

---

ATTI ACCADEMIA NAZIONALE DEI LINCEI  
CLASSE SCIENZE FISICHE MATEMATICHE NATURALI

# RENDICONTI

---

UGO PANICHI

## Armonicità orbitali

*Atti della Accademia Nazionale dei Lincei. Classe di Scienze Fisiche, Matematiche e Naturali. Rendiconti, Serie 8, Vol. 34 (1963), n.5, p. 488–493.*

Accademia Nazionale dei Lincei

[http://www.bdim.eu/item?id=RLINA\\_1963\\_8\\_34\\_5\\_488\\_0](http://www.bdim.eu/item?id=RLINA_1963_8_34_5_488_0)

L'utilizzo e la stampa di questo documento digitale è consentito liberamente per motivi di ricerca e studio. Non è consentito l'utilizzo dello stesso per motivi commerciali. Tutte le copie di questo documento devono riportare questo avvertimento.

---

*Articolo digitalizzato nel quadro del programma  
bdim (Biblioteca Digitale Italiana di Matematica)  
SIMAI & UMI*

<http://www.bdim.eu/>

**Cristallografia.** — *Armonicità orbitali.* Nota (\*) del Socio UGO PANICHI.

Prosegue in questa Nota qualche osservazione sopra i rapporti armonici che, nei reticolati cristallini, sono espressione della interdipendenza fra caratteristiche proprietà strutturali.

Antiche mie comunicazioni (1) notavano rapporti armonici tra facce di uno spigolo di cristallo; in seguito (1921) dimostrai, per via armonica, il principio dei tre vettori; e sopra questi appunto è basata l'omologia, di cui è centro l'origine degli assi cristallografici. Recentemente, dopo avere esaminato assi e fasci armonici inerenti alla cristallizzazione (M. 57), mi sono riferito specialmente a composti binari del campo mineralogico, ed a superfici sia orbitali, sia di coordinazione; lievi contributi verso una ordinata *Cristallografia armonica*.

Supposta una fila di punti equidistanti (come A, O, B, D della fig. 1), e chiamando C il coniugato armonico di D rispetto ad A e B, le due superfici sferiche con diametri AB e CD sono tali che per ogni punto (U) della prima è  $UD/UC = 2$ , e per ogni punto (V) della seconda è  $VA/VB = 3$ . Ora i loro centri O ed O' possono altresì corrispondere ai centri di due ioni adiacenti, che supporremo sferici; siano R e r i raggi di due ioni in contatto, e se EF (= 2R) e FF' (= 2r) rappresentano nella figura le sfere ioniche, possiamo supporre che sia  $r/R = 0,5$  (salgemma = 0,526), e allora  $AB = 2(R + x)$  e  $CD = 2(r + y)$ ; da cui  $BC = BF + FC = x + y$ ; e, con  $R = 2r$ , è  $y = 2x$ .

Se poi il rapporto  $r/R$  non è 0,5, e se ci riferiamo ancora alle due superfici date, il punto F si sposterà verso C o verso B al crescere o al diminuire di  $r/R$ : nell'aumento il contatto avverrà tra F e il punto di mezzo di OO'; nella diminuzione, se il contatto avverrà a  $3/4$  di OO', si avrà  $r/R = 0,3$ , valore prossimo a quello proprio del quarzo, il quale (N. 60) presenta, fra i composti binari naturali, il minimo valore di  $r/R$ ; le corrispondenti orbite sono in contatto nel punto K.

Ma, oltre al variare di tal rapporto, è variabile la distanza OO', cioè  $R + r$ . Ora  $O'D = 3/4 OA$ , e C è il punto di mezzo di OB; e se indichiamo con H il punto di mezzo di O'D e facciamo  $HO'' = 3/4 O'D$ , la circonferenza HH' (centro O'') risulta coniugata della CD come la CD lo è della AB; ed è, ad esempio:  $WA/WB = WC/WD = 3$  e  $WH'/WH = 2$ . Tracciamo le orbite ioniche di centro O' e O''; esse sono rappresentate dai diametri GL e LL', e siano R' e r' i rispettivi raggi; allora sarà  $O'O'' = R' + r'$ , e al tempo stesso  $r/R = r'/R = 0,5$ .

(\*) Presentata nella seduta dell'11 maggio 1963.

(1) « Accad. delle Scienze », Torino 1902; S. I. P. S. (*Concetti fondamentali, ecc.*) 1921; « Accad. Naz. Lincei », Memorie 1957 e 58, Nota 1960.

