

- BYSTRÖN, A. M. (1954). Kinnekulle bentonite beds. Sverig. geol. Unders., Arsbok 48, Nº 5.
- COLE, W. F. y LANCUCKI, C. J. (1966). Tabular data of layer structure factors for clay minerals. Acta Cryst. 21,836-838.
- Comisión Federal de Electricidad (1968). Comunicación personal.
- DE ANDA, L. (1957). La geotermia en México. Minería y Metalurgia 1(2), 6-13.
- HAMILTON, J. D. (1957). Partially ordered mixed layer mica-montmorillonite from Maitland, New South Wales. Clay Minerals 7,63-78.
- HENDRICKS, S. B. y TELLER, E. (1942). X-ray interference in partially ordered layer lattices. J. Chem. Phys. 10,147-167.
- HEYSTEK, K. (1954). Regular mixed layer clay. Miner. Mag. 30,400-408.
- HOWER, J. y MOWATT, T. C. (1966). The mineralogy of illites and mixed layer illite/montmorillonites. Amer. Miner. 51,825-854.
- KASPER, J. S., y LONSDALE, K. (1967). International Tables for X-ray Crystallography. The Kynoch Press, Birmingham, Inglaterra. 2nd. Ed. Vol. II, pp. 270-271.
- MACEWAN, D. M. C. (1956a). Illite-montmorillonite. Clays and clay minerals. Publ. 456, Nat. Acad. Sci. Washington. A. Swineford, Editor. Pag. 166-172.
- (1956b). Fourier transform methods for studying scattering from lamellar systems. I. A direct method for analysing interstratified mixtures. Kolloid Zeitschrift 149,96-108.
- (1958). Fourier transform methods. II. Calculation of diffraction effects for different types of interstratification. Kolloidzshr. 156,61-67.
- MOOSER, F. (1964). Provincias geotérmicas de México. Bol. Asoc. Mex. Geol. Petr. XVI (7,8), 153.
- (1966). Geología del campo de Pathé. Comisión Federal de Electricidad, México. Comunicación personal.
- SATO, M., AINUMA, K., y KAZUO, K. (1965). Nature, Lond. 208, 179.
- STEINER, A. (1968). Clay minerals in hydrothermally altered rocks at Wairakei, New Zeland. Clays and Clay Minerals 16 (3), 193-214.
- STUBICAN, V. y ROY, R. (1961a). Isomorphous substitution and infrared spectra of the layer lattice silicates. Amer. Miner. 46, 32-51.
- (1961b). A new approach to assignement of infrared absorption bands in layer structure silicates. Zeit. Kristallographie 115, 200-14.
- (1961c). Infrared spectra of layer structure silicates. Jour. Amer. Cer. Soc. 44, 625-27.

LA CELDA REDUCIDA

Programas de cálculo cristalográfico

CONTENIDO

Programa 13: Reducción de Einsenstein (en banda) Matriz de Niggli	45
Cálculo y selección de la celda reducida	46
Primera parte, cálculos	47
Segunda parte, examen de constantes	48
Tercera parte, selección de la celda reducida	49
Celdas reducidas y sus matrices en transformación	49
Tabla general	51
Bibliografía	58

LA CELDA REDUCIDA

PROGRAMAS DE CÁLCULO CRISTALOGRAFICO

FORTRAN - BURROUGHS 5500 - COMPLEJO R: PROG. 13

FRANCISCO J. FABREGAT GUINCHARD

PROGRAMA 13: REDUCCIÓN DE EISENSTEIN (EN BANDA). MATRIZ DE NIGGLI

Este programa establece las matrices de Niggli y de Zelling que corresponden a una celda elemental directa inicial dada (medidas paramétricas absolutas en angstroms y angulares en grados, minutos y segundos sexagesimales).

Luego se calculan los posibles vectores en banda con los símbolos más bajos, para cada uno de los planos coordenados, eligiendo automáticamente los tres menores. Esta determinación puede no ser la más adecuada y al investigador incumbe el examinarla y proveer a otra que crea mejor con base en los otros vectores menores calculados.

El programa somete la celda reducida al criterio de compatibilidad de Eisenstein y calcula el volumen de la celda correspondiente. Calcula asimismo las matrices de Niggli y las de Zelling de la última celda reducida, para poder verificarla algorítmicamente. Téngase en cuenta que los escalares simétricos de la matriz de Niggli han de ser siempre positivos (son los cuadrados de los lados) y los simétricos serán negativos cuando el ángulo axial que impliquen sea obtuso.

Como la celda de los tres parámetros menores haya de tener sus tres ángulos obtusos, será fácil lograrlo examinando el signo de los tres escalares asimétricos y forzándolo a ser negativo al operar con los índices del vector. El tipo de red de la celda reducida hallada se selecciona con el criterio de Niggli, mediante proposiciones condicionales lógicas de elección, sobre la matriz de Niggli de su celda reducida, e indicación de la matriz correspondiente que se haya de emplear para elevarla hasta la elemental definitiva.

El programa continúa la exploración con cuantas nuevas celdas reducidas se le propongan.

CÁLCULO Y SELECCIÓN DE LA CELDA REDUCIDA

El problema es fundamental en las investigaciones sobre la celda elemental, que se hacen a partir de los diagramas de Debye, cuando se interpretan por el método de Ito, en el que se numeran los arcos de los reflejos con relación a una terna elegida arbitrariamente como de pinacoides. Luego se ha de pasar de esa celda arbitraria a la verdadera.

Este programa no puede darse como definitivo para todos los casos que se puedan presentar, por requerir el juicio del investigador en algunos problemas complejos. Se ha verificado como satisfactorio en los casos sencillos y aun ser de un auxilio eficaz en los demás. Desgraciadamente, los errores físicos de medida introducen variantes en las constantes, cuya comparación no se puede confiar a la computadora (casos de igualdad o de reducción a cero).

De entre los modos de representar una red cristalina se emplea con más frecuencia la paramétrica, la matricial de Niggli y la de Zelling:

paramétrica:	a,	b,	c,	α ,	β ,	γ ,
	a : b : c =					
matriz de Niggli:	s(11)		s(22)		s(33)	
	s(23)		s(31)		s(12)	
matriz de Zelling:	s(23)		s(31)		s(12)	
	s(14)		s(24)		s(34)	

cuya significación de valores es:

$$\begin{aligned}
 s(11) &= a^2 \\
 s(22) &= b^2 \\
 s(33) &= c^2 \\
 s(23) &= b c \cos \alpha \\
 s(31) &= c a \cos \beta \\
 s(12) &= a b \cos \gamma \\
 s(14) &= -s(11) - s(12) - s(13) \\
 s(24) &= -s(21) - s(22) - s(23) \\
 s(34) &= -s(31) - s(32) - s(33)
 \end{aligned}$$

Sobre cada una de esas matrices se pueden efectuar una serie de transformaciones, para llegar al conocimiento de los parámetros de la celda redu-

cida. Tanto la matriz de Niggli cuanto la de Zelling se valen de algoritmos triangulares para facilitar las operaciones. Este programa propone un procedimiento más directo y seguro: el del cálculo de parámetros en banda para cada uno de los pinacoides, seleccionando los menores compatibles aislados.

Una banda está formada por dos filas reticulares próximas paralelas; se trata de calcular las traslaciones conjugadas de la red de modo que dada una constante, la otra sea la menor posible. Reiterada la operación para la primera traslación manteniendo constante la segunda, se llegan a determinar las dos menores de la banda. Los cálculos análogos con base en las otras dos bandas pinacoidales, darán las tres traslaciones de la celda reducida.

Nótese que los vectores de base de la celda unidad serán idénticos a los de la celda reducida, sólo cuando aquélla sea primitiva; en otro caso, se habrán de transformar mediante una matriz adecuada.

Se opera con datos de la celda directa: los parámetros lineales y los angulares (dados en radianes).

En la *primera parte*, cálculos:

1. De los términos de sus matrices de Niggli y de Zelling.
2. De todos los vectores posibles en banda, entre los índices 0, 1, -1, 2, -2.

$$\vec{t}_1 = u_1 \vec{a} + v_1 \vec{b} + w_1 \vec{c}$$

$$\vec{t}_2 = u_2 \vec{a} + v_2 \vec{b} + w_2 \vec{c}$$

$$\vec{t}_3 = u_3 \vec{a} + v_3 \vec{b} + w_3 \vec{c}$$

cuyo módulo es

$$t^2 = u^2 a^2 + v^2 b^2 + w^2 c^2 + 2uvab \cos \gamma + 2vwbc \cos \alpha + 2wuca \cos \beta$$

o bien, con

$$k_1 = a^2 ; k_4 = 2 a b \cos \gamma$$

$$k_2 = b^2 ; k_5 = 2 b c \cos \alpha$$

$$k_3 = c^2 ; k_6 = 2 c a \cos \beta$$

$$t^2 = u^2 k_1 + v^2 k_2 + w^2 k_3 + u v k_4 + v w k_5 + w u k_6$$

3. Elección de los tres pares de vectores menores. Esta elección requiere el juicio del investigador en los casos críticos. De no admitir los calculados por la computadora, no tendrían valor los resultados subsiguientes, que podrán ser objeto de cálculo directo.

4. Selección de los correspondientes al primer octante.

5. Cosenos de los ángulos de la celda reducida: (nuevos α , β , γ).

$$\cos(t_1 \wedge t_2) = \frac{1}{t_1 t_2} \left\{ \begin{aligned} &u_1 u_2 a^2 + v_1 v_2 b^2 + w_1 w_2 c^2 + \\ &+ (u_1 v_2 + u_2 v_1) a b \cos \gamma + \\ &+ (v_1 w_2 + v_2 w_1) b c \cos \alpha + \\ &+ (w_1 u_2 + w_2 u_1) c a \cos \beta \end{aligned} \right.$$

Segunda parte, examen de esas constantes para que puedan tenerse como de celda reducida; esto es, para que sean capaces de dar una solución única a las ecuaciones de Eisenstein que de ella derivan. Estas condiciones son (Roof, 1969):

1º Que los parámetros reticulares se coloquen en orden creciente:

$$a^2 \leq b^2 \leq c^2$$

(1A) Si $a^2 = b^2$

$$|b c \cos \alpha| \leq |a c \cos \beta|$$

(1B) Si $b^2 = c^2$

$$|a c \cos \beta| \leq |a b \cos \gamma|$$

2º Que los ángulos axiales sean todos agudos o todos obtusos (o rectos, convencionalmente $\cos 90^\circ = -0.0$)

$$(2A) \quad \begin{aligned} a^2 &\geq |2 a c \cos \beta| \\ a^2 &\geq |2 a b \cos \gamma| \\ b^2 &\geq |2 a b \cos \alpha| \end{aligned}$$

(2B) Se distinguirán 3 casos, según que:

$$(2BA) \quad a b \cos \gamma, a c \cos \beta, b c \cos \alpha > 0$$

(O sea, que los tres cosenos sean +)

$$\begin{aligned} \text{Cuando } a^2 &= 2ab \cos \gamma \rightarrow ac \cos \beta \leq 2bc \cos \alpha \\ a^2 &= 2ac \cos \beta \rightarrow ab \cos \gamma \leq 2cb \cos \alpha \\ b^2 &= 2bc \cos \alpha \rightarrow ab \cos \gamma \leq 2ac \cos \beta \end{aligned}$$

$$(2BB) \quad a b \cos \gamma, a c \cos \beta, b c \cos \alpha = 0$$

(O sea, que los tres cosenos sean 0)

$$\text{Cuando } a^2 = -2ab \cos \gamma \rightarrow ac \cos \beta = 0$$

$$a^2 = -2ac \cos \beta \rightarrow ab \cos \gamma = 0$$

$$b^2 = -2bc \cos \alpha \rightarrow ab \cos \gamma = 0$$

$$(2BC) \quad a b \cos \gamma, a c \cos \beta, b c \cos \alpha < 0$$

(O sean que los tres cosenos sean -)

$$\text{Cuando } a^2 = -2ab \cos \gamma \rightarrow ac \cos \beta = 0$$

$$a^2 = -2ac \cos \beta \rightarrow ab \cos \gamma = 0$$

$$b^2 = -2bc \cos \alpha \rightarrow ab \cos \gamma = 0$$

Quando $a^2 + b^2 + 2bc \cos \alpha + 2ac \cos \beta + 2ab \cos \gamma \geq 0$
ha de cumplir dos posibilidades:

(2BCA) de ser > 0 , es correcto.

(2BCB) de ser $= 0 \rightarrow$

$$a^2 + 2ac \cos \beta + ab \cos \gamma \leq 0$$

Tercera parte. Selección de la celda reducida y tipo de red a que pertenece; su matriz de transformación a la celda elemental definitiva.

