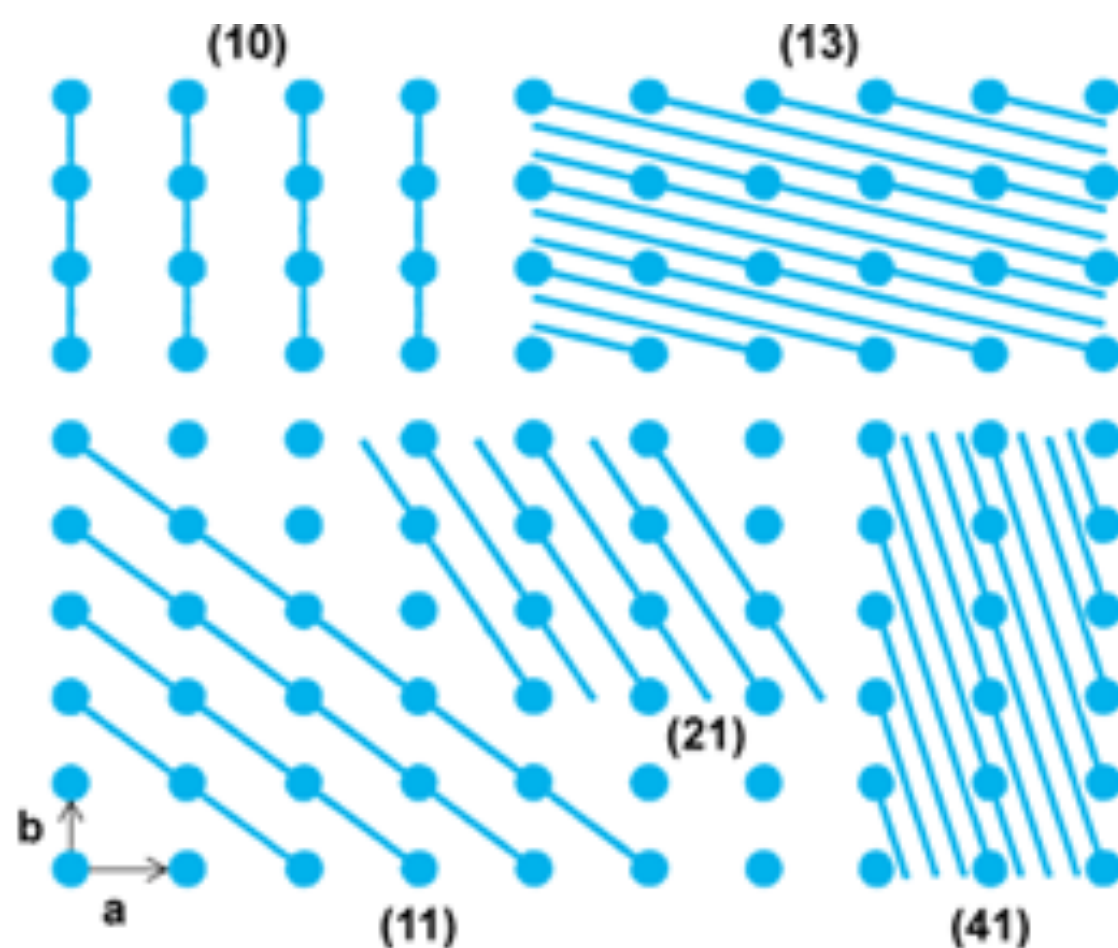
Para o caso particular de uma célula cúbica temos que $a=b=c$

$$\Rightarrow \cos(\alpha) = \frac{a^2 (uu' + vv' + ww')}{a^2 [u^2 + v^2 + w^2]^{1/2} \cdot [u'^2 + v'^2 + w'^2]^{1/2}}$$

$$\Rightarrow \alpha = \cos^{-1} \left\{ \frac{uu' + vv' + ww'}{[u^2 + v^2 + w^2]^{1/2} \cdot [u'^2 + v'^2 + w'^2]^{1/2}} \right\}$$

