

Caliza grisácea, pulverulenta cretosa.

Calcita microgranular, afanítica, con abundantes cavidades conteniendo unas, calcita acicular y otras, attapulgita. Escasa dolomitización.

Origen sedimentario marino.

Caliza, dolomita escasa. 49.32% CaO, 1.97 MgO, 41.13 CO₂.

10

Igual localidad. Arcilla o "sacalum".

Arcilla verde, plástica, en masas lenticulares o estrechos horizontales en calizas grisáceas pulverulentas cretosas (Fig. 13).

Origen sedimentario marino.

Attapulgita.

Attapulgita. 52.68%, SiO₂, 11.08 Al₂O₃, 10.23 MgO, 0.84 CaO, 0.28 FeO, 1.80 Fe₂O₃, 0.37 TiO₂, 8.70 H₂O⁻, 10.44 H₂O⁺, 8.70 pérdida a 80°, 2.24 a 200°, 6.31 a 400° y 1.89 a 700°.

CALCULO CRISTALOGRAFICO. CALCULO ELECTRONICO

Prog. 140

Análisis de los reflejos de un roentgenograma
y determinación de su grupo espacial

*Francisco José FABREGAT GUINCHARD **

* Investigador Titular en el Instituto de Geología, UNAM.
México 20, D. F.

CONTENIDO

RESUMEN	35
INTRODUCCIÓN	35
DESCRIPCIÓN DEL PROGRAMA	36

ANÁLISIS DE LOS REFLEJOS DE UN ROENTGENOGRAMA Y DETERMINACIÓN DE SU GRUPO ESPACIAL

RESUMEN

Programa de computación electrónica para el análisis de los reflejos de un röntgenograma, por paridades de sus respectivos índices, y selección del grupo espacial correspondiente.

ZUSAMMENFASSUNG

Komputerprogramm für die Reflexanalyse von Röntgenogrammen anhand der Geradzähligkeit ihrer Indizes, und Auswahl der entsprechenden Raumgruppen.

Introducción

Al problema de la numeración de los reflejos de un roentgenograma, esto es, al de la signación de sus índices, sigue otro no menos importante cual es el de la interpretación de éstos para deducir los elementos de simetría de su celda elemental, su tipo de red y el grupo espacial a que pertenece el cristal en estudio.

Esa numeración de reflejos puede lograrse tanto a partir de los diagramas de polvo de la sustancia, cuanto de sus diagramas de cristal único. Claro está que cuanto más individualizados resulten los reflejos, tanto más precisa será su numeración y menos ambigüedades acarrearán su interpretación. Ello se logra con los métodos de Buerger y de Weissenberg; en menor grado con los de cristal oscilante... y con mayor incertidumbre empleando diagramas de Debye. Para éstos en particular, la interpretación que se ofrece con este diagrama permite un medio de afinarlos, analizando y suprimiendo los titubeos que pudieran llevar a incompatibilidades.

Para la interpretación de los diagramas, se hace preciso observar las "extinciones sistemáticas", o lo que es más fácil, las condiciones de reflejo de las

manchas presentes, por la paridad de sus índices. Existe una relación entre los reflejos presentes y la existencia de los elementos de simetría de la red cristalina.

Estas condiciones de paridad son sencillas para un símbolo en particular; mas se convierten en una labor casi inabordable al tenerlos en cuenta a todos ellos. Con este objeto se ha redactado este programa de computación electrónica.

Descripción del programa

1. Una primera parte tiende a redactar el encabezado del problema. Dispone los datos generales de la especie cristalina: su nombre, las constantes paramétricas y angulares de su celda elemental, su relación paramétrica y la singonía que comporta.

2. Análisis de los reflejos: Para ello se requiere la lista de índices de todos los reflejos observados. La computación examina cada símbolo con respecto a las condiciones de paridad citadas en la "Tabla de referencia" que se consiguen después de ese análisis. Para ello se procede a determinar a qué tipo de reflejo pertenece (HKL, HKO, HOO, ...) y aún a qué subtipo puede referirse (HHL, HHL, HHO, ...).

Es preciso hacer notar que en obsequio a la generalización del problema, se utilizan los índices HKL de Miller, aún para la designación de cristales exagonales y trigonales, y en estos símbolos, HK $\bar{L}$, se prescinde del tercero, por tratarse de ejes homogéneos.

Cuando se cumple la condición de paridad indicada, el programa lo señala por un 0, y en caso contrario, por un 1. Las casillas que no pertenecen al tipo de reflejo analizado, se llenan por 1; si todas las casillas de un tipo de reflejo determinado tuviesen 1, querría decir que su símbolo no cumple con la condición de paridad analizada, y el programa coloca un 0 en la primera correspondiente, esto es, en la de la de incondicionalidad de tal reflejo.

