Faces em zona e índices harmônicos[1].

EDUARDO A. SALGADO[2]

Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz"

1 — Recebido para publicação em 8-10-1965; 2 — Cadeira de Geologia e Mineralogia da E. S. A. Luiz de Queiroz.

RESUMO

Em uma zona cristalográfica podem ocorrer símbolos de faces, cujos índices de Miller, colocados em determinada ordem, formam aquilo que, em algebra, se conhece sob a designação de "série harmônica".

Este trabalho mostra como tal possibilidade pode ser pesquisada.

1. INTRODUÇÃO

Sabe-se, em algebra, o que é uma série harmônica.

O presente trabalho procura examinar as condições sob as quais, em uma zona cristalográfica, ocorrem símbolos de faces cujos índices milerianos, colocados em ordem adequada, podem constituir uma série harmonica.

2. DEDUÇÃO

Seja um índice igual à unidade, sejam os outros dois A e B, este ultimo o termo médio harmônico, isto é, aquele que pode formar com A e 1 a série harmônica procurada. Tem-se:

$$B = \frac{2A}{A+1}.$$

As permutações de A, B, 1 dão seis possibilidades:

A,B,1; A,1,B; B,A,1; B,1,A; 1,A,B; 1,B,A; ...... (×)

Representando o símbolo da zona por $[R_1R_21]$ obtem-se as seis equações seguintes:

$$A^2R_1+A\ (R_1+2R_2+1) + 1 = 0 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (1)$$
$$A^2R_1+A\ (R_1+R_2+2) + R_2 = 0 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (2)$$
$$A^2R_2+A\ (2R_1+R_2+1) + 1 = 0 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (3)$$
$$A^2+A\ (2R_1+R_2+1) + R_2 = 0 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (4)$$
$$A^2R_2+A\ (R_1+R_2+2) + R_1 = 0 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (5)$$
$$A^2+A\ (R_1+2R_2+1) + R_1 = 0 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad (6)$$

Os valores de A podem ser tirados das equações de segundo grau anteriores e é facil verificar que tais valores apresentam o mesmo numerador em (1) e (6), (2) e (5), (3) e (4), respectivamente.

Vejamos o que ocorre nas diferentes zonas que podem ser consideradas: a) [100]; b) [010]; c) [001]; d) [111]; e) zona (100) (hkl); f) zona (010) (hkl); g) zona (001) (hkl); h) caso geral $[R_1\ R_2\ 1]$.

a) na zona [100] o símbolo geral de face é (0kl) ou

$$\left(0\ \frac{k}{l}\ 1\right).$$

Comparando este último símbolo com os símbolos gerais possiveis ($\times$), obtem-se A = O e B = O e, por conseguinte, os símbolos (001) e (010).

b) na zona [010] obtem-se, de modo idêntico, (001) e (100).

c) zona [001], as faces (100) e (010).

d) zona [111]. As equações (1) a (6) dão: $A^2+4A+1=0$, tirando-se desta valores irracionais de A, inadmissiveis, isto é, não ocorrem índices harmônicos nesta zona.

c) zona (100) (hkl), tendo para eixo $[0\bar{l}k]$. Obtem-se:

1 — da equação (1): $(ABl) = \dfrac{k}{2l-k} : \dfrac{k}{l} : 1$

2 — da equação (2): $(AlB) = \dfrac{l}{2k-l} : 1 : \dfrac{l}{k}$

3 — da equação (3): $(BAl) = \dfrac{2k}{k+l} : \dfrac{k}{l} : 1$

4 — da equação (4): $(BlA) = \dfrac{2l}{k+l} : 1 : \dfrac{l}{k}$

5 — da equação (5): $(lAB) = 1 : \dfrac{2k-l}{l} : \dfrac{2k-l}{k}$

6 — da equação (6): $(lBA) = 1 : \dfrac{2l-k}{l} : \dfrac{2l-k}{k}$

Pode-se verificar que são idênticos os símbolos obtidos em 1 e 6, 2 e 5, 3 e 4, respectivamente, o que dá, para a zona em questão, três faces em cujos símbolos são encontrados índices harmônicos.

f) zona (010) (hkl), tendo para eixo $[10\bar{h}]$. Obtem-se:

1 — da equação (1): $(ABl) = \frac{-1}{1} : \frac{2}{1-1} : 1$

2 — da equação (2): $(AlB) = \frac{1+2}{-1} : 1 : 1+2.$

3 — da equação (3): $BAl) = \frac{-1}{1} : \frac{-1}{21+1} : 1$

4 — da equação (4): $(BlA) = \frac{1+21}{1} : 1 : -1-21$

5 — da equação (5): $(lAB) = 1 : \frac{-1}{1+2} : -1$

6 — da equação (6): $(lBA) = 1 : \frac{21}{1-1} : -1$

Os símbolos calculados em 1 e 6, 2 e 5, 3 e 4 são respectivamente idênticos e esta zona apresenta três faces que satisfazem.

g) zona (001) (hkl), tendo para eixo [kh0]. Tem-se:

1) $Ak - Bh = O \therefore (ABl) = \frac{2h-k}{k} : \frac{2h-k}{h} : 1$

2) $Ak - h = O \therefore (AlB) = \frac{h}{k} : 1 : \frac{2h}{h+k}$

3) $Bk - Ah = O \therefore (BAl) = \frac{2k-h}{k} : \frac{2k-h}{h} : 1$

$$4)\ Bk - h = O \therefore (B1A) = \frac{h}{k} : 1 : \frac{h}{2k-h}$$

$$5)\ k - Ah = O \therefore (1AB) = 1 : \frac{k}{h} : \frac{2k}{h+k}$$

$$6)\ k - Bh = O \therefore (1BA) = 1 : \frac{k}{h} : \frac{k}{2h-k}$$

Como nos dois casos anteriores, ha três soluções.

h) caso geral: zona $[R_1R_21]$. Tome-se a equação (1): $A^2R_1+A\ (R_1+2R_2+1) + 1 = O$. Fazendo $R_1+2R_2+1 = m$, tem-se $A = \dfrac{-m \pm \sqrt{m^2-4R_1}}{2R_1}$.