CELDA REDUCIDA Y SUS MATRICES DE TRANSFORMACIÓN

Una de las formas de representar la celda elemental es mediante su matriz de Niggli:

$$\begin{aligned} &\begin{matrix} \rightarrow\rightarrow & \rightarrow\rightarrow & \rightarrow\rightarrow \\ ||a.a & ||b.b & c.c|| \\ \rightarrow\rightarrow & \rightarrow\rightarrow & \rightarrow\rightarrow \end{matrix} = \begin{vmatrix} a^2 & & \\ a b \cos \gamma & b^2 & \\ a c \cos \beta & b c \cos \alpha & c^2 \end{vmatrix} \\ &= \begin{vmatrix} S(11) & S(22) & S(33) \\ S(23) & S(13) & S(12) \end{vmatrix} \end{aligned}$$

Para facilidad tipográfica y aun conveniencia en su aplicación a computadora electrónica, se pueden establecer las siguientes convenciones:

$$\begin{aligned} H &= S(11) & Q &= S(22) & P &= S(33) \\ D &= S(23) & E &= S(13) & G &= S(12) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 O &= O & F &= S(22)/2 & Y &= (S(11)-S(12))/2 \\
 A &= S(11)/3 & R &= S(12)/2 & U &= (S(11)-S(23)-S(13)) \\
 B &= S(11)/2 & Z &= S(13)/2 & V &= (S(22)-S(12))/2 \\
 C &= S(11)/4 & X &= S(23)/2 & W &= (S(22)-S(11)/3)/2 \\
 T &= S(11)-2(S(23)) & K &= (S(11)-S(13))/2 \\
 L &= (S(11)-S(23))/2 & M &= (S(22)-S(13))/2
 \end{aligned}$$

mediante las cuales su matriz de representación tiene el aspecto general

$$\begin{pmatrix} H & Q & P \\ D & E & G \end{pmatrix}$$

Con la tabla general que se coloca a continuación se pueden construir las matrices de Niggli de las celdas reducidas que se calculen, determinar su modo de Bravais y clase de red, así como las matrices de transformación (penúltima columna) para calcular la celda definitiva a partir de su reducida provisional.

TABLA GENERAL

Nº	Escala res simétricos: H H H			Matriz de transformación	
	Escala res asimétricos: +				
1	O	B	B	I Ortoclínica	$0\bar{1}\bar{1}/01\bar{1}/2\bar{1}\bar{1}$
2	O	E	E	C Monoclínica	$011/0\bar{1}1/100$
3	C	B	B	I Tetragonal	$011/111/100$
4	B	O	B	I Ortoclínica	$\bar{1}0\bar{1}/10\bar{1}/\bar{1}2\bar{1}$
5	B	C	B	I Tetragonal	$\bar{1}01/\bar{1}1\bar{1}/010$
6	B	B	O	I Ortoclínica	$\bar{1}\bar{1}0/1\bar{1}0/\bar{1}\bar{1}2$
7	B	B	C	I Tetragonal	$\bar{1}10/\bar{1}\bar{1}1/001$
8	B	B	B	F Cúbica	$1\bar{1}1/11\bar{1}/\bar{1}11$
9	B	B	G	I Ortoclínica	$00\bar{1}/11\bar{1}/\bar{1}10$
10	B	R	G	C Monoclínica	$0\bar{1}0/0\bar{1}2/100$
11	B	E	B	I Ortoclínica	$0\bar{1}0/1\bar{1}1/\bar{1}01$
12	B	E	Z	C Monoclínica	$00\bar{1}/02\bar{1}/100$
13	Z	E	B	C Monoclínica	$\bar{1}00/\bar{1}20/001$
14	R	B	G	C Monoclínica	$\bar{1}00/\bar{1}02/010$
15	D	O	D	C Monoclínica	$101/\bar{1}01/010$
16	D	B	B	I Ortoclínica	$\bar{1}00/\bar{1}11/0\bar{1}1$
17	D	B	X	C Monoclínica	$00\bar{1}/20\bar{1}/010$
18	D	X	B	C Monoclínica	$0\bar{1}0/2\bar{1}0/001$
19	D	D	O	C Monoclínica	$110/\bar{1}10/001$
20	D	D	G	C Monoclínica	$110/\bar{1}10/001$
21	D	E	E	C Monoclínica	$011/0\bar{1}1/100$
22	D	E	D	C Monoclínica	$101/\bar{1}01/010$
23	D	D	D	R Romboédrica	$1\bar{1}0/101/110$

Nº	Escalares simétricos: H H H	Escalares asimétricos: -	Matriz de transformación
24	-0 -0 -0	P Cúbica	1 0 0 / 0 1 0 / 0 0 1
25	-0 -0 -B	P Exagonal	1 0 0 / 0 1 0 / 0 0 1
26	-0 -0 -G	C Ortoclínica	1 1 0 / $\bar{1}$ 1 0 / 0 0 1
27	-0 -B -0	P Exagonal	0 0 1 / 1 0 0 / 0 1 0
28	-0 -B -B	I Tetragonal	0 0 1 / 0 1 0 / 2 1 1
29	-0 -B -G	C Monoclínica	2 0 1 / 0 0 1 / 0 1 0
30	-0 -E -0	C Ortoclínica	1 0 1 / $\bar{1}$ 0 1 / 0 1 0
31	-0 -E -B	C Monoclínica	2 1 0 / 0 1 0 / 0 0 1
32	-0 -E -E	C Monoclínica	0 1 1 / 0 $\bar{1}$ 1 / 1 0 0
33	-A -A -A	I Cúbica	1 0 1 / 1 1 0 / 0 1 1
34	-B -0 -0	P Exagonal	0 1 0 / 0 0 1 / 1 0 0
35	-B -0 -B	I Tetragonal	1 0 0 / 0 0 1 / 1 2 1
36	-B -0 -G	C Monoclínica	0 2 1 / 0 0 1 / 1 0 0
37	-B -B -0	I Tetragonal	1 0 0 / 0 1 0 / 1 1 2
38	-B -B -G	I Ortoclínica	0 0 1 / 1 1 1 / $\bar{1}$ 1 0
39	-B -E -0	C Monoclínica	0 1 2 / 0 1 0 / 1 0 0
40	-B -E -B	I Ortoclínica	0 1 0 / 1 1 1 / $\bar{1}$ 0 1
41	-Y -Y -G	I Tetragonal	1 0 1 / 0 1 1 / 1 1 0
42	-K -E -K	I Tetragonal	0 1 1 / 1 1 0 / 1 0 1
43	-D -0 -0	C Ortoclínica	0 1 1 / 0 $\bar{1}$ 1 / 1 0 0
44	-D -0 -B	C Monoclínica	1 2 0 / 1 0 0 / 0 0 1
45	-D -0 -D	C Monoclínica	1 0 1 / $\bar{1}$ 0 1 / 0 1 0
46	-D -B -0	C Monoclínica	1 0 2 / 1 0 0 / 0 1 0
47	-D -B -B	I Ortoclínica	1 0 0 / 1 1 1 / 0 $\bar{1}$ 1

Nº	Escalares simétricos: H H P	Escalares asimétricos: +	Matriz de transformación
48	-D -L -L	I Tetragonal	1 1 0 / 1 0 1 / 0 1 1
49	-D -D -0	C Monoclínica	1 1 0 / $\bar{1}$ 1 0 / 0 0 1
50	-D -D -D	R Romboédrica	1 $\bar{1}$ 0 / $\bar{1}$ 0 1 / $\bar{1}$ $\bar{1}$ $\bar{1}$
51	-D -D -G	C Monoclínica	1 1 0 / $\bar{1}$ 1 0 / 0 0 1
52	-D -E -D	C Monoclínica	1 0 1 / $\bar{1}$ 0 1 / 0 1 0
53	-D -E -E	C Monoclínica	0 1 1 / 0 $\bar{1}$ 1 / 1 0 0
54	-D -E -U	I Ortoclínica	1 0 1 / 1 1 0 / 0 1 1
55	C B B	F Ortoclínica	$\bar{1}$ 2 0 / $\bar{1}$ 0 2 / 1 0 0
56	B C B	F Ortoclínica	2 $\bar{1}$ 0 / 0 $\bar{1}$ 2 / 0 1 0
57	B B B	R Romboédrica	1 0 0 / $\bar{1}$ 1 0 / $\bar{1}$ $\bar{1}$ 3
58	B R G	C Monoclínica	0 $\bar{1}$ 0 / 0 $\bar{1}$ 2 / 1 0 0
59	B E B	I Monoclínica	1 0 $\bar{1}$ / 0 1 0 / 1 $\bar{1}$ 1
60	Z E B	C Monoclínica	$\bar{1}$ 0 0 / $\bar{1}$ 2 0 / 0 0 1
61	R B G	C Monoclínica	$\bar{1}$ 0 0 / $\bar{1}$ 0 2 / 0 1 0
62	D B B	I Monoclínica	0 1 $\bar{1}$ / 1 0 0 / $\bar{1}$ 1 1
63	D X B	C Monoclínica	0 $\bar{1}$ 0 / 2 $\bar{1}$ 0 / 0 0 1
64	D D 0	C Monoclínica	1 1 0 / $\bar{1}$ 1 0 / 0 0 1
65	D D G	C Monoclínica	1 1 0 / $\bar{1}$ 1 0 / 0 0 1
Nº	Escalares simétricos: H H P	Escalares asimétricos: -	Matriz de transformación
66	-0 -0 -0	P Tetragonal	1 0 0 / 0 1 0 / 0 0 1
67	-0 -0 -B	P Exagonal	1 0 0 / 0 1 0 / 0 0 1

68	-0	-0	-G	C Ortoclínica	1 1 0 / $\bar{1}$ 1 0 / 0 0 1
69	-0	-B	-0	C Ortoclínica	1 1 0 / $\bar{1}$ 0 $\bar{2}$ / 0 1 0
70	-0	-E	-0	P Monoclínica	1 0 0 / 0 1 0 / 0 0 1
71	-0	-E	-B	C Monoclínica	2 1 0 / 0 1 0 / 0 0 1
72	-C	-C	-B	F Ortoclínica	1 $\bar{1}$ 0 / 1 1 2 / $\bar{1}$ $\bar{1}$ 0
73	-B	-0	-0	C Ortoclínica	0 1 0 / 0 $\bar{1}$ $\bar{2}$ / 1 0 0
74	-B	-B	-0	I Tetragonal	1 0 0 / 0 1 0 / 1 1 2
75	-B	-E	-0	C Monoclínica	0 1 2 / 0 1 0 / 1 0 0
76	-D	-0	-0	P Monoclínica	0 1 0 / 1 0 0 / 0 0 1
77	-D	-0	-B	C Monoclínica	1 2 0 / 1 0 0 / 0 0 1
78	-D	-B	-0	C Monoclínica	1 0 2 / 1 0 0 / 0 1 0
79	-D	-D	-0	C Monoclínica	1 1 0 / $\bar{1}$ 1 0 / 0 0 1
80	-D	-D	-T	F Ortoclínica	1 $\bar{1}$ 0 / 1 1 2 / $\bar{1}$ $\bar{1}$ 0
81	-D	-D	-G	C Monoclínica	1 1 0 / $\bar{1}$ 1 0 / 0 0 1
82	-D	-E	-B	I Monoclínica	1 0 1 / 1 1 0 / 0 $\bar{1}$ $\bar{1}$
83	-D	-E	-U	I Monoclínica	0 1 1 / 1 1 0 / 1 0 1

Nº	Escalares simétricos:	H	Q	Q	Matriz de transformación
	Escalares asimétricos:		+		

84	0	B	B	I Ortoclínica	$\bar{1}$ 0 0 / $\bar{1}$ 1 1 / 0 $\bar{1}$ 1
85	0	E	E	C Monoclínica	0 1 1 / 0 $\bar{1}$ 1 / 1 0 0
86	C	B	B	I Tetragonal	0 $\bar{1}$ 1 / 1 $\bar{1}$ $\bar{1}$ / 1 0 0
87	F	R	G	C Monoclínica	0 $\bar{1}$ 0 / 0 $\bar{1}$ 2 / 1 0 0
88	F	E	Z	C Monoclínica	0 0 $\bar{1}$ / 0 2 $\bar{1}$ / 1 0 0
89	R	B	G	C Monoclínica	$\bar{1}$ 0 0 / $\bar{1}$ 0 2 / 0 1 0
90	Z	E	B	C Monoclínica	$\bar{1}$ 0 0 / $\bar{1}$ 2 0 / 0 0 1
91	D	B	B	I Ortoclínica	$\bar{1}$ 0 0 / $\bar{1}$ 1 1 / 0 $\bar{1}$ 1

92	D	E	E	C Monoclínica	0 1 1 / 0 $\bar{1}$ 1 / 1 0 0
----	---	---	---	---------------	-------------------------------

Nº	Escalares simétricos:	H	Q	Q	Matriz de transformación
	Escalares asimétricos:		-		

93	-0	-0	-0	P Tetragonal	0 1 0 / 0 0 1 / 1 0 0
94	-0	-0	-B	C Ortoclínica	1 0 0 / $\bar{1}$ $\bar{2}$ 0 / 0 0 1
95	-0	-0	-G	P Monoclínica	1 0 0 / 0 0 1 / 0 1 0
96	-0	-B	-0	C Ortoclínica	1 0 0 / $\bar{1}$ 0 $\bar{2}$ / 0 1 0
97	-0	-B	-B	I Ortoclínica	1 0 0 / 1 1 1 / 0 $\bar{1}$ 1
98	-0	-E	-0	P Monoclínica	1 0 0 / 0 1 0 / 0 0 1
99	-0	-E	-E	C Monoclínica	0 1 1 / 0 $\bar{1}$ 1 / 1 0 0
100	-B	-0	-0	P Exagonal	0 1 0 / 0 0 1 / 1 0 0
101	-F	-0	-B	I Ortoclínica	1 0 0 / 0 0 1 / $\bar{1}$ $\bar{2}$ $\bar{1}$
102	-F	-0	-R	C Monoclínica	0 2 1 / 0 0 1 / 1 0 0
103	-F	-B	-0	I Ortoclínica	1 0 0 / 0 1 0 / $\bar{1}$ $\bar{1}$ $\bar{2}$
104	-F	-E	-0	C Monoclínica	0 1 2 / 0 1 0 / 1 0 0
105	-W	-A	-A	R Romboédrica	1 2 1 / 0 $\bar{1}$ 1 / 1 0 0
106	-V	-Y	-G	I Monoclínica	1 0 0 / 1 1 2 / 0 1 0
107	-M	-E	-K	I Monoclínica	1 0 0 / 1 2 1 / 0 0 1
108	-D	-0	-0	C Ortoclínica	0 1 1 / 0 $\bar{1}$ 1 / 1 0 0
109	-D	-0	-B	C Monoclínica	1 2 0 / 1 0 0 / 0 0 1
110	-D	-B	-0	C Monoclínica	1 0 2 / 1 0 0 / 0 1 0
111	-D	-B	-B	I Ortoclínica	1 0 0 / 1 1 1 / 0 $\bar{1}$ 1
112	-D	-E	-E	C Monoclínica	0 1 1 / 0 $\bar{1}$ 1 / 1 0 0