PLANOS DE UMA REDE CRYSTALINA

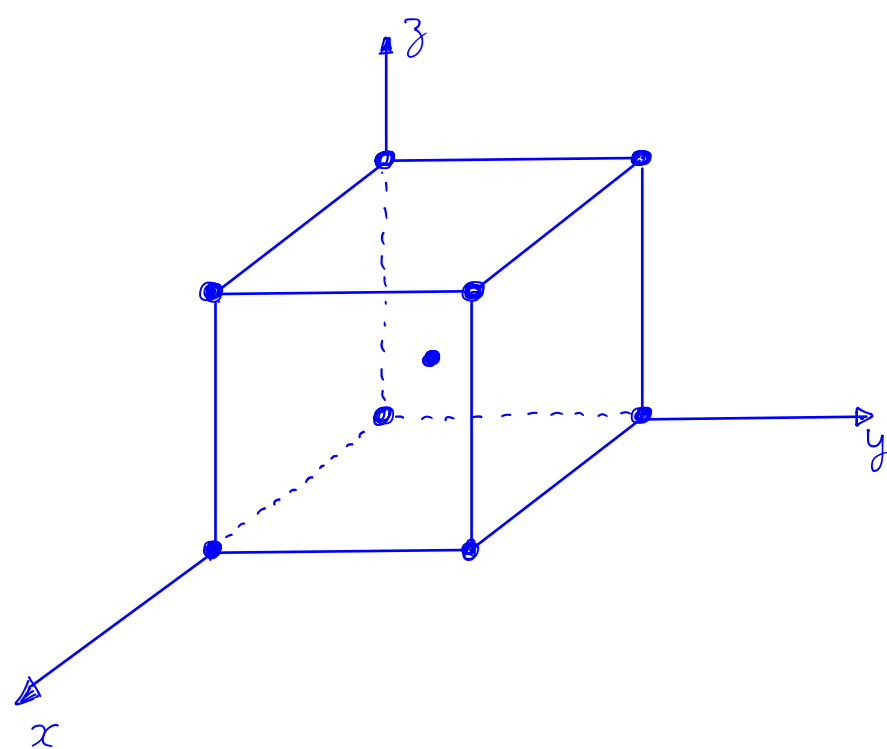
Não é difícil perceber que uma estrutura cristalina tridimensional define vários planos associados a conjunto de átomos posicionados sobre os planos. Este fato pode ser visualizado na ilustração abaixo (bidimensional).



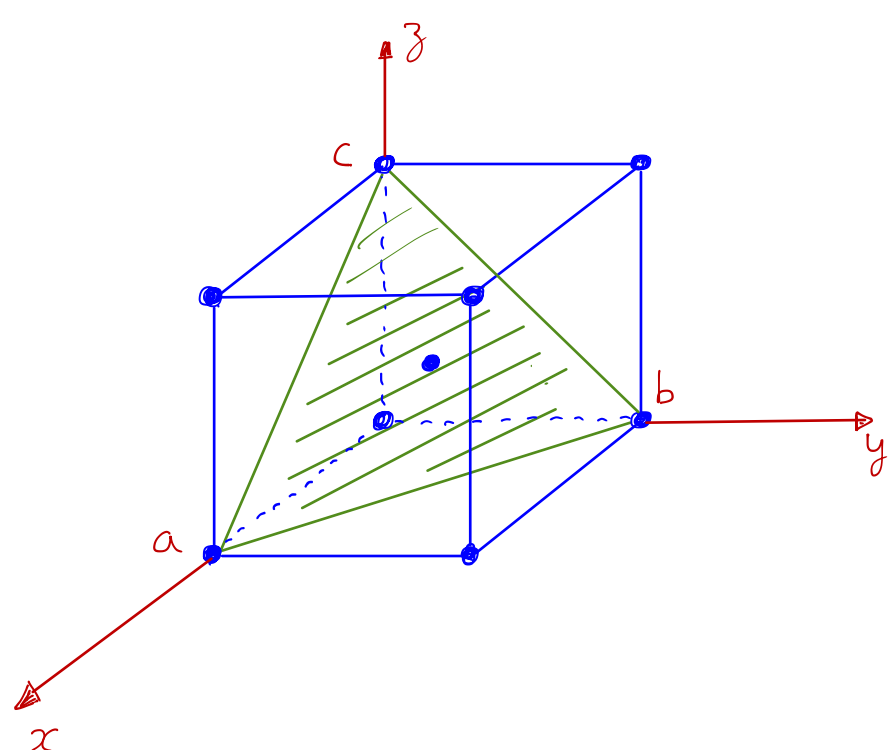
Acima estão representados alguns conjuntos de planos. Cada conjunto de plano é definido por três índices inteiros delimitados por parênteses — (hkl) . São chamados índices de Miller.