Sin embargo, la incondicionalidad del primer reflejo, que pertenece al grupo de los tipos HKL y que sirven para la determinación de la red de Bravais, se fija de modo diferente. Depende de las 14 primeras condiciones: si sólo hay cero en la 2ª condición, la red es I centrada; así como si la 3ª, o 4ª o 5ª es cero, la red será de caras C, A o B centradas respectivamente; más si las tres, 3ª, 4ª y 5ª son ceros y a la vez la 7ª, 8ª y 9ª o la 12ª, 13ª y 14ª (mas no ambos grupos) fuesen cero, la red sería F de caras centradas. De no cumplirse estas condiciones de manera clara (que conviene examinar con

cuidado, sobre todo en las columnas 7ª a 14ª) o de presentarse simultáneamente varias redes centradas posibles, la red se determina como P primitiva.

Analizados así todos los reflejos considerados, luego de una línea de guiones que marca la escala de numeración de las casillas, se coloca una línea iniciada por HKL que arrastra los 0 que se hubiesen encontrado: esta línea representa las condiciones totales del diagrama. Todos estos casos se han de tener en cuenta (que el programa realiza automáticamente) al establecer la comparación con las condiciones de reflejo indicadas en las Tablas Internacionales. Para ello, esto es, para la elección inmediata de los grupos espaciales que puedan ser congruentes, se establece la comparación de la línea HKL con todas las condiciones generales señaladas en dichas Tablas Internacionales, examinando cuál grupo espacial pueda encajar en el diagrama estudiado, quedando al investigador la elección definitiva entre los pocos casos congruentes. Para facilitar esa elección, el programa elimina los grupos que no sean de la singonía asignada al cristal, por las deducciones geométricas que se citan con base en las dimensiones de su celda elemental. Además, entre los grupos seleccionados, toca al investigador retener sólo los que tengan la red de Bravais que se haya determinado por el programa. Esta última elección, así como su confirmación por los elementos de simetría espacial posibles, son muy subjetivas y se ha preferido no someterlas al automatismo de la computación, toda vez que la orientación del cristal podría ser diferente a la que se considera standard en las Tablas Internacionales.

En el lote de los grupos espaciales colocados entre los "Datos" del programa, se han analizado las condiciones generales de los reflejos, y se han añadido en tarjetas duplicando sólo las de reflejos especiales (entre paréntesis en las Tablas Internacionales) que puedan tener manchas de posiciones equivalentes generales.

Esa elección se puede guiar por la determinación inmediata del símbolo del grupo, con los criterios que se analizan en la última Tabla del programa. Con este objeto se recuerda que:

Los grupos de la simetría de posición se designan:

1. Por una letra mayúscula que indica el modo de Bravais

P, A, C, B, I, F, R, H

2. Una letra minúscula o cifra que indica a/ tratándose de un eje, que es paralelo a $\vec{a}$

b/ tratándose de un elemento inverso (m, b, c, n, d), que es paralelo a los ejes $\vec{b}$, $\vec{c}$.

3. Como en 2:

a/ que el eje es paralelo a $\vec{b}$

b/ que el plano es paralelo a $\vec{a}$, $\vec{c}$

4. Como en 2:

a/ que el eje es paralelo a $\vec{c}$

b/ que el plano es paralelo a $\vec{a}$, $\vec{b}$.

Las otras explicaciones aclaratorias aparecen entre los resultados como "Tablas de referencia", y el mecanismo de funcionamiento del programa se coloca como comentarios que le preceden.

Es de hacer notar que se ha tenido en cuenta la presentación del cristal como se considera en las Tablas Internacionales, a las que conviene dirigirse para lograr datos complementarios.