Con questa operazione è possibile confrontare due composti ionici che presentino eguale (o quasi) il rapporto ionico, e tali che le somme  $R + r$  e  $R' + r'$  stiano fra loro come  $OO'$  ad  $O'O''$ . Le sfere ioniche  $EF$  ed  $FF'$  possono rappresentare il salgemma, e alle sfere  $GL$  ed  $LL'$  sono corrispondenti, con discreta approssimazione, la cassiterite ed il rutilo.

Nella fig. 2 è esaminata la determinazione di raggi orbitali. Nella Nota precedente considerai, a tale scopo, superfici sferiche concentriche succedentisi entro la sfera ionica, con periodo costante ( $\sigma$ ) o frazione  $\sigma/n$ . Da alcuni esempi risultò  $\vartheta - 1 = n R/r$ .

Ma nella fig. 2 supponiamo di partire da una superficie sferica di diametro  $AB$ ; segniamo su  $AB$  il punto  $C$  coniugato di  $B$  rispetto ad  $A$  ed  $O$  (per il quale  $AC = 2 CO$ ), ed il punto  $D$  coniugato di  $A$  rispetto ad  $O$  e  $B$  (per

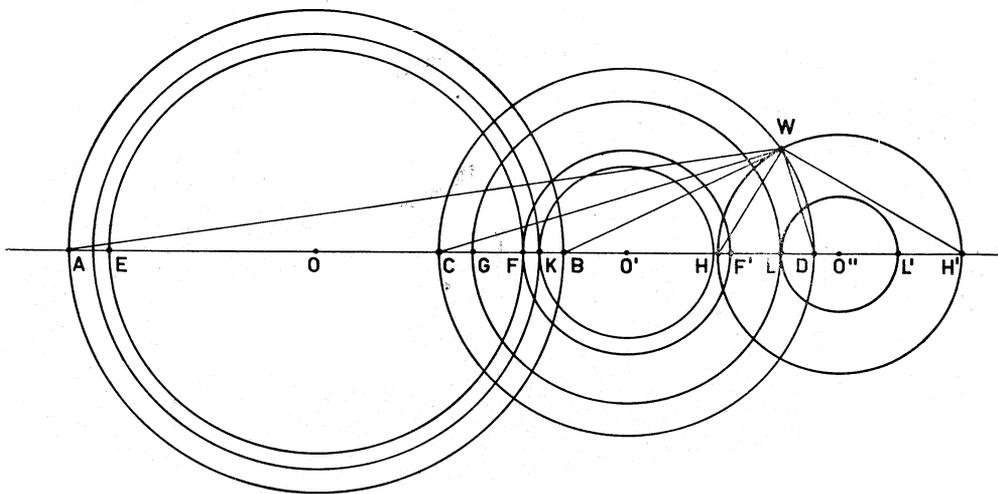


Fig. 1.

il quale è  $BD = 2 DO$ ); nella figura si vede il quadrilatero (vertici 1, 2, 3, 4), col quale si può trovare per via armonica il punto  $D$ . Se poi si traccia il segmento fra punto  $D$  e vertice 3, si crea il punto d'incontro 5; e il quadrilatero 1, 2, 3, 5 conduce al punto  $N$ , punto di mezzo di  $OB$ . Ottenuti come quarti armonici i punti  $D$  ed  $N$  (e analogamente si trovano i punti  $C$  ed  $M$ ) a  $1/3$  e  $1/2$  dei raggi  $OB$  ed  $OA$ , tracciamo le due corrispondenti superfici, i cui diametri sono  $CD$  ed  $MN$ .

Considerando dapprima il diametro  $CD$ , ripetiamo su questo l'operazione che ci ha dato  $C$  e  $D$ ; si ottiene così la superficie con diametro  $EF$  (ed è  $CE = 2 EO$ ); proseguendo poi in modo analogo, si ottiene il diametro  $HK$  e la corrispondente superficie ( $EH = 2 HO$ ). Tutti i raggi delle successive superfici, posto  $AO = 1$ , sono dati da  $1, 1/3, 1/9, 1/27, \dots$ . Chiamo  $\alpha$  tale progressione geometrica.

Consideriamo adesso la superficie con diam.  $MN$ : i punti  $M$  ed  $N$  li avremmo ottenuti anche con gli archi  $OG$  (centro  $A$ ) ed  $OG'$  (centro  $B$ ), e con

le normali  $GM$  e  $G'N$ ; ed osserviamo che le rette  $AG'$  ed  $BG$  sono tangenti alla circonferenza  $MN$ . Se dai punti di tangenza tiriamo le normali ad  $AB$ , troviamo che  $P$  e  $Q$  sono i punti di mezzo di  $OM$  ed  $ON$ . Possiamo ora condurre con diametro  $PQ$  un'altra superficie sferica; passare poi analogamente al diam.  $UV$  e continuare le operazioni per le successive superfici. Abbiamo anche qui una progressione geometrica ( $\beta$ ) coi raggi  $1, 1/2, 1/4, 1/8, \dots$ .