Como definir os valores de (hkl) para um dado conjunto de planos?

Consideremos uma célula cúbica de corpo centrado:



Vamos definir um plano como abaixo;

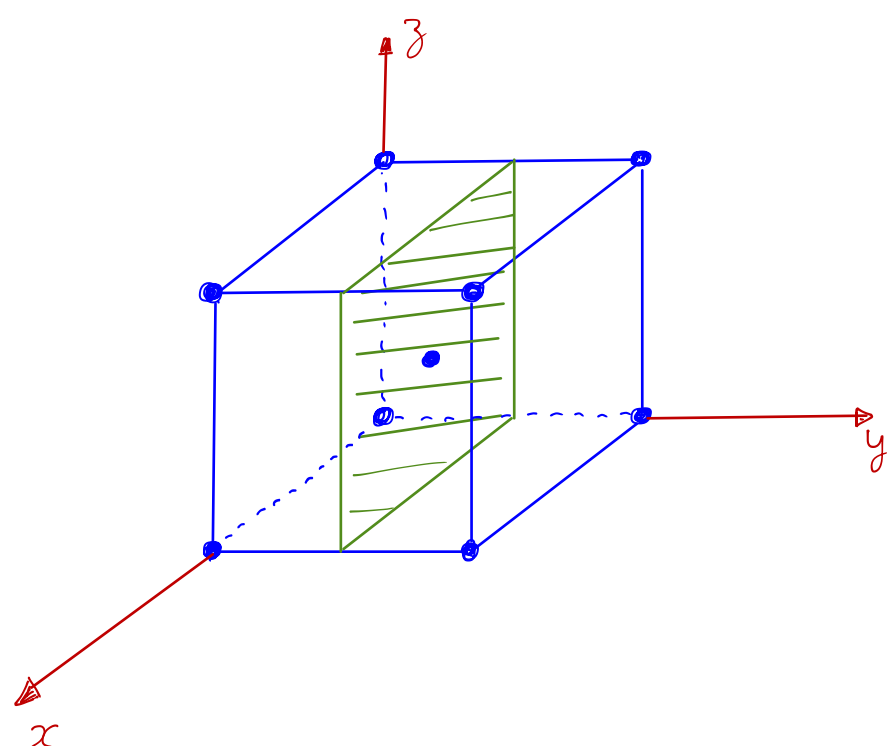


⇒ O plano passa por três átomos nos vértices e o do centro. Para definir um plano utiliza-se os pontos nos quais o plano corta os 3 eixos coordenados.

Neste caso, o plano corta x em $1\vec{a}$
y em $1\vec{b}$
e z em $1\vec{c}$

Os índices são, portanto, (111)

Vejamos agora o plano que passa pelo átomo do centro apenas e que é paralelo ao plano xz , como ilustrado abaixo



O plano em questão corta x em ∞ (não corta)
 y em $\frac{1}{2}$
 e z em ∞ (não corta)

Os índices seriam $(\infty \frac{1}{2} \infty)$ que não são inteiros e nem mesmo definidos no caso de ∞ .

