



210456

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO
INSTITUTO DE GEOLOGIA

BOLETIN NUMERO 89

**ALGUNOS PROGRAMAS DE CALCULO
CRISTALOGRAFICO MEDIANTE COMPUTADORA
ELECTRONICA**

POR

FRANCISCO J. FABREGAT GUINCHARD



MEXICO, D. F.
1971

I N D I C E

Introducción	7
Prgr. 23.— Cálculo de las coordenadas Azimutales φ, ρ	11
Prgr. 27.— Cálculo de las traslaciones según el eje de giro, en diagramas de cristal giratorio	29
Prgr. 28.— Datos para la resolución gráfica de los diagramas de cristal giratorio	49
Prgr. 21.— Interpretación analítica de diagramas de cristal giratorio (Rotatorio y Oscilante)	75

CONJUNTO DE PROGRAMAS PARA EL CALCULO DE LOS
FACTORES DE ESTRUCTURA E INTENSIDADES:

Factor de polarización	88
Factor de Lorentz	89
Expresiones auxiliares	90
Factor de difusión atómico	91
Factor de multiplicidad	96
Factor de temperatura	96
Factor de absorción	98
Cálculo del coeficiente de absorción lineal	99
Factor de estructura	100
Factor de escala de niveles	102
Factor de corrección de la forma de los reflejos	102
Ejemplos de cálculo	103
Advertencia	154

INTRODUCCION

El conjunto de programas de cálculo electrónico que aquí se ofrece, tiende a facilitar los problemas cotidianos de cálculo cristalográfico. Están escritos en FORTRAN y previstos para correrse en la computadora BURROUGHS 5500 del Centro de Cálculo Electrónico de nuestra Universidad; mas podrán realizarse asimismo en otras computadoras de menores alcances mediante muy ligeras adaptaciones.

En la WORLD LIST OF CRYSTALLOGRAPHIC COMPUTER PROGRAMS (Int.U. of Cryst.) se halla la referencia de unos 900 que se ocupan en resolver problemas estructurales, en afinar parámetros por mínimos cuadrados, en numerar diagramas de polvo, ... tendientes todos ellos a obviar el número ingente de operaciones que implican. Empero, no se encuentran otros más sencillos, como los que resuelven los cálculos goniométricos y los primarios de exploración, muy frecuentes y no menos laboriosos en las labores cotidianas de nuestros laboratorios.

Así por ejemplo, el cálculo goniométrico de un cristal, llevado mediante matrices, es labor de unas 3 - 4 horas con una calculadora de escritorio: con un programa se resuelve en fracciones de segundo.

Otras ventajas de la programación es el verse obligado a estudiar a fondo los innumerables aspectos del caso y criticar todas las facetas que pueda presentar, el evitar la reiteración de operaciones semejantes para uno y otro de los minerales que se estudian, el tener ya una pauta redactada con anterioridad para los diversos problemas que se presentan, ahorrando el planeo de actividades.

Aunque son varios los programas redactados, se proponen ahora unos cuantos que se espera sean muy útiles en los Laboratorios de Cristalografía.

CALCULO CRISTALOGRAFICO
PROGRAMAS PARA COMPUTADORA ELECTRONICA
FORTRAN

Francisco José FABREGAT GUINCHARD
Ricardo ESQUIVEL ESPARZA

CALCULO CRISTALOGRAFICO
PROGRAMAS PARA COMPUTADORA ELECTRONICA
FORTRAN

BURROUGHS 5500

COORDENADAS AZIMUTALES φ, ρ

El programa tiene por objeto el cálculo de las coordenadas azimutales φ, ρ de una forma cristalina cualquiera, dadas sus relaciones axiales: relación paramétrica y ángulos en grados sexagesimales. Se requieren como datos adicionales las tarjetas de los símbolos cuyos polos interesan.

El cálculo se hace con base en la matriz M^* de Bond, y viene a ser una variante del programa 2, que calcula por el mismo procedimiento las distancias angulares entre los polos de cara dados por sus símbolos. En efecto, los arcos φ y ρ son los correspondientes al azimut del polo dado, contándolo desde el polo elegido como origen (arco φ) y el comprendido entre aquél y el centro de la proyección (arco ρ).

La matriz que se tiene en cuenta es la M^* correspondiente al caso general triclinico, y el programa mismo se encarga de hacer las reducciones necesarias para cristales de cualquier otro sistema.

$$M^* = \begin{vmatrix} \frac{1}{a \sin \beta} & 0 & -\frac{\operatorname{ctg} \beta}{c} \\ \frac{-v}{a w \sin \beta} & \frac{1}{b w} & \frac{v \operatorname{ctg} \beta - \cos \alpha}{c w} \\ 0 & 0 & \frac{1}{c} \end{vmatrix}$$

$$\text{con, } v = \frac{\cos \gamma - \cos \alpha \cos \beta}{\sin \beta}$$

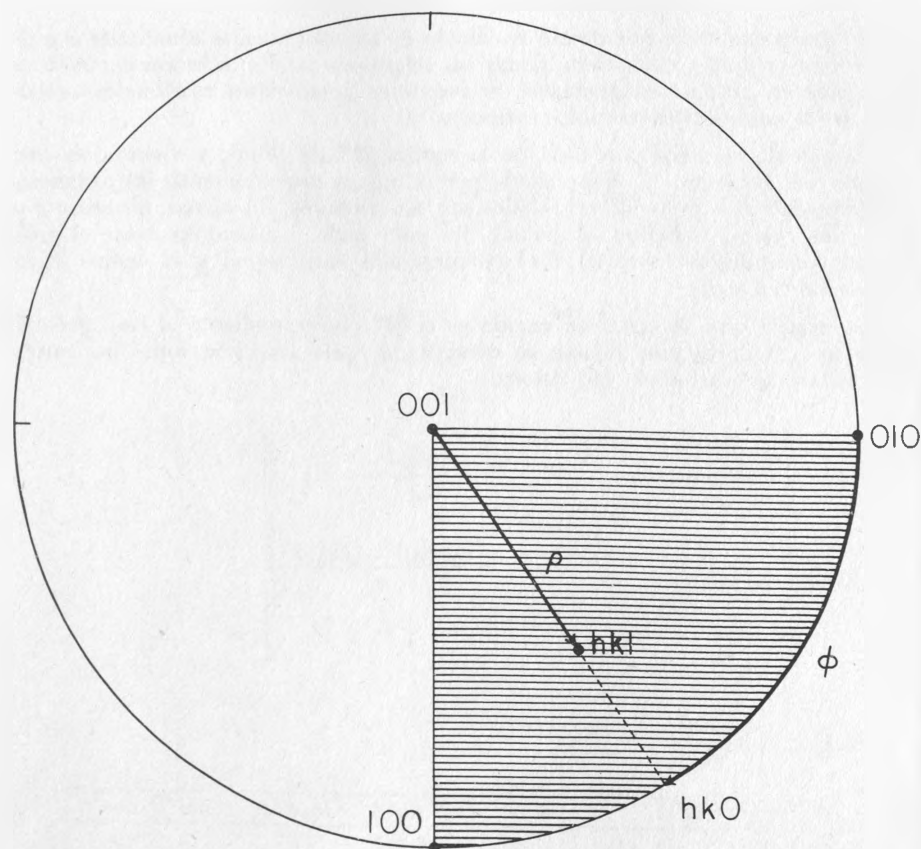
$$w = \frac{\sqrt{1 + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma - (\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta \cos^2 \gamma)}}{\sin \beta}$$

Como casos importantes de aplicación se han calculado las tablas de coordenadas de algunas formas frecuentes, que son constantes en los cristales cúbicos, tetragonales y exagonales.

- a). En las formas CUBICAS se calculan los arcos del polo hkl (PQR) correspondientes a

el azimut entre hk0 y 010 (STU), como φ

la altura del polo desde hkl hasta 001 (VWZ), como ρ



Relaciones axiales: $1 : 1 : 1$
 $90^\circ, 90^\circ, 90^\circ$.

- b). De las formas TETRAGONALES, sólo tienen φ, ρ constantes las prismáticas, ya que las demás varían su inclinación con la longitud del eje c. En éstas, $\rho = 90^\circ$ para todas, y en obsequio a la nitidez de la tabla se podría prescindir de este valor; φ es el arco entre hk0 (PQR) y 010 (STU).

Sin embargo, toda otra forma piramidal hkl tiene el mismo φ que su prismática hk0 correspondiente, quedando por determinar su ángulo ρ . El programa queda abierto para cualquier polo de cara que se ponga en las tarjetas de datos.

Relaciones axiales. $1 : 1 : 0.5$
 $90^\circ, 90^\circ, 90^\circ$,

Se pone arbitrariamente 0.5 como tercer término de la relación paramétrica para que corra el programa, toda vez que en la tabla interesan sólo las formas prismáticas y dicho término no influye en ellas. Tratándose de una forma cristalina en concreto, se pondría su verdadera relación paramétrica y las tarjetas de polos que interesasen.

- c). con respecto a las formas exagonales (y trigonales referidas a ejes de Miller-Bravais) valen las mismas observaciones generales hechas a propósito de las tetragonales. Sin embargo,

1º Téngase en cuenta que siendo homogéneos los ejes exagonales, los símbolos de los polos se escriben hkl para generalizar, prescindiendo por convención del índice -i con el que suelen escribirse hkil y que resulta superfluo.

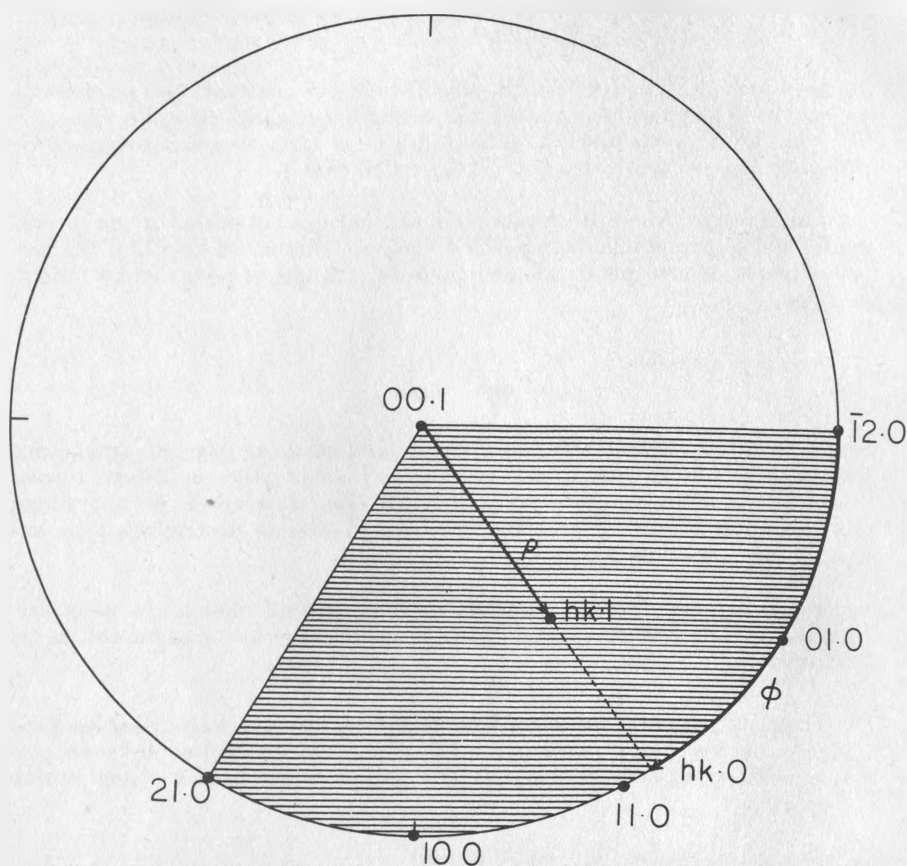
2º Se admite la posición axial G(1) de Goldschmidt, por ser la más empleada, según se representa en la figura. De preferir la posición G(2) habría que elegir otro origen de azimutes.

Relaciones axiales: $1 : 1 : 0.5$
 $90^\circ, 90^\circ, 120^\circ$,

- 3º Tratándose de cristales trigonales con notación de Miller, se pueden cambiar a exagonales los símbolos de los polos, habida cuenta de su correspondencia, o resolver directamente sobre índices romboédricos cambiando el nombre de los polos de origen.

ADVERTENCIA: Los ejemplos calculados tienen una doble importancia:

- a). Calcular exactamente los ángulos, hasta una aproximación de la segunda cifra



decimal en los segundos de arcos, formando así unas tablas de precisión. Las citadas por el Dana's System, en su volumen I, carecen de esta aproximación. Como sus términos fueron calculados trigonométricamente, hay más acumulación de error. Ciertamente que en los resultados reales no se puede llegar a ese grado, debido a las dificultades experimentales: mas a lo menos, no es tolerable acumular inexactitudes de cálculo.

- b). Se pueden descubrir por comparación los errores de las tablas ya existentes: las de coordenadas de las formas cúbicas del Dana's System, por ejemplo, asignan a (072) = 15°56'30", siendo así que debe ser de 74°3'16.57".

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

C CALCULO CRISTALOGRAFICO. COORDENADAS AZIMUTALES FI, RO.
 C CALCULO MATRICIAL.
 C DATOS= RELACION PARAMETRICA= ANGULOS AXIALES EN GRADOS SEXAGESIMALES.
 C
 C F.J.FABR+GAT GUINCHARD Y R.ESQUIVEL ESPARZA
 C FORTRAN - BURROUGHS 5500
 C TARJETAS DE DATOS
 C
 C TARJETA 1.- NUMERO ORDINAL CONSECUTIVO DEL CASO PROPUESTO,(FORMATO,101)
 C TARJETA 2.- NOMBRE DEL MINERAL, SEGUIDO DE SUS RELACIONES PARAMETRICA Y
 C TARJETA 3.- LOS SIMBOLOS DE LOS DOS POLOS ORIGEN DE COORDENADAS FI, RO.
 C ANGULAR, ESTA EXPRESADA EN GRADOS MINUTOS Y SEGUNDOS,(FORMATO,10).
 C ESTOS SUELEN SER (010),(001) PARA TODAS LAS SINGONIAS, Y (110),(001) PA
 C RA LAS EXAGONAL=TRIGONAL.(SE SUPRIME CONVENCIONALMENTE EL TERCER INDICE
 C (FORMATO,6)
 C TARJETA 4 Y SS.- LOS SIMBOLOS DE LOS POLOS DE LOS QUE SE DESEAN SUS COORDE
 C NADAS AZIMUTALES,(FORMATO,16). LA ULTIMA TARJETA DE ESTE GRUPO SERA 999
 C , EN SUS 4 PRIMERAS COLUMNAS, PARA INDICAR EL CAMBIO DE GRUPO.
 C DE HABER VARIOS CRISTALES POR CALCULAR, SE REPETIRAN SUCESIVAMENTE LAS
 C TARJETAS 1-4, TERMINANDO TODOS LOS GRUPOS POR UNA TARJETA CON 8888 EN SUS
 C 4 PRIMERAS COLUMNAS.
 C ** LOS TRES CASOS DE EJEMPLO QUE SE CALCULAN SON LAS TABLAS DE ANGULOS CONSTAN
 C TES EN LOS SISTEMAS CUBICO, TETRAGONAL Y EXAGONAL. ESTAS TABLAS COMPLETAN
 C EN PRECISION, A LAS PUBLICADAS EN EL VOL.I DEL DANA'S SYSTEM OF MINERALOGY
 C
 C
 C

DIMENSION BEATA(3,3),VECT1(3),COMP1(3),COMP2(3),VECT2(3),IMB(4)

```

1, VECT3(3), COMP3(3)
100 PRINT 102
102 FORMAT (1H1)
    READ 101, NUM
101 FORMAT (I4)
    IF (NUM.EQ.8888) GO TO 103
    READ 10, IMB, A, C, AB, AC, AD, BB, BC, BD, CC, CD, CE
10 FORMAT(3A4, A3, F9.6, 9X, F9.6, F4.0, F3.0, F5.2, F4.0, F3.0, F5.2, F4.0,
1F3.0, F5.2)
    SUM=AB*60.
    SUM=SUM+AC
    SUM=SUM*60.
    SUM=SUM+AD
    ALFA=SUM/206264.8062
    SUM1=BB*60.
    SUM1=SUM1+BC
    SUM1=SUM1*60.
    SUM1=SUM1+BD
    BETA=SUM1/206264.8062
    SUM2=CC*60.
    SUM2=SUM2+CD
    SUM2=SUM2*60.
    SUM2=SUM2+CE
    GAMA=SUM2/206264.8062
    V=(COS(GAMA)-COS(ALFA)*COS(BETA))/SIN(BETA)
    FIRST=1.+(2.*COS(ALFA)*COS(BETA)*COS(GAMA))
    SECON=COS(ALFA)*COS(ALFA)+COS(BETA)*COS(BETA)
    THIR=COS(GAMA)*COS(GAMA)
    Z=FIRST-(SECOND+THIRD)
    Z1=SQRT (ABS (Z))
    IF (Z) 76, 77, 77

```

```

76 Z1=-Z1
77 W=Z1/SIN(BETA)
    BEATA(1,1)=1./(A*SIN(BETA))
    BEATA(1,2)=0.
    BEATA(1,3)=-(COS(BETA)/SIN(BETA))/C
    BEATA(2,1)=-(V/(A*W*SIN(BETA)))
    BEATA(2,2)=1./W
    RON=V*(COS(BETA)/SIN(BETA))-COS(ALFA)
    BEATA(2,3)=RON/(W*C)
    BEATA(3,3)=1./C
    BEATA(3,1)=0.
    BEATA(3,2)=0.
    PRINT 50, IMB
50 FORMAT(1X, 3A4, A3//)
    PRINT 56
56 FORMAT(24H          MATRIZ M*/)
    PRINT 11, ((BEATA(I,J), J=1, 3), I=1, 3)
11 FORMAT(3F12.7//)
    PRINT 12
12 FORMAT(53H COORDENADAS AZIMUTALES DE LAS FORMAS MAS FRECUENTES.//)
    PRINT 14
14 FORMAT(64H          SIMBOLOS          FI
1          RO//)
    PRINT 13
13 FORMAT(71H  P    Q    R          GRAD  MIN  SEG          GR
1AD  MIN  SEG//)
    READ 6, S, T, U, V, W, Z
6 FORMAT (6F4.0)
    VECT2(1)=S
    VECT2(2)=T
    VECT2(3)=U

```

```

      VECT3(1)=V
      VECT3(2)=W
      VECT3(3)=Z
5 READ 10,P,Q,R
16 FORMAT(3F4.0)
      IF(P.EQ.999.) GO TO 100
      VECT1(1)=P
      VECT1(2)=Q
      VECT1(3)=0
      DO15 I=1,3
      DO20 J=1,3
20 COMP1(I)=COMP1(I)+BEATA(I,J)*VECT1(J)
15 CONTINUE
      DO25 K=1,3
      DO31 L=1,3
31 COMP2(K)=COMP2(K)+BEATA(K,L)*VECT2(L)
25 CONTINUE
      DO35 M=1,3
35 PROD1=PROD1+COMP1(M)**2
      DO40 N=1,3
40 PROD2=PROD2+COMP2(N)**2
      PROD1=SQRT(PROD1)
      PROD2=SQRT(PROD2)
      X1=COMP1(1)/PROD1
      Y1=COMP1(2)/PROD1
      Z1=COMP1(3)/PROD1
      X2=COMP2(1)/PROD2
      Y2=COMP2(2)/PROD2
      Z2=COMP2(3)/PROD2
      COSEN=X1*X2+Y1*Y2+Z1*Z2
      RAD=ARCUS(COSEN)