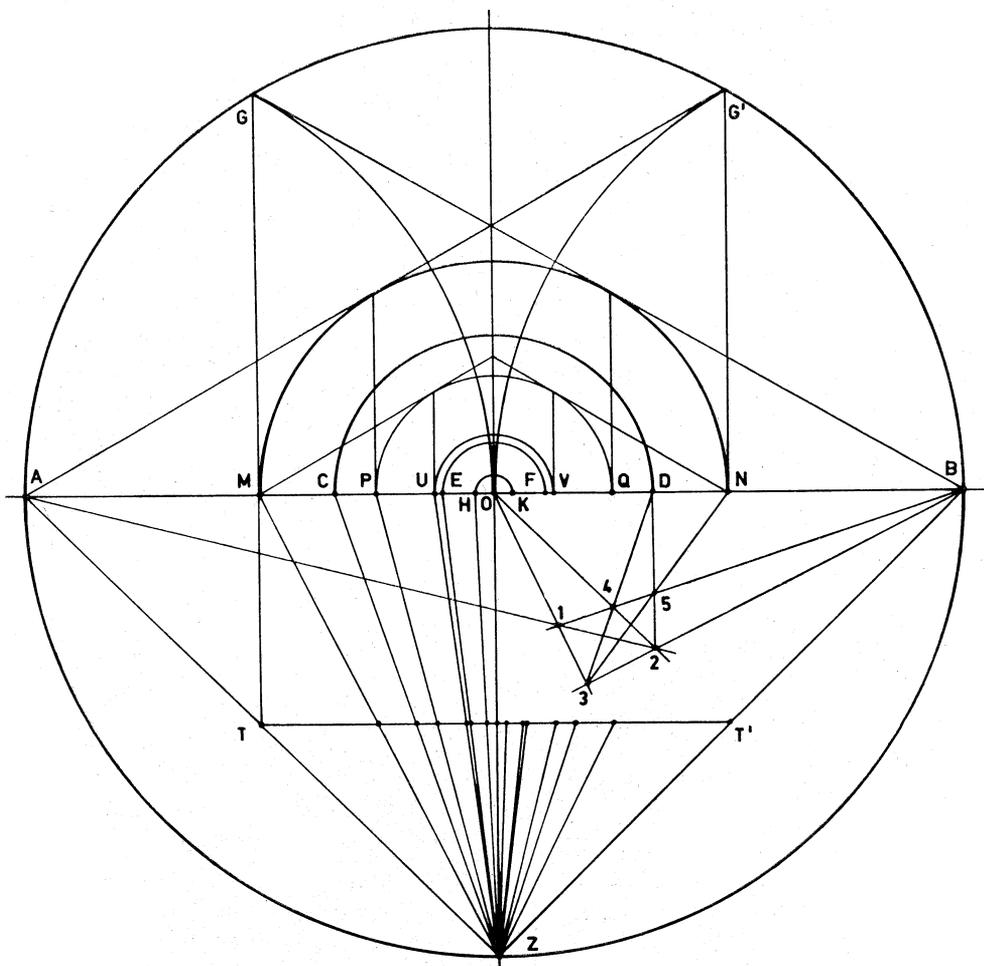


Fig. 2.

Nella fig. 2 si vedono ambedue le progressioni  $\alpha$  e  $\beta$ ; i loro termini sono rapidamente decrescenti (le somme delle rispettive serie sono  $3/2$  e  $2$ ); perciò solo pochi termini sono rappresentati nel disegno. Notiamo che, essendo  $MC = \frac{1}{2} - \frac{1}{3} = \frac{1}{6}$  e  $CP = \frac{1}{3} - \frac{1}{4} = \frac{1}{12}$ ,  $PU - PC = \frac{1}{24}$ , ecc., sono armonicamente operabili suddivisioni con intervalli di  $1/6, 1/12, 1/24$ , ecc. di  $AO$ .