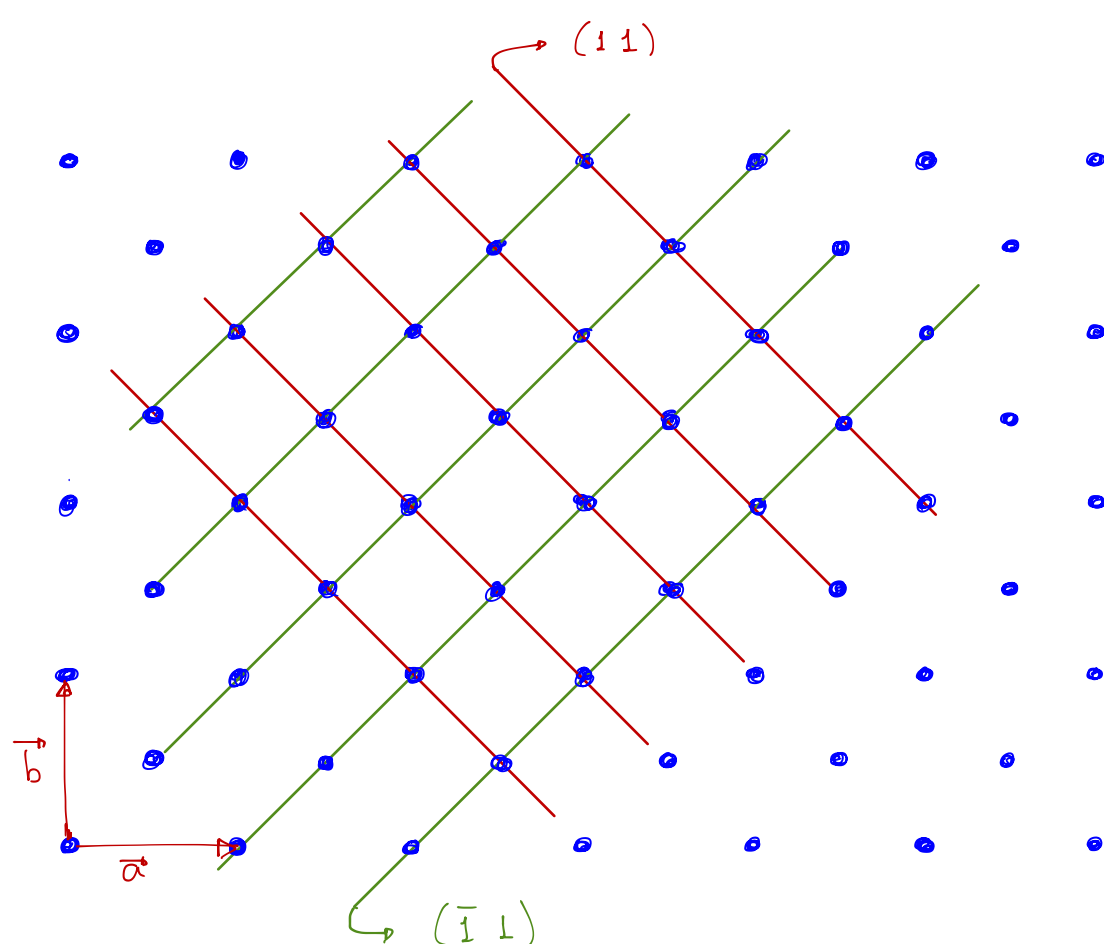
Os índices são definidos como o inverso dos "pontos" onde o plano corta os eixos coordenados. No caso,
 $(\frac{1}{\infty} \frac{2}{1} \frac{1}{\infty}) = (0 \ 2 \ 0)$

$$(h \ k \ l) = (0 \ 2 \ 0)$$

Perceba que no caso anterior (pág. passada) esta definição também é válida, embora não a tenhamos realizado explicitamente. Naquele caso, $(1 \ 1 \ 1)$, invertendo obtemos os mesmos $(1 \ 1 \ 1)$.