```

64
65
66
67
68
69
70
71
72
73
74
75
76
77
78
79
80
81
82
83
84
85
86
87
88
89
90
91
92
93
94

```

75 BSEG=RAD*206264.80620
      BMIN=RAD*3437.746770
      BGRA=RAD*57.295779
      IBGRA=BGRA
      ESTA=IBGRA*60
      IRES2=BMIN-ESTA
      ARRU=IRES2*60
      CARBQ=ESTA*60
      BSEG=BSEG-(CARBQ+ARRU)
      IF(BSEG=60.) 78,79,79
79 BSEG=BSEG-60.
      IRES2=IRES2+1
78 IF(IRES2=60) 80,81,81
81 IRES2=IRES2-60
      IBGRA=IBGRA+1
80 CONTINUE
      PROD1=0.0
      DO 68 I=1,3
68 COMP1(I)=0.0
      VECT1(3)=R
      DO 53 I=1,3
      DO 51 J=1,3
51 COMP1(I)=COMP1(I)+BEATA(I,J)*VECT1(J)
53 CONTINUE
      DO 26 K=1,3
      DO 27 L=1,3
27 COMP3(K)=COMP3(K)+BEATA(K,L)*VECT3(L)
26 CONTINUE
      DO 52 M=1,3
52 PROD1=PROD1+COMP1(M)**2
      DO 41 N=1,3

```

96
97
98
99
100
101
102
103
104
105
106
107
108
109
110
111
112
113
114
115
116
117
118
119
120
121
122
123
124
125
126

```

41 PROD3=PROD3+COMP3(N)**2
   PROD1=SQR(PROD1)
   PROD3=SQR(PROD3)
   X1=COMP1(1)/PROD1
   Y1=COMP1(2)/PROD1
   Z1=COMP1(3)/PROD1
   X3=COMP3(1)/PROD3
   Y3=COMP3(2)/PROD3
   Z3=COMP3(3)/PROD3
   COSAN=X1*X3+Y1*Y3+Z1*Z3
   ANGG=ARCCOS(COSAN)
72 CSEG=ANGG*206264.8062
   CMIN=ANGG*3437.746770
   CGRA=ANGG*57.295779
   IGRA=CGRA
   ESTO=IGRA*60
   IRES3=CMIN-ESTO
   ARRE=IRES3*60
   CARBE=ESTO*60
   CSEG=CSEG-(CARBE+ARRE)
   IF(CSEG=60.) 85,82,82
82 CSEG=CSEG*60.
   IRES3=IRES3+1
85 IF(IRES3=60) 83,84,84
84 IRES3=IRES3*60
   IGRA=IGRA+1
83 CONTINUE
   PRINT45,P,Q,R,IBGHA,IRES2,BSEG,IGRA,IRES3,CSEG
45 FORMAT(3F5.0,2(10X,14,3X,13,4X,F5.2))
   DD 55 JL=1,3
   COMP1(JL)=0

```

```

127
128
129
130
131
132
133
134
135
136
137
139
140
141
142
143
144
145
146
147
148
149
150
151
152
153
154
155
156
157
158

```

```

   COMP3(JL)=0
55 COMP2(JL)=0
   PROD1=0
   PROD2=0
   PROD3=0
   GOT05
103 CONTINUE
   STOP
   END

```

SIST. CUBICO

MATRIZ M*

1.0000000 0.0000000 0.0000000

0.0000000 1.0000000 0.0000000

0.0000000 0.0000000 1.0000000

COORDENADAS AZIMUTALES DE LAS FORMAS MAS FRECUENTES.

SIMBOLOS			FI			RO		
P	Q	R	GRAD	MIN	SEG	GRAD	MIN	SEG
0.	1.	15.	0	0	0.00	3	48	50.67
0.	1.	10.	0	0	0.00	5	42	38.14
0.	1.	8.	0	0	0.00	7	7	30.06
0.	1.	7.	0	0	0.00	8	7	48.37
0.	1.	6.	0	0	0.00	9	27	44.36
0.	1.	5.	0	0	0.00	11	18	35.76
0.	2.	9.	0	0	0.00	12	31	43.71
0.	1.	4.	0	0	0.00	14	2	10.48
0.	7.	2.	0	0	0.00	74	3	16.57
0.	3.	10.	0	0	0.00	16	41	57.28
0.	1.	3.	0	0	0.00	18	26	5.82
0.	2.	5.	0	0	0.00	21	48	5.07
0.	3.	7.	0	0	0.00	23	11	54.93
0.	4.	9.	0	0	0.00	23	57	44.96
0.	1.	2.	0	0	0.00	26	33	54.18
0.	5.	9.	0	0	0.00	29	3	16.57
0.	4.	7.	0	0	0.00	29	44	41.57
0.	3.	5.	0	0	0.00	30	57	49.52
0.	2.	3.	0	0	0.00	33	41	24.24
0.	5.	7.	0	0	0.00	35	32	15.64
0.	3.	4.	0	0	0.00	36	52	11.63
0.	4.	5.	0	0	0.00	38	39	35.31
0.	5.	6.	0	0	0.00	39	48	20.06
0.	7.	8.	0	0	0.00	41	11	9.33
0.	1.	1.	0	0	0.00	44	59	60.00
1.	10.	18.	5	42	38.14	29	10	32.80
1.	8.	8.	7	7	30.06	45	13	19.48
1.	7.	9.	8	7	48.37	38	9	20.90
1.	7.	7.	8	7	48.37	45	17	21.76
1.	6.	12.	9	27	44.36	26	52	49.11
1.	6.	11.	9	27	44.36	28	56	29.93
1.	6.	10.	9	27	44.36	31	18	40.16
1.	6.	6.	9	27	44.36	45	23	32.82
1.	5.	10.	11	18	35.76	27	1	1.64
1.	5.	8.	11	18	35.76	32	30	45.06
1.	5.	7.	11	18	35.76	36	4	14.77
1.	5.	6.	11	18	35.76	40	21	32.76

1.	5.	5.	11	18	35.76	45	33	42.33
1.	4.	8.	14	2	10.48	27	15	57.76
1.	4.	5.	14	2	10.48	39	30	34.96
1.	4.	4.	14	2	10.48	45	52	5.70
2.	7.	7.	15	56	43.43	46	7	25.45
1.	3.	8.	18	26	5.82	21	34	5.27
1.	3.	7.	18	26	5.82	24	18	40.54
1.	3.	6.	18	26	5.82	27	47	28.70
1.	3.	5.	18	26	5.82	32	18	41.52
2.	6.	9.	18	26	5.82	35	5	48.48
1.	3.	4.	18	26	5.82	38	19	43.75
1.	3.	3.	18	26	5.82	46	30	30.53
2.	5.	11.	21	48	5.07	26	5	4.35
2.	5.	10.	21	48	5.07	28	18	11.51
2.	5.	5.	21	48	5.07	47	7	26.44
3.	7.	10.	23	11	54.93	37	17	31.47
1.	2.	8.	26	33	54.18	15	36	58.07
1.	2.	7.	26	33	54.18	17	42	55.70
1.	2.	5.	26	33	54.18	24	5	41.43
2.	4.	9.	26	33	54.18	26	25	22.67
1.	2.	4.	26	33	54.18	29	12	21.36
5.	10.	18.	26	33	54.18	31	50	44.36
2.	4.	7.	26	33	54.18	32	34	24.80
1.	2.	3.	26	33	54.18	36	41	57.21
2.	4.	5.	26	33	54.18	41	48	37.13
1.	2.	2.	26	33	54.18	48	11	22.87
4.	7.	7.	29	44	41.57	49	2	2.67
3.	5.	11.	30	57	49.52	27	55	38.86
3.	5.	10.	30	57	49.52	30	14	46.52
3.	5.	8.	30	57	49.52	36	5	13.73
3.	5.	7.	30	57	49.52	39	47	38.64
3.	5.	5.	30	57	49.52	49	23	13.72
2.	3.	12.	33	41	24.24	16	43	24.81
2.	3.	9.	33	41	24.24	21	49	54.73
2.	3.	8.	33	41	24.24	24	15	38.88
2.	3.	7.	33	41	24.24	27	15	7.32
2.	3.	6.	33	41	24.24	31	0	9.79
2.	3.	5.	33	41	24.24	35	47	44.74
2.	3.	4.	33	41	24.24	42	1	52.01
4.	6.	7.	33	41	24.24	45	51	3.79
2.	3.	3.	33	41	24.24	50	14	16.23
5.	7.	8.	35	32	15.64	47	4	39.92
3.	4.	10.	36	52	11.63	26	33	54.18
3.	4.	6.	36	52	11.63	39	48	20.06
3.	4.	5.	36	52	11.63	44	59	60.00
6.	8.	9.	36	52	11.63	48	0	46.03
3.	4.	4.	36	52	11.63	51	20	24.69
4.	5.	8.	38	39	35.31	38	40	24.42
4.	5.	6.	38	39	35.31	46	51	41.62
4.	5.	5.	38	39	35.31	52	0	53.40
10.	12.	13.	39	48	20.06	50	13	53.14
1.	1.	12.	44	59	60.00	6	43	16.93
1.	1.	11.	44	59	60.00	7	19	33.73
1.	1.	10.	44	59	60.00	8	2	58.08
1.	1.	9.	44	59	60.00	8	55	48.51
1.	1.	8.	44	59	60.00	10	1	29.96
1.	1.	7.	44	59	60.00	11	25	18.31
1.	1.	6.	44	59	60.00	13	15	45.63
1.	1.	5.	44	59	60.00	15	47	35.41
2.	2.	9.	44	59	60.00	17	26	46.87
1.	1.	4.	44	59	60.00	19	28	16.39

2.	2.	7.	44	59	60.00	22	0	6.17
1.	1.	3.	44	59	60.00	25	14	21.85
3.	3.	8.	44	59	60.00	27	56	18.07
2.	2.	5.	44	59	60.00	29	29	46.35
3.	3.	7.	44	59	60.00	31	13	10.91
1.	1.	2.	44	59	60.00	35	15	51.80
4.	4.	7.	44	59	60.00	38	56	32.79
3.	3.	5.	44	59	60.00	40	18	55.95
2.	2.	3.	44	59	60.00	43	18	49.88
3.	3.	4.	44	59	60.00	46	41	10.12
5.	5.	6.	44	59	60.00	49	41	4.05
1.	1.	1.	44	59	60.00	54	44	8.20

COORDENADAS AZIMUTALES DE LAS FORMAS MAS FRECUENTES.

SIMBOLOS			FI			RO		
P	Q	R	GRAD	MIN	SEG	GRAD	MIN	SEG
11.	10.	0.	1	34	29.38	89	59	60.00
10.	9.	0.	1	44	25.81	89	59	60.00
9.	8.	0.	1	56	42.43	89	59	60.00
8.	7.	0.	2	12	15.22	89	59	60.00
7.	6.	0.	2	32	34.53	89	59	60.00
6.	5.	0.	3	0	16.17	89	59	60.00
11.	9.	0.	3	18	15.50	89	59	60.00
5.	4.	0.	3	40	13.79	89	59	60.00
9.	7.	0.	4	7	40.12	89	59	60.00
4.	3.	0.	4	42	54.01	89	59	60.00
11.	8.	0.	5	12	31.39	89	59	60.00
7.	5.	0.	5	29	46.92	89	59	60.00
10.	7.	0.	5	49	3.09	89	59	60.00
3.	2.	0.	6	35	12.39	89	59	60.00
11.	7.	0.	7	18	40.00	89	59	60.00
8.	5.	0.	7	35	20.72	89	59	60.00
5.	3.	0.	8	12	47.56	89	59	60.00
7.	4.	0.	8	56	53.79	89	59	60.00
9.	5.	0.	9	22	1.20	89	59	60.00
11.	6.	0.	9	38	14.65	89	59	60.00
2.	1.	0.	10	53	36.22	89	59	60.00
11.	5.	0.	12	12	58.86	89	59	60.00
9.	4.	0.	12	31	11.39	89	59	60.00
7.	3.	0.	13	0	14.08	89	59	60.00
5.	2.	0.	13	53	52.39	89	59	60.00
8.	3.	0.	14	42	16.76	89	59	60.00
11.	4.	0.	15	4	44.90	89	59	60.00
3.	1.	0.	16	6	7.61	89	59	60.00
10.	3.	0.	17	16	10.10	89	59	60.00
7.	2.	0.	17	47	1.14	89	59	60.00
11.	3.	0.	18	15	30.49	89	59	60.00
4.	1.	0.	19	6	23.78	89	59	60.00
9.	2.	0.	20	10	24.85	89	59	60.00
5.	1.	0.	21	3	6.21	89	59	60.00
11.	2.	0.	21	47	12.44	89	59	60.00
6.	1.	0.	22	24	39.28	89	59	60.00
7.	1.	0.	23	24	47.61	89	59	60.00
8.	1.	0.	24	10	56.91	89	59	60.00
9.	1.	0.	24	47	28.61	89	59	60.00
10.	1.	0.	25	17	5.99	89	59	60.00
11.	1.	0.	25	41	36.17	89	59	60.00

COORDENADAS AZIMUTALES DE LAS FORMAS MAS FRECUENTES.

SIMBOLOS			FI			RO		
P	Q	R	GRAD	MIN	SEG	GRAD	MIN	SEG
1.	11.	0.	5	11	39.94	89	59	60.00
1.	10.	0.	5	42	38.14	89	59	60.00
1.	9.	0.	6	20	24.69	89	59	60.00
1.	8.	0.	7	7	30.06	89	59	60.00
1.	7.	0.	8	7	48.37	89	59	60.00
1.	6.	0.	9	27	44.36	89	59	60.00
2.	11.	0.	10	18	17.45	89	59	60.00
1.	5.	0.	11	18	35.76	89	59	60.00
2.	9.	0.	12	31	43.71	89	59	60.00
1.	4.	0.	14	2	10.48	89	59	60.00
3.	11.	0.	15	15	18.43	89	59	60.00
2.	7.	0.	15	56	43.43	89	59	60.00
3.	10.	0.	16	41	57.28	89	59	60.00
1.	3.	0.	18	26	5.82	89	59	60.00
4.	11.	0.	19	58	59.18	89	59	60.00
3.	8.	0.	20	33	21.76	89	59	60.00
2.	5.	0.	21	48	5.07	89	59	60.00
3.	7.	0.	23	11	54.93	89	59	60.00
4.	9.	0.	23	57	44.96	89	59	60.00
5.	11.	0.	24	26	38.24	89	59	60.00
1.	2.	0.	26	33	54.18	89	59	60.00
6.	11.	0.	28	36	37.65	89	59	60.00
5.	9.	0.	29	3	16.57	89	59	60.00
4.	7.	0.	29	44	41.57	89	59	60.00
3.	5.	0.	30	57	49.52	89	59	60.00
5.	8.	0.	32	0	19.38	89	59	60.00
7.	11.	0.	32	28	16.29	89	59	60.00
2.	3.	0.	33	41	24.24	89	59	60.00
7.	10.	0.	34	59	31.27	89	59	60.00
5.	7.	0.	35	32	15.64	89	59	60.00
8.	11.	0.	36	1	38.54	89	59	60.00
3.	4.	0.	36	52	11.63	89	59	60.00
7.	9.	0.	37	52	29.94	89	59	60.00
4.	5.	0.	38	39	35.31	89	59	60.00
9.	11.	0.	39	17	21.86	89	59	60.00
5.	6.	0.	39	48	20.06	89	59	60.00
6.	7.	0.	40	36	4.66	89	59	60.00
7.	8.	0.	41	11	9.33	89	59	60.00
8.	9.	0.	41	38	0.74	89	59	60.00
9.	10.	0.	41	59	13.96	89	59	60.00
10.	11.	0.	42	16	25.28	89	59	60.00
1.	1.	0.	44	59	60.00	89	59	60.00

CALCULO CRISTALOGRAFICO
PROGRAMAS PARA COMPUTADORA ELECTRONICA
FORTRAN

Progr. 27

Francisco José FABREGAT GUINCHARD
Ricardo ESQUIVEL ESPARZA

CALCULO CRISTALOGRAFICO
PROGRAMAS PARA COMPUTADORA ELECTRONICA BURROUGHS 5500
FORTRAN

PROGRAMA PARA TABLAS DE DOBLE ENTRADA
APLICACION:
TRASLACION EN DIAGRAMAS DE CRISTAL GIRATORIO

En el caso concreto de aplicación que se propone, el programa tiene por objeto automatizar el cálculo de la traslación reticular directa según el eje de giro, a partir de un diagrama de cristal rotatorio.

Se supone el empleo de anticátodo de CuK ($\lambda = 1.54178$), radiación filtrada (por Ni). Cámara R = 28.648 mm, que es el del cilindro de la cámara de Weissenberg, utilizada generalmente para estos diagramas. En caso de variar estas dos constantes, se habrían de cambiar las tarjetas correspondientes del programa.

El cálculo se basa en la ecuación conocida de

$$t = \frac{n\lambda}{\text{sen arc tg}(y/r)}$$

y los resultados aparecen tabulados para y (en milímetros y décimas) en 5 columnas correspondientes a los 5 primeros niveles.

Con ayuda de la tabla resultante se construyó la gráfica de la figura adjunta, que interesa las dimensiones reticulares de la mayoría de los minerales.