Es para mí un grato deber reconocer la valiosa ayuda recibida del Ing. Javier Esquivel Esparza en las revisiones tan laboriosas de los criterios de extinción y en las discusiones sobre algunas exclusiones de incompatibilidades que fueron necesarias para lograr su marcha satisfactoria.

```

C  PROGRAMA 140
C  FORTRAN IV.- BURROUGHS 6700.- BCL
C
C  CALCULO CRISTALOGRAFICO.- ANALISIS DE LOS REFLEJOS DE UN ROENTGENOGRAMA Y
C  DETERMINACION DE SU GRUPO ESPACIAL
C
C  YA LOGRADA LA LISTA DE REFLEJOS DE UN CRISTAL POR DIFRACCION DE RAYOS X,
C  POR CUALQUIER METODO ROENTGENOLOGICO (DE DEBYE O DE CRISTAL UNICO) SE EN-
C  FRENTE UNO CON LA DIFICULTAD DE ASIGNAR LA PARIDAD DE CADA UNO DE ELLOS Y
C  DE LA ELECCION DEL GRUPO ESPACIAL POSIBLE.
C  MEDIANTE ESTE PROGRAMA SE TIENDE A FACILITAR ESA INDAGACION Y LA INVE-
C  STIGACION DE LOS ELEMENTOS DE SIMETRIA DE POSICION QUE LE SON CONGRUENTES.
C
C  TARJETAS DE DATOS:
C
C  TARJETA 1.- DATOS GENERALES.
C  COLS.1 A 18.- NOMBRE DE LA ESPECIE MINERALOGICA EN ESTUDIO (3A6)
C  COLS.19 A 39.- PARAMETROS FUNDAMENTALES DE LA CELDA ELEMENTAL (3F7, 4)
C  COLS.40 A 57.- ANGULOS FUNDAMENTALES EN GRADOS Y FRACCION DECIMAL (3F6,2)
C  COLS.58 A 66.- UNO DE LOS SIMBOLOS GENERALES HKL EN EL QUE SE NOTA SE H+K+L
C  =3N O =H+K+L=3N, PARA DISTINGUIR ENTRE LAS SIGNONIAS EXAGONAL Y TRIGONAL.
C  ESTE DATO ES SOLO NECESARIO CUANDO SETUVIEREN 120 COMO VALOR DE GAMMA.
C  (3I3)
C  COLS.67 A 72.- DOS VALORES QUE CONTROLAN EL ANALISIS DE REFLEJOS (2 I3)
C  M= PARES DE TARJETAS DE LOS GRUPOS ESPACIALES QUE SE CONSIDERAN EN.
C  NK= NUMERO DE TARJETAS DE INDICES.
C  TARJETA 2 Y SS.- DATOS DEL PROBLEMA, UNA TARJETA POR CADA SIMBOLO DE REFLEJO
C  (3I3). TODOS (HK) SE CONSIDERAN DE SUS INDICES, AUN LOS EXAGONALES, YA QUE
C  SIENDO ESTOS EJES UNIFORMES SE PUEDE SUPRIMIR EL TERCER INDICE DE LOS CUATRO
C  HABITUALES.
C  TARJETA 3 Y SS.- BLOQUE DE TARJETAS. ESTE BLOQUE HA DE QUEDAR CONSTANTE PARA
C  LA IMPRESION DE UNA TABLA DE REFERENCIA PARA LA INTERPRETACION DE LA ESCALA
C  DE LOS REFLEJOS ANALIZADOS.
C  TARJETA 4 Y SS.- BLOQUE DE TARJETAS, CON DOS DE ELLAS POR CADA UNO DE LOS GRUPOS
C  ESPACIALES DE COMPARACION. ESTOS PARES SE HAN DE INDICAR EN M DE LA TARJETA
C  1.
C  EL BLOQUE PUEDE TENER VARIAS SERIES= UNA CON LOS REFLEJOS GENERALES OBLIGATORIOS,
C  OTRA CON LOS EVENTUALES, OTRA CON AQUELLOS MAS ESPECIALES, ETC.
C  TARJETA 5 Y SS.- BLOQUE DE TARJETAS, CON LA INTERPRETACION DE LOS REFLEJOS A
C  CIERTOS ELEMENTOS DE SIMETRIA QUE PUDIERAN ORIGINARLOS. ESTOS DATOS PERMITEN
C  TIRAR ESCRIBIR DIRECTAMENTE EL GRUPO ESPACIAL Y CONFIRMAR EL ELEGIDO ANTERIORMENTE.
C
C  *****
C
C  DIMENSION I(500),K(500),L(500),IP(110,500),IPA(110,500)
C  DIMENSION FF(29,14)
C  DIMENSION EE(13,32)
C  PRINT 88888
C
C  88888 FORMAT (' UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO',/10X,' INSTITUTO
C  * DE GEOLOGIA',/14X,' * * * * *',/6X,' LABORATORIO DE CRISTALOGRAFIA',/14X,' *
C  * * * * *',///)