Portanto a regra é: Encontra-se os pontos de corte, referidos a uma célula unitária, e inverte-se os valores para obter os índices que definem os planos.

Assim como existem direções equivalentes existem conjunto de planos equivalentes. Um conjunto de planos não paralelos equivalentes está ilustrado abaixo.



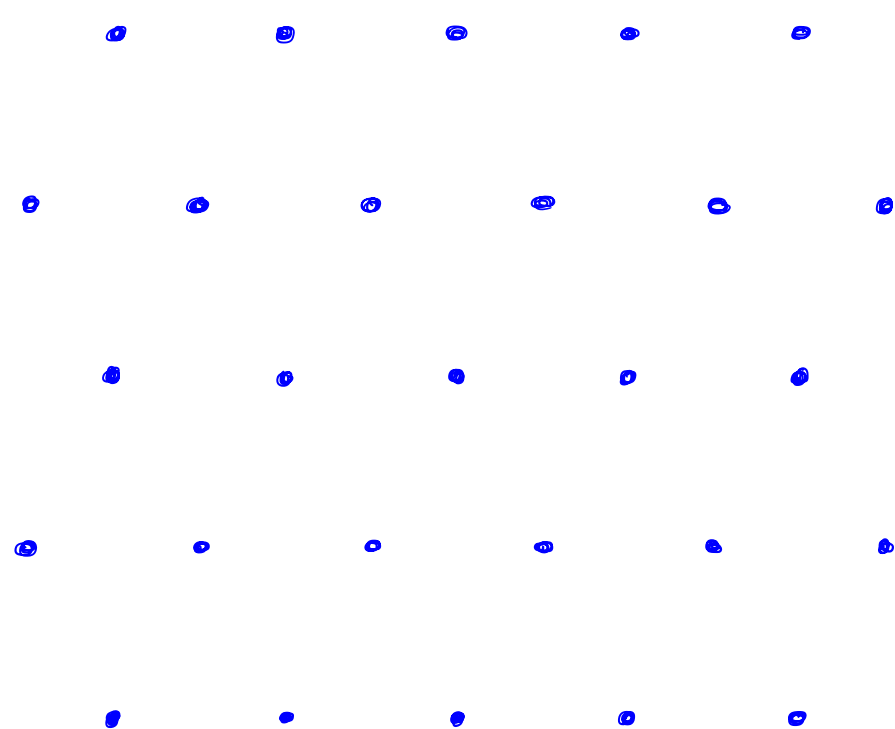
Uma análise visual cuidadosa evidencia que os dois conjuntos de linhas são equivalentes.

Neste caso, 2D, os índices são $(1 \ 1)$ e $(\bar{1} \ 1)$.