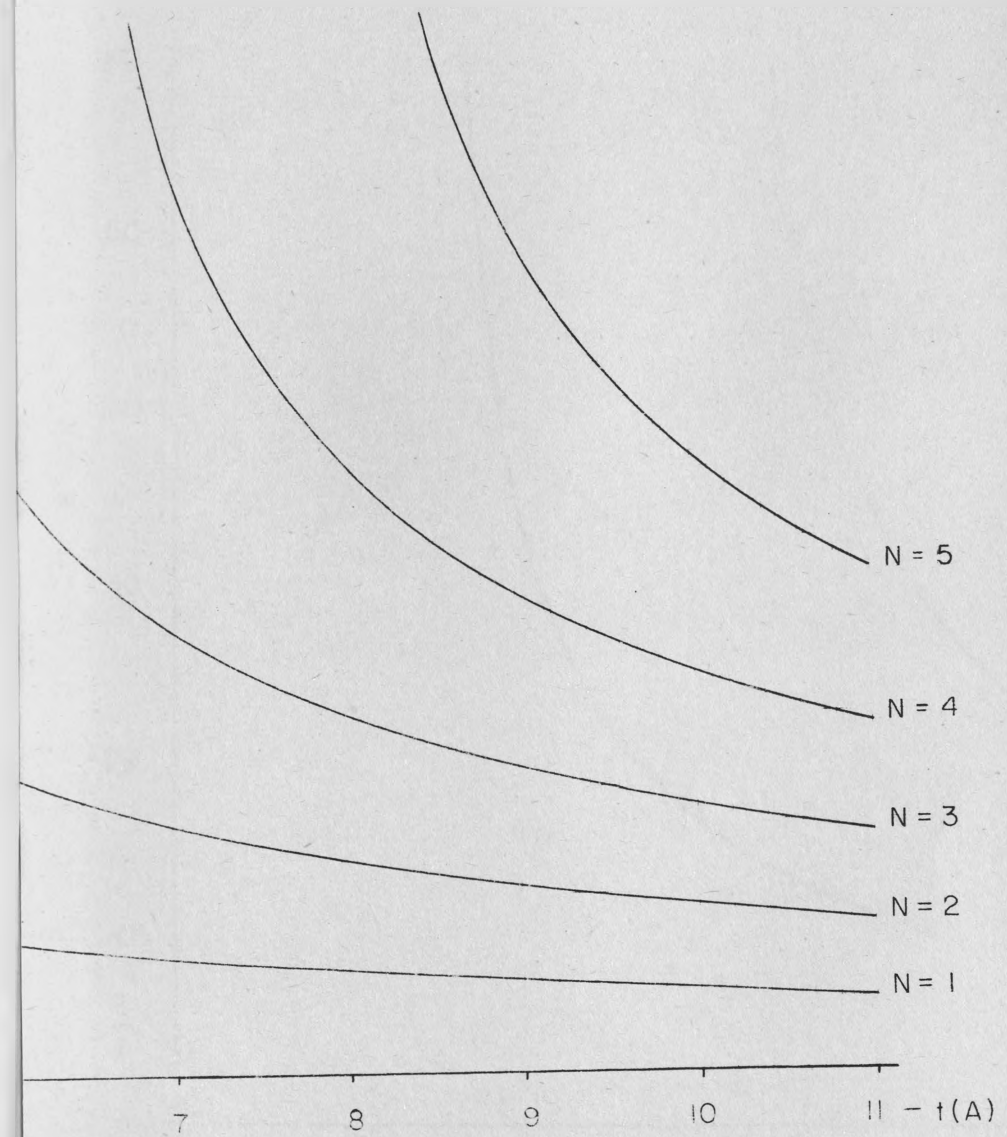
Variaciones: Si se desearan más columnas en la tabla, en vez de 5, se habría de corregir el valor de la dimensión T(5).

Cuando los valores de la primera columna se desearan variables en unidades enteras, se pondrían M=0 y M=M+1 en vez de las tarjetas P=0 y P=P+1 respectivamente.

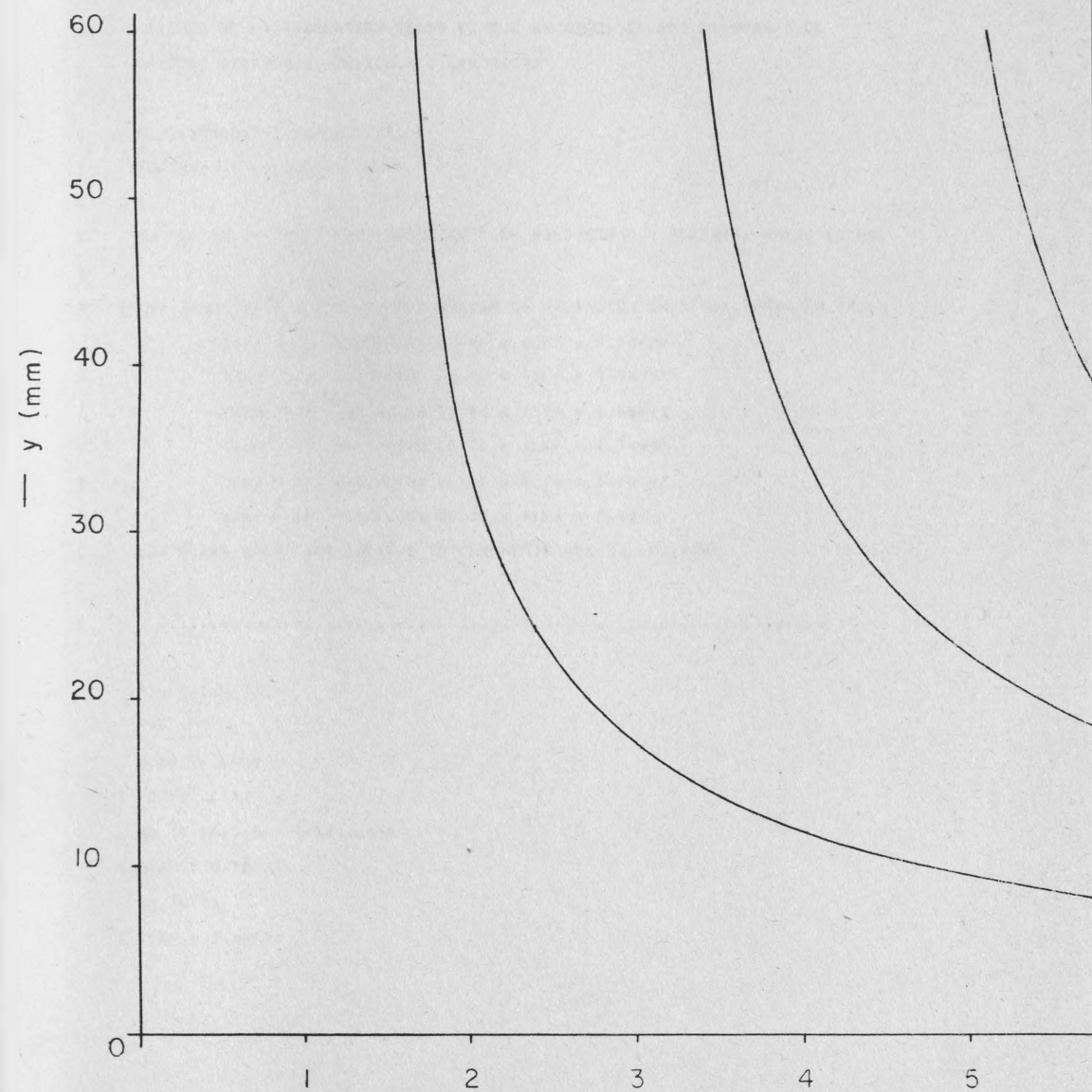
Etc.

CAMARA CILINDRICA R=28.648 mm

CuK α . $\lambda=1.54178$ Filtro Ni



TRASLACION $t(A)$ EN DIAGRAMAS DE CRISTAL GIRATORIO



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

```

C   CALCULO CRISTALOGRAFICO
C   PROGRAMA 27
C   CALCULO DE LA TRASLACION SEGUN EL EJE DE GIRO, EN LOS DIAGRAMAS DE
C   CRISTAL GIRATORIO. PELICULA CILINDRICA.
C
C   F.J.FABREGAT Y R. ESQUIVEL E
C   FORTRAN - BURROUGHS 5500
C
C   CALCULASE LA TABLA EN FUNCION DE Y EN MILIMETROS Y DECIMAS, HASTA 60 MM.
C
C   UNICA TARJETA DE DATOS, PARA INDICAR LA RADIACION EMPLEADA, (FORMATO I4).
C       LAMB = 1, RADIACION DE MO K ALFA = 0.70926
C       LAMB = 2, RADIACION DE CU K ALFA = 1.54050
C       LAMB = 3, RADIACION DE NI K ALFA = 1.65783
C       LAMB = 4, RADIACION DE CO K ALFA = 1.78890
C       LAMB = 5, RADIACION DE FE K ALFA = 1.93597
C       LAMB = 6, RADIACION DE CR K ALFA = 2.28962
C   LOS DEMAS DATOS SON CREADOS INTERNAMENTE POR EL PROGRAMA
C
C   .....

```

DIMENSION T(5)

P=0

READ 9, LAMB

9 FORMAT (I4)

GO TO (4,5,6,7,8,15), LAMB

4 ALAM = 0.70926

GO TO 16

5 ALAM = 1.54050

```

GO TO 16
6 ALAM = 1.65783
GO TO 16
7 ALAM = 1.78890
GO TO 16
8 ALAM = 1.9359.
GO TO 16
15 ALAM = 2.28962
16 R=28.648
PRINT 10
10 FORMAT (19X,31H DIAGRAMAS DE CRISTAL GIRATORIU/)
PRINT 17, ALAM
17 FORMAT (" RADIACION DE ",F8.5," A. - CAMARA DE 57.3 MM DE DIAMET
1RO.",/)
PRINT 11
11 FORMAT (4X,51H TRASLACION T(A) EN FUNCION DE Y(MM) PARA 5 NIVELES/
1)
PRINT 12
12 FORMAT(4X,39H Y(MM)                T (ANGSTROMS))
PRINT 13
13 FORMAT(10X,50H N= 1      2      3      4      5  )
PRINT 14
14 FORMAT(4X,56H -----  -----  -----  -----  -----
1---/)
DO 1 J=1,600
P=P+.1
N=0
DO 2 I=1,5
N=N+1
T(I)=N *ALAM/SIN(ATAN(P/R))
2 CONTINUE

```

```

PRINT 3,(P,(T(L),L=1,5))
3 FORMAT(5X,F5.1,5(3X,F7.3))
1 CONTINUE
STOP
END

```

DIAGRAMAS DE CRISTAL GIRATORIO

RADIACION DE 1.54050 Å. - CAMARA DE 57.3 MM DE DIAMETRO.

TRASLACION T(Å) EN FUNCIÓN DE Y(MM) PARA 5 NIVELES

Y(MM)	N=	1	2	3	4	5
-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
0.1	441.325	882.650	*****	*****	*****	*****
0.2	220.667	441.333	662.000	882.666	*****	*****
0.3	147.116	294.231	441.347	588.462	735.578	*****
0.4	110.341	220.683	331.024	441.365	551.707	*****
0.5	88.278	176.556	264.834	353.112	441.390	*****
0.6	73.570	147.140	220.710	294.279	367.849	*****
0.7	63.065	126.130	189.195	252.260	315.324	*****
0.8	55.187	110.374	165.560	220.747	275.934	*****
0.9	49.060	98.120	147.180	196.240	245.300	*****
1.0	44.159	88.318	132.477	176.636	220.796	*****
1.1	40.150	80.300	120.449	160.599	200.749	*****
1.2	36.809	73.618	110.427	147.236	184.046	*****
1.3	33.983	67.966	101.948	135.931	169.914	*****
1.4	31.561	63.121	94.682	126.243	157.803	*****
1.5	29.462	58.924	88.385	117.847	147.309	*****
1.6	27.626	55.251	82.877	110.503	138.128	*****
1.7	26.006	52.012	78.017	104.023	130.029	*****
1.8	24.566	49.133	73.699	98.265	122.831	*****
1.9	23.279	46.557	69.836	93.114	116.393	*****
2.0	22.120	44.240	66.359	88.479	110.599	*****
2.1	21.072	42.143	63.215	84.287	105.359	*****
2.2	20.119	40.238	60.358	80.477	100.596	*****
2.3	19.250	38.492	57.749	76.999	96.248	*****
2.4	18.453	36.906	55.359	73.811	92.264	*****
2.5	17.720	35.440	53.160	70.890	88.600	*****
2.6	17.044	34.087	51.131	68.175	85.219	*****
2.7	16.418	32.835	49.253	65.671	82.089	*****
2.8	15.837	31.673	47.510	63.346	79.183	*****
2.9	15.296	30.592	45.887	61.183	76.479	*****
3.0	14.791	29.582	44.374	59.165	73.956	*****
3.1	14.319	28.639	42.958	57.277	71.597	*****
3.2	13.877	27.754	41.631	55.508	69.385	*****
3.3	13.462	26.924	40.386	53.847	67.309	*****
3.4	13.071	26.142	39.214	52.285	65.356	*****
3.5	12.703	25.406	38.109	50.812	63.515	*****
3.6	12.355	24.711	37.066	49.421	61.777	*****
3.7	12.027	24.053	36.080	48.107	60.134	*****
3.8	11.715	23.431	35.146	46.862	58.577	*****
3.9	11.420	22.841	34.261	45.681	57.102	*****
4.0	11.140	22.290	33.420	44.560	55.700	*****
4.1	10.874	21.747	32.621	43.495	54.368	*****
4.2	10.620	21.240	31.860	42.480	53.100	*****
4.3	10.378	20.757	31.135	41.513	51.891	*****
4.4	10.148	20.295	30.443	40.591	50.738	*****
4.5	9.927	19.855	29.782	39.710	49.637	*****
4.6	9.717	19.434	29.151	38.867	48.584	*****
4.7	9.515	19.031	28.546	38.061	47.577	*****
4.8	9.322	18.645	27.967	37.290	46.612	*****
4.9	9.137	18.275	27.412	36.550	45.687	*****
5.0	8.960	17.920	26.880	35.839	44.799	*****

5.1	8.789	17.579	26.368	35.158	43.947
5.2	8.626	17.251	25.877	34.503	43.128
5.3	8.468	16.936	25.404	33.873	42.341
5.4	8.317	16.633	24.950	33.266	41.583
5.5	8.171	16.341	24.512	32.682	40.853
5.6	8.030	16.060	24.090	32.120	40.150
5.7	7.894	15.789	23.683	31.577	39.471
5.8	7.763	15.527	23.290	31.054	38.817
5.9	7.637	15.274	22.911	30.548	38.185
6.0	7.515	15.030	22.545	30.060	37.575
6.1	7.397	14.794	22.191	29.588	36.985
6.2	7.283	14.566	21.849	29.132	36.414
6.3	7.173	14.345	21.518	28.690	35.863
6.4	7.066	14.131	21.197	28.263	35.328
6.5	6.962	13.924	20.886	27.849	34.811
6.6	6.862	13.724	20.586	27.447	34.309
6.7	6.765	13.529	20.294	27.059	33.823
6.8	6.670	13.341	20.011	26.681	33.352
6.9	6.579	13.158	19.737	26.316	32.894
7.0	6.490	12.980	19.470	25.960	32.450
7.1	6.404	12.808	19.212	25.615	32.019
7.2	6.320	12.640	18.960	25.280	31.600
7.3	6.239	12.477	18.716	24.955	31.193
7.4	6.160	12.319	18.479	24.638	30.798
7.5	6.083	12.165	18.248	24.330	30.413
7.6	6.008	12.015	18.023	24.031	30.039
7.7	5.935	11.870	17.805	23.740	29.674
7.8	5.864	11.728	17.592	23.456	29.320
7.9	5.795	11.590	17.385	23.179	28.974
8.0	5.728	11.455	17.183	22.910	28.638
8.1	5.662	11.324	16.986	22.648	28.310
8.2	5.598	11.196	16.794	22.392	27.991
8.3	5.536	11.072	16.607	22.143	27.679
8.4	5.475	10.950	16.425	21.900	27.375
8.5	5.416	10.831	16.247	21.663	27.079
8.6	5.358	10.716	16.074	21.432	26.789
8.7	5.301	10.603	15.904	21.206	26.507
8.8	5.246	10.493	15.739	20.985	26.231
8.9	5.192	10.385	15.577	20.770	25.962
9.0	5.140	10.280	15.420	20.559	25.699
9.1	5.088	10.177	15.265	20.354	25.442
9.2	5.038	10.077	15.115	20.153	25.191
9.3	4.989	9.976	14.968	19.957	24.946
9.4	4.941	9.882	14.824	19.765	24.706
9.5	4.894	9.789	14.683	19.577	24.471
9.6	4.848	9.697	14.545	19.393	24.242
9.7	4.803	9.607	14.410	19.214	24.017
9.8	4.759	9.519	14.278	19.038	23.797
9.9	4.716	9.433	14.149	18.866	23.582
10.0	4.674	9.349	14.023	18.697	23.372
10.1	4.633	9.266	13.899	18.533	23.166
10.2	4.593	9.186	13.778	18.371	22.964
10.3	4.553	9.106	13.660	18.213	22.766
10.4	4.514	9.029	13.543	18.058	22.572
10.5	4.476	8.953	13.429	17.906	22.382
10.6	4.439	8.879	13.318	17.757	22.196
10.7	4.403	8.806	13.208	17.611	22.014
10.8	4.367	8.734	13.101	17.468	21.835
10.9	4.332	8.664	12.996	17.328	21.660
11.0	4.298	8.595	12.893	17.190	21.488
11.1	4.264	8.523	12.792	17.056	21.319

11.2	4.231	8.462	12.692	16.923	21.154
11.3	4.198	8.397	12.595	16.793	20.992
11.4	4.166	8.333	12.499	16.666	20.832
11.5	4.135	8.270	12.406	16.541	20.676
11.6	4.105	8.209	12.314	16.418	20.523
11.7	4.074	8.149	12.223	16.298	20.372
11.8	4.045	8.090	12.135	16.179	20.224
11.9	4.016	8.032	12.047	16.063	20.079
12.0	3.987	7.975	11.962	15.949	19.936
12.1	3.959	7.919	11.878	15.837	19.796
12.2	3.932	7.864	11.795	15.727	19.659
12.3	3.905	7.809	11.714	15.619	19.524
12.4	3.878	7.756	11.634	15.513	19.391
12.5	3.852	7.704	11.556	15.408	19.260
12.6	3.826	7.653	11.479	15.305	19.132
12.7	3.801	7.602	11.403	15.205	19.006
12.8	3.776	7.553	11.329	15.105	18.882
12.9	3.752	7.504	11.256	15.008	18.760
13.0	3.728	7.456	11.184	14.912	18.640
13.1	3.704	7.409	11.113	14.818	18.522
13.2	3.681	7.362	11.044	14.725	18.406
13.3	3.658	7.317	10.975	14.633	18.292
13.4	3.636	7.272	10.908	14.544	18.180
13.5	3.614	7.228	10.842	14.455	18.069
13.6	3.592	7.184	10.776	14.368	17.961
13.7	3.571	7.141	10.712	14.283	17.854
13.8	3.550	7.099	10.649	14.199	17.748
13.9	3.529	7.058	10.587	14.116	17.645
14.0	3.509	7.017	10.526	14.034	17.543
14.1	3.489	6.977	10.466	13.954	17.443
14.2	3.469	6.937	10.406	13.875	17.344
14.3	3.449	6.899	10.348	13.797	17.246
14.4	3.430	6.860	10.290	13.721	17.151
14.5	3.411	6.823	10.234	13.645	17.056
14.6	3.393	6.785	10.178	13.571	16.963
14.7	3.374	6.749	10.123	13.497	16.872
14.8	3.356	6.713	10.069	13.425	16.782
14.9	3.339	6.677	10.016	13.354	16.693
15.0	3.321	6.642	9.963	13.284	16.605
15.1	3.304	6.608	9.911	13.215	16.519
15.2	3.287	6.574	9.860	13.147	16.434
15.3	3.270	6.540	9.810	13.080	16.350
15.4	3.254	6.507	9.761	13.014	16.268
15.5	3.237	6.475	9.712	12.949	16.186
15.6	3.221	6.442	9.664	12.885	16.106
15.7	3.205	6.411	9.616	12.822	16.027
15.8	3.190	6.380	9.569	12.759	15.949
15.9	3.174	6.349	9.523	12.698	15.872
16.0	3.159	6.319	9.478	12.637	15.796
16.1	3.144	6.289	9.433	12.577	15.722
16.2	3.130	6.259	9.389	12.518	15.648
16.3	3.115	6.230	9.345	12.460	15.575
16.4	3.101	6.201	9.302	12.403	15.504
16.5	3.087	6.173	9.260	12.346	15.433
16.6	3.073	6.145	9.218	12.291	15.363
16.7	3.059	6.118	9.177	12.236	15.294
16.8	3.045	6.091	9.136	12.181	15.226
16.9	3.032	6.064	9.096	12.128	15.160
17.0	3.019	6.037	9.056	12.075	15.093
17.1	3.006	6.011	9.017	12.023	15.028
17.2	2.993	5.986	8.978	11.971	14.964