```



```

KMK=MOD(JL,4)
IF(JI.EQ.0.OR.JK.EQ.0.OR.JL.EQ.0) GO TO 105
IF(JI.EQ.0.OR.JK.EQ.0) GO TO 101
K1=MOD(MA,2)
K2=MOD(HB,2)
K3=MOD(MC,2)
K4=MOD(MD,2)
IP(2,N)=K1
IP(3,N)=K2
IP(4,N)=K3
IP(5,N)=K4
IP(6,N)=MOD(MG,2)
IP(7,N)=KIK
IP(8,N)=KJK
IP(9,N)=KKK
IP(10,N)=MOD(MK,2)
IP(11,N)=MOD(JS,2)
IP(12,N)=MOD(MT,2)
IP(13,N)=MOD(MS,2)
IP(14,N)=MOD(MH,2)
IP(15,N)=MOD(JT,2)
IP(16,N)=MOD(ML,2)
IP(17,N)=KLK
IP(18,N)=MOD(HE,3)
IP(19,N)=MOD(MH,3)
IX=IP(18,N)
IY=IP(7,N)
IZ=IP(8,N)
IXX=IP(9,N)
IF(IX.EQ.0) GO TO 30
IP(20,N)=1
GO TO 31
30 IP(20,N)=MOD(JL,2)
31 IF(IY.EQ.0.AND.IZ.EQ.0) GO TO 32
IP(21,N)=1
GO TO 33
32 IP(21,N)=MOD(JL,3)
33 IF(IY.EQ.0.AND.IZ.EQ.0.AND.IXX.EQ.0) GO TO 34
IP(22,N)=1
GO TO 35
34 IP(22,N)=MOD(MA,4)
35 IP(23,N)=MOD(MA,4)
IP(24,N)=MOD(JV,4)
IP(25,N)=MOD(MG,4)
IP(26,N)=MOD(JI,4)
IP(27,N)=MOD(JK,4)
IP(28,N)=KKK
IP(29,N)=MOD(MQ,4)
IP(30,N)=MOD(MR,4)
IP(31,N)=MOD(MQ,4)
IP(32,N)=MOD(JI,8)
IP(33,N)=MOD(JK,8)
IP(34,N)=MOD(JL,8)
IP(35,N)=MOD(MT,8)
IP(36,N)=MOD(MS,8)
IP(37,N)=MOD(MH,8)
IP(38,N)=MOD(JB,8)
IP(39,N)=MOD(JA,8)
IP(40,N)=MOD(MN,8)
IP(41,N)=MOD(JC,8)

```

```

IP(42,N)=MOD(JD,8)
IP(43,N)=MOD(JE,8)
IP(44,N)=MOD(JG,8)
IP(45,N)=MOD(JH,8)
IP(46,N)=MOD(JJ,8)
IP(47,N)=MOD(JI,8)
IP(48,N)=MOD(JN,8)
IP(49,N)=MOD(JQ,8)
IP(50,N)=MOD(JP,8)
IP(51,N)=MOD(JQ,8)
IP(52,N)=MOD(JR,8)
C REFLEJOS HKL INCONDICIONADOS
DO 69 J=2,52
IAM=IP(J,N)
IF(IAM.NE.0) IAM=1
IAG=IAM+IAG
69 CONTINUE
IAZ=51-IAG
IF(IAZ.NE.0) GO TO 87
IP(1,N)=0
GO TO 86
87 IP(1,N)=1
86 CONTINUE
GO TO 102
101 DO 120 J=1,52
120 IP(J,N)=1
102 IF(JI.EQ.0) GO TO 103
IP(54,N)=KIK
IP(55,N)=KKK
IP(56,N)=MOD(MH,2)
IP(57,N)=KLK
IP(58,N)=KMK
IP(59,N)=MOD(MD,2)
IP(60,N)=MOD(JV,4)
IP(61,N)=MOD(JL,6)
IP(62,N)=MOD(MH,6)
IP(63,N)=MOD(MH,6)
IP(64,N)=MOD(MD,6)
IP(65,N)=MOD(JW,6)
C REFLEJOS HKL INCONDICIONADOS
DO 88 J=54,65
IBM=IP(J,N)
IF(IBM.NE.0) IBM=1
IBG=IBM+IBG
88 CONTINUE
IBZ=12-IBG
IF(IBZ.NE.0) GO TO 89
IP(53,N)=0
GO TO 90
89 IP(53,N)=1
90 CONTINUE
GO TO 104
103 DO 121 J=53,65
121 IP(J,N)=1
104 IP(67,N)=KKK
JX=MOD(MD,3)
IP(68,N)=JX
IF(JX.EQ.0) GO TO 36
IP(69,N)=1
GO TO 37

```

```

36 IP(69,N)=MOD(JL,2)
37 IP(70,N)=MOD(JL,6)
   IP(71,N)=MOD(MH,6)
   IP(72,N)=MOD(MH,6)
   IP(73,N)=MOD(MH,6)
   IP(74,N)=MOD(JW,6)
C REFLEJOS H=HL INCONDICIONADOS
DO 38 J=67,74
  ICH=IP(J,N)
  IF(ICH.NE.0) ICH=1
  ICG=ICH+ICG
38 CONTINUE
  ICZ=8-ICG
  IF(ICZ.NE.0) GO TO 39
  IP(66,N)=0
  GO TO 40
39 IP(66,N)=1
40 CONTINUE
  GO TO 106
105 DO 122 J=1,74
122 IP(J,N)=1
106 IF(JI.EQ.0.AND.JK.NE.0.AND.JL.NE.0) GO TO 107
  DO 123 J=75,83
123 IP(J,N)=1
  GO TO 108
107 IP(76,N)=KJK
  IP(77,N)=KKK
  IP(78,N)=MOD(MH,2)
  IP(79,N)=KKK
  IP(80,N)=MOD(MC,2)
  IP(81,N)=MOD(MC,4)
  IP(82,N)=MOD(MC,4)
  IP(83,N)=MOD(MC,4)
C REFLEJOS OKL INCONDICIONADOS
DO 41 J=76,83
  IDM=IP(J,N)
  IF(IDM.NE.0) IDM=1
  IDG=IDM+IDG
41 CONTINUE
  IDZ=8-IDG
  IF(IDZ.NE.0) GO TO 42
  IP(75,N)=0
  GO TO 43
42 IP(75,N)=1
43 CONTINUE
108 IF(JI.NE.0.AND.JK.EQ.0.AND.JL.NE.0) GO TO 109
  DO 124 J=84,88
124 IP(J,N)=1
  GO TO 110
109 IP(85,N)=KIK
  IP(86,N)=KKK
  IP(87,N)=MOD(MD,2)
  IP(88,N)=MOD(MD,4)
C REFLEJOS HOL INCONDICIONADOS
DO 44 J=85,88
  IEM=IP(J,N)
  IF(IEM.NE.0) IEM=1
  IEG=IEM+IEG
44 CONTINUE
  IEZ=4-IEG