Nº	Escalares simétricos: H Q P			Matriz de transformación	
	Escalares asinétricos: +				
113	C	B	B	F Ortoclínica	$\bar{1} 2 0 / \bar{1} 0 2 / 1 0 0$
114	F	R	Q	C Monoclínica	$0 \bar{1} 0 / 0 \bar{1} 2 / 1 0 0$
115	Z	E	B	C Monoclínica	$\bar{1} 0 0 / \bar{1} 2 0 / 0 0 1$
116	R	B	G	C Monoclínica	$\bar{1} 0 0 / \bar{1} 0 2 / 0 1 0$
117	D	B	B	I Monoclínica	$0 1 \bar{1} / 1 0 0 / \bar{1} 1 1$
118	D	E	G	P Triclínica	$1 0 0 / 0 1 0 / 0 0 1$

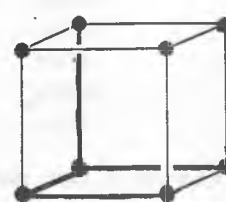
Nº	Escalaes simétricos: H Q P			Matriz de transformación	
Escalaes asimétricos: -					
119	-0	-0	-0	P Ortoclínica	1 0 0 / 0 1 0 / 0 0 1
120	-0	-0	-B	C Ortoclínica	1 0 0 / $\overline{1} \overline{2}$ 0 / 0 0 1
121	-0	-0	-G	P Monoclínica	1 0 0 / 0 0 1 / 0 1 0
122	-0	-B	-0	C Ortoclínica	1 0 0 / $\overline{1}$ 0 $\overline{2}$ / 0 1 0
123	-0	-E	-0	P Monoclínica	1 0 0 / 0 1 0 / 0 0 1
124	-F	-0	-0	C Ortoclínica	0 1 0 / 0 $\overline{1} \overline{2}$ / 1 0 0
125	-F	-B	-0	I Ortoclínica	1 0 0 / 0 1 0 / $\overline{1} \overline{1} \overline{2}$
126	-F	-E	-0	C Monoclínica	0 1 2 / 0 1 0 / 1 0 0
127	-V	-Y	-G	I Monoclínica	1 0 0 / 1 1 2 / 0 1 0
128	-D	-0	-0	P Monoclínica	0 1 0 / 1 0 0 / 0 0 1
129	-D	-0	-B	C Monoclínica	1 2 0 / 1 0 0 / 0 0 1
130	-D	-B	-0	C Monoclínica	1 0 2 / 1 0 0 / 0 1 0
131	-D	-B	-B	I Monoclínica	1 1 1 / 1 0 0 / 0 1 $\overline{1}$
132	-D	-E	-G	P Triclínica	1 0 0 / 0 1 0 / 0 0 1

NOTA: Aplicada la matriz de transformación a la celda reducida se obtiene la correspondiente celda elemental del mismo tipo, excepto en los grupos numerados como:

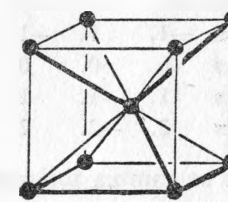
1, 4, 6 — que lleva a una celda cúbica de caras centradas: F Cúbica.

23, 50, 57, 105 — que da una celda exagonal primitiva: P Exagonal.

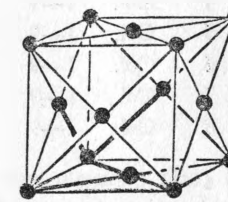
28, 35, 37 — que también originan una celda cúbica de caras centradas.



P

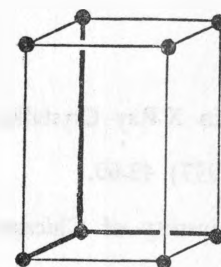


I



F

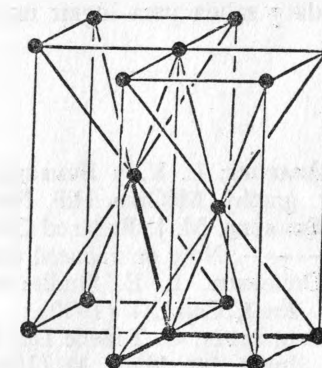
Redes cúbicas



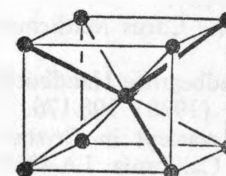
P(+)



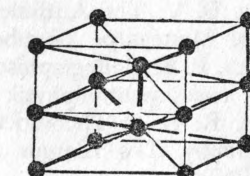
P(-)



I



I

Redes tetragonales
(Roof, 1969)

I(-)

Datos:

Tarjetas		Formato
1 y 2	En blanco	
3	Col. 1—15 : Nombre del Mineral	3A4,A3
	16—42 : Parámetros lineales directos, a, b, c, de la celda	3F9.6
	43—78 : Parámetros angulares de la celda directa, α, β, γ , en radianes	3F12.0
4	Col. 1—9 : Índices —2. 2. —2.	3F3.0
5	Col. 1—9 : Índices —1. 1. —1.	3F3.0
6	Col. 1—9 : Índices 0. 0. 0.	3F3.0
7	Col. 1—9 : Índices 1. —1. 1.	3F3.0
8	Col. 1—9 : Índices 2. —2. 2.	3F3.0

Para cada ejemplo por calcular se cambia *únicamente la tarjeta 3*, con los datos pertinentes, quedando las otras.

En los “COMENTARIOS” del programa se explican los mecanismos de entrada y salida para lograr un análisis satisfactorio del problema propuesto.

BIBLIOGRAFÍA

AZAROFF, L. V. y BUERGER, M. J. The Powder Method in X-Ray Crystallography. McGraw Hill, New York (1958).

BUERGER, M. J. Reduced Cells. Z. f. Kristallographie 109 (1957) 42-60.

———. Note on reduced cells. X. Krist. 113 (1960) 52-56.

DICKINSON, L. E. Studies in the theory of numbers. University of Chicago Press, Cap. XI (1930).

EISENSTEIN, G. Tabelle Der Reduzierten positive ternären quadratischen formen. Journ. für. Math. 41 (1851) 141-190.

JONES, B. V. A Table of Eisenstein-reduced positive ternary quadratic forms of determinant 200. National Research Council, Bull. 97 (1935).

JONES, B. V. The Arithmetic Theory of quadratic forms. The Carus Mathematical Monographs, Number 10, John Wiley (1950).

NIGGLI, P. Kristallographische und Strukturtheoretische Grundbegriffe Handbuch der experimenthalphysik 7 (Akademische Verlagsgesellsch (1928) 108-176.

ROOF, R. B. A Theoretical Extension of the reduced-cell concept in Crystallography. Los Alamos Scientific Laboratory, Univ. of California LA-4038 (1969).

SANTORO, A. y MICHELL, A. D. Determination of Reduced Cells. Acta Cryst. A26 (1970) 124.

SEEBER, L. A. Untersuchungen über die Eigenschaften der positiven ternären quadratischen Formen. Freiburg (1831).

CELDA REDUCIDA

REDUCCIÓN DE EISENSTEIN SOBRE LA MATRIZ DE NIGGLI

REDUCCIÓN EN BANDA

B 5 5 0 0 F O R T R A N C O M P I L A T I O N I X. 7.

C CALCULO CRISTALOGRAFICO= CELDA REDUCIDA POR VECTORES EN BANDA.
 C REDUCCION DE EISENSTEIN
 C DATOS CELDA ELEMENTAL DIRECTA
 C TRASLACIONES DE LA CELDA REDUCIDA
 C CF. AZAROFF, L.V. Y BUERGER M.J., THE POWDER METHOD IN X-RAY CRYSTALLOGRAPHY. MC GRAW HILL, NEW YORK (1958) 134-141, 146-150
 C RODRIGUEZ.- A THEORETICAL EXTENSION OF THE REDUCED CELL CONCEPT IN CRYSTALLOGRAPHY. LOS ALAMOS SC. LAB., CAL. (1969).
 C
 C F.J. FABRAGAT GUINCHARD.
 C FORTRAN - BURROUGHS 5500
 C
 C CON BASE EN UNA CELDA ELEMENTAL DIRECTA INICIAL DADA (PARAMETROS EN ANGSTROMS Y ANGULOS EN GRADOS, MINUTOS Y SEGUNDOS SEXAGESIMALES), EL PROGRAMA ESTABLECE SUS MATRICES DE NIGGLI Y DE SELLING POR SI SE DESEASE LA REDUCCION DIRECTA MEDIANTE ALGORITMO.
 C LUEGO SE CALCULAN LOS POSIBLES VECTORES EN BANDA PARA LOS TRES PINACOIDES CON SUS INDICES U V W CORRESPONDIENTES, ENTRE +2. Y -2.. EL PROGRAMA ELIGE ENTRE LOS TRES MENORES NO COPLANARES DETERMINA LOS DEL PRIMER OCTANTE Y ESTABLECE SUS ANGULOS CORRESPONDIENTES, QUE SFRAN LOS DE UNA POSIBLE CELDA REDUCIDA.
 C SE CALCULA SU VOLUMEN Y SE VERIFICA LA LEGITIMIDAD DE TAL CELDA
 C LUEGO SE ESTABLECEN SUS PROPIAS MATRICES DE NIGGLI Y DE SELLING INDAGANDO SI SE PUEDE CONTINUAR LA REDUCCION.
 C FINALMENTE SE ESTABLECE EL TIPO DE RED DE TAL CELDA REDUCIDA Y LA MATRIZ DE SUS TRANSFORMACIONES A LA CELDA ELEMENTAL DEFINITIVA, MULTIPLICANDOLA POR LOS TRES VECTORES DE BASE DE LA CELDA REDUCIDA QUE SE CALCULO.
 C TRATANDOSE DE UNA RED PRIMITIVA P, LA CELDA REDUCIDA ES A SU VEZ LA ELEMENTAL TAL DEFINITIVA.

0000

R 0000

0000

R 0000

C
C TARJETAS DE ENTRADA.
C TARJETA 1.- NOMBRE DEL MINERAL Y PARAMETROS DIRECTOS DE LA CELDA ELEMENTAL
C PROPUESTA (ANGULOS EN GR., MIN., SEG. SEXAGESIMALES). (FORMATO 3A4, A3, 3F6.6,
C 3(F4.0, F3.0, F5.2))
C TARJETA 2.- INDICES -2. 2. -2. (FORMATO 3F3.0)
C TARJETA 3.- INDICES -1. 1. -1. (FORMATO 3F3.0)
C TARJETA 4.- INDICES 0. 0. 0. (FORMATO 3F3.0)
C TARJETA 5.- INDICES 1. -1. 1. (FORMATO 3F3.0)
C TARJETA 6.- INDICES 2. -2. 2. (FORMATO 3F3.0)
C TARJETA 7 Y SS.- SE PONDRAN AQUI UNO O MAS TERNAS DE TARJETAS (FOR
C MATO 1X, 3(F3.0, 5X), F15.7) CON LOS DATOS U, V, W, VECTOR DE LOS 3
C VECTORES ADECUADOS QUE A JUICIO DEL INVESTIGADOR HAYAN DE RE-
C SULTAR POR LA INSPECCION DE LA LISTA, CUANDO CORRIDO EL PROGRA-
C MA LA PRIMERA VEZ NO SATISFAGA LA ELECCION AUTOMATICA DE LA
C COMPUTADORA.
C PRACTICAMENTE, SE COPIARAN EN SENDAS TARJETAS LOS N VECTORES MENORES
C CON SUS SIMBOLOS, SE DUPLICARA CADA UNA (N=1)(N=2) VECES Y SE HARAN CON
C ELLAS TERNAS CON TODAS SUS PERMUTACIONES POSIBLES. SE TENDRA CUIDADO DE
C ELIMINAR AQUELLAS TERNAS QUE COMPORTEN 3 CEROS EN EL MISMO INDICE, POR
C SUPONER CELDAS DE VECTORES COPLANARFS.
C SE EXAMINARAN LAS POSIBLES CELDAS REDUCIDAS ENCONTRADAS. LA MENOR ES LA
C DE MENOR VOLUMEN.
C PARA EVITAR TANTEOS AL IMPONER UNOS VECTORES RETICULARES, ES IMPORTANTE
C EL QUE
C 1. LOS PARAMETROS FUNDAMENTALES SE COLLOQUEN EN ORDEN CRECIENTE A, B, C.
C 2. SE CONSIDERE LA CELDA CON SUS TRES ANGULOS OBTUSOS (COSENO NEGATIVO
C ULTIMA TARJETA.- AUN CUANDO SE OMITAN LAS TARJETAS 7 Y SS. (COMO EN
C UNA PRIMERA CORRIDA EXPLORATORIA DEL PROGRAMA) SE TERMINARA
C SIEMPRE CON UNA QUE LLEVE CEROS EN EL FORMATO DE ELLAS.
C