17.3	2.980	5.960	8.940	11.920	14.900
17.4	2.968	5.935	8.903	11.870	14.838
17.5	2.955	5.910	8.865	11.821	14.776
17.6	2.943	5.886	8.829	11.772	14.715
17.7	2.931	5.862	8.793	11.723	14.654
17.8	2.919	5.838	8.757	11.676	14.595
17.9	2.907	5.814	8.722	11.629	14.536
18.0	2.896	5.791	8.687	11.582	14.478
18.1	2.884	5.768	8.652	11.537	14.421
18.2	2.873	5.746	8.618	11.491	14.364
18.3	2.862	5.723	8.585	11.447	14.308
18.4	2.851	5.701	8.552	11.402	14.253
18.5	2.840	5.679	8.519	11.359	14.198
18.6	2.829	5.658	8.487	11.316	14.145
18.7	2.818	5.637	8.455	11.273	14.091
18.8	2.808	5.616	8.423	11.231	14.039
18.9	2.797	5.595	8.392	11.190	13.987
19.0	2.787	5.574	8.362	11.149	13.936
19.1	2.777	5.554	8.331	11.108	13.885
19.2	2.767	5.534	8.301	11.068	13.835
19.3	2.757	5.514	8.271	11.029	13.786
19.4	2.747	5.495	8.242	10.990	13.737
19.5	2.738	5.475	8.213	10.951	13.689
19.6	2.728	5.456	8.185	10.913	13.641
19.7	2.719	5.438	8.156	10.875	13.594
19.8	2.709	5.419	8.128	10.838	13.547
19.9	2.700	5.400	8.101	10.801	13.501
20.0	2.691	5.382	8.073	10.765	13.456
20.1	2.682	5.364	8.046	10.729	13.411
20.2	2.673	5.347	8.020	10.693	13.366
20.3	2.664	5.329	7.993	10.658	13.322
20.4	2.656	5.312	7.967	10.623	13.279
20.5	2.647	5.294	7.942	10.589	13.236
20.6	2.639	5.277	7.916	10.555	13.194
20.7	2.630	5.261	7.891	10.521	13.152
20.8	2.622	5.244	7.866	10.488	13.110
20.9	2.614	5.228	7.841	10.455	13.069
21.0	2.606	5.211	7.817	10.423	13.028
21.1	2.598	5.195	7.793	10.391	12.988
21.2	2.590	5.179	7.769	10.359	12.949
21.3	2.582	5.164	7.746	10.327	12.909
21.4	2.574	5.148	7.722	10.296	12.871
21.5	2.566	5.133	7.699	10.266	12.832
21.6	2.559	5.118	7.677	10.235	12.794
21.7	2.551	5.103	7.654	10.205	12.757
21.8	2.544	5.088	7.632	10.176	12.719
21.9	2.537	5.073	7.610	10.146	12.683
22.0	2.529	5.059	7.588	10.117	12.646
22.1	2.522	5.044	7.566	10.088	12.610
22.2	2.515	5.030	7.545	10.060	12.575
22.3	2.508	5.016	7.524	10.032	12.540
22.4	2.501	5.002	7.503	10.004	12.505
22.5	2.494	4.988	7.482	9.976	12.470
22.6	2.487	4.974	7.462	9.949	12.436
22.7	2.480	4.961	7.441	9.922	12.402
22.8	2.474	4.948	7.421	9.895	12.369
22.9	2.467	4.934	7.402	9.869	12.336
23.0	2.461	4.921	7.382	9.843	12.303
23.1	2.454	4.908	7.363	9.817	12.271
23.2	2.448	4.896	7.343	9.791	12.239
23.3	2.441	4.883	7.324	9.766	12.207

23.4	2.435	4.870	7.306	9.741	12.176
23.5	2.429	4.858	7.287	9.716	12.145
23.6	2.423	4.846	7.268	9.691	12.114
23.7	2.417	4.833	7.250	9.667	12.084
23.8	2.411	4.821	7.232	9.643	12.054
23.9	2.405	4.810	7.214	9.619	12.024
24.0	2.399	4.798	7.197	9.595	11.994
24.1	2.393	4.786	7.179	9.572	11.965
24.2	2.387	4.774	7.162	9.549	11.936
24.3	2.381	4.763	7.144	9.526	11.907
24.4	2.376	4.752	7.127	9.503	11.879
24.5	2.370	4.740	7.111	9.481	11.851
24.6	2.365	4.729	7.094	9.459	11.823
24.7	2.359	4.718	7.077	9.437	11.796
24.8	2.354	4.707	7.061	9.415	11.768
24.9	2.348	4.697	7.045	9.393	11.741
25.0	2.343	4.686	7.029	9.372	11.715
25.1	2.338	4.675	7.013	9.351	11.688
25.2	2.332	4.665	6.997	9.330	11.662
25.3	2.327	4.654	6.982	9.309	11.636
25.4	2.322	4.644	6.966	9.288	11.610
25.5	2.317	4.634	6.951	9.268	11.585
25.6	2.312	4.624	6.936	9.248	11.560
25.7	2.307	4.614	6.921	9.228	11.535
25.8	2.302	4.604	6.906	9.208	11.510
25.9	2.297	4.594	6.891	9.188	11.485
26.0	2.292	4.584	6.877	9.169	11.461
26.1	2.287	4.575	6.862	9.150	11.437
26.2	2.283	4.565	6.848	9.131	11.413
26.3	2.278	4.556	6.834	9.112	11.390
26.4	2.273	4.546	6.820	9.093	11.366
26.5	2.269	4.537	6.806	9.074	11.343
26.6	2.264	4.528	6.792	9.056	11.320
26.7	2.259	4.519	6.778	9.038	11.297
26.8	2.255	4.510	6.765	9.020	11.275
26.9	2.250	4.501	6.751	9.002	11.252
27.0	2.246	4.492	6.738	8.984	11.230
27.1	2.242	4.483	6.725	8.967	11.208
27.2	2.237	4.475	6.712	8.949	11.187
27.3	2.233	4.466	6.699	8.932	11.165
27.4	2.229	4.458	6.686	8.915	11.144
27.5	2.225	4.449	6.674	8.898	11.123
27.6	2.220	4.441	6.661	8.881	11.102
27.7	2.216	4.432	6.649	8.865	11.081
27.8	2.212	4.424	6.636	8.848	11.060
27.9	2.208	4.416	6.624	8.832	11.040
28.0	2.204	4.408	6.612	8.816	11.020
28.1	2.200	4.400	6.600	8.800	11.000
28.2	2.196	4.392	6.588	8.784	10.980
28.3	2.192	4.384	6.576	8.768	10.960
28.4	2.188	4.376	6.564	8.753	10.941
28.5	2.184	4.369	6.553	8.737	10.921
28.6	2.180	4.361	6.541	8.722	10.902
28.7	2.177	4.353	6.530	8.706	10.883
28.8	2.173	4.346	6.519	8.691	10.864
28.9	2.169	4.338	6.507	8.676	10.846
29.0	2.165	4.331	6.496	8.662	10.827
29.1	2.162	4.323	6.485	8.647	10.809
29.2	2.158	4.316	6.474	8.632	10.791
29.3	2.154	4.309	6.463	8.618	10.772
29.4	2.151	4.302	6.453	8.604	10.755

29.5	2.147	4.295	6.442	8.589	10.737
29.6	2.144	4.288	6.432	8.575	10.719
29.7	2.140	4.281	6.421	8.561	10.702
29.8	2.137	4.274	6.411	8.548	10.685
29.9	2.133	4.267	6.400	8.534	10.667
30.0	2.130	4.260	6.390	8.520	10.650
30.1	2.127	4.253	6.380	8.507	10.633
30.2	2.123	4.247	6.370	8.493	10.617
30.3	2.120	4.240	6.360	8.480	10.600
30.4	2.117	4.233	6.350	8.467	10.584
30.5	2.113	4.227	6.340	8.454	10.567
30.6	2.110	4.221	6.331	8.441	10.551
30.7	2.107	4.214	6.321	8.428	10.535
30.8	2.104	4.208	6.312	8.415	10.519
30.9	2.101	4.201	6.302	8.403	10.504
31.0	2.098	4.195	6.293	8.390	10.488
31.1	2.094	4.189	6.283	8.378	10.472
31.2	2.091	4.183	6.274	8.366	10.457
31.3	2.088	4.177	6.265	8.353	10.442
31.4	2.085	4.171	6.256	8.341	10.427
31.5	2.082	4.165	6.247	8.329	10.412
31.6	2.079	4.159	6.238	8.317	10.397
31.7	2.076	4.153	6.229	8.305	10.382
31.8	2.073	4.147	6.220	8.294	10.367
31.9	2.071	4.141	6.212	8.282	10.353
32.0	2.068	4.135	6.203	8.271	10.338
32.1	2.065	4.130	6.194	8.259	10.324
32.2	2.062	4.124	6.186	8.248	10.310
32.3	2.059	4.118	6.177	8.236	10.296
32.4	2.056	4.113	6.169	8.225	10.282
32.5	2.054	4.107	6.161	8.214	10.268
32.6	2.051	4.102	6.152	8.203	10.254
32.7	2.048	4.096	6.144	8.192	10.240
32.8	2.045	4.091	6.136	8.181	10.227
32.9	2.043	4.085	6.128	8.171	10.213
33.0	2.040	4.080	6.120	8.160	10.200
33.1	2.037	4.075	6.112	8.149	10.187
33.2	2.035	4.069	6.104	8.139	10.174
33.3	2.032	4.064	6.096	8.129	10.161
33.4	2.030	4.059	6.089	8.118	10.148
33.5	2.027	4.054	6.081	8.108	10.135
33.6	2.024	4.049	6.073	8.098	10.122
33.7	2.022	4.044	6.066	8.088	10.110
33.8	2.019	4.039	6.058	8.078	10.097
33.9	2.017	4.034	6.051	8.068	10.085
34.0	2.014	4.029	6.043	8.058	10.072
34.1	2.012	4.024	6.036	8.048	10.060
34.2	2.010	4.019	6.029	8.038	10.048
34.3	2.007	4.014	6.021	8.029	10.036
34.4	2.005	4.009	6.014	8.019	10.024
34.5	2.002	4.005	6.007	8.009	10.012
34.6	2.000	4.000	6.000	8.000	10.000
34.7	1.998	3.995	5.993	7.991	9.988
34.8	1.995	3.991	5.986	7.981	9.977
34.9	1.993	3.986	5.979	7.972	9.965
35.0	1.991	3.981	5.972	7.963	9.954
35.1	1.988	3.977	5.965	7.954	9.942
35.2	1.986	3.972	5.959	7.945	9.931
35.3	1.984	3.968	5.952	7.936	9.920
35.4	1.982	3.964	5.945	7.927	9.909
35.5	1.980	3.959	5.939	7.918	9.898

35.6	1.977	3.955	5.932	7.909	9.887
35.7	1.975	3.950	5.926	7.901	9.876
35.8	1.973	3.946	5.919	7.892	9.865
35.9	1.971	3.942	5.913	7.883	9.854
36.0	1.969	3.937	5.906	7.875	9.844
36.1	1.967	3.933	5.900	7.867	9.833
36.2	1.965	3.929	5.894	7.858	9.823
36.3	1.962	3.925	5.887	7.850	9.812
36.4	1.960	3.921	5.881	7.842	9.802
36.5	1.958	3.917	5.875	7.833	9.792
36.6	1.956	3.913	5.869	7.825	9.781
36.7	1.954	3.909	5.863	7.817	9.771
36.8	1.952	3.905	5.857	7.809	9.761
36.9	1.950	3.901	5.851	7.801	9.751
37.0	1.948	3.897	5.845	7.793	9.741
37.1	1.946	3.893	5.839	7.785	9.732
37.2	1.944	3.889	5.833	7.777	9.722
37.3	1.942	3.885	5.827	7.770	9.712
37.4	1.941	3.881	5.822	7.762	9.703
37.5	1.939	3.877	5.816	7.754	9.693
37.6	1.937	3.873	5.810	7.747	9.683
37.7	1.935	3.870	5.804	7.739	9.674
37.8	1.933	3.866	5.799	7.732	9.665
37.9	1.931	3.862	5.793	7.724	9.655
38.0	1.929	3.858	5.788	7.717	9.646
38.1	1.927	3.855	5.782	7.710	9.637
38.2	1.926	3.851	5.777	7.702	9.628
38.3	1.924	3.848	5.771	7.695	9.619
38.4	1.922	3.844	5.766	7.688	9.610
38.5	1.920	3.840	5.761	7.681	9.601
38.6	1.918	3.837	5.755	7.674	9.592
38.7	1.917	3.833	5.750	7.667	9.583
38.8	1.915	3.830	5.745	7.660	9.575
38.9	1.913	3.826	5.740	7.653	9.566
39.0	1.911	3.823	5.734	7.646	9.557
39.1	1.910	3.819	5.729	7.639	9.549
39.2	1.908	3.816	5.724	7.632	9.540
39.3	1.906	3.813	5.719	7.625	9.532
39.4	1.905	3.809	5.714	7.619	9.523
39.5	1.903	3.806	5.709	7.612	9.515
39.6	1.901	3.803	5.704	7.605	9.507
39.7	1.900	3.799	5.699	7.599	9.499
39.8	1.898	3.796	5.694	7.592	9.490
39.9	1.896	3.793	5.689	7.586	9.482
40.0	1.895	3.790	5.685	7.579	9.474
40.1	1.893	3.786	5.680	7.573	9.466
40.2	1.892	3.783	5.675	7.567	9.458
40.3	1.890	3.780	5.670	7.560	9.450
40.4	1.889	3.777	5.666	7.554	9.443
40.5	1.887	3.774	5.661	7.548	9.435
40.6	1.885	3.771	5.656	7.542	9.427
40.7	1.884	3.768	5.652	7.535	9.419
40.8	1.882	3.765	5.647	7.529	9.412
40.9	1.881	3.762	5.642	7.523	9.404
41.0	1.879	3.759	5.638	7.517	9.397
41.1	1.878	3.756	5.633	7.511	9.389
41.2	1.876	3.753	5.629	7.505	9.382
41.3	1.875	3.750	5.624	7.499	9.374
41.4	1.873	3.747	5.620	7.493	9.367
41.5	1.872	3.744	5.616	7.488	9.360
41.6	1.870	3.741	5.611	7.482	9.352

41.7	1.869	3.738	5.607	7.476	9.345
41.8	1.868	3.735	5.603	7.470	9.338
41.9	1.866	3.732	5.598	7.465	9.331
42.0	1.865	3.729	5.594	7.459	9.324
42.1	1.863	3.727	5.590	7.453	9.317
42.2	1.862	3.724	5.586	7.448	9.310
42.3	1.861	3.721	5.582	7.442	9.303
42.4	1.859	3.718	5.578	7.437	9.296
42.5	1.858	3.716	5.573	7.431	9.289
42.6	1.856	3.713	5.569	7.426	9.282
42.7	1.855	3.710	5.565	7.420	9.275
42.8	1.854	3.707	5.561	7.415	9.269
42.9	1.852	3.705	5.557	7.410	9.262
43.0	1.851	3.702	5.553	7.404	9.255
43.1	1.850	3.700	5.549	7.399	9.249
43.2	1.848	3.697	5.545	7.394	9.242
43.3	1.847	3.694	5.541	7.389	9.236
43.4	1.846	3.692	5.538	7.383	9.229
43.5	1.845	3.689	5.534	7.378	9.223
43.6	1.843	3.687	5.530	7.373	9.216
43.7	1.842	3.684	5.526	7.368	9.210
43.8	1.841	3.682	5.522	7.363	9.204
43.9	1.839	3.679	5.518	7.358	9.197
44.0	1.838	3.676	5.515	7.353	9.191
44.1	1.837	3.674	5.511	7.348	9.185
44.2	1.836	3.672	5.507	7.343	9.179
44.3	1.835	3.669	5.504	7.338	9.173
44.4	1.833	3.667	5.500	7.333	9.167
44.5	1.832	3.664	5.496	7.328	9.161
44.6	1.831	3.662	5.493	7.324	9.155
44.7	1.830	3.659	5.489	7.319	9.149
44.8	1.829	3.657	5.486	7.314	9.143
44.9	1.827	3.655	5.482	7.309	9.137
45.0	1.826	3.652	5.479	7.305	9.131
45.1	1.825	3.650	5.475	7.300	9.125
45.2	1.824	3.648	5.472	7.295	9.119
45.3	1.823	3.645	5.468	7.291	9.114
45.4	1.822	3.643	5.465	7.286	9.108
45.5	1.820	3.641	5.461	7.282	9.102
45.6	1.819	3.639	5.458	7.277	9.096
45.7	1.818	3.636	5.454	7.273	9.091
45.8	1.817	3.634	5.451	7.268	9.085
45.9	1.816	3.632	5.448	7.264	9.080
46.0	1.815	3.630	5.444	7.259	9.074
46.1	1.814	3.627	5.441	7.255	9.069
46.2	1.813	3.625	5.438	7.251	9.063
46.3	1.812	3.623	5.435	7.246	9.058
46.4	1.810	3.621	5.431	7.242	9.052
46.5	1.809	3.619	5.428	7.238	9.047
46.6	1.808	3.617	5.425	7.233	9.042
46.7	1.807	3.615	5.422	7.229	9.036
46.8	1.806	3.612	5.419	7.225	9.031
46.9	1.805	3.610	5.415	7.221	9.026
47.0	1.804	3.608	5.412	7.216	9.021
47.1	1.803	3.606	5.409	7.212	9.015
47.2	1.802	3.604	5.406	7.208	9.010
47.3	1.801	3.602	5.403	7.204	9.005
47.4	1.800	3.600	5.400	7.200	9.000
47.5	1.799	3.598	5.397	7.196	8.995
47.6	1.798	3.596	5.394	7.192	8.990
47.7	1.797	3.594	5.391	7.188	8.985