```

```

  IF(IEZ.NE.0) GO TO 45
  IP(84,N)=0
  GO TO 46
45 IP(84,N)=1
46 CONTINUE
110 IF(JI.NE.0.AND.JK.NE.0.AND.JL.EQ.0) GO TO 111
  DO 125 J=89,93
125 IP(J,N)=1
  GO TO 112
111 IP(90,N)=KIK
  IP(91,N)=KJK
  IP(92,N)=MOD(MB,2)
  IP(93,N)=MOD(MB,4)
C REFLEJOS HKO INCONDICIONADOS
DO 47 J=90,93
  IHM=IP(J,N)
  IF(IHM.NE.0) IHM=1
  IHG=IHM+IHG
47 CONTINUE
  IHZ=4-IHG
  IF(IHZ.NE.0) GO TO 48
  IP(89,N)=0
  GO TO 49
48 IP(89,N)=1
49 CONTINUE
112 IF(JI.EQ.0) GO TO 113
  DO 126 J=94,95
126 IP(J,N)=1
  GO TO 114
113 IP(95,N)=KIK
C REFLEJOS HHO INCONDICIONADOS
  IIM=IP(95,N)
  IF(IIM.EQ.0) GO TO 50
  IP(94,N)=0
  GO TO 51
50 IP(94,N)=1
51 CONTINUE
114 IF(JI.NE.0.AND.JK.EQ.0.AND.JL.EQ.0) GO TO 115
  DO 127 J=96,98
127 IP(J,N)=1
  GO TO 116
115 IP(97,N)=KIK
  IP(98,N)=MOD(JI,4)
C REFLEJOS HOO INCONDICIONADOS
DO 52 J=97,98
  IJH=IP(J,N)
  IF(IJH.NE.0) IJH=1
  IJG=IJH+IJG
52 CONTINUE
  IJZ=2-IJG
  IF(IJZ.NE.0) GO TO 53
  IP(96,N)=0
  GO TO 54
53 IP(96,N)=1
54 CONTINUE
116 IF(JI.EQ.0.AND.JK.NE.0.AND.JL.EQ.0) GO TO 117
  DO 128 J=99,101
128 IP(J,N)=1
  GO TO 118
117 IP(100,N)=KJK

```



```

IP(101,N)=MOD(JK,4)
C REFLEJOS OKO INCONDICIONADOS
DO 55 J=100,101
IKM=IP(J,N)
IF(IKM,NE,0)IKM=1
IKG=IKM+IKG
55 CONTINUE
IKZ=2-IKG
IF(IKZ,NE,0) GO TO 56
IP(99,N)=0
GO TO 57
56 IP(99,N)=1
57 CONTINUE
118 IF(JI,EQ,0,AND,JK,EQ,0,AND,JL,NE,0) GO TO 119
DO 129 J=102,106
129 IP(J,N)=1
GO TO 130
119 IP(103,N)=KKK
IP(104,N)=KKL
IP(105,N)=KKM
IP(106,N)=MOD(JL,6)
C REFLEJOS OOL INCONDICIONADOS
DO 58 J=103,106
ILM=IP(J,N)
IF(ILM,NE,0)ILM=1
ILG=ILM+ILG
58 CONTINUE
ILZ=4-ILG
IF(ILZ,NE,0) GO TO 59
IP(102,N)=0
GO TO 60
59 IP(102,N)=1
60 CONTINUE
130 CONTINUE
DO 501 J=1,106
JJJ =IP(J,N)
IF(JJJ,NE,0) IP(J,N)=1
501 CONTINUE
PRINT 500,1(N),K(N),L(N),(IP(J,N),J=1,106)
500 FORMAT(1X,3I3,3X,106I1)
94 CONTINUE
DO 61 J=1,106
IFA=0
DO 62 KP=1,NK
IXI=IP(J,KP)
IF(IXI,EQ,0) GO TO 62
IFA=IFA+1
62 CONTINUE
IF(IFA=NK) 64,63,64
63 IP(J,NK)=1
GO TO 61
64 IP(J,NK)=0
61 CONTINUE
C EXCLUSION DE INCOMPATIBILIDADES
IN1=IP(2,NK)
IN2=IP(3,NK)
IN3=IP(4,NK)
IN4=IP(5,NK)
IN5=IN1+IN2+IN3+IN4
IN6=IP(7,NK)