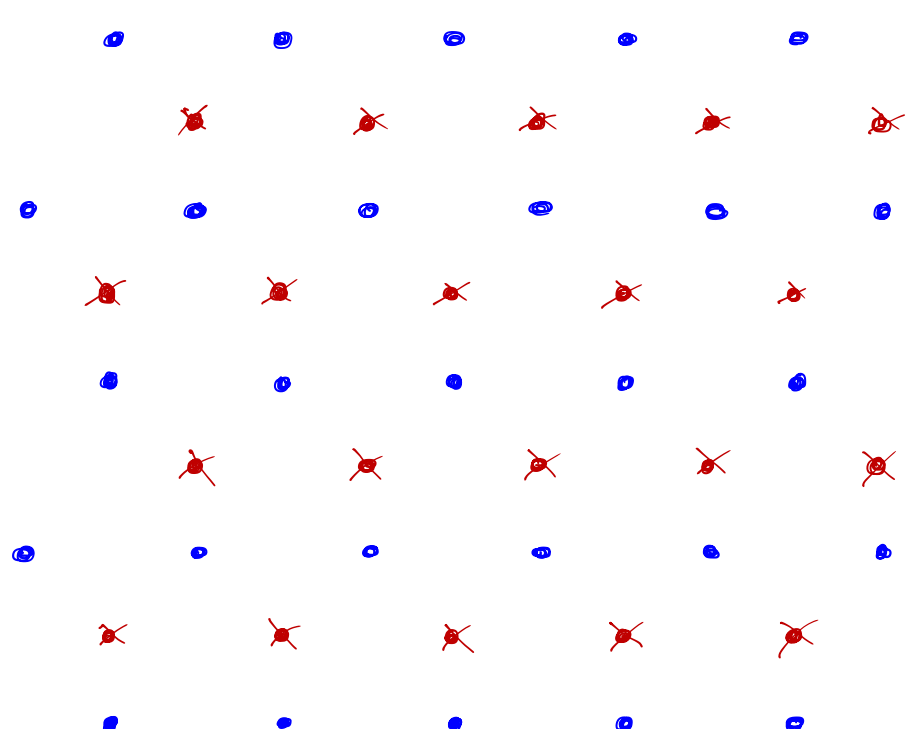
Obs: Os planos escolhidos para extrairmos os índices devem ser referidos a uma célula unitária e não devem passar pela origem do sistema coordenado escolhido como base.

★ Planos em uma estrutura hexagonal.

A estrutura exagonal resulta de um empilhamento de planos do tipo abaixo



Uma estrutura plana deste mesmo tipo encaixada sobre esta resultaria em

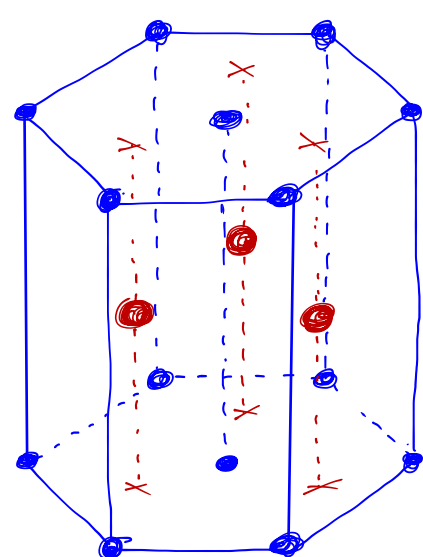


Nesta ilustração imagine que os pontos  estão mais altos relativamente ao plano que contém os pontos .

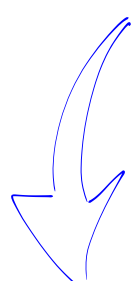
Note que são duas estruturas hexagonais empilhadas.

Subsequentemente, os próximos planos a serem empilhados se alternam.