Como A não pode ser imaginário ou irracional, segue-se que a expressão sub-radical m^2-4R_1 deve ser igual a *zero* ou um *quadrado perfeito*. Teremos, então:

I) $m^2-4R_1 = R^2_1+R_1\ (4R_2-2) + (4R^2_2+4R_2+1) = 0$. Daqui tira-se:

$R_1 = \dfrac{-(4R_2-2) \pm \sqrt{-32R_2}}{2}$. Como R_1 não pode ser imaginário ou irracional, devemos ter:

a) $-\ 32\ R_2=0 \therefore R_2=0,\ R_1=1,\ A=-1,\ B=\text{inf.}$, verificando-se então que, na zona [101], não ocorrem índices harmônicos.

b) $-\ 32R_2=X^2$, sendo X um número qualquer, inteiro ou fracionário, que permite obter os valores correspondentes de R_2, R_1, m e, finalmente, de A e B.

II) pesquisemos quando m^2-4R_1 pode ser quadrado perfeito. Isto ocorre nos seguintes casos:

a) $R_1=0$. É o caso particular da zona (100) (hkl), já visto.

b) $R_2=0$. Tem-se o caso da zona (010) (hkl), conhecido.

c) $4R_2 — 2R_1 + 1 = 0$. Obtem-se:

$$A = \frac{—1}{2R_1} \text{ e } A = \frac{—2R_1 — 4R_2 — 1}{2R_1} \therefore$$

$$\therefore B = \frac{—2}{2R_2 — 1} \text{ e } B = \frac{4R_1 + 8R_2 + 2}{4R_2 + 1}$$

d) $4R_2 \; (R_1 + R_2 + 1) = 0 \therefore R_1 + R_2 + 1 = 0$. Obtem-se:

$$A = \frac{—R_2 — 1}{R_1} \text{ e } A = \frac{—R_1 — R_2}{R_1} \therefore B = \frac{2R_2 + 2}{R_2 + 1 — R_1} \text{ e}$$

$$B = \frac{2R_1 + 2R_2}{R_2}$$

e) $R_1 \; (R_1 + 4R_2 — 2) = 0 \therefore R_1 + 4R_2 — 2 = 0$. Tem-se:

$$A = \frac{—1}{2} \text{ e } A = \frac{—R_1 — 4R_2 — 2}{2R_1} \therefore B = -2 \text{ e}$$

$$B = \frac{2R_1 + 8R_2 + 4}{4R_2 — R_1 + 2}$$

f) $m^2 — 4R_1 = X^2 \therefore R^2_1 + R_1 \; (4R_2 — 2) + (4R^2_2 + 4R_2 + 1 — X^2) = = 0$, onde X é um número qualquer, inteiro ou fracionário.

Desta equação tira-se: $R_1 = \dfrac{—(4R_2 — 2) \pm \sqrt{4X^2 — 32\, R_2}}{2}$

Deve-se ter então: $4X^2 — 32R_2 = 0 \therefore R_2 = \dfrac{X^2}{8}$ ou $4X^2 — 32R_2 = t^2$, sendo t inteiro ou fracionário.

Fixados arbitrariamente os valores de X e de t, obter-se-ão R_1 R_2, m, A, B.

Nas equações (2) a (6) aparecerão situações semelhantes às que foram discutidas relativamente à equação (1), não havendo necessidade, pois, de se fazer aqui o seu exame.

A pesquisa dos índices harmônicos pode ser feita, ainda, com base no teorema seguinte: os recíprocos de números que formam uma série harmônica constituem uma progressão aritmética.

Tem-se, assim: x, x+m, x+2m, termos de uma progressão aritmética; $\frac{1}{x}$, $\frac{1}{x+m}$, $\frac{1}{x+2m}$, termos da série harmônica correspondente, devendo cada um destes representar o papel de índice de símbolo de face da zona $[R_1\ R_2\ 1]$.

$$\text{Obtem-se: } \frac{R_1}{x} + \frac{R_2}{x+m} + \frac{1}{x+2m} = 0 \therefore$$

$$\therefore R_1\ (2m^2+{}^3mx+x^2) + R_2\ (2mx+x^2) + x^2+mx = 0$$

Arbitrados os valores de m e x da progressão aritmética, podem ser obtidos, em análise indeterminada do primeiro grau, os valores de R_1, R_2 das zonas em que ocorrem os índices harmônicos achados.

3. SUMMARY

In a cristallographic zone it may occur face symbols whose Miller indices, placed in a certain order, form what we know, in Algebra, by the designation of "harmonic series".

This work indicates the way such possibility may be researched.

4. BIBLIOGRAFIA CITADA

H. S. HALL e S. R. KNIGHT — Algebra Superior — versão castelhana por Rafael García Díaz — Union Tipografica Editorial Hispano-Americana-Mexico 1956.