47.8	1.796	3.592	5.388	7.164	8.920
47.9	1.795	3.590	5.385	7.180	8.915
48.0	1.794	3.588	5.382	7.176	8.910
48.1	1.793	3.586	5.379	7.172	8.905
48.2	1.792	3.584	5.376	7.168	8.900
48.3	1.791	3.582	5.373	7.164	8.895
48.4	1.790	3.580	5.370	7.161	8.891
48.5	1.789	3.578	5.368	7.157	8.886
48.6	1.788	3.576	5.365	7.153	8.881
48.7	1.787	3.575	5.362	7.149	8.876
48.8	1.786	3.573	5.359	7.145	8.872
48.9	1.785	3.571	5.356	7.142	8.867
49.0	1.784	3.569	5.353	7.138	8.862
49.1	1.784	3.567	5.351	7.134	8.858
49.2	1.783	3.565	5.348	7.130	8.853
49.3	1.782	3.563	5.345	7.127	8.849
49.4	1.781	3.562	5.342	7.123	8.844
49.5	1.780	3.560	5.340	7.120	8.839
49.6	1.779	3.558	5.337	7.116	8.835
49.7	1.778	3.556	5.334	7.112	8.830
49.8	1.777	3.554	5.332	7.109	8.826
49.9	1.776	3.553	5.329	7.105	8.822
50.0	1.775	3.551	5.326	7.102	8.818
50.1	1.775	3.549	5.324	7.098	8.814
50.2	1.774	3.547	5.321	7.095	8.810
50.3	1.773	3.546	5.318	7.091	8.806
50.4	1.772	3.544	5.316	7.088	8.802
50.5	1.771	3.542	5.313	7.084	8.798
50.6	1.770	3.541	5.311	7.081	8.794
50.7	1.769	3.539	5.308	7.078	8.790
50.8	1.769	3.537	5.306	7.074	8.786
50.9	1.768	3.535	5.303	7.071	8.782
51.0	1.767	3.534	5.301	7.068	8.778
51.1	1.766	3.532	5.298	7.064	8.774
51.2	1.765	3.531	5.296	7.061	8.770
51.3	1.764	3.529	5.293	7.058	8.766
51.4	1.764	3.527	5.291	7.054	8.762
51.5	1.763	3.526	5.288	7.051	8.758
51.6	1.762	3.524	5.286	7.048	8.754
51.7	1.761	3.522	5.284	7.045	8.750
51.8	1.760	3.521	5.281	7.042	8.746
51.9	1.760	3.519	5.279	7.038	8.742
52.0	1.759	3.518	5.276	7.035	8.738
52.1	1.758	3.516	5.274	7.032	8.734
52.2	1.757	3.514	5.272	7.029	8.730
52.3	1.756	3.513	5.269	7.026	8.726
52.4	1.756	3.511	5.267	7.023	8.722
52.5	1.755	3.510	5.265	7.020	8.718
52.6	1.754	3.508	5.262	7.017	8.714
52.7	1.753	3.507	5.260	7.014	8.710
52.8	1.753	3.505	5.258	7.011	8.706
52.9	1.752	3.504	5.256	7.008	8.702
53.0	1.751	3.502	5.253	7.005	8.698
53.1	1.750	3.501	5.251	7.002	8.694
53.2	1.750	3.499	5.249	6.999	8.690
53.3	1.749	3.498	5.247	6.996	8.686
53.4	1.748	3.496	5.245	6.993	8.682
53.5	1.747	3.495	5.242	6.990	8.678
53.6	1.747	3.493	5.240	6.987	8.674
53.7	1.746	3.492	5.238	6.984	8.670
53.8	1.745	3.491	5.236	6.981	8.666

53.9	1.745	3.489	5.234	6.978	8.723
54.0	1.744	3.488	5.232	6.975	8.719
54.1	1.743	3.486	5.229	6.973	8.716
54.2	1.742	3.485	5.227	6.970	8.712
54.3	1.742	3.484	5.225	6.967	8.709
54.4	1.741	3.482	5.223	6.964	8.705
54.5	1.740	3.481	5.221	6.961	8.702
54.6	1.740	3.479	5.219	6.959	8.698
54.7	1.739	3.478	5.217	6.956	8.695
54.8	1.738	3.477	5.215	6.953	8.692
54.9	1.738	3.475	5.213	6.951	8.688
55.0	1.737	3.474	5.211	6.948	8.685
55.1	1.736	3.473	5.209	6.945	8.681
55.2	1.736	3.471	5.207	6.942	8.678
55.3	1.735	3.470	5.205	6.940	8.675
55.4	1.734	3.469	5.203	6.937	8.671
55.5	1.734	3.467	5.201	6.934	8.668
55.6	1.733	3.466	5.199	6.932	8.665
55.7	1.732	3.465	5.197	6.929	8.662
55.8	1.732	3.463	5.195	6.927	8.658
55.9	1.731	3.462	5.193	6.924	8.655
56.0	1.730	3.461	5.191	6.922	8.652
56.1	1.730	3.459	5.189	6.919	8.649
56.2	1.729	3.458	5.187	6.916	8.646
56.3	1.728	3.457	5.185	6.914	8.642
56.4	1.728	3.456	5.184	6.911	8.639
56.5	1.727	3.454	5.182	6.909	8.636
56.6	1.727	3.453	5.180	6.906	8.633
56.7	1.726	3.452	5.178	6.904	8.630
56.8	1.725	3.451	5.176	6.901	8.627
56.9	1.725	3.449	5.174	6.899	8.624
57.0	1.724	3.448	5.172	6.896	8.621
57.1	1.724	3.447	5.171	6.894	8.618
57.2	1.723	3.446	5.169	6.892	8.615
57.3	1.722	3.445	5.167	6.889	8.612
57.4	1.722	3.443	5.165	6.887	8.609
57.5	1.721	3.442	5.163	6.884	8.606
57.6	1.721	3.441	5.162	6.882	8.603
57.7	1.720	3.440	5.160	6.880	8.600
57.8	1.719	3.439	5.158	6.877	8.597
57.9	1.719	3.438	5.156	6.875	8.594
58.0	1.718	3.436	5.155	6.873	8.591
58.1	1.718	3.435	5.153	6.870	8.588
58.2	1.717	3.434	5.151	6.868	8.585
58.3	1.716	3.433	5.149	6.866	8.582
58.4	1.716	3.432	5.148	6.863	8.579
58.5	1.715	3.431	5.146	6.861	8.577
58.6	1.715	3.429	5.144	6.859	8.574
58.7	1.714	3.428	5.143	6.857	8.571
58.8	1.714	3.427	5.141	6.854	8.568
58.9	1.713	3.426	5.139	6.852	8.565
59.0	1.712	3.425	5.137	6.850	8.562
59.1	1.712	3.424	5.136	6.848	8.560
59.2	1.711	3.423	5.134	6.846	8.557
59.3	1.711	3.422	5.133	6.843	8.554
59.4	1.710	3.421	5.131	6.841	8.552
59.5	1.710	3.420	5.129	6.839	8.549
59.6	1.709	3.418	5.128	6.837	8.546
59.7	1.709	3.417	5.126	6.835	8.543
59.8	1.708	3.416	5.124	6.833	8.541
59.9	1.708	3.415	5.123	6.830	8.538

CALCULO CRISTALOGRAFICO
PROGRAMAS PARA COMPUTADORA ELECTRONICA
FORTRAN

Progr. 28

Francisco José FABREGAT GUINCHARD

CALCULO CRISTALOGRAFICO

PROGRAMAS PARA COMPUTADORA ELECTRONICA BURROUGHS 5500
FORTRANDATOS PARA LA RESOLUCION GRAFICA DE DIAGRAMAS
DE CRISTAL GIRATORIO

En los diagramas de cristal giratorio contrasta la precisión y facilidad con la que pueden apreciarse las traslaciones según el eje de giro, con la dificultad en la numeración de los reflejos que se obtienen por su medio.

En efecto, si bien los niveles se aprecian de un modo nítido no así los reflejos de cada nivel. Estos son muy numerosos y aglomerados, ya que cada nivel resume todos los correspondientes a un plano reticular recíproco del cristal, y aún puede haber superposiciones. Esta dificultad se resuelve al obtener diagramas de oscilación en vez de rotatorios. La proximidad de los reflejos no constituye en principio una dificultad, si se aumenta la precisión en las mediciones y apreciando las distancias dobles ($2x, 2y$ en milímetros) entre manchas simétricas. La radiación suele emplearse filtrada, para eliminar las radiaciones beta; no obstante, estos niveles de reflejos se distinguen perfectamente de los alfa por ser constantemente más cercanos a la línea ecuatorial.

Otras condiciones muy importantes para el éxito en la interpretación gráfica, son la precisión en los cálculos de las cantidades requeridas y la exactitud y magnitud de escala para el trazado. La apreciación de las distancias en milímetros es más fácil y exacta: no así la medición directa de las coordenadas ζ , ξ , mediante la plantilla de Bernal. Una escala de trazado de 100, puede dar una precisión notable a la interpretación.

A partir de las dimensiones directas de la celda elemental, el programa calcula primero las recíprocas y luego la escala de 100 en la que deberán dibujarse. Teniendo en cuenta una esfera de Ewald de 100 mm de radio, se calculan los círculos de reflexión para los diferentes niveles.

$$V = abc \sqrt{1 - (\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma) + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}$$

$$a^* = bc \sin \alpha / V = AR$$

$$b^* = ac \sin \beta / V = BR$$

$$c^* = ab \sin \gamma / V = CR$$

$$\alpha^* = (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) / \sin \beta \sin \gamma$$

$$\beta^* = (\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta) / \sin \alpha \sin \gamma$$

$$\gamma^* = (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) / \sin \alpha \sin \beta$$

y con la escala 100 de trazado,

$$a^* \cdot \lambda \cdot 100 = ARE$$

$$b^* \cdot \lambda \cdot 100 = BRE$$

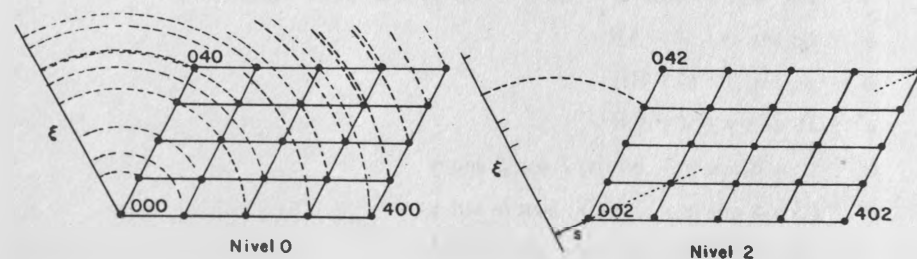
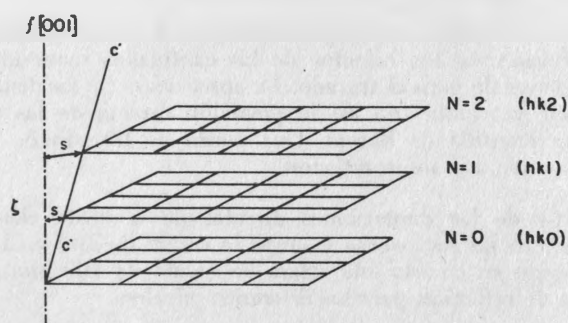
$$c^* \cdot \lambda \cdot 100 = CRE$$

Como el cristal gira con sus planos reticulares perpendiculares al eje de giro, lo hace por lo común en derredor de uno de sus ejes cristalográficos (perpendicular a esa familia de planos); mas en los casos de

- cristales triclinicos,
- monoclinicos, que no sea el eje principal de simetría,
- trigonales, que no sea un eje cristalográfico, el giro es en realidad un subeje de cristal, que se aparta del eje en cierto ángulo.

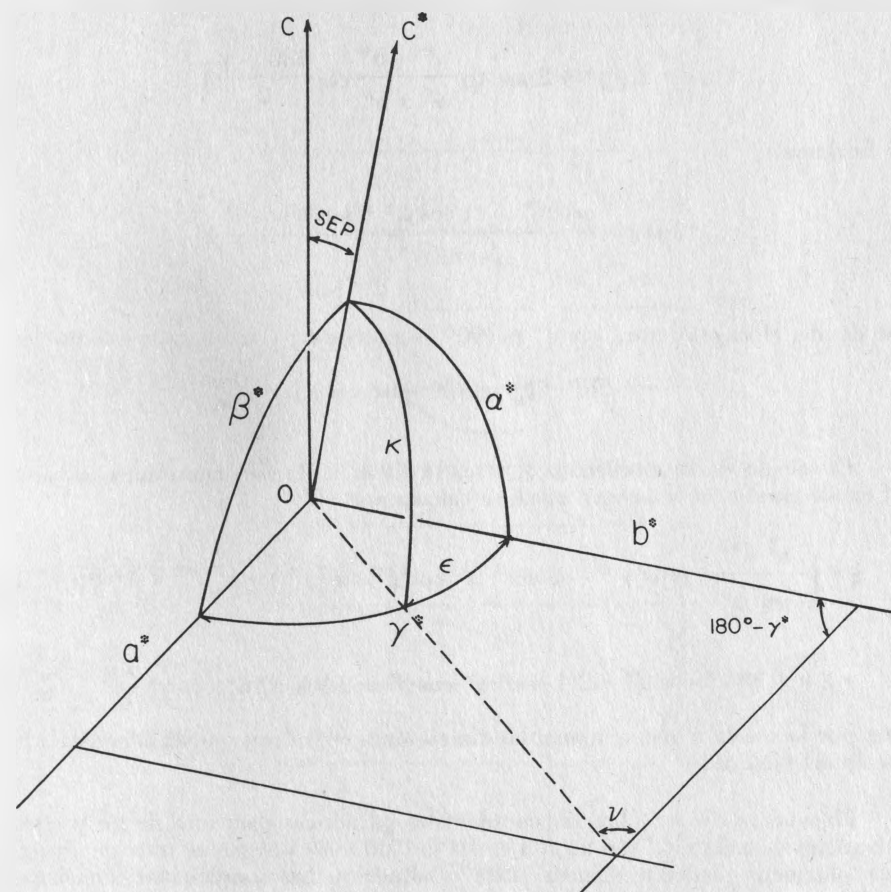
La separación de cada nivel en estos casos, se calculará por (§[001])

$$SEP = \zeta_n \operatorname{tg} (c^{\wedge} c^*) \curvearrowright$$



El ángulo κ de inclinación del eje c^* sobre el plano (a^*b^*) es

$$\operatorname{sen} \gamma^* \cos \kappa = \operatorname{sen}(\gamma^* - \epsilon) \cos \alpha^* + \operatorname{sen} \epsilon \cos \beta^* \quad (1^{\circ} \text{ ec. de Stewart})$$



y por el triangulo plano de la base,

$$\epsilon = \nu = \gamma^*$$

(1)

$$\operatorname{tg} \frac{\epsilon - \nu}{2} = \frac{a^* - b^*}{a^* + b^*} \operatorname{ctg} \left(\frac{180 - \gamma^*}{2} \right)$$

$$\epsilon - \nu = 2 \arctan \left(\frac{a^* - b^*}{a^* + b^*} \operatorname{ctg} \frac{180 - \gamma}{2} \right) \quad (2)$$

de (1) y (2),

$$\epsilon = 2 \left(\gamma^* + 2 \arctan \left(\frac{a^* - b^*}{a^* + b^*} \operatorname{ctg} \frac{180 - \gamma}{2} \right) \right)$$

y finalmente,

$$\cos \kappa = \frac{\sin(\gamma^* - \epsilon) \cos \alpha^* + \sin \epsilon \cos \beta^*}{\sin \gamma^*}$$

de donde, el ángulo entre c y c^* es $(90^\circ - \arccos \kappa)$ y la separación de niveles

$$\text{SEP} = \zeta_n \operatorname{tg}(90^\circ - \arccos \kappa) \quad \text{Q}$$

El cálculo de la coordenada ξ , o sea la distancia de cada nudo reticular hasta el eje de giro en su respectivo nivel, se calcula por

$$\xi = \left\{ \frac{h^2 a^{*2}}{\sin^2 \alpha^*} (\cos \gamma^* - 2 \cos^2 \alpha^* \cos^2 \beta^* \cos^2 \gamma^*) + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + \right. \\ \left. + 2 k l b^* c^* \cos \alpha^* + 2 l h c^* a^* \cos \beta^* + 2 h k a^* b^* \cos \gamma^* \right\}^{1/2} \quad \text{Q}$$

que por la escala a que se toman las dimensiones reticulares, queda adaptada a la escala del dibujo.

Finalmente, se calculan las coordenadas cilíndricas para uno de los puntos reticulares de cada nivel (en u.r.r. a escala de 100 mm) y según se trate de diagramas obtenidos mediante cámara plana o cilíndrica. Las coordenadas cartesianas medidas en milímetros sobre el diagrama, son x , y .

a). Para película plana:

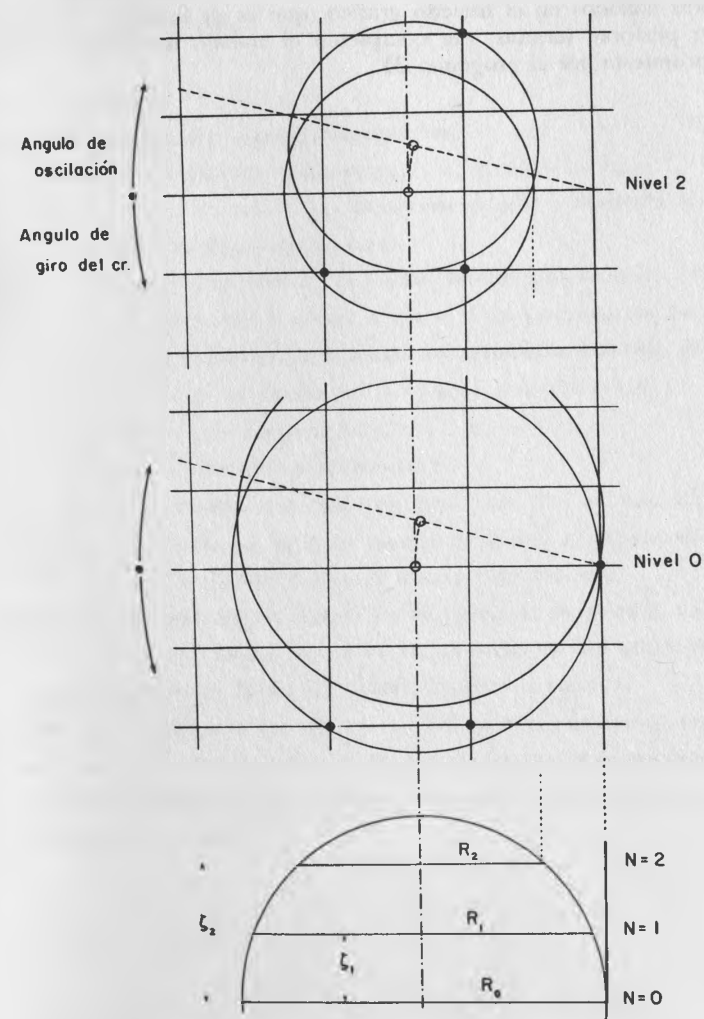
$$\zeta = y / \sqrt{D^2 + x^2 + y^2}$$

$$\xi = \sqrt{1 + \frac{D^2 + x^2 - 2 D \sqrt{D^2 + x^2 + y^2}}{D^2 + x^2 + y^2}}$$

b). Para película cilíndrica:

$$\zeta = y / \sqrt{r^2 + y^2}$$

$$\xi = \sqrt{1 + \frac{r^2}{x^2 + y^2} - \frac{2 r}{\sqrt{r^2 + y^2}} \cos \frac{360 x}{2 \pi r}}$$



Tratándose de diagramas de cristal oscilante, los reflejos posibles estarán limitados por los círculos de reflexión que se trazan en cada nivel según la amplitud de la oscilación.