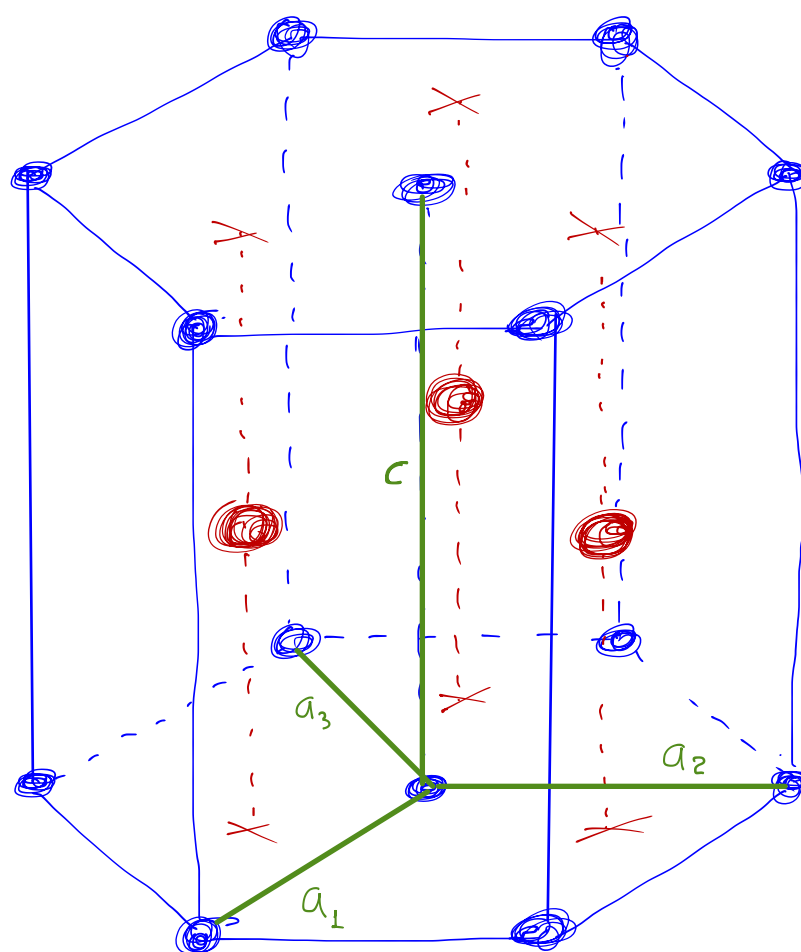
Uma célula unitária hexagonal 3D fica .



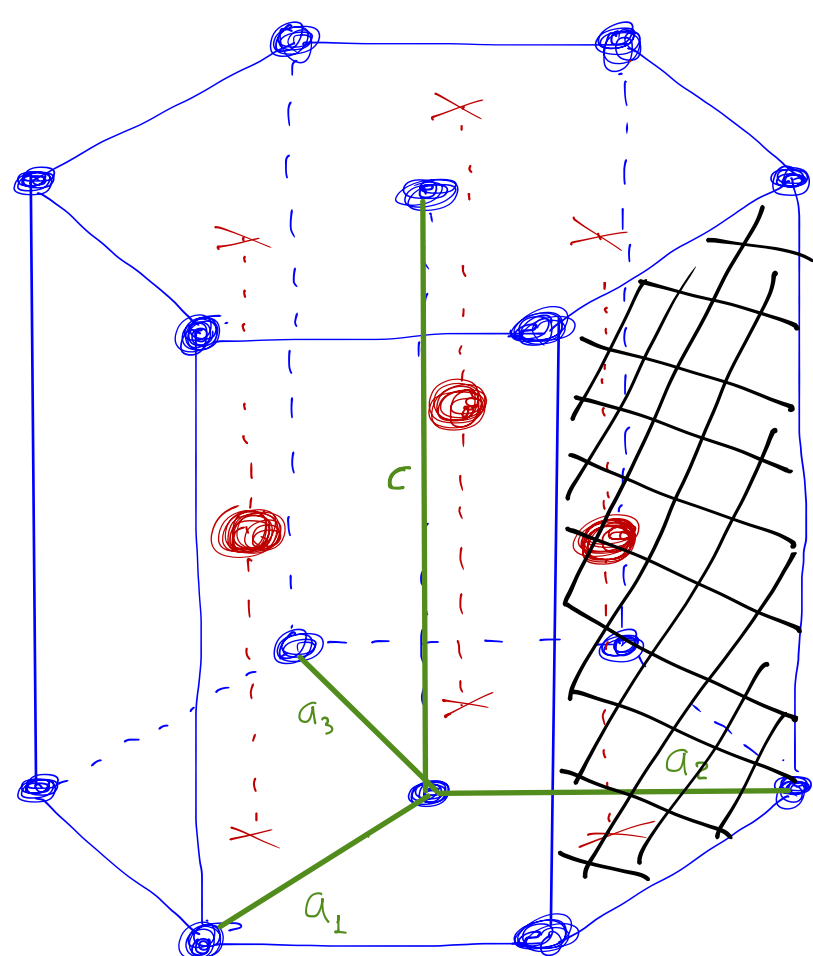
Para o caso da célula unitária hexagonal existem duas formas para se definir a base vetorial - Um com quatro vetores e outra com três vetores.