```

```
IN7=IP(8,NK)
IN8=IP(9,NK)
IN9=IP(12,NK)
IN10=IP(13,NK)
IN11=IP(14,NK)
IN12=IN6+IN7+IN8
IN13=IN9+IN10+IN11
IN14=IN2+IN3+IN4
IF(IN5,EQ.O.OR.IN5.EQ.2.OR.IN5.EQ.4) GO TO 270
IF(IN5,EQ.3) GO TO 271
IF(IN5,EQ.1.AND.IN1,EQ.O) GO TO 270
IF(IN5,EQ.1.AND.IN1,EQ.1.AND.IN14.NE.O) GO TO 270
IF(IN14,EQ.O.AND.IN12,EQ.3.AND.IN13,EQ.O) GO TO 271
IF(IN14,EQ.O.AND.IN12,EQ.O.AND.IN13,EQ.3) GO TO 271
270 IP(1,NK)=O
GO TO 272
271 IP(1,NK)=1
272 CONTINUE
PRINT 65,(IP(J,NK),J=1,106)
65 FORMAT(3X,'-----+',---+'-----'+---+'----'
*,---+'-----'+---+'-----'+---+'-----'+---+'--'/
*,3X,'H K L',3X,106I1,//)
PRINT 303
30. TORRAT(13X,'+',51X,'+',12X,'+',8X,'+',8X,'+',4X,'+',4X,'++ + +'
*/13X,'HKL',49X,'HHL',10X,'H=HL',5X,'OKL',6X,'HOL',2X,'HKO',X,'HHO')
*BOOKOOOL',//)
PRINT 304
300. TORRAT('/',10X,'TABLA DE REFERENCIA',//)
DO 302 JW=1,29
READ 300,(FF(JW,KZ),KZ=1,14)
30. FORMATT(A6,A5,3A6)
PRINT 301,(FF(JW,KZ),KZ=1,14)
301 FORMATT(1OX,4A6,1OX,3A6,12X,4A5,12X,3A6)
302 CONTINUE
PRINT 70
70 FORMATT(///,3X,'POSIBLES GRUPOS ESPACIALES:',//)
DO 71 IA=1,M
READ 72,HR,D1,FRA,CC,NO,(IPA(J,IA),J=1,106)
72 FORMATT(SA5,2X,53I1,,/,27X,53I1)
IJUA=O
IV=1
IW=52
IPER=O
713 NV2=O
DO 701 J2=IV,IW
HW=IW-IV+1
NV1=IP(J2,NK)
NV2=Nv2+NVI
701 CONTINUE
IF(NV2,EQ.HW) GO TO 702
DO 702 J3=IV,IW
NV=IP(J3,NK)
NW=IPA(J3,IA)
IF(NW.NE.O) GO TO 702
IF(NW,EQ.NV) GO TO 702
IJUA=1
702 CONTINUE
IPER=IPER+1
GO TO (703,704,705,706,707,708,709,710,711,712),IPER
703 IV=53
```

```

      IW=65
      GO TO 713
704  IV=66
      IW=74
      GO TO 713
705  IV=75
      IW=83
      GO TO 713
706  IV=84
      IW=88
      GO TO 713
707  IV=89
      IW=93
      GO TO 713
708  IV=94
      IW=95
      GO TO 713
709  IV=96
      IW=98
      GO TO 713
710  IV=99
      IW=101
      GO TO 713
711  IV=102
      IW=106
      GO TO 713
712  CONTINUE
      IF(IJUA,NE.0) GO TO 71
C    EXCLUSION DE GRUPOS DE OTRAS SINGONIAS (SUPONIENDO 704 TARJETAS)
      GO TO (400,401,402,403,404,405,406),SIN
400  IF(IA,GE.299,AND,IA,LE.352) GO TO 407
      GO TO 71
401  IF(IA,GE.151,AND,IA,LE.236) GO TO 407
      GO TO 71
402  IF(IA,GE.268,AND,IA,LE.294) GO TO 407
      GO TO 71
403  IF(IA,GE.237,AND,IA,LE.267) GO TO 407
      GO TO 71
404  IF(IA,GE.39,AND,IA,LE.150) GO TO 407
      GO TO 71
405  IF(IA,GE.3,AND,IA,LE.38) GO TO 407
      GO TO 71
406  IF(IA,EQ.1,OR,IA,EQ.2) GO TO 407
      GO TO 71
407  PRINT 75,NR,DI,FRA,CC,ND,(IPA(LA,IA),LA=1,106)
      75 FORMAT(1X,5A5,10611)
      71 CONTINUE
      PRINT 211
211  FORMAT(///,10X,'INTERPRETACION DE LOS REFLEJOS',///,10X,'MODO DE BRA
      *VAIS: ',/)
      JP1=IP(1,NK)
      JP2=IP(2,NK)
      JP3=IP(3,NK)
      JP4=IP(4,NK)
      JP5=IP(5,NK)
      JP6=IP(7,NK)
      JP7=IP(8,NK)
      JP8=IP(9,NK)
      JP9=IP(12,NK)
      JP10=IP(13,NK)