Per applicare tali progressioni allo studio delle orbite elettroniche, il raggio  $OA$  può rappresentare il raggio del corrispondente ione; e a tal tale

scopo basta proiettare il diametro AB da un punto della normale da O ad AB, tagliando poi la proiezione con opportuna parallela ad AB. Nella fig. 2 la proiezione su AB è fatta dal punto Z, e si suppone di riferirci alla coppia ionica NaCl. Se il raggio OA rappresenta il raggio anionico, il raggio cationico sarà eguale alla metà di OA. Se T è il punto di mezzo di AZ, il segmento TT' parallelo ad AB è eguale ad  $1/2$  AB; la proiezione su di esso vi incide i segni che suddividono il diam. AB.

Nella fig. 3 le due circonferenze di diametri AB, A'B' corrispondono alle superfici AB, CD della fig. 1. Lungo il diam. AB della fig. sono riportati, in proporzione, gli stessi punti ottenuti nella fig. 2, indicandoli con le stesse lettere. Anche lungo il diam. A'B' sono schierati, con la corrispondente proporzione, i medesimi punti della fig. 2, indicandoli con le lettere accentate.

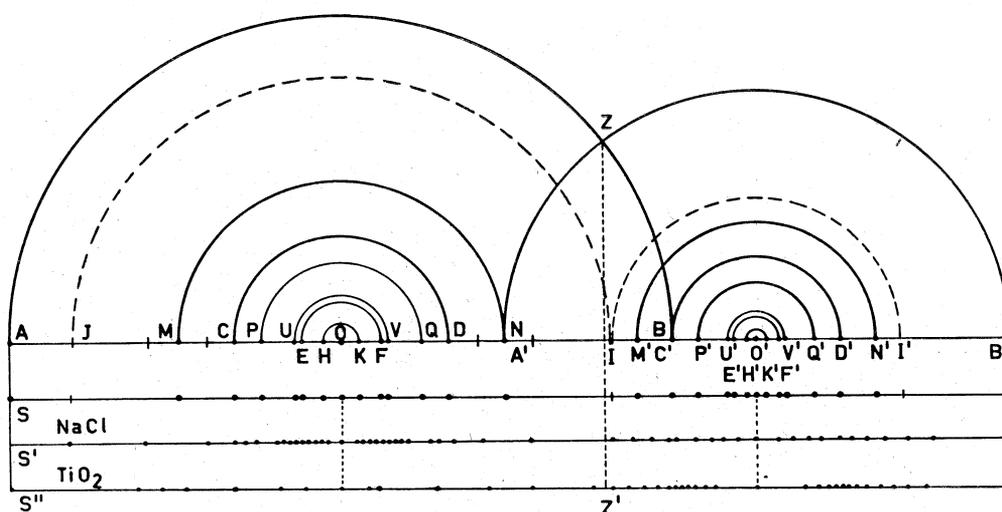


Fig. 3.

Sono coincidenti N con A' e B con C'. La duplice distribuzione di punti è riportata lungo tutto l'asse S.

Il segmento ZZ' (ad angolo retto sugli assi AB' ed S) rappresenta il piano, che segna il contatto fra le due superfici AB, A'B'; esso indica altresì, con discreta approssimazione, la separazione fra i due campi ionici. I punti O e O' si possono far corrispondere ai centri di orbite ioniche, nell'ipotesi considerata che sia  $r/R = 0,5$ . Le semicirconferenze JJ' e II' indicano i due ioni; e tutte le circonferenze concentriche si possono pensare come possibile espressione delle varie orbite, esse pure supposte sferiche. I tre punti J, I, I' sono riportati anche sull'asse S.

Paralleli ad S sono gli assi S' ed S''; sopra questi sono trasportati, mediante proiezione, i punti che, riguardo al salgemma, corrispondono ad una sezione della fotografia riportata da W. Nowacki, in *Fouriersynthese* (1952 - pag. 62); la sezione fatta sulla fotografia passa per i due centri ionici, e quindi

i punti che poi vengono proiettati sopra  $S'$  corrispondono ai diametri delle diverse orbite elettroniche.

Analogamente sopra  $S''$  sono proiettati i punti che, riguardo al rutilo, corrispondono ad una sezione della figura 197 in *Los Rayons X, ecc.* (1946) di Garrido e Orland.

Per confrontare la distribuzione dei punti schierati in  $S$  con quella dei punti ottenuti sopra  $S'$  ed  $S''$  (esame con riga e squadra su figura ingrandita), premettiamo che tutte le coincidenze, sia giuste, sia approssimative, sono esposte a possibili cause di inesattezza, inerenti alla supposta sfericità, alla fotografia, al disegno, e forse anche alle figure del testo. Ecco ora ciò che risulta dalla nostra figura.

Riguardo ai punti  $J, I, I'$ , troviamo che  $I$  e  $I'$  hanno i loro corrispondenti su  $S'$  ed  $S''$ ; ad  $J$  corrisponde il punto su  $S'$ , mentre manca su  $S''$ .