★ Quatro vetores:



Exemplos:



O plano rachurado possui índices $(hkl) = (0 \ 1 \ 0)$

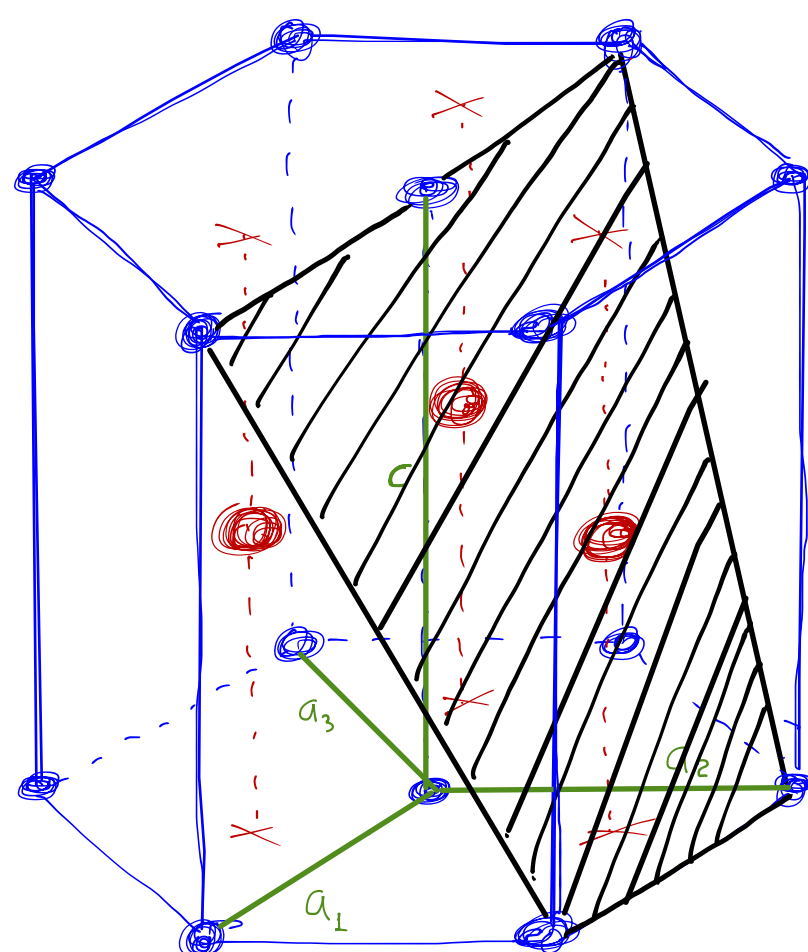
pois corta a_1 em $\infty \Rightarrow h = \frac{1}{\infty} = 0$

a_2 em $1 \Rightarrow k = \frac{1}{1} = 1$

a_3 em $-1 \Rightarrow i = \frac{1}{-1} = -1 \Rightarrow \bar{1}$

c em $\infty \Rightarrow l = \frac{1}{\infty} = 0$

Outra possibilidade:



Corta a_1 em $\infty \Rightarrow h = 0$

a_2 em $1 \Rightarrow k = 1$

a_3 em $-1 \Rightarrow i = \bar{1}$

c em $1 \Rightarrow l = 1$

$\Rightarrow (hkl) = (0 \ 1 \ \bar{1} \ 1)$

Esses índices serão utilizados juntamente com a técnica de difração de raios-X para cálculo de distâncias interplanares.