C PARA CADA EJEMPLO POR CALCULAR SE CAMBIA UNICAMENTE LA TARJETA 1,
C Y EVENTUALMENTE LA 7 Y SS., QUEDANDO LAS OTRAS
C
C *****
C
C
C DIMENSION U(5), V(5), W(5), TEST(125, 4), VECT(125), CAMB(8), CHAN(8),
C ITARA(8), TARF(8), FARO(3, 4), ANGU(9), COSA(3), WIN(3), EDITO(9), SEN(3),
C DIMENSION Z(9), HAN(3), EDI(9)
C T1=TIME(2)/60.
C READ 1, VANA, VENC, VINE, VONO, A, B, C, (ANGU(1), I=1, 9)
C 1 FORMAT(3A4, A3, 3F9.6, 3(F4.0, F3.0, F5.2))
C READ 5, (U(I), V(I), W(I), I=1, 5)
C 5 FORMAT(3F3.0)
C PRINT 88888
C 88888 FORMAT (" UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO", 10X, "INSTITUTO
C * DE GEOLOGIA", 14X, " * * * * *", 14X, "LABORATORIO DE CRISTALOG
C *RAFIA", 14X, " * * * * *", 14X, " * * * * *")
C PRINT 175, VANA, VENC, VINE, VONO
C 175 FORMAT(9H MINERAL=3A4, A3, /)
C PRINT 176
C 76 FORMAT(29H CELDA ELEMENTAL INICIA, /)
C PRINT 177, A, (ANGU(1), I=1, 3)
C 177 FORMAT(9X, 3H A=F8.5, 4X, 10H ALFA=F4.0, F3.0, F5.2)
C PRINT 178, B, (ANGU(1), I=4, 6)
C 178 FORMAT(9X, 3H B=F8.5, 4X, 10H BETA=F4.0, F3.0, F5.2)
C PRINT 179, C, (ANGU(1), I=7, 9)
C 179 FORMAT(9X, 3H C=F8.5, 4X, 10H GAMMA=F4.0, F3.0, F5.2, /)
C N=0
C DU 2 JJ=1, 3

```

IM=JJ+N
SUNE=ANGU(IM)*60.
K=JJ+1+N
SUNE=SUNE + ANGU(K)
SUNE=SUNE*60.
L=K+1
SUNE=SUNE+ANGU(L)
N=N+2
RAD=SUNE/206264.8062
COA(JJ)=COS(RAD)
COALF=COA(1)
COBET=COA(2)
COGAM=COA(3)
SEN(JJ)=SIN(RAD)
2 CONTINUE
CORG=(COALF*COBET-COGAM)/(SEN(1)*SEN(2))
GAR=ARCOS(CORG)
SERG=SIN(GAR)
VOL=A*B*C*SEN(1)*SEN(2)*SERG
PRINT 6, VOL
6 FORMAT (10X,"VOLUMEN DE LA CELDA ELEMENTAL INICIAL ="F15.6,/)
DO 10 J=1,5
25 DO 15 K=1,5
DO 20 L=1,5
M=M+1
TEST(M,1)=U(J)
TEST(M,2)=V(K)
20 TEST(M,3)=W(L)
15 CONTINUE
10 CONTINUE
CI=A**2

```

```

CII=B**2
CIII=C**2
CIV=2*A*B*COGAM
CV=2*B*C*COALF
CVI=2*C*A*COBET
PRINT 180
180 FORMAT(9X,17H MATRIZ DE NIGGLI/)
CVII=CIV/2.
CVIII=CV/2.
CIX=CVI/2.
PRINT 181,CI,CII,CIII
181 FORMAT(9X,6H S(11),3X,6H S(22),3X,6H S(33),6X,
1F11.6,3X,F11.6,3X,F11.6)
PRINT 182,CVIII,CIX,CVII
182 FORMAT(9X,6H S(23),3X,6H S(31),3X,6H S(12),6X,F11.6,3X,
1F11.6,3X,F11.6,/)
PRINT 183
183 FORMAT(9X,18H MATRIZ DE SELLING/)
CHAV=-CI-CIX-CVII
CHEV=-CVIII-CII-CVII
CHIV=-CVIII-CIX-CIII
PRINT 184,CVIII,CIX,CVII
184 FORMAT(9X,6H S(23),3X,6H S(13),3X,6H S(12),6X,F11.6,3X,F11.6,3X,F1
11.6)
PRINT 185,CHAV,CHEV,CHIV
185 FORMAT(9X,6H S(14),3X,6H S(24),3X,6H S(34),6X,F11.6,3X,F11.6,3X,F1
11.6,/)
PRINT 186
186 FORMAT(5X,15H CELDA REDUCIDA/)
DO 35 LL=1,125

```

```

35 VECT(LL)=SQR(CI*TEST(LL,1)**2+CII*TEST(LL,2)**2+CIII*TEST(LL,3)
1**2+TEST(LL,1)*TEST(LL,2)*CIV+TEST(LL,2)*TEST(LL,3)*CV+TEST(LL,3)
2*TEST(LL,1)*CVI)
DO 40 MN=1,125
40 TEST(MN,4)=VECT(MN)
PRINT 31
31 FORMAT(37H "      V      W      VECTOR/)
PRINT 30,((TEST(N,JJ),JJ=1,4),N=1,125)
30 FORMAT(1X,F3.0,5X,F3.0,5X,F3.0,5X,F15.7,
NN=2
J=1
N=2
90 DO 125 K=N,125
IF(TEST(K,4))45,125,45
45 IF(TEST(J,4)-TEST(K,4))125,50,70
70 DO 71 KK=1,4
CAMB(KK)=TEST(J,KK)
CHAN(KK)=TEST(K,KK)
TEST(J,KK)=CHAN(KK)
TEST(K,KK)=CAMB(KK)
71 CONTINUE
GO TO 125
50 DO 51 KL=1,4
TARE(KL)=TEST(K,KI)
TARA(KL)=TEST(MN,KL)
TEST(MN,KL)=TARE(KL)
TEST(K,KL)=TARA(KL)
51 CONTINUE
J=J+2
NN=NN+2
K=0

```

```

N=NN
GO TO 80
125 CONTINUE
80 IF(N=8)90,90,100
100 CONTINUE
PRINT 136
136 FORMAT(3H /)
PRINT 135
135 FORMAT(26H LOS TRES VECTORES MENORES/)
PRINT 30,((TEST(LL,MH),MH=1,4),LL=1,6)
J1=1
DO 140 IJ=1,6
KM=3
DO 145 IM=1,3
IF(TEST(IJ,IM)) 150,155,155
150 KM=KM+1
GO TO 145
155 KM=KM+1
GO TO 145
145 CONTINUE
IF(KM=6) 140,156,140
156 DO 160 MI=1,4
FARG(JI,MI)=TEST(IJ,MI)
160 CONTINUE
JI=JI+1
140 CONTINUE
PRINT 136
PRINT 165
165 FORMAT (" *****
\ *****"//," LOS VECTORES DEL PRIMER OCTANTE DETE
*MINADOS POR EL PROGRAMA",/)

```

```

PRINT 30,((FARO(III,JJJ),JJJ=1,4),III=1,3)
C  CALCULO ANGULOS CELDA REDUCIDA
U1=FARO(1,1)
V1=FARO(1,2)
W1=FARO(1,3)
AR=FARO(1,4)
U2=FARO(2,1)
V2=FARO(2,2)
W2=FARO(2,3)
BR=FARO(2,4)
U3=FARO(3,1)
V3=FARO(3,2)
W3=FARO(3,3)
CR=FARO(3,4)
C  CONDICION DE COPLANARIDAD DE VECTORES, QUE SU DETERMINANTE SEA CERO.
13  FAT=U1*U2*U3+U3*V1*W2+W1*U2*V3-U3*V2*W1-W3*U2*V1-U1*V3*W2
    IF(FAT.EQ.0.) GO TO 101
    GO TO 103
101  PRINT 102
102  FORMAT (1H0,"NO SON VIABLES POR SER COPLANARES. ES PRECISO ELEGIR
    *LOS MAS CONVENIENTES DE ENTRE LOS OTROS MENORES CALCULADOS",//)
    GO TO 14
103  GAMAR=(U1*U2*CI+V1*V2*CII+W1*W2*CIIT+(U1*V2+U2*V1)*(CIV/2.)+
    1*(V1*W2+V2*W1)*(CV/2.)+(W1*U2+W2*U1)*(CVI/2.))/(AR*BR)
    BETAR=(U1*U3*CI+V1*V3*CII+W1*W3*CIIT+(U3*V1+U1*V3)*(CIV/2.)
    1+(V3*W1+V1*W3)*(CV/2.)+(W3*U1+W1*U3)*(CVI/2.))/(AR*CR)
    ALFAR=(U2*U3*CI+V2*V3*CII+W2*W3*CIIT+(U2*V3+U3*V2)*(CIV/2.)
    1+(V2*W3+V3*W2)*(CV/2.)+(W2*U3+W3*U2)*(CVI/2.))/(BR*CR)
    WIN(1)=ARCOS(ALFAR)
    WIN(2)=ARCOS(BETAR)
    WIN(3)=ARCOS(GAMAR)

```

```

PRINT 136
PRINT 170
170  FORMAT (32H          ANGULOS CELDA REDUCIDA/)
NN=00
DO 3  KK=1,3
BRC=WIN(KK)
BRC=ABS(BRC)
BSEG=BRC*206264.80620
BMIN=BRC*3437.746770
BGRA=BRC*57.295779
IBGRA=BGRA
ESTA=IBGRA*60
IRES2=BMIN-ESTA
ARRO=IRES2*60
CARBO=ESTA*60.
BSEG=BSEG-(CARBO+ARRO)
IF(BSEG<60.) 78,79,79
79  BSEG=BSEG-60.
    IRES2=IRES2+1
78  IF(IRES2<60 ) 8,81,81
81  IRES2=IRES2-60
    IBGRA=IBGRA+1
8  CONTINUE
MM=KK+NN
EDITO(MM)=IBGRA
KL=KK+1+NN
EDITO(KL)=IRES2
LL=KL+1
EDITO(LL)=BSEG
NN=NN+2
3  CONTINUE

```

```

PRINT 171,(EDITO(NL),NL=1,3)
171 FORMAT(15H          ALFA=FA.0,F3.0,F5.2)
PRINT 172,(EDITO(NL),NL=4,6)
172 FORMAT(15H          BETA=FA.0,F3.0,F5.2)
PRINT 173,(EDITO(NL),NL=7,9)
173 FORMAT(15H          GAMMA=FA.0,F3.0,F5.2,/)
PRINT 136
SEAL=SIN(WIN(1))
SEBC=SIN(WIN(2))
CGR=(ALFA*BTAR*GAMMA)/(SEAL*SEBC)
GRE=ARCOS(CGR)
SGR=SIN(GRE)
VETA=AR*BR*CR*SEAL*SEBC*SGR
PRINT 7,VETA
7 FORMAT(9X,32H VOLUMEN DE LA CELDA REDUCIDA = ,F15.6,/)
CG=AR*BR*GAMMA
BG=AR*CR*BTAR
AG=BR*CR*ALFA
AA=AR*AR
BB=BR*BR
PRINT 900
900 FORMAT (10X,"VERIFICACION DE LA CELDA REDUCIDA POR LAS CONDICIONES
* DE EISENSTEIN.",/)

```

SEGMENT

```

IF(AA.LE.BB.AND.BB.LE.CC) GO TO 901
PRINT 902
902 FORMAT (15X,"LAS DIMENSIONES A,B,C DE LA CELDA NO ESTAN EN ORDEN C
*RECIENTE.",/)
901 IF(AA.GE.ABS(2*BG).AND.AA.GE.ABS(2*CG).AND.BB.GE.ABS(2*AG))
*GO TO 907
GO TO 950

```

```

907 IF(AA.NE.BB) GO TO 908
IF(AG.GT.BG) GO TO 950
908 IF(BB.NE.CC) GO TO 909
IF(BG.GT.BG) GO TO 950
909 IF(AG.GT.0.AND.BG.GT.0.AND.CG.GT.0) GO TO 903
IF(AG=0.AND.BG=0.AND.CG=0) GO TO 904
IF(AG.LT.0.AND.BG.LT.0.AND.CG.LT.0) GO TO 905
PRINT 906
906 FORMAT (15X,"NO TIENE TODOS SUS ANGULOS AGUDOS NI TODOS OBTUSOS.",
*/ )
903 IF(AA.NE.(2*CG)) GO TO 910
IF(BG.GT.(2*AG)) GO TO 950
910 IF(AA.NE.(2*BG)) GO TO 911
IF(CG.GT.(2*AG)) GO TO 950
911 IF(BB.NE.(2*AG)) GO TO 17
IF(CG.GT.(2*BG)) GO TO 950
GO TO 17
904 IF(AA.NE.(2*CG)) GO TO 912
IF(BG.NE.0) GO TO 950
912 IF(AA.NE.(2*BG)) GO TO 913
IF(CG.NE.0) GO TO 950
913 IF(BB.NE.(2*BG)) GO TO 17
IF(CG.NE.0) GO TO 950
GO TO 17
905 IF(AA.NE.(2*CG)) GO TO 916
IF(BG.NE.0) GO TO 950
916 IF(AA.NE.(2*BG)) GO TO 917
IF(CG.NE.0) GO TO 950
917 IF(BB.NE.(2*BG)) GO TO 918
IF(CG.NE.0) GO TO 950
918 AIA=AA+BB+2*AG+2*BG+2*CG