```

```

      JP11=IP(14,NK)
      JP12=IP(18,NK)
      JP13=IP(19,NK)
      IF(JP1,NE.0) GO TO 201
      PRINT 200
200  FORMAT(27X,'RED P PRIMITIVA',/)
203  FORMAT(27X,'RED I CENTRADA',/)
205  FORMAT(27X,'RED C DE CARAS (001) CENTRADAS',/)
207  FORMAT(27X,'RED A DE CARAS (100) CENTRADAS',/)
209  FORMAT(27X,'RED B DE CARAS (010) CENTRADAS',/)
212  FORMAT(27X,'RED F DE CARAS CENTRADAS',/)
201  IF(IN5,EQ.0,OR,IN5,EQ.2,OR,IN5,EQ.4) GO TO 202
      IF(IN5,EQ.3,AND,IN14,EQ.3) GO TO 204
      IF(IN5,EQ.3,AND,IN14,NE.3,AND,IN2,EQ.0) GO TO 206
      IF(IN5,EQ.3,AND,IN14,NE.3,AND,IN3,EQ.0) GO TO 208
      IF(IN5,EQ.3,AND,IN14,NE.3,AND,IN4,EQ.0) GO TO 295
      IF(IN5,EQ.1,AND,IN1,EQ.0) GO TO 202
      IF(IN12,EQ.0,AND,IN13,NE.0,OR,IN12,NE.0,AND,IN13,EQ.0) GO TO 210
204  PRINT 203
      GO TO 216
206  PRINT 205
      GO TO 213
208  PRINT 207
      GO TO 216
210  PRINT 212
      GO TO 216
295  PRINT 209
      GO TO 216
202  PRINT 200
213  IF(GA,NE.120,) GO TO 216
      IF(JP12,NE.0) GO TO 214
      PRINT 215
215  FORMAT(27X,'RED H EXAGONAL TRIPLE',/)
214  IF(JP13,NE.0) GO TO 216
      PRINT 242
242  FORMAT(27X,'RED R ROMBOEDRICA OBVERSA',/)
216  CONTINUE
      PRINT 416
416  FORMAT(//,5X,'- REFLEJOS -',6X,'ELEMENTOS DE SIMETRIA DE POSICI
      *ON',6X,'- SINGONIAS -',//,5X,'*TIPO*CONDICION*ORIENTACION*COMPONENT
      *ES * S I M B O L O S *',//,1X,'EJES',/)
      JP14=IP(97,NK)
      JP15=IP(98,NK)
      JP16=IP(100,NK)
      JP17=IP(103,NK)
      JP18=IP(104,NK)
      JP19=IP(105,NK)
      JP20=IP(106,NK)
      JP21=IP(55,NK)
      JP22=IP(59,NK)
      JP23=IP(60,NK)
      JP24=IP(67,NK)
      JP25=IP(76,NK)
      JP26=IP(77,NK)
      JP27=IP(80,NK)
      JP28=IP(81,NK)
      JP29=IP(85,NK)
      JP30=IP(86,NK)
      JP31=IP(87,NK)
      JP32=IP(88,NK)