Quanto ai punti delle progressioni  $\alpha$  e  $\beta$ , segnati nella fig. 3, è da osservare:

1° i centri  $O, O'$  segnati in  $S$  hanno, per costruzione, i loro corrispondenti in  $S'$  e in  $S''$ ; si ha quindi una globale corrispondenza anche fra i punti rispettivamente distribuiti intorno ai detti centri;

2° separando i punti della progressione  $\alpha$  da quelli della  $\beta$ ; ed attribuendo alle coincidenze giuste un valore maggiore rispetto a quelle approssimative, si ottengono i due seguenti prospetti; nei quali vengono indicate con 2 le migliori e con 1 le incerte. Ed in essi, oltre alle colonne corrispondenti ai singoli punti segnati con le lettere della fig. 3, alcune altre colonne si riferiscono a punti, che (come abbiamo detto per la fig. 2) suddividono in frazioni armoniche i relativi intervalli.

$\alpha$		C	E	H	K	F		D		C'		E'	H'	K'	F'		D'			
$S'$		2	2	2	2	2	2	2	1	1	2	2	2	2	1		2	1	2	2
$S''$			2	2	2		1	2			1	2	2					1	2	2

$\beta$		M		P	U	V	Q		N		M'		P'	U'	V'	Q'		N'			
$S'$		1		2		2	2		2		2		1		2	1	1	1	1		1
$S''$			1					2		2	1	1	2	2			2	2	2	2	2

Se ora sommiamo in ogni linea  $S$  le cifre indicanti le coincidenze, si ottengono numeri sopra i quali, oltre alle suddette possibilità di inesattezza, possono influire anche i valori 2 e 1 attribuiti alle più o meno giuste corrispondenze, e la limitazione ai primi termini delle due progressioni.

Si trova dunque:

$$\text{per la } \alpha: S' = 34(30 + 4) \quad , \quad S'' = 19(16 + 3) \quad - \text{ Totale } 53;$$

$$\text{per la } \beta: S' = 19(12 + 7) \quad , \quad S'' = 19(16 + 3) \quad - \text{ Totale } 38;$$

e quindi:

$$\text{per il salgemma} \quad S'(\alpha) + S'(\beta) = 34 + 19 = 53;$$

$$\text{per il rutilo} \quad S''(\alpha) + S''(\beta) = 19 + 19 = 38.$$

Differenze notevoli qui si osservano, tanto fra salgemma e rutilo, quanto fra  $\alpha$  e  $\beta$ . Ma è da rilevare:

1° l'uguaglianza dei risultati confrontando l'insieme salgemma-rutilo (in cui predomina il salgemma) con l'insieme  $\alpha$ - $\beta$  (in cui predomina  $\alpha$ );

2° la netta correlazione fra le predominanze del salgemma e della progressione  $\alpha$ .

È perciò presumibile che, nel paragone fra le intime strutture ioniche e la natura armonica delle progressioni, possano predominare, da un lato il salgemma (più ricco di simmetrie) in fronte al rutilo; da altro lato la progressione  $\alpha$ , in fronte alla  $\beta$ . Notiamo infatti, riguardo alla  $\alpha$ , che, dati i tre punti A, O, B, di un diametro, si trovano con essi i quarti armonici C e D, e che ciò può avvenire sugli infiniti diametri della superficie sferica; talché si può così passare direttamente ad un'altra superficie (di raggio  $OC = 1/3 OA$ ); e da questa poi alla successiva, ecc. Ora questa semplice operazione non è fattibile quando si proceda, partendo dal diametro AOB, allo sviluppo della progressione  $\beta$ ; la superficie sferica non basta, e i quarti armonici si trovano o mediante il punto all'infinito della retta sostegno di AB, o mediante il quadrilatero 1, 2, 3, 5 della fig. 2) dopo avere ottenuto  $1/3 OA$ , o prolungando AB fino ad altro punto della fila propria di AB. In questo senso dunque l'armonicità inerente alla progressione  $\alpha$  è più autonoma di quella inerente alla  $\beta$ ; e forse perciò possiamo attribuirle una più diretta azione sulle entità orbitali.

Possiamo quindi vedere una relazione fra il maggiore numero di coincidenze osservate su  $S'$  (in confronto con  $S''$ ) e la maggiore armonicità della  $\alpha$ .

Risulta altresì una apprezzabile corrispondenza fra l'insieme dei semplici rapporti armonici costituenti le due progressioni, e l'insieme di analoghi collegamenti fra le orbite elettroniche di ciascun ione.