```

```

IF(AIA.NE.0) GO TO 17
BIB=AA+2*BG+CG
IF(BIB.LE.0) GO TO 17
950 PRINT 16
16 FORMAT (15X,"EN SINTESIS, LA CELDA CALCULADA NO PUEDE TENERSE COMO
  *LA REDUCIDA DE EISENSTEIN",//)
14 U1=0.
V1=0.
W1=0.
AR=0.
U2=0.
V2=0.
W2=0.
BR=0.
U3=0.
V3=0.
W3=0.
CR=0.
READ 30,U1,V1,W1,AR
IF(AR.EQ.0.) GO TO 921
READ 30,U2,V2,W2,BR
READ 30,U3,V3,W3,CR
PRINT 11
11 FORMAT (" *****
*****",//," VECTORES DE LA CELDA REDUCIDA ELEGIDO
*DS POR EL INVESTIGADOR",//)
PRINT 30,U1,V1,W1,AR
PRINT 30,U2,V2,W2,BR
PRINT 30,U3,V3,W3,CR
GO TO 13
17 PRINT 19

```

```

19 FORMAT(15X,"EN SINTESIS, ESTA CELDA CALCULADA PUEDE CONSIDERA
  IRSE COMO REDUCIDA.",//)
PRINT 180
AR=FARO(1,4)
BR=FARO(2,4)
CR=FARO(3,4)
RAFI=AR**2
RAFO=BR**2
RAFU=CR**2
TAF=BR*CR*ALFAR
TERO=CR*AR*BETAR
TIRO=AR*BR*GAMAR
PRINT 181,RAFI,RAFO,RAFU
PRINT 182,TAF,TERO,TIRO
PRINT 136
PRINT 183
RANA=-RAFI-TIRO-TERO
RENO=-TIRO-RAFO-TAF
RINO=-TERO-TAF-RAFU
PRINT 184,TAF,TERO,TIRO

PRINT 185,RANA,RENO,RINO
PRINT 191
191 FORMAT(3H //)
C SELECCION DE LA CELDA REDUCIDA.
IH=RAFI*10.
IQ=RAFO*10.
IP=RAFU*10.
ID=TAF*10.
IE=TERO*10.

```

IG=TIRO*10.

H=IH/10

Q=IQ/10

P=IP/10

D=ID/10

E=IE/10

G=IG/10

IF(H.E.Q.Q.AND.Q.E.Q.P) GO TO 300

IF(H.E.Q.Q.AND.Q.NE.P) GO TO 301

IF(H.NE.Q.AND.Q.E.Q.P) GO TO 302

C

C ESCALARES DEL IV GRUPO

C

IF(D.LE.0.AND.E.LE.0.AND.G.LE.0) GO TO 303

IF(D=H/4.) GO TO 413

IF(D=E/2.) GO TO 415

IF(D=Q/2.) GO TO 310

IF(E=H/2.) GO TO 417

DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"P","TRICLN",1,0,0,0,1,0,0,0,1/

GO TO 920

417 CONTINUE

DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","MONOCL",0,1,1,1,0,0,1,1,1/

GO TO 920

310 IF(E=H/2.) GO TO 416

DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",0,-1,0,0,-1,2,1,0,0/

GO TO 920

416 CONTINUE

DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",-1,0,0,-1,0,2,0,1,0/

GO TO 920

415 CONTINUE

DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",-1,0,0,-1,2,0,0,0,1/

GO TO 920

413 CONTINUE

DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"F","ORTOCL",-1,2,0,-1,0,2,1,0,0/

GO TO 920

303 IF(D=0) GO TO 311

IF(D=-Q/2.) GO TO 313

IF(D=-(Q-G)/2.) GO TO 427

IF(E=0) GO TO 314

IF(E=-H/2.) GO TO 315

DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"P","TRICLN",1,0,0,0,1,0,0,0,1/

GO TO 920

427 CONTINUE

DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","MONOCL",1,0,0,1,1,2,0,1,0/

GO TO 920

311 IF(E=0) GO TO 316

IF(E=-H/2.) GO TO 422

DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"P","MONOCL",1,0,0,0,1,0,0,0,1/

GO TO 920

422 CONTINUE

DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","ORTOCL",1,0,0,-1,0,-2,0,1,0/

GO TO 920

316 IF(G=0) GO TO 419

IF(G=-H/2.) GO TO 420

DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"P","MONOCL",1,0,0,0,0,1,0,1,0/

GO TO 920

420 CONTINUE

DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","ORTOCL",1,0,0,-1,-2,0,0,0,1/

GO TO 920

313 IF(E=0) GO TO 424

IF(E=-H/2.) GO TO 425

DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",0,1,2,0,1,0,1,0,0/

```

GO TO 920
424 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","ORTOCL",0,1,0,0,-1,-2,1,0,0/
GO TO 920
425 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","ORTOCL",1,0,0,0,1,0,-1,-1,-2/

GO TO 920
314 IF(G=0) GO TO 428
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",1,2,0,1,0,0,0,0,1/
GO TO 920
428 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"P","MONOCL",0,1,0,1,0,0,0,0,1/
GO TO 920
315 IF(G=0) GO TO 430
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","MONOCL",1,1,1,1,0,0,0,1,-1/
GO TO 920
430 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",1,0,2,1,0,0,0,1,0/
GO TO 920
419 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"P","ORTOCL",1,0,0,0,1,0,0,0,1/
GO TO 920

C
C ESCALARES DEL I GRUPO
C
300 IF(D.LE.0.AND.E.LE.0.AND.G.LE.0) GO TO 335
IF(D=0) GO TO 336
IF(D=H/2.) GO TO 337
IF(D=H/4.) GO TO 503
IF(D=E/2.) GO TO 513

```

```

IF(D=G/2.) GO TO 514
IF(E=0) GO TO 515
IF(E=H/2.) GO TO 338
IF(E=D/2.) GO TO 518
IF(E=D) GO TO 339
IF(G=E) GO TO 521
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",1,0,1,-1,0,1,0,1,0/
GO TO 920
339 IF(G=0) GO TO 519
IF(G=D) GO TO 523
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",1,1,0,-1,1,0,0,0,1/
GO TO 920
338 IF(G=H/2.) GO TO 516
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",0,0,-1,2,0,-1,0,1,0/
GO TO 920
516 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","ORTOCL",-1,0,0,-1,1,1,0,-1,1/
GO TO 920
523 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"R","ROMBDR",1,-1,0,-1,0,1,-1,-1,-1
GO TO 923
519 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",1,1,0,-1,1,0,0,0,1/
GO TO 920
521 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",0,1,1,0,-1,1,1,0,0/
GO TO 920
518 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",0,-1,0,2,-1,0,0,0,1/
GO TO 920
515 CONTINUE

```

```

DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",1,0,1,-1,0,1,0,1,0/

GO TO 920

514 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",-1,0,0,-1,0,2,0,1,0/
GO TO 920

513 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",-1,0,0,-1,2,0,0,0,1/
GO TO 920

503 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","TETRAG",0,-1,1,1,-1,-1,1,0,0/
GO TO 920

337 IF(E=0) GO TO 504
IF(E=H/4.) GO TO 505
IF(E=G/2.) GO TO 510
IF(E=H/2.) GO TO 740
IF(G=H/2.) GO TO 511
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",0,0,-1,0,2,-1,1,0,0/
GO TO 920

740 IF(G=0) GO TO 506
IF(G=H/2.) GO TO 508
IF(G=H/4.) GO TO 507
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","ORTOCL",0,0,-1,1,1,-1,-1,1,0/
GO TO 920

336 IF(E=H/2.) GO TO 501
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",0,1,1,0,-1,1,1,0,0/
GO TO 920

501 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","ORTOCL",0,-1,-1,0,1,-1,2,-1,-1/
GO TO 922

507 CONTINUE

```

```

DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","TETRAG",-1,1,0,-1,-1,1,0,0,1/
GO TO 920

508 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"F","CUBICA",1,-1,1,1,1,-1,-1,1,1/
GO TO 920

506 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","ORTOCL",-1,-1,0,1,-1,0,-1,-1,2/

GO TO 922

511 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","ORTOCL",0,-1,0,1,-1,1,-1,0,1/
GO TO 920

510 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",0,-1,0,0,-1,2,1,0,0/
GO TO 920

505 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","TETRAG",-1,0,1,-1,1,-1,0,1,0/

GO TO 920

504 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","ORTOCL",-1,0,-1,1,0,-1,-1,2,-1/
GO TO 922

335 IF(D=0) GO TO 741
IF(D=-H/3.) GO TO 533
IF(D=-(H-G)-2.) GO TO 541
IF(D=-(H-E)/2.) GO TO 542
IF(D=-H/2.) GO TO 744
IF(E=-H/2.) GO TO 745
IF(E=0) GO TO 746
IF(E=(H-D)/2.) GO TO 548

```

```

IF(E=D) GO TO 747
IF(G=D) GO TO 552
IF(G=(H-D-E)) GO TO 554
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",0,1,1,0,-1,1,1,0,0/
GO TO 920
554 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","ORTOCL",1,0,1,1,1,0,0,1,1/
GO TO 920
552 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",1,0,1,-1,0,1,0,1,0/
GO TO 920
747 IF(G=0) GO TO 549
IF(G=D) GO TO 550
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",1,1,0,-1,1,0,0,0,1/
550 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"R","ROMBDR",1,-1,0,-1,0,1,-1,-1,-1/
GO TO 923
549 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",1,1,0,-1,1,0,0,0,1/
GO TO 920
548 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","TETRAG",1,1,0,1,0,1,0,1,1/
GO TO 920
746 IF(G=0) GO TO 543
IF(G=H/2.) GO TO 544
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",1,0,1,-1,0,1,0,1,0/
GO TO 920
544 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",1,2,0,1,0,0,0,0,1/
GO TO 920
543 CONTINUE

```

```

DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","ORTOCL",0,1,1,0,-1,1,1,0,0/
GO TO 920
745 IF(G=0) GO TO 546
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","ORTOCL",1,0,0,1,1,1,0,-1,1/
GO TO 920
546 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",1,0,2,1,0,0,0,1,0/
GO TO 920
744 IF(E=0) GO TO 748
IF(E=H/2.) GO TO 349
IF(G=0) GO TO 539
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","ORTOCL",0,1,0,1,1,1,-1,0,1/
GO TO 920
539 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",0,1,2,0,1,0,1,0,0/
GO TO 920
349 IF(G=0) GO TO 537
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","ORTOCL",0,0,1,1,1,1,-1,1,0/
GO TO 920
537 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","TETRAG",1,0,0,0,1,0,1,1,2/
GO TO 922
748 IF(G=0) GO TO 534
IF(G=H/2.) GO TO 535
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",0,2,1,0,0,1,1,0,0/
GO TO 920
535 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","TETRAG",1,0,0,0,0,1,1,2,1/
GO TO 922
534 CONTINUE

```

```

DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"P","EXAGON",0,1,0,0,0,1,1,0,0/
GO TO 920
542 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","TETRAG",0,1,1,1,0,1,0,1/
GO TO 920
541 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","TETRAG",1,0,1,0,1,1,1,0/
GO TO 920
533 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","CUBICA",1,0,1,1,1,0,0,1,1/
GO TO 920
741 IF(E=0) GO TO 742
IF(E=-H/2.) GO TO 743
IF(G=0) GO TO 530
IF(G=-H/2.) GO TO 531
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",0,1,1,0,-1,1,1,0,0/
GO TO 920
531 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",2,1,0,0,1,0,0,0,1/
GO TO 920
530 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","ORTOCL",1,0,1,-1,0,1,0,1,0/
GO TO 920
743 IF(G=0) GO TO 527
IF(G=-H/2.) GO TO 528
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",2,0,1,0,0,1,0,1,0/
GO TO 920
528 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","TETRAG",0,0,1,0,1,0,2,1,1/
GO TO 922

```

```

527 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"P","EXAGON",0,0,1,1,0,0,0,1,0/
GO TO 920
742 IF(G=0) GO TO 524
IF(G=-H/2.) GO TO 525
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","ORTOCL",1,1,0,-1,1,0,0,0,1/
GO TO 920
524 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"P","CUBICA",1,0,0,0,1,0,0,0,1/
GO TO 920
525 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"P","EXAGON",1,0,0,0,1,0,0,0,1/
GO TO 920
C
C ESCALARES DEL II GRUPO
C
301 IF(D=LE.0.AND.E=LE.0.AND.G=LE.0) GO TO 327
IF(D=H/4.) GO TO 555
IF(D=H/2.) GO TO 328
IF(D=E/2.) GO TO 560
IF(D=G/2.) GO TO 561
IF(E=H/2.) GO TO 562
IF(E=D/2.) GO TO 563
IF(G=0) GO TO 564
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",1,1,0,-1,1,0,0,0,1/
GO TO 920
564 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",1,1,0,-1,1,0,0,0,1/
GO TO 920
563 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",0,-1,0,2,-1,0,0,0,1/

```

```

GO TO 920
562 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","MONOCL",0,1,-1,1,0,0,-1,1,1/
GO TO 920
561 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",-1,0,0,-1,0,2,0,0,1/
GO TO 920
560 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",-1,0,0,-1,2,0,0,0,1/

GO TO 920
328 IF(E=H/4.) GO TO 556
IF(E=H/2.) GO TO 557
IF(E=G/2.) GO TO 558
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","MONOCL",1,0,-1,0,1,0,1,-1,1/
GO TO 920
558 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",0,-1,0,0,-1,2,1,0,0/
GO TO 920
557 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"R","ROMBDR",1,0,0,-1,1,0,-1,-1,3/

GO TO 923
556 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"F","ORTOCL",2,-1,0,0,-1,2,0,1,0/
GO TO 920
555 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"F","ORTOCL",-1,2,0,-1,0,2,1,0,0/
GO TO 920
327 IF(D=0) GO TO 329