```

```

JP33=IP(90,NK)
JP34=IP(91,NK)
JP35=IP(92,NK)
JP36=IP(93,NK)
JP37=IP(101,NK)
JP38=IP(95,NK)
DO 250 J=1,32
READ 217,((EE(IZ,J),IZ=1,13)
250 CONTINUE
217 FORMAT(2X,13A6)
IF(CJP14,NE.0) GO TO 218
PRINT 217,((EE(IZ,J),IZ=1,13),J=1,2)
218 IF(CJP15,NE.0) GO TO 219
PRINT 217,((EE(IZ, 3),IZ=1,13)
219 IF(CJP16,NE.0) GO TO 252
PRINT 217,((EE(IZ, 4),IZ=1,13)
252 IF(CJP37,NE.0) GO TO 220
PRINT 217,((EE(IZ,5),IZ=1,13)
220 IF(CJP17,NE.0) GO TO 221
PRINT 217,((EE(IZ,J),IZ=1,13),J=6,7)
PRINT 217,((EE(IZ, 9),IZ=1,13)
221 IF(CJP19,NE.0) GO TO 222
PRINT 217,((EE(IZ, 8),IZ=1,13)
222 IF(CJP18,NE.0) GO TO 223
PRINT 217,((EE(IZ, 10),IZ=1,13)
223 IF(CJP20,NE.0) GO TO 253
PRINT 217,((EE(IZ, 11),IZ=1,13)
253 IF(CJP38,NE.0) GO TO 224
PRINT 217,((EE(IZ,12),IZ=1,13)
224 PRINT 225
225 FORMAT(1X,'PLANUS')
IF(CJP21,NE.0) GO TO 226
PRINT 217,((EE(IZ, 28),IZ=1,13)
226 IF(CJP22,NE.0) GO TO 227
PRINT 217,((EE(IZ, 30),IZ=1,13)
PRINT 217,((EE(IZ,31),IZ=1,13)
227 IF(CJP23,NE.0) GO TO 228
PRINT 217,((EE(IZ, 32),IZ=1,13)
228 IF(CJP24,NE.0) GO TO 229
PRINT 217,((EE(IZ, 29),IZ=1,13)
229 IF(CJP25,NE.0) GO TO 230
PRINT 217,((EE(IZ, 18),IZ=1,13)
230 IF(CJP26,NE.0) GO TO 231
PRINT 217,((EE(IZ, 19),IZ=1,13)
231 IF(CJP27,NE.0) GO TO 232
PRINT 217,((EE(IZ, 20),IZ=1,13)
232 IF(CJP28,NE.0) GO TO 233
PRINT 217,((EE(IZ,J),IZ=1,13),J=21,22)
233 IF(CJP29,NE.0) GO TO 234
PRINT 217,((EE(IZ, 24),IZ=1,13)
234 IF(CJP30,NE.0) GO TO 235
PRINT 217,((EE(IZ, 23),IZ=1,13)
235 IF(CJP31,NE.0) GO TO 236
PRINT 217,((EE(IZ, 25),IZ=1,13)
236 IF(CJP32,NE.0) GO TO 237
PRINT 217,((EE(IZ,J),IZ=1,13),J=26,27)
237 IF(CJP33,NE.0) GO TO 238
PRINT 217,((EE(IZ, 13),IZ=1,13)
238 IF(CJP34,NE.0) GO TO 239
PRINT 217,((EE(IZ, 14),IZ=1,13)

```

```

239 IF(JP35,NE,0) GO TO 240
    PRINT 217, ((EE(IZ,      15),IZ=1,13)
240 IF(JP36,NE,0) GO TO 241
    PRINT 217,((EE(IZ,J),IZ=1,13),J=16,17)
241 CONTINUE
    PRINT 304
    PRINT 416
    PRINT 217,((EE(IPE,ITA),IPE=1,13),ITA=1,12)
    PRINT 251
251 FORMAT(//,1X,'PLANUS',//)
    PRINT 217,((EE(IPE,ITA),IPE=1,13),ITA=13,32)
    CALL EXIT
    END

```

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO
INSTITUTO DE GEOLOGIA
LABORATORIO DE CRISTALOGRAFIA

NOMBRE: COSALITA

CELDA ELEMENTAL: A= 19.0900 ALFA= 90.00
B= 23.8700 BETA= 90.00
C= 4.0550 GAMA= 90.00

RELACION PARAMETRICA= 0.7997 : 1 : 0.1699

SINGONIA = +ORTOCLINICA.

SELECCION DEL GRUPO ESPACIAL.

REFLEJOS

CONDICIONES DE PARIDAD.

[illegible]

HKO	H=2N	(001)	A/2	A	M(I),TET,ORT.
HKO	K=2H	(001)	B/2	B	M(I),TET,ORT.
HKO	H+K=2H	(001)	A/2+B/2	A	M(I),TET,ORT.
HKO	H+K=4H	(001)	A/4+B/4	D	ORT.
	(H+K)=2H				
OKL	K=2H	(100)	H/2	B	ORT,YET,CUR.
OKL	L=2H	(100)	C/2	C	ORT,YET,CUR.
OKL	K+L=2H	(100)	H/2+C/2	H	ORT,YET,CUR.
OKL	K+L=4H	(100)	B/4+C/4	D	ORT,YET,CUR.
	(K+L)=2H				
HOL	L=2H	(010)	C/2	C	MON(II),ORT.
HOL	H=2N	(010)	A/2	A	MON(II),ORT.
HOL	L+H=2H	(010)	C/2+A/2	N	MON(II),ORT.
HOL	L+H=4H	(010)	C/4+A/4	D	ORT.
	(L+H)=2H				
HOL	L=2H	(110)	C/2	C	EXA.
HHL	H=2N	(110)	A/2+B/2	C	EXA.
HHL	2H+3L=2N	(110)	(A/2+B/2)+C/2	(N) C	TRIG.TET,CUB.
HHL	H+L=2H	(110)	A/4+H/4+C/4	H(C)	
HHL	2H+L=4H	(110)	A/2+B/4+C/4	D	TET,CUR.