La interpretación de los símbolos es análoga a la de los diagramas de oscilación.

En la lista de resultados del programa se han dejado unos lugares para la anotación de las condiciones experimentales que se hayan llevado, y otros para los símbolos hallados en el trazado gráfico, que es su finalidad. Con estos datos se pueden perforar tarjetas que completen el trabajo mediante la numeración analítica propuesta por el programa 21.

85500 FORTRAN COMPILATION

```

C  CALCULO CRISTALOGRAFICO
C  DATOS PARA LA RESOLUCION GRAFICA DE DIAGRAMAS DE CRISTAL GIRATORIO
C  CAMARA PLANA O CILINDRICA, DISPOSICION NORMAL.
C
C  F.J.FABREGAT GUINCHARD
C  FORTRAN - BURROUGHS 5500
C
C  TARJETAS DE ENTRADA
C  TARJETA 1.- NOMBRE DEL MINERAL.(FORMATO JAS)
C  DIMENSIONES RETICULARES DIRECTAS(A, B, C. (FORMATO JF9.6)
C  ANGULOS DE LA CELDA ELEMENTAL, EN GRADOS MINUTOS Y SEGUNDOS SEXAGESIMA-
C  LES. (FORMATO 3(F4.0,F3.0,F3.2))
C  TARJETA 2.- LONGITUD DE ONDA DE LA RADIACION EMPLEADA.(FORMATO F7.5)
C  TARJETA 3.- DISTANCIA DE LA PELICULA SEGUN LA CAMARA EMPLEADA (MU=0) EN
C  MILIMETROS, SE ESCRIBIRA EN SU LUGAR LA DISTANCIA, PONIENDO CERO EN EL
C  CORRESPONDIENTE DE LA CAMARA NO UTILIZADA. (FORMATO 2F8.5)
C  DISP (EN CAMARA PLANA)
C  DISC (EN CAMARA CILINDRICA)
C  TARJETA 4.- EJE DE GIRD, IJA 100, IJB 010, IJC 001, EN CADA CASO PLANOS
C  PERPENDICULARES AL EJE DE GIRD (SUBEJE DE GIRD), SE ESCRIBIRA 1 EN EL
C  LUGAR DEL EJE UTILIZADO Y 0 EN LOS OTROS. (FORMATO 3I3)
C  TARJETA 5.- ALTURAS DE LOS NIVELES EN MM. DESDE EL ECUATORIAL 0.0, Y EL
C  NUMERO TOTAL DE LOS QUE SE TENGAN EN CUENTA.(PARA LOS DEMAS SE PONDRAN
C  TAMBIEN 0.0, HASTA EL QUINTO LUGAR).(FORMATO 5F8.3,I8).
C  TARJETA 6.- COORDENADAS X,Y LEIDAS (EN MILIMETROS), UN PAZ DE COORDENADAS
C  POR TARJETA. (FORMATO 2F10.2). SE PONDRAN TANTAS TARJETAS CUANTOS SEAN
C  LOS PARES DE COORDENADAS LEIDOS (PRIMERO LAS DEL NIVEL CERO, LUEGO LAS
C  DEMAS, POR SU ORDEN.)

```

```

C   ULTIMA TARJETA.- CON DOS GRUPOS DE 999, COMO COORDENADAS, COMENZANDO EN
C   LAS COLUMNAS 5 Y 15, PARA INDICAR EL FINAL.
C ** PASO AL PROGRAMA 21.- NUMERACION ANALITICA DE LOS DIAGRAMAS DE CRISTAL
C   GIRATORIO (DE CRISTAL OSCILANTE) SE PUEDE PRECISAR LA INTERPRETACION
C   INICIADA GRAFICAMENTE CON LOS DATOS DEL PROGRAMA ACTUAL. EN EFECTO, COM
C   ESTE SE OBTIENEN LOS ELEMENTOS PARA UNA CONSTRUCCION ADECUADA Y LOS INDIC
C   CES LOGRADOS LIMITAN EL NUMERO DE CALCULOS, PRECISANDO LAS COINCIDENCIAS
C   ENTRE ESPACIADOS OBSERVADOS Y CALCULADOS.
C   A ESTE EFECTO, SE TRASLADAN A AQUEL PROGRAMA LAS TARJETAS DE DATOS
C   NUMS. 2, 1, 3, 6. SE CONTARA EL NUMERO CONCRETO DE ESTAS ULTIMAS PARA
C   PONERLO EN EL PROGRAMA, Y A CONTINUACION SE AÑADIRAN LAS TARJETAS DE LOS I
C   NDEXES (STU) QUE SE HUBIEREN HALLADO Y SE DESEEN CALCULAR. (FOR. 3F4.0)
C
C .....
C

```

```

DIMENSION RAD(5),ZET(5),SEP(5),Y(5),XICR(1000)
PRINT 3
3 FORMAT (" DATOS PARA LA RESOLUCION GRAFICA DE DIAGRAMAS DE CRISTAL
1 GIRATORIO.",/)
READ 1,MAN,MEN,MIN,MGN,AD,BD,CD,A1,A2,A3,B1,B2,B3,C1,C2,C3
1 FORMAT (3A4,A3,3F9.6,3(F4.0,F3.0,F5.2))
PRINT 70, MAN, MEN, MIN, MGN
70 FORMAT (" MINERAL = ",3A4,A3,/)

SUM=A1*60.
SUM=SUM+A2
SUM=SUM*60.
SUM=SUM+A3
ALFG=SUM/206264.8062
SUM=B1*60.

```

```

SUM=SUM+B2
SUM=SUM*60.
SUM=SUM+B3
BETG=SUM/206264.8062
SAM=C1*60
SAM=SAM+C2
SAM=SAM*60.
SAM=SAM+C3
GAMG=SAM/206264.8062
READ 6, ALAMB
6 FORMAT (F7.5)
READ 7, DISP,DISC
7 FORMAT (2F8.5)
READ 8, IJA,IJB,IJC
8 FORMAT (3I3)
PRINT 11
11 FORMAT (" ANOTACION DE LAS CONDICIONES EXPERIMENTALES",/)
PRINT 12,ALAMB,DISP,DISC,IJA,IJB,IJC
12 FORMAT(6X,"RADIACION =",F7.5,10X,"CAPAHA EMPLEADA = PLANA ("F8.3,
1",MM), CILINDRICA (R="F8.3,"MM),"",6X,"EJE DE GITU = ",3I1,10
2X,"OSCILACION =",/)
PRINT 5
5 FORMAT (" PARAMETROS REICULARES DIRECTOS",/)
PRINT 71,AD, BD, CD
71 FORMAT(9X,"A =",F8.4,dX,"B =",F8.4,dX,"C =",F8.4,/)
PRINT 72,A1,A2,A3,B1,B2,B3,C1,C2,C3
72 FORMAT(6X,"ALFA =",F4.0,F3.0,F5.2," HEIA =",F4.0,F3.0,F5.2," GAMA
1="F4.0,F3.0,F5.2,/)
READ 44, Y(1), Y(2), Y(3), Y(4), Y(5), N
44 FORMAT (5F8.3,18)

```

```

IF(DISP) 45,46,45
46 IF(DISC) 47,48,47
45 ALT=DISP
GO TO 48
47 ALT=DISC
48 CONTINUE
DO 65 I=1,N
ZET(I)=Y(I)/SQRT(ALT**2+Y(I)**2)
65 CONTINUE
PRINT 10
10 FORMAT (" DIMENSIONES RETICULARES RECIPROCAS",/)
CAQ=(COS(ALFG))**2
CBQ=(COS(BETG))**2
CGQ=(COS(GAMG))**2
VUL=AD*BD*CD*SQRT(1.-(CAQ+CBQ+CGQ)+2.*COS(ALFG)*COS(BETG)*COS(GAMG
1))
AR=BD*CD*SIN(ALFG)/VUL
BR=AD*CD*SIN(BETG)/VUL
CR=AD*BD*SIN(GAMG)/VUL
CALR =(COS(BETG)*COS(GAMG)-COS(ALFG))/(SIN(BETG)*SIN(GAMG))
CBER =(COS(ALFG)*COS(GAMG)-COS(BETG))/(SIN(ALFG)*SIN(GAMG))
CGAR =(COS(ALFG)*COS(BETG)-COS(GAMG))/(SIN(ALFG)*SIN(BETG))
PI=3.141592653
ALFAR=ARCUS(CALR)
BETAR=ARCOS(CBER)
GAMAR=ARCOS(CGAR)
ARGR=ALFAR*180./PI
BRGR=BETAR*180./PI
GRGR=GAMAR*180./PI
PRINT 13, AR,BR,CH

```

```

13 FORMAT (9X,"AH="F8.4,"7X," BH="F8.4,"8X,"CH="F8.4,/)
PRINT 14, ARGR, BRGR, GRGR
14 FORMAT (5X,7H ALFAR=F10.7,2X,7H BETAR=F10.7,2X,7H GAMAR=F10.7,2
1X,9H GHADD ,/)
PRINT 19
19 FORMAT (62H DIMENSIONES DE LA RED RECIPROCA (EN MM),PARA ESCALA E=
1100 MM.,/)

ARE=AH*ALAMB*100.
BRE=BH*ALAMB*100.
CRE=CH*ALAMB*100.
PRINT 20,ARE,BRE,CRE
20 FORMAT (7X,5H ARE=F7.4,7X,5H BRE=F7.4,7X,5H CRE=F7.4,/)
PRINT 15
15 FORMAT (50H RADIO DEL CIRCULO DE EWALD, PARA NIVEL 0 =100 MM.,/)
DO 16 I=1,N
RAD(I)=100.*SQRT(1.-ZET(I)**2)
J=I-1
PRINT 17,J,RAD(I)
17 FORMAT (21X,7H NIVEL ,I,2H =F7.2)
16 CONTINUE
PRINT 18
18 FORMAT (1H ,/)
PRINT 21
21 FORMAT (76H SEPARACION DEL ORIGEN DE LOS PLANOS RECIPROCOS PARA LO
15 DIFERENTES NIVELES.,/)
IF(IJA) 101,102,101
102 IF(IJB) 103,104,103
104 IF(IJC) 105,106,105
101 DO 107 I=1,N

```

```

AA=HRL
BB=CRC
ANG1=HETAR
ANG2=GAMAR
ANG3=ALFAR
QEB=(AA-BB)/(AA+BB)
COM=(PI-ANG3)/2.
EPS=2.+(ANG3+2.*ATAN((QEB)*COTAN(COM)))
KOSX=(SIN(ANG3-EPS)*COS(ANG1)+SIN(EPS)*COS(ANG2))/SIN(ANG3)
EQI=ARCOS(KOSX)
PEN=PI/2.-EQI
SEP(I)=ZET(I)*TAN(PEN)
K=I-1
PRINT 28,K,SEP(I)
28 FORMAT (5X,15H PARA EL NIVEL ,I1,18H ,LA SEPARACION ES,F7.3,4H MM,
1)
107 CONTINUE
106 GO TO 108
103 DO 109 I=1,N
AA=CRE
BB=ARE
ANG1=GAMAR
ANG2=ALFAR
ANG3=HETAR
QEB=(AA-BB)/(AA+BB)
COM=(PI-ANG3)/2.
EPS=2.+(ANG3+2.*ATAN((QEB)*COTAN(COM)))
KOSX=(SIN(ANG3-EPS)*COS(ANG1)+SIN(EPS)*COS(ANG2))/SIN(ANG3)
EQI=ARCOS(KOSX)
PEN=PI/2.-EQI

```

```

SEP(I)=ZET(I)*TAN(PEN)
K=I-1
PRINT 31,K,SEP(I)
31 FORMAT (5X,15H PARA EL NIVEL ,I1,18H ,LA SEPARACION ES,F7.3,4H MM,
1,/)
109 CONTINUE
GO TO 108
105 DO 110 I=1,N
AA=ARE
BB=BFE
ANG1=ALFAR
ANG2=HETAR
ANG3=GAMAR
QEB=(AA-BB)/(AA+BB)
COM=(PI-ANG3)/2.
EPS=2.+(ANG3+2.*ATAN((QEB)*COTAN(COM)))
KOSX=(SIN(ANG3-EPS)*COS(ANG1)+SIN(EPS)*COS(ANG2))/SIN(ANG3)
EQI=ARCOS(KOSX)
PEN=PI/2.-EQI
SEP(I)=ZET(I)*TAN(PEN)
K=I-1
PRINT 33,K,SEP(I)
33 FORMAT(5X,15H PARA EL NIVEL ,I1,18H ,LA SEPARACION ES,F7.3,4H MM.)
110 CONTINUE
108 CONTINUE
PRINT 34
34 FORMAT (1H ,/)
PRINT 111
111 FORMAT (" COORDENADA XI PARA CADA NODO DEL PLANO RECIPROCO, DESDE
IEL EJE DE GIRO DEL CRISTAL, EN SUS DIFERENTES NIVELES.",/)

```

```

SAQ=(SIN(ALFAH))*2
SBQ=(SIN(BETAR))*2
SGQ=(SIN(GAMAR))*2
QCA=(COS(ALFAH))*2
QCB=(COS(BETAR))*2
QCG=(COS(GAMAR))*2
PRO=2.*4CA+QCB+QCG
IF(IJA) 143,142,143
142 IF(IJB) 145,144,145
144 IF(IJC) 147,146,147
143 DO 116 K=1,N
KK=K-1
PRINT 112,KK
112 FORMAT (" COORDENADAS XI PARA REFLEJOS TIPO NKL DEL NIVEL",12,/)
PRINT 117
117 FORMAT (10X," K L X1",/)
DO 113 J=1,6
JJ=J-1
DO 114 I=1,6
II=I-1
AK=KK
AI=II
AJ=JJ
PRI=2.*AI*AJ*BRE*CRE*COS(ALFAH)
PRE=2.*AJ*AK*CRE*ARE*CCS(BETAR)
PRA=2.*AK*AI*ARE*BRE*CCS(GAMAR)
XICR(K)=SQRT(ABS(((AK*AK*ARE*ARE/SAQ)*(QCG-PHG)+AI*AI*BRE*BRE+AJ*AJ*
1J*CRE*CRE+PRI+PRE+PRA)))
PRINT 115,AK,AI,AJ,XICR(K)
115 FORMAT (10X,3F4,0,7X,F7,3)

```

```

114 CONTINUE
113 CONTINUE
PRINT 150
150 FORMAT (1H ,/)
116 CONTINUE
GO TO 146
145 DO 126 I=1,N
II=I-1
PRINT 122,II
122 FORMAT (" COORDENADAS XI PARA REFLEJOS TIPO HAL DEL NIVEL",12,/)

PRINT 127
127 FORMAT (10X," H K L X1",/)
DO 123 J=1,6
JJ=J-1
DO 124 K=1,6
KK=K-1
AK=KK
AI=II
AJ=JJ
PRI=2.*AI*AJ*BRE*CRE*COS(ALFAH)
PRE=2.*AJ*AK*CRE*ARE*CCS(BETAR)
PRA=2.*AK*AI*ARE*BRE*CCS(GAMAR)
XICR(I)=SQRT(ABS(((AI*AI*BRE*BRE/SBQ)*(QCA-PRC)+AK*AK*ARE*ARE+AJ*AJ*
1J*CRE*CRE+PRI+PRE+PRA)))
PRINT 125,AK,AI,AJ,XICR(I)
125 FORMAT (10X,3F4,0,7X,F7,3)
124 CONTINUE
123 CONTINUE
PRINT 151

```

```

151 FORMAT (1H ,//)
126 CONTINUE
      GO TO 146
147 DO 136 J=1,N
      JJ=J-1
      PRINT 132,JJ
132 FORMAT (' COORDENADAS X1 PARA REFLEJOS TIPO HKN DEL NIVEL',J2,/)
      PRINT 137
137 FORMAT (10X,' H K L X1',/)
      DO 133 I=1,6
      II=I-1
      DO 134 K=1,6
      KK=K-1
      AK=KK
      AI=II
      AJ=JJ
      PRI=2, *AI*AJ*BRE*CRE*CCS(ALFA)
      PRE=2, *AJ*AK*CRE*ARE*CCS(BETA)
      PRA=2, *AK*AI*ARE*BRE*CCS(GAMMA)
      XICR( J)=SQRT(ABS((AJ*AJ*CRE*CRE/SGG)*(QUB-PHL)+AK*AK*ARE*ARE+AI*AI*
      II*BRE*BRE+PRI+PRE+PRA))
      PRINT 135,AK,AI,AJ,XICR( J)
135 FORMAT (10X,3F4.0,7X,F7.3)
134 CONTINUE
133 CONTINUE
      PRINT 152
152 FORMAT (1H ,//)
136 CONTINUE
146 CONTINUE
      PRINT 35

```

```

35 FORMAT (63H COORDENADAS CILINDRICAS (CURR A ESCALA 100 MM) PARA CAD
1A NIVEL,/)
      PRINT 64
64 FORMAT (15X,2H X,8X,2H Y,12X,5H ZETA,5X,4H X1 ,/)
      IF(DISP) 37,36,37
36 IF(DISC) 39,38,39
37 READ 40, XC,YC
      IF(XC.EQ.999.) GO TO 38
40 FORMAT (2F10.2)
      ZEP=(YC/SQRT(DISP**2+XC**2+YC**2))*100.
      XIP=(SQRT(1.0*((DISP**2+XC**2-2.*DISP*SQRT(DISP**2+XC**2+YC**2))/(D
      ISP**2+XC**2+YC**2))))*100.
      PRINT 41, XC, YC, ZEP, XIP
41 FORMAT (10X,2F10.2,5X,2F10.3)
      GO TO 37
39 READ 42, XC,YC
      IF(XC.EQ.999.) GO TO 38
42 FORMAT (2F10.2)
      ZEC=(YC/SQRT(DISC**2+YC**2))*100.
      XIC=SQRT(1.0+(DISC**2/(DISC**2+YC**2)-(2.0*DISC/SQRT(DISC**2+YC**2))*
      100*360.*XC/(2.*3.141592*DISC)))*100.
      PRINT 43, XC, YC, ZEC, XIC
43 FORMAT (10X,2F10.2,5X,2F10.3)
      GO TO 39
38 CONTINUE
      PRINT 50
50 FORMAT (1H ,//)
      PRINT 49
49 FORMAT (58H ANCIACION DE LOS REFLEJOS POSIBLES HALLADOS GRAFICAMEN
1TE,/)

```

```

PRINT 51
51 FORMAT (5X,8H NIVEL 0,5X,8H NIVEL 1,5X,8H NIVEL 2,5X,8H NIVEL 3,5X
1,8H NIVEL 4,5X,8H NIVEL 5,/)
STOP
END

```

DATOS PARA LA RESOLUCION GRAFICA DE DIAGRAMAS DE CRISTAL GIRATORIO.

MINERAL = LIVINGSTONITA

ANOTACION DE LAS CONDICIONES EXPERIMENTALES

RADIACION = 1.54178

CAMARA EMPLEADA = PLANA (0.000,MM).

CILINDRICA (R= 28.648,MM).