```

```

IF(D=-H/4.) GO TO 572
IF(D=-H/2.) GO TO 331
IF(E=0) GO TO 332
IF(E=-H/2.) GO TO 578
IF(E=-D) GO TO 333
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","MONOCL",0,1,1,1,1,0,1,0,1/
GO TO 920
333 IF(G=0) GO TO 579
IF(G=-H/2.) GO TO 582
IF(G=H/2+D) GO TO 580
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",1,1,0,-1,1,0,0,0,1/
GO TO 920
580 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"F","ORTOCL",1,-1,0,1,1,2,-1,-1,0/
GO TO 920
582 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","MONOCL",1,0,1,1,1,0,0,-1,-1/
GO TO 920
579 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",1,1,0,-1,1,0,0,0,1/
GO TO 920
578 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",1,0,2,1,0,0,0,0,1/
GO TO 920
332 IF(G=0) GO TO 576
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",1,2,0,1,0,0,0,0,1/
GO TO 920
576 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"P","MONOCL",0,1,0,1,0,0,0,0,1/
GO TO 920
331 IF(E=0) GO TO 573

```

```

IF(E=H/2.) GO TO 574
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",0,1,2,0,1,0,1,0,0/
GO TO 920
574 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","TETRAG",1,0,0,0,1,0,1,1,2/
GO TO 920
573 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","ORTOCL",0,1,0,0,-1,-2,1,0,0/
GO TO 920
572 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"F","ORTOCL",1,-1,0,1,1,2,-1,-1,0/
GO TO 920
J29 IF(E=0) GO TO 330
IF(E=H/2.) GO TO 569
IF(G=0) GO TO 570
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",2,1,0,0,1,0,0,0,1/
GO TO 920
570 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"P","MONOCL",1,0,0,0,1,0,0,0,1/
GO TO 920
569 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","ORTOCL",1,0,0,-1,0,-2,0,1,0/
GO TO 920
330 IF(G=0) GO TO 566
IF(G=H/2.) GO TO 567
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","ORTOCL",1,1,0,-1,1,0,0,0,1/
GO TO 920
567 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"P","EXAGON",1,0,0,0,1,0,0,0,1/
GO TO 920

```

```

566 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"P","TETRAG",1,0,0,0,1,0,0,0,1/
GO TO 920
C
C ESCALARES DEL III GRUPO
C
302 IF(D.LE.0.AND.E.LE.0.AND.G.LE.0) GO TO 317
IF(D=0) GO TO 318
IF(D=H/4.) GO TO 586
IF(D=E/2.) GO TO 590
IF(D=G/2.) GO TO 589
IF(D=0/2.) GO TO 319
IF(E=H/2.) GO TO 591
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",0,1,1,0,-1,1,1,0,0/
GO TO 920
591 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","ORTOCL",-1,0,0,-1,1,1,0,-1,1/
GO TO 920
319 IF(E=G/2.) GO TO 587
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",0,0,-1,0,2,-1,1,0,0/
GO TO 920
587 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",0,-1,0,0,-1,2,1,0,0/
GO TO 920
589 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",-1,0,0,-1,0,2,0,1,0/
GO TO 920
590 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",-1,0,0,-1,2,0,0,0,1/
GO TO 920
586 CONTINUE

```

```

DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","TETRAG",0,-1,1,1,-1,-1,1,0,0/
GO TO 920
318 IF(E=H/2.) GO TO 584
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",0,1,1,0,-1,1,1,0,0/

GO TO 920
584 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","ORTOCL",-1,0,0,-1,1,1,0,-1,1/
GO TO 920
317 IF(D=0) GO TO 320
IF(D=-H/2.) GO TO 400
IF(D=-D/2.) GO TO 321
IF(D=-(Q-G)/2.) GO TO 406
IF(D=-(Q-E)/2.) GO TO 407
IF(D=-(Q-H/3.)/2.) GO TO 405
IF(E=0) GO TO 322
IF(E=-H/2.) GO TO 323
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",0,1,1,0,-1,1,1,0,0/
GO TO 920
323 IF(G=0) GO TO 410
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","ORTOCL",1,0,0,1,1,1,0,-1,1/
GO TO 920
410 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",1,0,2,1,0,0,0,1,0/
GO TO 920
322 IF(G=0) GO TO 408
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",1,2,0,1,0,0,0,0,1/
GO TO 920
408 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","ORTOCL",0,1,1,0,-1,1,1,0,0/
GO TO 920

```

```

405 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"R","ROMBDR",1,2,1,0,-1,1,1,0,0/
GO TO 923
407 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","MONOCL",1,0,0,1,2,1,0,0,1/
GO TO 920
406 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","MONOCL",1,0,0,1,1,2,0,1,0/
GO TO 920
321 IF(E=0) GO TO 324
IF(E=-H/2.) GO TO 403
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",0,1,2,0,1,0,1,0,0/

GO TO 920
403 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","ORTOCL",1,0,0,0,1,0,-1,-1,-2/
GO TO 920
324 IF(G=-H/2.) GO TO 401
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",0,2,1,0,0,1,1,0,0/
GO TO 920
401 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","ORTOCL",1,0,0,0,0,1,-1,-2,-1/
GO TO 920
400 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"P","EXAGON",0,1,0,0,0,1,1,0,0/

GO TO 920
320 IF(E=0) GO TO 325
IF(E=-H/2.) GO TO 326
IF(G=0) GO TO 598

```

```

DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","MONOCL",0,1,1,0,-1,1,1,0,0/
GO TO 920
598 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"P","MONOCL",1,0,0,0,1,0,0,0,1/
GO TO 920
326 IF(G=0) GO TO 596
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"I","ORTOCL",1,0,0,1,1,1,0,-1,1/
GO TO 920
596 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","ORTOCL",1,0,0,-1,0,-2,0,1,0/
GO TO 920
325 IF(G=0) GO TO 593
IF(G=-H/2.) GO TO 594
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"P","MONOCL",1,0,0,0,0,1,0,1,0/
GO TO 920
594 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"C","ORTOCL",1,0,0,-1,-2,0,0,0,1/
GO TO 920
593 CONTINUE
DATA NA,NO,(Z(J),J=1,9)/"P","TETRAG",0,1,0,0,0,1,1,0,0/
GO TO 920
920 PRINT 340, NA,NO,(Z(J),J=1,9)
340 FORMAT (8X," LA CELDA REDUCIDA PERTENECE A UNA RED ",A2,1X,A6,///
18X," SU MATRIZ DE TRANSFORMACION A LA CELDA ELEMENTAL DEFINITIVA E
25",///,15X,3F5.0," / ",3F5.0," / ",3F5.0,///)
PRINT 341
341 FORMAT (8X," LA CORRESPONDIENTE CELDA ELEMENTAL DEFINITIVA ES DEL
*MISMO TIPO.",/)

GO TO 928
922 PRINT 924, NA,NO,(Z(J),J=1,9)

```

```

924 FORMAT (8X," LA CELDA REDUCIDA PERTENECE A UNA RED ",A2,1X,A6,///
18X," SU MATRIZ DE TRANSFORMACION A LA CELDA ELEMENTAL DEFINITIVA E
25",///,15X,3F5.0," / ",3F5.0," / ",3F5.0,///)
PRINT 926
926 FORMAT (8X," LA CORRESPONDIENTE CELDA ELEMENTAL DEFINITIVA ES UNA
*CELDA CUBICA DE CARAS CENTRADAS, F CUBICA.",/)
GO TO 926
923 PRINT 925, NA,NO,(Z(J),J=1,9)
925 FORMAT (8X," LA CELDA REDUCIDA PERTENECE A UNA RED ",A2,1X,A6,///
18X," SU MATRIZ DE TRANSFORMACION A LA CELDA ELEMENTAL DEFINITIVA E
25",///,15X,3F5.0," / ",3F5.0," / ",3F5.0,///)
PRINT 927
927 FORMAT (8X," LA CORRESPONDIENTE CELDA ELEMENTAL DEFINITIVA ES UNA
*CELDA EXAGONAL SENCILLA, P EXAGONAL.",/)
928 CONTINUE
U1=Z(1)
V1=Z(2)
W1=Z(3)
U2=Z(4)
V2=Z(5)
W2=Z(6)
U3=Z(7)
V3=Z(8)
W3=Z(9)
ADE=U1*AR+V1*BR+W1*CR
BDE=U2*AR+V2*BR+W2*CR
CDE=U3*AR+V3*BR+W3*CR
ANA=U1*U2*AR*AR
ANB=V1*V2*BR*BR
ANC=W1*W2*CR*CR
BNA=U1*V2

```

```

BNB=U2*V1
BNC=V1*W2
CNA=V2*W1
CNB=W1*U2
CNC=W2*U1
ENA=U3*U2*AR*AR
ENB=V3*V2*BR*BR
ENC=W3*W2*CR*CR
FNA=U3*V2
FNB=U2*V3
FNC=V3*W2
GNA=V2*W3
GNB=W3*U2
GNC=W2*U3
PNA=U1*U3*AR*AR
PNB=V1*V3*BR*BR
PNC=W1*W3*CR*CR
QNA=U1*V3
QNB=U3*V1
QNC=V1*W3
RNA=V3*W1
RNB=W1*U3
RNC=W3*U1
DME=AR*BR*GAMAR
DMF=BR*CR*ALFAR
DMG=CR*AR*BF TAR
CA=(1./(ADE*BDE))*(ANA+ANB+ANC+(BNA+BNB)*DNE+(BNC+CNA)*DMF+(CNB+CN
1C)*DMG)
CB=(1./(BDE*CDE))*(ENA+ENB+ENC+(FNA+FNH)*DNE+(FNC+GNA)*DMF+(GNB+GN
1C)*DMG)
CC=(1./(ADE*CDE))*(PNA+PNB+PNC+(QNA+QNB)*DNE+(QNC+RNA)*DMF+(RNB+RN

```

```

1C)*DMG)
WAN(1)= ARCS(CA)
WAN(2)= ARCS(CB)
WAN(3)= ARCS(CC)
N=0
DO 342 K=1,3
ER=WAN(K)
ER=ABS(ER)
ES=ER*206264.8062
EH=ER*3437.74677
EG=ER*57.295779
IEG=EG
ET=IEG*60
IR=EM-ET
FR=IR*60
CA=ET*60.
ES=ES-(CA+FR)
IF(ES<60.) 343,344,344
344 ES=ES*60.
IR=IR+1
343 IF( IR<60) 345,346,346
346 IR=IR*60
IEG=IEG+1
345 CONTINUE
M=K+N
EDI(M)=IEG
J=K+1+N
EDI(J)=IR
L=J+1
EDI(L)=ES
N=N+2

```

```

342 CONTINUE
      PRINT 350, ADE, (EDI(ML), ML=1,3)
350 FORMAT (15X, "A = ", F8.5, 10X, "ALFA = ", F4.0, F3.0, F5.2)
      PRINT 347, BDE, (EDI(ML), ML=4,6)
347 FORMAT (15X, "B = ", F8.5, 10X, "BETA = ", F4.0, F3.0, F5.2)
      PRINT 348, CDE, (EDI(ML), ML=7,9)
348 FORMAT (15X, "C = ", F8.5, 10X, "GAMA = ", F4.0, F3.0, F5.2, ///)

      GO TO 14
921 CONTINUE
      T2=TIME(2)/60.
      T3=T2-T1
      PRINT 99999, T3
99999 FORMAT(10X, "TIEMPO EMPLEADO EN LA EJECUCION = ", F10.5, " SEGUNDOS. ")
1/)
      CALL EXIT
      END

```

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO
INSTITUTO DE GEOLOGIA
LABORATORIO DE CRISTALOGRAFIA

MINERAL=TABL.INTERN.

CELDA ELEMENTAL INICIAL

A= 8.50500 ALFA=135. 0. 0.00
B= 8.50500 BETA= 69.18. 0.00
C= 6.02100 GAMA= 90. 0. 0.00

VOLUMEN DE LA CELDA ELEMENTAL INICIAL = 266.725816

MATRIZ DE NIGGLI

S(11)	S(22)	S(33)	72.335025	72.335025	36.252441
S(23)	S(31)	S(12)	-36.209952	18.100954	-0.000000

MATRIZ DE SELLING

S(23)	S(13)	S(12)	36.209952	18.100954	0.000000
S(14)	S(24)	S(34)	-90.435979	-36.125073	-18.143443

CELDA REDUCIDA

U	V	W	VECTOR
-2.	2.	-2.	34.0320027
-2.	2.	-1.	28.8474655
-2.	2.	0.	24.0557727
-2.	2.	1.	19.9421418
-2.	2.	2.	17.0059613
-2.	1.	-2.	28.2193608
-2.	1.	-1.	23.2970231
-2.	1.	0.	19.0177582
-2.	1.	1.	15.9092378
-2.	1.	2.	14.7321910
-2.	0.	-2.	24.0856912
-2.	0.	-1.	19.9498460
-2.	0.	0.	17.0100000
-2.	0.	1.	15.9119052
-2.	0.	2.	17.0159406
-2.	-1.	-2.	22.5089473
-2.	-1.	-1.	19.9477186
-2.	-1.	0.	19.0177581
-2.	-1.	1.	19.9485251
-2.	-1.	2.	22.5103769
-2.	-2.	-2.	24.0586362
-2.	-2.	-1.	23.2915574
-2.	-2.	0.	24.0557727
-2.	-2.	1.	26.2177160

-2.	-2.	2.	29.4713751
-1.	2.	-2.	29.4748761
-1.	2.	-1.	24.0617805
-1.	2.	0.	19.0177582
-1.	2.	1.	14.7270449
-1.	2.	2.	12.0250347
-1.	1.	-2.	22.5149603
-1.	1.	-1.	17.0160014
-1.	1.	0.	12.0278864
-1.	1.	1.	8.5029807
-1.	1.	2.	8.5109454
-1.	0.	-2.	17.0220035
-1.	0.	-1.	12.0328456
-1.	0.	0.	8.5050000
-1.	0.	1.	8.5079703
-1.	0.	2.	12.0391434
-1.	-1.	-2.	14.7391934
-1.	-1.	-1.	12.0293181
-1.	-1.	0.	12.0278863
-1.	-1.	1.	14.7356875
-1.	-1.	2.	19.0293407
-1.	-2.	-2.	17.0120278
-1.	-2.	-1.	17.0085174
-1.	-2.	0.	19.0177581
-1.	-2.	1.	22.5070093
-1.	-2.	2.	26.9065176
0.	2.	-2.	26.9077959
0.	2.	-1.	21.6894525
0.	2.	0.	17.0100000
0.	2.	1.	13.4444313
0.	2.	2.	12.0278946
0.	1.	-2.	19.0311481
0.	1.	-1.	13.4538979
0.	1.	0.	8.5050000
0.	1.	1.	6.0139473
0.	1.	2.	8.5149857
0.	0.	-2.	12.0420000
0.	0.	-1.	6.0210000
0.	0.	0.	0.0000000
0.	0.	1.	6.0210000
0.	0.	2.	12.0420000
0.	-1.	-2.	8.5149857
0.	-1.	-1.	6.0139473
0.	-1.	0.	8.5050000
0.	-1.	1.	13.4538979
0.	-1.	2.	19.0311481
0.	-2.	-2.	12.0278946
0.	-2.	-1.	13.4444313
0.	-2.	0.	17.0100000
0.	-2.	1.	21.6894525
0.	-2.	2.	26.9077959
1.	2.	-2.	26.9065176
1.	2.	-1.	22.5070093
1.	2.	0.	19.0177581
1.	2.	1.	17.0085174
1.	2.	2.	17.0120278
1.	1.	-2.	19.0293407
1.	1.	-1.	14.7356875
1.	1.	0.	12.0278863
1.	1.	1.	12.0293181
1.	1.	2.	14.7391934

1.	0.	-2.	12.0391434
1.	0.	-1.	8.5079703
1.	0.	0.	8.5050000
1.	0.	1.	12.0328456
1.	0.	2.	17.0220035
1.	-1.	-2.	8.5109454
1.	-1.	-1.	8.5029807
1.	-1.	0.	12.0278864
1.	-1.	1.	17.0160014
1.	-1.	2.	22.5149603
1.	-2.	-2.	12.0250347
1.	-2.	-1.	14.7270449
1.	-2.	0.	19.0177582
1.	-2.	1.	24.0617805
1.	-2.	2.	29.4748761
2.	2.	-2.	29.4713751
2.	2.	-1.	26.2177160
2.	2.	0.	24.0557727
2.	2.	1.	23.2915574
2.	2.	2.	24.0586362
2.	1.	-2.	22.5103769
2.	1.	-1.	19.9485251
2.	1.	0.	19.0177581
2.	1.	1.	19.9477186
2.	1.	2.	22.5089473
2.	0.	-2.	17.0159406
2.	0.	-1.	15.9119052
2.	0.	0.	17.0100000
2.	0.	1.	19.9498460
2.	0.	2.	24.0656912
2.	-1.	-2.	14.7321910
2.	-1.	-1.	15.9092378
2.	-1.	0.	19.0177582
2.	-1.	1.	23.2970231
2.	-1.	2.	28.2193608
2.	-2.	-2.	17.0059613
2.	-2.	-1.	19.9421418
2.	-2.	0.	24.0557727
2.	-2.	1.	28.8474655
2.	-2.	2.	34.0320027

LOS TRES VECTORES MENORES

0.	1.	1.	6.0139473
0.	-1.	-1.	6.0139473
-1.	0.	0.	8.5050000
0.	1.	0.	8.5050000
0.	0.	-1.	6.0210000
0.	0.	1.	6.0210000

 LOS VECTORES DEL PRIMER OCTANTE DETERMINADOS POR EL PROGRAMA

0.	1.	1.	6.0139473
0.	1.	0.	8.5050000
0.	0.	1.	6.0210000

NO SON VIABLES POR SER COPLANARES.

ES NECESARIO ELEGIR LOS MAS CONVENIENTES DE ENTRE LOS OTROS MENORES CALCULADOS

VECTORES DE LA CELDA REDUCIDA ELEGIDOS POR EL INVESTIGADOR

-1.	1.	1.	8.5029807
0.	1.	1.	6.0139473
0.	0.	-1.	6.0210000

NO SON VIABLES POR SER COPLANARES.

ES PRECISO ELEGIR LOS MAS CONVENIENTES DE ENTRE LOS OTROS MENORES CALCULADOS

VECTORES DE LA CELDA REDUCIDA ELEGIDOS POR EL INVESTIGADOR

-1.	1.	1.	8.5029807
0.	1.	1.	6.0139473
0.	0.	1.	6.0210000

NO SON VIABLES POR SER COPLANARES.

ES PRECISO ELEGIR LOS MAS CONVENIENTES DE ENTRE LOS OTROS MENORES CALCULADOS

VECTORES DE LA CELDA REDUCIDA ELEGIDOS POR EL INVESTIGADOR

-1.	1.	1.	8.5029807
0.	0.	-1.	6.0210000
0.	-1.	-1.	6.0139473

ANGULOS CELDA REDUCIDA

ALFA= 89.55.57.97
BETA=110.41.21.84
GAMA= 69.20.44.46

VOLUMEN DE LA CELDA REDUCIDA = 266.725817

VERIFICACION DE LA CELDA REDUCIDA POR LAS CONDICIONES DE EISENSTEIN.

LAS DIMENSIONES A, B, C DE LA CELDA NO ESTAN EN ORDEN CRECIENTE.

NO TIENE TODOS SUS ANGULOS AGUDOS NI TODOS OBTUSOS.

EN SINTESIS, ESTA CELDA CALCULADA PUEDE CONSIDERARSE COMO REDUCIDA.

MATRIZ DE NIGGLI

S(11)	S(22)	S(33)	36.167562	72.335025	36.252441
S(23)	S(31)	S(12)	0.060089	-12.793049	18.041595

MATRIZ DE SELLING

S(23)	S(13)	S(12)	0.060089	-12.793049	18.041595
S(14)	S(24)	S(34)	-41.416108	-90.436709	-23.519481

LA CELDA REDUCIDA PERTENECE A UNA RED P TRICLN

SU MATRIZ DE TRANSFORMACION A LA CELDA ELEMENTAL DEFINITIVA ES

1.	0.	0.	/	0.	1.	0.	/	0.	0.	1.
----	----	----	---	----	----	----	---	----	----	----

LA CORRESPONDIENTE CELDA ELEMENTAL DEFINITIVA ES DEL MISMO TIPO.

A = 6.01395	ALFA = 69.20.44.46
B = 8.50500	BETA = 89.55.57.97
C = 6.02100	GAMA = 110.41.21.84

VECTORES DE LA CELDA REDUCIDA ELEGIDOS POR EL INVESTIGADOR

-1.	1.	1.	8.5029807
0.	0.	-1.	6.0210000
0.	1.	1.	6.0139473

ANGULOS CELDA REDUCIDA

ALFA= 90. 4. 2.33
BETA= 69.18.38.16
GAMA= 69.20.44.46

VOLUMEN DE LA CELDA REDUCIDA = 266.725817

VERIFICACION DE LA CELDA REDUCIDA POR LAS CONDICIONES DE EISENSTEIN.

LAS DIMENSIONES A, B, C DE LA CELDA NO ESTAN EN ORDEN CRECIENTE.

NO TIENE TODOS SUS ANGULOS AGUDOS NI TODOS OBTUSOS.

EN SINTESIS, ESTA CELDA CALCULADA PUEDE CONSIDERARSE COMO REDUCIDA.

MATRIZ DE NIGGLI

S(11)	S(22)	S(33)	36.167562	72.335025	36.252441
S(23)	S(31)	S(12)	-0.060089	12.793049	18.041595

MATRIZ DE SELLING

S(23)	S(13)	S(12)	-0.060089	12.793049	18.041595
S(14)	S(24)	S(34)	-47.002207	-90.316532	-48.985402

LA CELDA REDUCIDA PERTENECE A UNA RED P TRICLN
SU MATRIZ DE TRANSFORMACION A LA CELDA ELEMENTAL DEFINITIVA ES

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

LA CORRESPONDIENTE CELDA ELEMENTAL DEFINITIVA ES DEL MISMO TIPO.

$$\begin{aligned} A &= 6.01395 & ALFA &= 69.20.44.46 \\ U &= 8.50500 & BETA &= 90.4.2.03 \\ C &= 6.02100 & GAMA &= 69.18.38.16 \end{aligned}$$

VECTORES DE LA CELDA REDUCIDA ELEGIDOS POR EL INVESTIGADOR

$$\begin{aligned} +1 & \quad 1 & \quad 1 & \quad 8.5029807 \\ 0 & \quad 0 & \quad 1 & \quad 6.0210000 \\ 0 & \quad -1 & \quad -1 & \quad 6.0139473 \end{aligned}$$

ANGULOS CELDA REDUCIDA

$$\begin{aligned} ALFA &= 90.4.2.03 \\ BETA &= 110.41.21.84 \\ GAMA &= 110.39.15.54 \end{aligned}$$

VOLUMEN DE LA CELDA REDUCIDA = 266.725817

VERIFICACION DE LA CELDA REDUCIDA POR LAS CONDICIONES DE EISENSTEIN.

LAS DIMENSIONES A,B,C DE LA CELDA NO ESTAN EN ORDEN CRECIENTE.

EN SINTESIS, ESTA CELDA CALCULADA PUEDE CONSIDERARSE COMO REDUCIDA.

MATRIZ DE NIGGLI

$$\begin{aligned} S(11) & \quad S(22) & \quad S(33) & \quad 36.167562 & \quad 72.335025 & \quad 36.252441 \\ S(23) & \quad S(31) & \quad S(12) & \quad -0.060089 & \quad -12.793049 & \quad -18.041595 \end{aligned}$$

MATRIZ DE SELLING

$$\begin{aligned} S(23) & \quad S(13) & \quad S(12) & \quad -0.060089 & \quad -12.793049 & \quad -18.041595 \\ S(14) & \quad S(24) & \quad S(34) & \quad -5.332918 & \quad -54.233341 & \quad -23.399303 \end{aligned}$$

LA CELDA REDUCIDA PERTENECE A UNA RED P MONOCL
SU MATRIZ DE TRANSFORMACION A LA CELDA ELEMENTAL DEFINITIVA ES

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

LA CORRESPONDIENTE CELDA ELEMENTAL DEFINITIVA ES DEL MISMO TIPO.

$$\begin{aligned} A &= 6.01395 & ALFA &= 110.39.15.54 \\ B &= 8.50500 & BETA &= 90.4.2.03 \\ C &= 6.02100 & GAMA &= 110.41.21.84 \end{aligned}$$

VECTORES DE LA CELDA REDUCIDA ELEGIDOS POR EL INVESTIGADOR

$$\begin{aligned} -1 & \quad 1 & \quad 1 & \quad 8.5029807 \\ 0 & \quad 0 & \quad 1 & \quad 6.0210000 \\ 0 & \quad 1 & \quad 1 & \quad 6.0139473 \end{aligned}$$

ANGULOS CELDA REDUCIDA

$$\begin{aligned} ALFA &= 89.55.57.97 \\ BETA &= 69.18.38.16 \\ GAMA &= 110.39.15.54 \end{aligned}$$

VOLUMEN DE LA CELDA REDUCIDA = 266.725817

VERIFICACION DE LA CELDA REDUCIDA POR LAS CONDICIONES DE EISENSTEIN.

LAS DIMENSIONES A,B,C DE LA CELDA NO ESTAN EN ORDEN CRECIENTE.

NO TIENE TODOS SUS ANGULOS AGUDOS NI TODOS OBTUSOS.

EN SINTESIS, ESTA CELDA CALCULADA PUEDE CONSIDERARSE COMO REDUCIDA.