EJE DE GIRC = C10

OSCILACION =

PARAMETROS RETICULARES DIRECTOS

A = 29.7656

B = 4.0126

C = 21.3960

ALFA = 90. 0. 0.00 BETA = 104.12. 0.00 GAMA = 90. 0. 0.00

DIMENSIONES RETICULARES RECIPROCAS

AR= 0.0347

BR= 0.2492

CR= 0.0482

ALFA=90.000000 BETA=75.600000 GAMA=90.000000 GRADOS

DIMENSIONES DE LA RED RECIPROCA (EN MM), PARA ESCALA L=100 MM.

ARE= 5.3430

BRE=38.4235

CRE= 7.4330

RADIO DEL CIRCULO DE EWALD, PARA NIVEL 0 = 100 MM.

NIVEL 0 = 100.00

NIVEL 1 = 99.04

NIVEL 2 = 92.00

NIVEL 3 = 63.39

SEPARACION DEL ORIGEN DE LOS PLANOS RECIPROCOS PARA LOS DIFERENTES NIVELES.

PARA EL NIVEL 0, LA SEPARACION ES 0.000 MM.

PARA EL NIVEL 1, LA SEPARACION ES -0.000 MM.

PARA EL NIVEL 2, LA SEPARACION ES -0.000 MM.

PARA EL NIVEL 3, LA SEPARACION ES -0.000 MM.

COORDENADA XI PARA CADA PUNTO DEL PLANO RECIPROCO, DESDE EL EJE DE GIRC DEL

CRISTAL, EN SUS DIFERENTES NIVELES.

COORDENADAS XI PARA REFLEJOS TIPO HKL DEL NIVEL 0

H	K	L	XI
0.	0.	0.	0.000
1.	0.	0.	5.343
2.	0.	0.	10.686
3.	0.	0.	16.029

4.	0.	0.	21.372
5.	0.	0.	26.715
0.	0.	1.	7.433
1.	0.	1.	10.163
2.	0.	1.	14.436
3.	0.	1.	19.252
4.	0.	1.	24.289
5.	0.	1.	29.434
0.	0.	2.	14.866
1.	0.	2.	16.986
2.	0.	2.	20.326
3.	0.	2.	24.389
4.	0.	2.	28.873
5.	0.	2.	33.609
0.	0.	3.	22.299
1.	0.	3.	24.171
2.	0.	3.	26.988
3.	0.	3.	30.488
4.	0.	3.	34.465
5.	0.	3.	38.771
0.	0.	4.	29.732
1.	0.	4.	31.472
2.	0.	4.	33.972
3.	0.	4.	37.078
4.	0.	4.	40.651
5.	0.	4.	44.580
0.	0.	5.	37.165
1.	0.	5.	38.823
2.	0.	5.	41.113
3.	0.	5.	43.937
4.	0.	5.	47.199
5.	0.	5.	50.814

COORDENADAS XI PARA REFLEJOS TIPO HNL DEL NIVEL 1

H	K	L	XI
0.	1.	0.	0.000
1.	1.	0.	5.343
2.	1.	0.	10.686
3.	1.	0.	16.029
4.	1.	0.	21.372
5.	1.	0.	26.715
0.	1.	1.	7.433
1.	1.	1.	10.163
2.	1.	1.	14.436
3.	1.	1.	19.252
4.	1.	1.	24.289
5.	1.	1.	29.434
0.	1.	2.	14.866
1.	1.	2.	16.986
2.	1.	2.	20.326
3.	1.	2.	24.389
4.	1.	2.	28.873
5.	1.	2.	33.609
0.	1.	3.	22.299

1.	1.	3.	24.171
2.	1.	3.	26.988
3.	1.	3.	30.488
4.	1.	3.	34.465
5.	1.	3.	38.771
0.	1.	4.	29.732
1.	1.	4.	31.472
2.	1.	4.	33.972
3.	1.	4.	37.078
4.	1.	4.	40.651
5.	1.	4.	44.580
0.	1.	5.	37.165
1.	1.	5.	38.823
2.	1.	5.	41.113
3.	1.	5.	43.937
4.	1.	5.	47.199
5.	1.	5.	50.814

COORDENADAS XI PARA REFLEJOS TIPO HNL DEL NIVEL 2

H	K	L	XI
0.	2.	0.	0.000
1.	2.	0.	5.343
2.	2.	0.	10.686
3.	2.	0.	16.029
4.	2.	0.	21.372
5.	2.	0.	26.715
0.	2.	1.	7.433
1.	2.	1.	10.163
2.	2.	1.	14.436
3.	2.	1.	19.252
4.	2.	1.	24.289
5.	2.	1.	29.434
0.	2.	2.	14.866
1.	2.	2.	16.986
2.	2.	2.	20.326
3.	2.	2.	24.389
4.	2.	2.	28.873
5.	2.	2.	33.609
0.	2.	3.	22.299
1.	2.	3.	24.171
2.	2.	3.	26.988
3.	2.	3.	30.488
4.	2.	3.	34.465
5.	2.	3.	38.771
0.	2.	4.	29.732
1.	2.	4.	31.472
2.	2.	4.	33.972
3.	2.	4.	37.078
4.	2.	4.	40.651
5.	2.	4.	44.580
0.	2.	5.	37.165
1.	2.	5.	38.823
2.	2.	5.	41.113
3.	2.	5.	43.937

4. 2. 5. 47.199
5. 2. 5. 50.814

COORDENADAS XI PARA REFLEJOS TIPO HNL DEL NIVEL 3

H	K	L	XI
0.	3.	0.	0.000
1.	3.	0.	5.343
2.	3.	0.	10.686
3.	3.	0.	16.029
4.	3.	0.	21.372
5.	3.	0.	26.715
0.	3.	1.	7.433
1.	3.	1.	10.163
2.	3.	1.	14.436
3.	3.	1.	19.252
4.	3.	1.	24.249
5.	3.	1.	29.434
0.	3.	2.	14.866
1.	3.	2.	16.986
2.	3.	2.	20.326
3.	3.	2.	24.329
4.	3.	2.	28.873
5.	3.	2.	33.669
0.	3.	3.	22.299
1.	3.	3.	24.171
2.	3.	3.	26.988
3.	3.	3.	30.488
4.	3.	3.	34.465
5.	3.	3.	38.771
0.	3.	4.	29.732
1.	3.	4.	31.472
2.	3.	4.	33.972
3.	3.	4.	37.078
4.	3.	4.	40.651
5.	3.	4.	44.580
0.	3.	5.	37.165
1.	3.	5.	38.823
2.	3.	5.	41.113
3.	3.	5.	43.937
4.	3.	5.	47.199
5.	3.	5.	50.814

COORDENADAS CILINDRICAS (CMR A ESCALA 100 MM) PARA CADA NIVEL.

X	Y	ZETA	XI
9.60	0.00	0.000	34.858
13.25	0.00	0.000	126.315
15.85	0.00	0.000	28.301
19.10	0.00	0.000	49.553
20.35	0.00	0.000	199.504
22.70	0.00	0.000	130.180

27.40	0.00	0.000	153.436
33.05	0.00	0.000	199.601
39.50	0.00	0.000	194.736
41.05	0.00	0.000	41.525
46.25	0.00	0.000	153.388
50.10	0.00	0.000	12.982
55.40	0.00	0.000	182.460
56.85	0.00	0.000	59.319
58.70	0.00	0.000	167.257
67.05	0.00	0.000	176.043
69.10	0.00	0.000	3.058
2.70	12.15	39.045	82.398
4.45	12.15	39.045	185.499
10.20	12.15	39.045	134.534
12.80	12.15	39.045	45.121
22.80	12.15	39.045	139.053
27.20	12.15	39.045	168.927
30.55	12.15	39.045	146.397
32.30	12.15	39.045	148.598
35.05	12.15	39.045	91.057
38.60	12.15	39.045	150.618
44.70	12.15	39.045	126.429
53.75	12.15	39.045	64.976
66.00	12.15	39.045	9.407
7.90	34.95	77.339	163.229
8.60	34.95	77.339	122.544
11.05	34.95	77.339	163.164
11.60	34.95	77.339	136.048
18.80	34.95	77.339	37.449
19.75	34.95	77.339	130.033
21.10	34.95	77.339	129.160
23.80	34.95	77.339	159.623
27.75	34.95	77.339	87.737
28.20	34.95	77.339	38.474
29.75	34.95	77.339	162.690
30.55	34.95	77.339	126.787
31.80	34.95	77.339	69.987
35.30	34.95	77.339	113.784
37.65	34.95	77.339	37.437
40.20	34.95	77.339	102.001
42.30	34.95	77.339	162.427
45.50	34.95	77.339	163.173
46.70	34.95	77.339	75.054
48.30	34.95	77.339	151.476
49.90	34.95	77.339	67.691
50.90	34.95	77.339	101.223
53.10	34.95	77.339	60.496
57.05	34.95	77.339	84.808
60.55	34.95	77.339	126.661
61.90	34.95	77.339	132.985
63.20	34.95	77.339	67.973
64.45	34.95	77.339	163.221

ANOTACION DE LOS REFLEJOS POSIBLES HALLADOS GRAFICAMENTE.

NIVEL 0 NIVEL 1 NIVEL 2 NIVEL 3 NIVEL 4 NIVEL 5

CALCULO CRISTALGRAFICO
PROGRAMAS PARA COMPUTADORA ELECTRONICA
FORTRAN

Prog. 21

Francisco José FABREGAT GUINCHARD

CALCULO CRISTALOGRAFICO
PROGRAMAS PARA COMPUTADORA ELECTRONICA
FORTRAN

BURROUGHS 5500

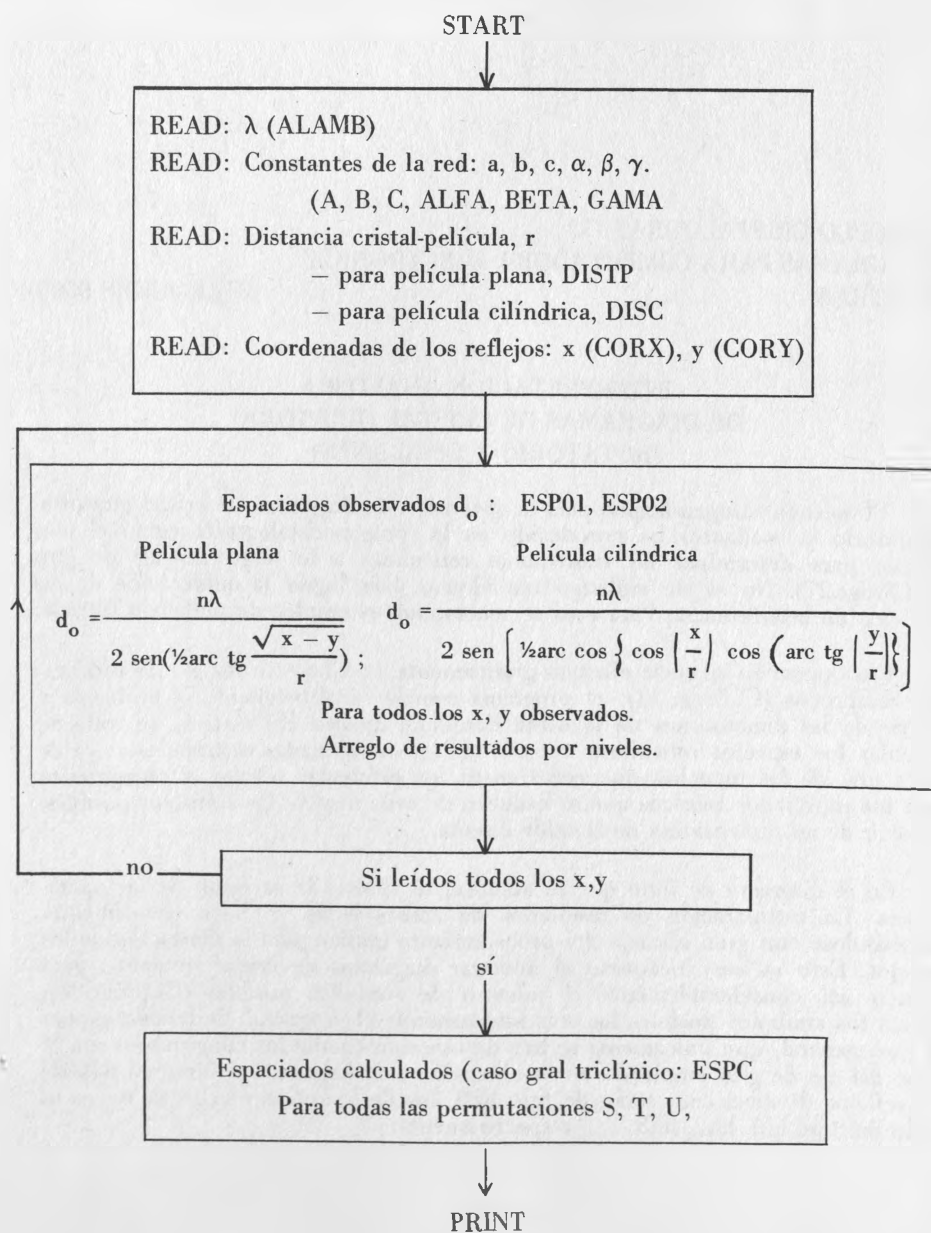
INTERPRETACION ANALITICA
DE DIAGRAMAS DE CRISTAL GIRATORIO
(ROTATORIO Y OSCILANTE)

El método röntgenológico para la obtención de diagramas de cristal giratorio (rotatorio y oscilante) ha prevalecido en la röntgencristalografía como el más eficaz para determinar las traslaciones reticulares a lo largo del eje de giro (Cf.Progr.27). No es sin embargo tan idóneo para lograr la numeración de sus reflejos de interferencia. Para ésto se recomienda el empleo de radiación filtrada.

Esa operación se suele efectuar gráficamente, con base en los planos reticulares recíprocos (Cf.Progr.28): el programa resuelve analíticamente el problema a partir de las dimensiones de la celda elemental directa. En síntesis, se trata de calcular los espacios reticulares a partir de las coordenadas cartesianas (x,y) de cada una de las manchas que constituyen los diferentes niveles, y compararlos con los espaciados teóricos que se deducen de cada uno de los símbolos posibles, a partir de las dimensiones de la celda directa.

En el diagrama de flujo que se adjunta, se aprecia la sucesión de las operaciones. La comparación de resultados de ambas listas, se hace virtualmente, auxiliándose con gran eficacia del procedimiento gráfico para la limitación de los reflejos. Esto es muy necesario al numerar diagramas de cristal oscilante, para reducir así considerablemente el número de símbolos posibles (Cf.progr.28). Todos los símbolos posibles los crea internamente el programa. Se recuerda, para el caso general, que únicamente se han de tener en cuenta los congruentes con la clase del eje de giro empleado en la obtención del diagrama: si fuese en $S[001]$ los reflejos de nivel cero serán de tipo $hk0$, los de los otros niveles sucesivos lo serán del tipo hkl , $hk2$, $hk3$, . . . respectivamente.

DIAGRAMA DE FLUJO



B5500 FORTRAN COMPILATION

C CALCULO CRISTALOGRAFICO. PROGRAMA 21.

C F.J.FABREGAT

C FORTRAN. - BURROUGHS 5500

C

C NUMERACION DE LOS REFLEJOS EN DIAGRAMAS DE CRISTAL GIRATORIO Y OSCILANTE.

C EL PROGRAMA CONSIDERA UN MAXIMO DE 100 PARES DE COORDENADAS, COMO LIMITE.

C

C**LOS CALCULOS TIENEN POR OBJETO FACILITAR LA NUMERACION APRECIATIVA DE UN

C DIAGRAMA DE CRISTAL GIRATORIO (ROTATORIO U OSCILANTE), CON BASE EN LA ME--

C DIAGRAMA DE CRISTAL GIRATORIO (ROTATORIO U OSCILANTE), CON BASE EN LA ME--

C DICION DE SUS REFLEJOS DE PRIMER CUADRANTE (EL DE TODOS SUS INDICES POSI-
C TIVOS).C SE OFRECEN LAS OPCIONES DE, A/ LA LONGITUD DE ONDA (RADIACION K ALFA FIL-
C TRADA).(TARJETA 1 DE DATOS)

C B/. CLASE DE CAMARA. PLANA (CON LA DISTANCIA CRISTAL-PLACA).

C CILINDRICA (CON EXPRESION DE SU RADIO).(TARJETA 3 DE
C DATOS).

C C/. EJE DE GIRO DEL CRISTAL (TARJETA DEL PROGRAMA).

C D/. NUMERO DE REFLEJOS MEDIDOS (TARJETA DEL PROGRAMA).

C

C **TARJETAS DE DATOS

C TARJETA 1.- LONGITUD DE ONDA EMPLEADA (RADIACION K ALFA FILTRADA).(FOR-
C MATO 1).

C LACIONES EN ANGSTROMS, ANGULOS EN GRADOS, MINUTOS Y SEGUNDOS).(FORM.2)

C TARJETA 3.- DISTANCIA CRISTAL-PELICULA, EN MM.(FORMATO 3).

C DISP. CON PLACA PLANA.

C DISC. CON PELICULA CILINDRICA.

C SE COLOCARA ESA DISTANCIA EN EL LUGAR ADECUADO, Y CERO EN EL OTRO,

C TARJETA 4.- COORDENADAS X (SEGUN LA DIRECCION DE LOS NIVELES), Y (DIS-
C TANCIA DEL NIVEL ECUATORIAL A LOS DEMAS SUCESIVOS SEGUN EL EJE DE GIRO)
C EN MM. UN PAR DE COORDENADAS POR TARJETA, CUYO NUMERO EXACTO SE PONDRÁ
C EN N DE LA TARJETA DEL PROGRAMA.

C

C ** RESULTADOS. APARECEN EN DOS TABLAS

C TABLA I.- LAS COORDENADAS X,Y DE LOS REFLEJOS OBSERVADOS EN CORRESPONDEN-
C PERIMENTADO CON PLACA PLANA (ESPL1) O CILINDRICA (ESPL2).

C TABLA II.- ESPACIADOS CALCULADOS CON BASE EN TODAS LAS PERMUTACIONES POSI-
C BLES DE LOS INDICES, QUE EL PROGRAMA FORMA INTERNAMENTE. ESTOS INDICES
C SE PUEDEN LIMITAR ADECUANDO LAS TARJETAS Y DEL PROGRAMA. NOTESE
C QUE EL EJE DE GIRO MARCAHA LOS INDICES DE LOS NIVELES 0,1,2,3,...

C LA UNIFICACION DE AMBAS TABLAS SE HARA VISUALMENTE, CON BASE EN LOS ESPACI-
C ADOS (ESPL1 O ESPL2) EXPERIMENTALES Y LOS (ESPLC) CALCULADOS.

C Y LA DE COMPARACION DE ESPACIADOS DEBERA TENER TOLERANCIA DE 0.05

C LOS SIMBOLOS ADYACENTES SON LOS PROFICOS DE LAS INTERFERENCIAS OBSERVADAS.
C SE PODRAN VERIFICAR COLOCANDOLAS EN UNA PLANILLA DE BERNAL CON EL

C DIAGRAMA OBTENIDO.