MATRIZ DE NIGGLI

$$\begin{aligned} S(11) & \quad S(22) & \quad S(33) & \quad 36.167562 & \quad 72.335025 & \quad 36.252441 \\ S(23) & \quad S(31) & \quad S(12) & \quad -0.060089 & \quad -12.793049 & \quad -18.041595 \end{aligned}$$

MATRIZ DE SELLING

$$\begin{aligned} S(23) & \quad S(13) & \quad S(12) & \quad -0.060089 & \quad -12.793049 & \quad -18.041595 \\ S(14) & \quad S(24) & \quad S(34) & \quad -30.919016 & \quad -54.353518 & \quad -49.105579 \end{aligned}$$

LA CELDA REDUCIDA PERTENECE A UNA RED P TRICLN

SU MATRIZ DE TRANSFORMACION A LA CELDA ELEMENTAL DEFINITIVA ES

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

LA CORRESPONDIENTE CELDA ELEMENTAL DEFINITIVA ES DEL MISMO TIPO.

$$\begin{aligned} A &= 6.01395 & ALFA &= 110.39.15.54 \\ B &= 8.50500 & BETA &= 89.55.57.97 \\ C &= 6.02100 & GAMA &= 69.18.38.16 \end{aligned}$$

En la Imprenta Universitaria, bajo la dirección de Jorge Gurúa Lacroix, se terminó la impresión de *Boletín número 94*, el día 9 de mayo de 1972. Su composición se hizo en tipos Electra 11:12, 10:12, 9:10 y 8:9. La edición consta de 1,200 ejemplares.

BOLETINES DEL INSTITUTO DE GEOLOGIA

50.— <i>Las Meteoritas Mexicanas</i> , por JOSÉ C. HARO, 1931.	\$ 50.00 M.N.	\$ 5.00 Dlls.
51.— <i>Zonas Mineras de los Estados de Jalisco y Nayarit</i> , por TOMÁS BARRERA, 1931.	Agotado (out of print)	
53.— <i>Topografía Sepultada en la Región de Santa Rosalía</i> , B. C., por IVAN F. WILSON, 1948.	\$ 25.00 M.N.	\$ 2.50 Dlls.
54.— <i>Paleontología y Estratigrafía del Plioceno de Yepómera</i> , Edo. de Chihuahua (Primera Parte), por JOHN F. LANCE, 1950.	\$ 25.00 M.N.	\$ 2.50 Dlls.
55.— <i>Los Estudios Paleobotánicos de México</i> , por MANUEL MALDONADO KOERDELL, 1950.	\$ 25.00 M.N.	\$ 2.50 Dlls.
56.— <i>Las Provincias Geohidrológicas de México</i> , (Segunda Parte), por ALFONSO DE LA O. CARREÑO, 1954.	\$ 30.00 M.N.	\$ 3.00 Dlls.
57.— <i>Espeleología Mexicana, Cuevas de la Sierra Madre Oriental de la Región de Xilitla</i> , por FEDERICO BONET, 1953.	Agotado (out of print)	
58.— <i>Geología y Paleontología de la Región de Caborca</i> , por G. ARTHUR COOPER y otros, 1954. Pt. III.— <i>Fauna Pérmica de El Antimonio, Oeste de Sonora, México</i> , por G. ARTHUR COOPER y otros, 1965.	Agotado (out of print)	
59.— <i>Los Depósitos de Bauxita en Haití y Jamaica y posibilidades de que Exista Bauxita en México</i> , por GUILLERMO P. SALAS, 1959.	\$ 30.00 M.N.	\$ 3.00 Dlls.
60.— <i>Geología del Estado de Morelos y de Partes Adyacentes de México y Guerrero</i> , Región Central Meridional de México, por CARL. FRIES, JR., 1960.	\$ 50.00 M.N.	\$ 5.00 Dlls.
61.— <i>Fenómenos Geológicos de Algunos Volcanes Mexicanos</i> , por LUIS BLÁSQUEZ L., ARMANDO REYES LAGOS, FEDERICO MOOSER y JOSÉ L. LORENZO, 1961.	\$ 20.00 M.N.	\$ 2.00 Dlls.
62.— <i>Reconocimiento Geológico en la Sierra Madre del Sur</i> , entre Chilpancingo y Acapulco, Edo. de Guerrero, por ZOLTAN DE CSERNA, 1965.	\$ 30.00 M.N.	\$ 3.00 Dlls.
63.— <i>Contribución al Estudio de Minerales y Rocas</i> , por EDUARDO SCHMITTER y RUTH ROJAS DE GÓMEZ, 1962.	\$ 30.00 M.N.	\$ 3.00 Dlls.
64.— <i>Estudios Geocronológicos de Rocas Mexicanas</i> , por CARL FRIES JR. 1962	Agotado (out of print)	
65.— <i>Estudios Mineralógicos y Petrográficos del Casquete y la Sal de Algunos Domos Salinos del Istmo de Tehuantepec, México</i> , por SALVADOR ENCISO DE LA VEGA, 1963.	\$ 30.00 M.N.	\$ 3.00 Dlls.
66.— <i>Revisión Crítica de los Minerales Mexicanos BOLEITA</i> , por FRANCISCO J. FABREGAT, 1963.	\$ 40.00 M.N.	\$ 4.00 Dlls.
67.—Pt. I.— <i>Salinidad, Batimetría, Temperatura y Distribución de los Sedimentos Recientes de la Laguna de Términos Campeche, México</i> , por AMADO YÁÑEZ CORREA, 1963.	\$ 25.00 M.N.	\$ 2.50 Dlls.

Pt. II.—Sistemática y Distribución de los Géneros de Diatomeas de la Laguna de Términos Campeche, México, por ÁNGEL SILVA B., 1963.	\$ 25.00 M.N.	\$ 2.50 Dlls.
Pt. III.—Sistemática y Distribución de los Foraminíferos Recientes de la Laguna de Términos Campeche, México, por AGUSTÍN AYALA, 1963.	\$ 75.00 M.N.	\$ 7.50 Dlls.
Pt. IV.—Sistemática y Distribución de los Micromoluscos Recientes de la Laguna de Términos, Campeche, México, por ANTONIO GARCÍA CUBAS, 1963.	\$ 30.00 M.N.	\$ 3.00 Dlls.
68.—Sistemática y Distribución de los Foraminíferos Recientes de la "Playa Washington" al S.E. de Matamoros, Tamps., por LUIS RAFAEL SEGURA V., 1963.	\$ 30.00 M.N.	\$ 3.00 Dlls.
69.—Geología del Area delimitada por el Tomatal, Huitzoco y Mayanacán, Estado de Guerrero, por JOSÉ MA. BOLÍVAR, 1963.	\$ 30.00 M.N.	\$ 3.00 Dlls.
70.—Derrames Cineríticos de El Oro, Tlalpujahua, por CARL FRIES, JR., ROSS Y OBREGÓN.	En preparación (Bring prepared)	
71.—Estudios Geológicos en los Estados de Durango y San Luis Potosí, por DIEGO A. CÓRDOVA, EUGENIO CSERNA Y ALEJANDRO BELLO BARRADAS, 1963.	\$ 40.00 M.N.	\$ 4.00 Dlls.
72.—Revisión Crítica de los Minerales Mexicanos, la PLUMOSITA, por FRANCISCO J. FABREGAT G., 1964.	\$ 40.00 M.N.	\$ 4.00 Dlls.
73.—Contribuciones del Laboratorio de Geocronometría.		
Pt. I.—Discusión de Principios y Descripción de la Determinación Geoquímica por el Método Plomo Alfa o Larsen, por CÉSAR RINCÓN ORTA, 1965.		
Pt. II.—Nuevas aportaciones Geocronológicas y Técnicas empleadas en el Laboratorio de Geocronometría, por CARL FRIES, JR., y CÉSAR RINCÓN ORTA, 1965.		
Pt. III.—Compendio de Edades de Radiocarbono de Muestras Mexicanas de 1962 a 1964, por JOSEFINA VALENCIA Y CARL FRIES, JR., 1965.	\$ 45.00 M.N.	\$ 4.50 Dlls.
74.—Estudios Geológicos en el Estado de Chihuahua:		
Pt. I.—Geología del Area de Plomosas, Chih., por LUTHER W. BRIDGES.		
Pt. II.—(Notas sobre la Geología de la Región de Placer de Guadalupe y Plomosa, Chih.), por ZOLTAN DE CSERNA, 1966.	\$ 45.00 M.N.	\$ 4.50 Dlls.
75.—Estudios Mineralógicos, por RICHARD V. GAINES:		
1.—Mineralización de Telurio en la Mina de la Moctezuma, cerca de Moctezuma, Sonora.		
2.—Métodos de Laboratorio para la Separación y Purificación de Muestras Minerales, 1965.	\$ 30.00 M.N.	\$ 3.00 Dlls.
76.—Estudios de Mineralogía.		
Pt. I.—Los Minerales de Manganeso de Molango, Hgo., por LIBERTO DE PABLO GALÁN.		

Pt. II.—Caolinita de Estructura Desordenada de Concepción de Buenos Aires, Edo. de Jalisco. México, por LIBERTO DE PABLO GALÁN.		
Pt. III.—Nota Preliminar sobre la Identificación por Rayos X, de Óxido Tálico TL_2O_3 , por JESÚS RUIZ ELIZONDO, GLORIA ÁVILA I., OCTAVIO CANO CORONA Y GLORIA AYALA ROJAS, 1965.	\$ 35.00 M.N.	\$ 3.50 Dlls.
77.—Los Minerales Mexicanos 3. DURANGITA, por FRANCISCO J. FABREGAT G., 1966.	\$ 45.00 M.N.	\$ 4.50 Dlls.
78.—Los Minerales Mexicanos 4. CUMENGEITA, por FRANCISCO J. FABREGAT G., 1966.	\$ 30.00 M.N.	\$ 3.00 Dlls.
79.—Los Minerales Mexicanos 5. LIVINGSTONITA, por FRANCISCO J. FABREGAT G., 1966.	\$ 30.00 M.N.	\$ 3.00 Dlls.
80.—"Biogeología Subsuperficial del Arrecife Alacranes, Yucatán", por FEDERICO BONET.	\$ 60.00 M.N.	\$ 6.00 Dlls.
81.—Ecology Distribution and Taxonomy of Recent Ostracoda of Laguna de Términos Campeche, México, por GUSTAVO A. MORALES.	\$ 50.00 M.N.	\$ 5.00 Dlls.
82.—Estudios de Geocronometría y Mineralogía.		
Pt. I.—Edad de Tres Rocas Intrusivas en la Parte Centro-Septentrional de México, por JERJES PANTOJA ALOR Y CÉSAR RINCÓN ORTA.		
Pt. II.—Nuevos datos sobre Mackayita, por RICHARD V. GAINES.		
Pt. III.—Ilvita de el Guaricho, Mich., por LIBERTO DE PABLO.		
Pt. IV.—Cálculo Cristalográfico, por FRANCISCO J. FABREGAT G. Y RICARDO ESQUIVEL ESPARZA, 1967.	\$ 30.00 M.N.	\$ 3.00 Dlls.
83.—Minerales Mexicanos 6. JALPAITA, por FRANCISCO J. FABREGAT G., 1967.	\$ 40.00 M.N.	\$ 4.00 Dlls.
84.—Sedimentología de la Laguna Madre. Tamaulipas.		
Pt. I.—Comisión y distribución de los sedimentos recientes de la Laguna Madre. Tamaulipas, por AMADO YÁÑES Y CARMEN SCHLAEPFER, 1968.		
Pt. II.—Minerales pesados de los sedimentos de la Laguna Madre, Tamaulipas, por CARMEN SCHLAEPFER, 1968.	\$ 40.00 M.N.	\$ 4.00 Dlls.
85.—Los Minerales Mexicanos 7. Vanadinita y Endlichita, por FRANCISCO J. FABREGAT G., 1970.	\$ 50.00 M.N.	\$ 5.00 Dlls.
86.—Ecología y Distribución de los Micromoluscos recientes de la Laguna Madre, Tamps., México, por ANTONIO GARCÍA-CUBAS JR., 1968.	\$ 50.00 M.N.	\$ 5.00 Dlls.
87.—Ecología y Distribución de los Foraminíferos Recientes de la Laguna Madre, Tamaulipas, México, por AGUSTÍN AYALA-CASTAÑARES Y LUIS R. SEGURA.	\$ 50.00 M.N.	\$ 5.00 Dlls.
88.—Geología Marina de la Laguna de Tamiahua, Ver., México, por RODOLFO CRUZ O., 1968.	\$ 40.00 M.N.	\$ 4.00 Dlls.

- 89.—*Algunos Programas de Cálculo Cristalográfico. Mediante computadora electrónica*, por FRANCISCO J. FABREGAT, 1971. \$ 50.00 M.N. \$ 5.00 Dlls.
- 90.—*Espeleología de la Región de Cacahuamilpa*, por F. BONET, 1971. \$ 70.00 M.N. \$ 7.00 Dlls.
- 91.—*Ecología y Distribución de Micromoluscos de la Laguna de Tamiahua*. En prensa
- 92.—*Sistema Caolinita-Caolinita-desordenada-metahalosita-endelita Atapulgita. Microscopía y difracción electrónica*.—53 p. y 26 figs, por LIBERTO DE PABLO, 1971. \$ 40.00 M.N. \$ 4.00 Dlls.
- 93.—*Fisiografía y sedimentología del delta del Río Balsas*.—58 p. 13 fig., 3 tablas, por MARIO GUTIÉRREZ ESTRADA, 1971. \$ 40.00 M.N. \$ 4.00 Dlls.
- 94.—*Las arcillas de la Cuenca Carbonífera de Coahuila*.—23 p., 4 tablas, 13 figs., por LIBERTO DE PABLO GALÁN, 1972.
Montmorillonita de Estructura interestratificada.—25-44 pp., 5 tablas, 7 figs., por LIBERTO DE PABLO GALÁN, 1972.
La celda reducida.—45-105 pp., 1 tabla, por FRANCISCO J. FABREGAT GUINCHARD, 1972. \$ 40.00 M.N. \$ 4.00 Dlls.

Para su adquisición dirijase al:
 Instituto de Geología, Oficina de Publicaciones — Ciudad Universitaria.
 México 20, D. F.