C

C

C

C

DIMENSION CORX(100), CORY(100), ESPL1(100), ESPL2(100) 1

DIMENSION S(10), I(10), L(10) 2

C CAMBIAR ESTA TARJETA (N=58) SEGUN EL NUMERO CONCRETO DE PARES DE COORDENA-
C N=58 4

READ 1, ALAMB 5

1 FORMAT (F7.5) 6

READ 2, MIN, MEN, MAN, MCN, A, B, C, AB, AC, AD, BH, BC, BD, CC, CD, CE 8

2 FORMAT(3A4, A3, 3F10.6, 3(F4.0, F3.0, F5.2)) 9

SUM=AB*60. 10

SUM=SUM+AC 11

SUM=SUM+60. 12

SUM=SUM+AC 13

ALFA=SUM/206264.8062 14

SUM1=BB*60. 15

SUM1=SUM1+BC 16

SUM1=SUM1*60. 17

SUM1=SUM1+BD 18

BETA=SUM1/206264.8062 19

SUM2=CC*60. 20

SUM2=SUM2+CD 21

SUM2=SUM2*60. 22

SUM2=SUM2+CE 23

GAMA=SUM2/206264.8062 24

PRINT 9, MIN, MEN, MAN, MCN, A, B, C, AB, AC, AD, BH, BC, BD, CC, CD, CE 25

9 FORMAT(1X, 3A4, A3, 3F10.6, 3(F4.0, F3.0, F5.2, 2X), /) 26

C SE COLOCARA LA DISTANCIA CRISTAL-PELICULA EN MM, EN EL CASO ADECUADO (PE=27

C LICULA PLANA O CILINDRICA) Y 0 EN EL OTRO. 28

READ 3, DISP, DISC 29

3 FORMAT (2F8.5) 30

READ 4, (CORX(M), CORY(M), M=1,N) 31

4 FORMAT(2F10.2) 32

C DETERMINACION DE LOS ESPACIADOS O OBSERVADOS 33

IF (DISP) 5, 5.6 34

5 IF (DISC) 6, 6.7 35

6 DO 18 J=1,N 36

ARP=(ATAN((SQRT((CORX(J)**2+CORY(J)**2))/(DISP))))/2 37

HRP=2*SIN(ARP) 38

ESPL1(J)=ALAMB/HRP 39

```

18 CONTINUE
GO 10 10
7 DO 8 J= 1,N
ARR=COS(CORX(J)/DISC)*COS(ATAN(CORY(J)/DISC))
HRR=(ATAN(SQRT(1./(ARR**2+1.)))/2
DRR=2*SIN(HRR)
ESPU2(J)=ALAN8/HRR
8 CONTINUE
C DETERMINACION DE LOS ESPACIADOS O CALCULADOS
10 COSA=COS(ALFA)
COSH=COS(BETA)
COSC=COS(GAMA)
SENA=SIN(ALFA)
SENB=SIN(BETA)
SENC=SIN(GAMA)
PRINT 50
50 FORMAT (19H LJE DE GIRC 010 //)
PRINT 20
26 FORMAT (33H TABLA I , ESPACIADOS OBSERVADOS //)
PRINT 21
21 FORMAT(51H      X      Y      ESP01      ESP02 //)
DO 30 J=1,N
IF(ESPO1(J).EQ.0) GO TO 31
PRINT 22, CORX(J),CORY(J),ESPO1(J)
22 FORMAT (2(2X,F10.2),7X,F10.5,5X,3H = )
31 PRINT 32, CORX(J),CORY(J),ESPO2(J)
32 FORMAT (2(2X,F10.2),10X,3H = ,6X,F10.5)
30 CONTINUE
PRINT 25
25 FORMAT (1H //)

```

40
41
42
43
44
45
46
47
48
49
50
51
52
53
54
55
56
57
58
59
60
61
62
63
64
65
66
67
68
69

```

C SE HARA VISUALMENTE LA COMPARACION ENTRE LOS D(OBS) Y LOS D(CALC) PARA
C ESTABLECER LA CORRESPONDENCIA ENTRE LAS LINEAS DE LAS 3 PRIMERAS COLUM=
C NAS (TABLA I) CON LAS DE LAS 4 ULTIMAS (TABLA II).
PRINT 27
PRINT 24
27 FORMAT (35H TABLA II , ESPACIADOS CALCULADOS. //)
24 FORMAT (41X,29H      ESPC      S      T      U //)
DO 200 I=1,6
DO 201 J=1,3
DO 202 K=1,6
S(I)=I-1
T(J)=J-1
U(K)=K-1
FUM=1.-COSA**2-COSB**2-COSC**2+2*COSA*COSH+COSC
AA=((S(I)/A)**2)*(SENA**2)
AB=((T(J)/B)**2)*(SENB**2)
AC=((U(K)/C)**2)*(SENC**2)
AD=((2*T(J)*U(K))/(B*C))*(COSA-COSH+COSC)
AE=((2*U(K)*S(I))/(C*A))*(COSH-COSC+COSA)
AH=((2*S(I)*T(J))/(A*B))*(COSC-COSA+COSH)
DEN=SQRT(AA+AB+AC-AD-AE-AH)
IF(DEN.EQ.0) GO TO 202
ESPC=FUM/DEN
PRINT 23, ESPC, S(I), T(J), U(K)
23 FORMAT (43X,F10.5,5X,3F4.0)
202 CONTINUE
201 CONTINUE
200 CONTINUE
STOP
END

```

72
73
74
75
76
77
78
79
80
81
82
83
84
85
86
87
88
89
90
91
92
93
94
95
96
97
98
99

LIVINGSTONITA 29.76560 4.01260 21.39600 90. 0. 0.00 104.12. 0.00 90. 0. 0.00

EJE DE GIRO 010

TABLA I , ESPACIADOS OBSERVADOS

X	Y	ESPO1	ESPO2
9.60	0.00	-	4.63707
13.25	0.00	-	3.37389
15.85	0.00	-	2.83128
19.10	0.00	-	2.36311
20.35	0.00	-	2.22352
22.70	0.00	-	2.00363
27.40	0.00	-	1.68004
33.05	0.00	-	1.41750
39.50	0.00	-	1.21517
41.05	0.00	-	1.17693
46.25	0.00	-	1.11182
50.10	0.00	-	1.19783
55.40	0.00	-	1.35157
56.85	0.00	-	1.40299
58.70	0.00	-	1.47598
67.05	0.00	-	1.95985
69.10	0.00	-	2.13954
2.70	12.15	-	3.78430
4.45	12.15	-	3.63500
10.20	12.15	-	2.95257
12.80	12.15	-	2.65361
22.80	12.15	-	1.83259
27.20	12.15	-	1.60468
30.55	12.15	-	1.46718
32.30	12.15	-	1.40516
35.05	12.15	-	1.31903
38.60	12.15	-	1.22494
44.70	12.15	-	1.09803
53.75	12.15	-	1.27751
66.00	12.15	-	1.74864
7.90	34.95	-	1.74862
8.60	34.95	-	1.73885
11.05	34.95	-	1.70005
11.60	34.95	-	1.69048
18.80	34.95	-	1.54801
19.75	34.95	-	1.52804
21.10	34.95	-	1.49964
23.80	34.95	-	1.44339
27.75	34.95	-	1.36419
28.20	34.95	-	1.35550
29.75	34.95	-	1.32612
30.55	34.95	-	1.31134
31.80	34.95	-	1.28876
35.30	34.95	-	1.22915
37.65	34.95	-	1.19216
40.20	34.95	-	1.15477
42.30	34.95	-	1.12610
45.50	34.95	-	1.09453
46.70	34.95	-	1.10945
48.30	34.95	-	1.13026
49.90	34.95	-	1.15215
50.90	34.95	-	1.16640

53.10	34.95	-	1.19926
57.05	34.95	-	1.26365
60.55	34.95	-	1.32638
61.90	34.95	-	1.35192
63.20	34.95	-	1.37716
64.45	34.95	-	1.40197

TABLA II , ESPACIADOS CALCULADOS.

ESPC	S	T	U
20.10848	0.	0.	1.
10.05424	0.	0.	2.
6.70283	0.	0.	3.
5.02712	0.	0.	4.
4.02170	0.	0.	5.
3.89000	0.	1.	0.
3.81919	0.	1.	1.
3.62793	0.	1.	2.
3.36445	0.	1.	3.
3.07650	0.	1.	4.
2.79604	0.	1.	5.
1.94500	0.	2.	0.
1.93596	0.	2.	1.
1.90959	0.	2.	2.
1.86795	0.	2.	3.
1.81396	0.	2.	4.
1.75098	0.	2.	5.
27.97443	1.	0.	0.
14.70730	1.	0.	1.
8.79954	1.	0.	2.
6.18366	1.	0.	3.
4.74921	1.	0.	4.
3.84997	1.	0.	5.
3.85292	1.	1.	0.
3.76068	1.	1.	1.
3.55785	1.	1.	2.
3.29266	1.	1.	3.
3.00936	1.	1.	4.
2.73638	1.	1.	5.
1.94031	1.	2.	0.
1.92821	1.	2.	1.
1.89916	1.	2.	2.
1.85538	1.	2.	3.
1.79990	1.	2.	4.
1.73603	1.	2.	5.
13.98722	2.	0.	0.
10.35350	2.	0.	1.
7.35365	2.	0.	2.
5.53830	2.	0.	3.
4.39977	2.	0.	4.
3.63551	2.	0.	5.
3.74776	2.	1.	0.
3.64146	2.	1.	1.
3.43853	2.	1.	2.
3.18324	2.	1.	3.
2.91429	2.	1.	4.
2.65611	2.	1.	5.
1.92646	2.	2.	0.

1.91156	2.	2.	1.
1.88034	2.	2.	2.
1.83512	2.	2.	3.
1.77893	2.	2.	4.
1.71499	2.	2.	5.
9.32481	3.	0.	0.
7.76380	3.	0.	1.
6.12840	3.	0.	2.
4.90243	3.	0.	3.
4.03120	3.	0.	4.
3.40186	3.	0.	5.
3.59013	3.	1.	0.
3.47787	3.	1.	1.
3.28424	3.	1.	2.
3.04724	3.	1.	3.
2.79923	3.	1.	4.
2.56078	3.	1.	5.
1.90402	3.	2.	0.
1.88669	3.	2.	1.
1.85387	3.	2.	2.
1.80791	3.	2.	3.
1.75176	3.	2.	4.
1.68850	3.	2.	5.
6.99361	4.	0.	0.
6.15373	4.	0.	1.
5.17675	4.	0.	2.
4.33680	4.	0.	3.
3.67482	4.	0.	4.
3.16677	4.	0.	5.
3.39951	4.	1.	0.
3.28812	4.	1.	1.
3.10985	4.	1.	2.
2.89576	4.	1.	3.
2.67209	4.	1.	4.
2.45588	4.	1.	5.
1.87388	4.	2.	0.
1.85457	4.	2.	1.
1.82073	4.	2.	2.
1.77469	4.	2.	3.
1.71927	4.	2.	4.
1.65736	4.	2.	5.
5.59489	5.	0.	0.
5.07804	5.	0.	1.
4.44729	5.	0.	2.
3.85510	5.	0.	3.
3.35278	5.	0.	4.
2.94146	5.	0.	5.
3.19388	5.	1.	0.
3.08806	5.	1.	1.
2.92797	5.	1.	2.
2.73822	5.	1.	3.
2.53964	5.	1.	4.
2.34621	5.	1.	5.
1.83715	5.	2.	0.
1.81632	5.	2.	1.
1.78203	5.	2.	2.
1.73650	5.	2.	3.
1.68240	5.	2.	4.
1.62239	5.	2.	5.

PROGRAMAS DE CALCULO CRISTALOGRAFICO
 APLICADO A COMPUTADORA ELECTRONICA
 FORTRAN

CALCULO DE FACTORES DE ESTRUCTURA
 Y DE INTENSIDADES

Dr. Francisco J. FABREGAT GUINCHARD

PROGRAMAS DE CALCULO CRISTALOGRAFICO
FORTRAN

BURROUGHS 5500

CALCULO DE FACTORES DE ESTRUCTURA
Y DE INTENSIDADES

Se suele juzgar sobre la verosimilitud de una estructura cristalina por el grado de coincidencia entre las intensidades de los reflejos que se hayan registrado sobre una placa fotográfica al someter la muestra a un haz de rayos X, y las intensidades calculadas que resultarían si se sometiese en iguales condiciones la estructura hipotética.

Las intensidades que se calculan son magnitudes relativas, que se vinculan a las observadas mediante un factor K constante. Para dicho cálculo se admiten expresiones con cierto número de factores influyentes sobre la intensidad del reflejo; no en su posición geométrica, que depende sólo de la ecuación de Bragg. Las expresiones varían sus términos con el método röntgenográfico empleado y con el grado de aproximación que se espere. Por lo general son

$$I \approx K \cdot P \cdot L \cdot D \cdot M \cdot T \cdot A \cdot F^2 \cdot E \cdot W$$

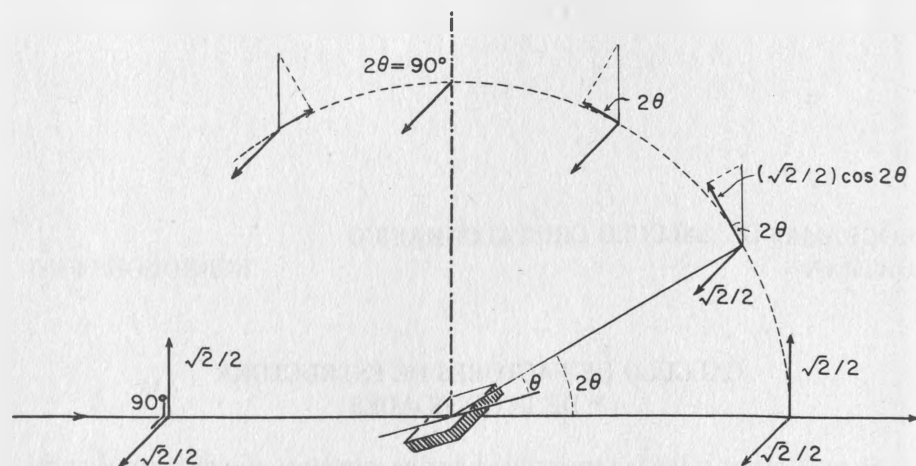
Dada la complejidad de su cálculo, resulta muy conveniente su aplicación a las computadoras electrónicas actuales.

K – *FACTOR CONSTANTE*, que depende del procedimiento röntgenográfico empleado y de todas las circunstancias de la experimentación.

Se puede prescindir de él prácticamente, ya que influye por igual en todos los reflejos.

En un segundo cálculo de afinación, entraría con la forma

$$K = \left| \overline{F_{\text{obs}}} \right|^2 / \sum_j \overline{f_j^2}$$



P - FACTOR DE POLARIZACION. Aunque el haz primario de los rayos X se considera no polarizado, sí lo es el secundario después de haber sido difractado por la red cristalina. Su grado de polarización depende del ángulo según el cual haya difractado o difundido.

La energía total de este haz secundario es proporcional al factor $(1 + \cos^2 \theta) / 2$.

Su vector eléctrico vibra en toda dirección perpendicular a su trayectoria; mas puede referirse a dos vectores componentes iguales y mutuamente normales, con amplitudes proporcionales a $\sqrt{2}/2$. La componente que yace en el plano reticular cristalino no sufre variación; mas la vertical a él es $(\sqrt{2}/2) \cos 2\theta$, llegando a ser cero en un haz difractado de $2\theta = 90^\circ$. En estas condiciones sólo actúa la componente horizontal. Por lo general.

$$P = (1 + \cos^2 2\theta) / 2 = 1 - 2 \sin^2 \theta + 2 \sin^4 \theta$$

que expresado en función de las coordenadas cilíndricas,

$$P = 1 - \frac{1}{2} (\xi^2 + \zeta^2) + \frac{1}{8} (\xi^2 + \zeta^2)^2$$

θ , ξ y ζ - en el párrafo siguiente, Pág. 89

P se llama también factor de Thompson.

L - FACTOR DE LORENTZ. El haz primario no es completamente monocromático ni rigurosamente paralelo. Ello hace que el rayo difractado no sea estrictamente una línea recta y que el cristal no refleje por un instante durante su movimiento, sino durante cierto tiempo, resultando la intensidad del reflejo proporcional a

1º En el método de Laue: $1 / \sin^2 \theta$

El factor L es peculiar a este procedimiento.

2º En el método de polvo: $1 / (2 \sin^2 \theta \cos \theta) = 1 / (\sin 2\theta \sin \theta)$

3º En los métodos de cristal giratorio y difractométrico:

$$L = 1 / (\sin \theta \cos \theta)$$

4º En los métodos de Weissenberg y de Jong-Bouman:

$$L = 1 / \cos \mu \cos \nu \cos \gamma$$

Con μ complemento del ángulo entre el eje de giro y el haz incidente.

ν complemento del semiángulo del cono de difracción para el nivel n

γ proyección de 2θ (entre los haces incidente y reflejado) sobre el nivel 0.

Esta expresión se aplica a las condiciones experimentales:

a/ Haz normal: ($\mu = 0$)

$$L^2 = 1 / (\sin^2 \theta - \sin^4 \theta - \xi_n^2 / 4)$$

b/ Equi-inclinación: ($\mu = -\nu$)

$$L^2 = 1 / (\sin^2 \theta - \sin^4 \theta - (\xi_n^2 / 4)(1 - \sin^2 \theta))$$

c/ Anti-equi-inclinación (se pone $\mu = \nu$)

$$L^2 = 1 / (\sin^2 \theta - \sin^4 \theta - (\xi_n^2 / 4) \sin^2 \theta)$$

d/ Caso general (equi-cono de Jong-B.) ($\sin \mu = \sin \nu - \xi_n$)

$$L^2 = 4/(4 \cos^2 \mu \cos^2 \nu - (\cos^2 \mu + \cos^2 \nu - \xi^2)^2)$$

5º En el método de precesión de Buerger (Mackay):

$$L^2 = 1/\xi^2 \sin^2 \mu, \mu = \text{ángulo de precesión.}$$

EXPRESIONES AUXILIARES:

θ puede calcularse para cada terna hkl a partir de la expresión:

$$\sin^2 \theta = R(11)h^2 + R(22)k^2 + R(33)l^2 + R(12)hk + R(13)hl + R(23)kl$$

$$\text{con } R(11) = \left(\frac{\lambda a^*}{2}\right)^2, \quad \odot$$

$$R(12) = \frac{\lambda^2}{2} a^* b^* \cos \gamma^*, \quad \odot$$

ζ para un giro en derredor del eje de zona uvw,

$$\zeta_1^2 = (4R(11)R(22)R(33) - R(11)R^2(23) - R(22)R^2(13) - R(33)R^2(12) + R(23)R(13)R(12)) / \text{DEN}$$

$$\begin{aligned} \text{DEN} = & (U^2(R(22)R(33) - R^2(23)/4) + VW(R(12)R(13)/2 - R(11)R(23) \\ & + V^2(R(11)R(33) - R^2(13)/4) + UW(R(12)R(23)/2 - R(22)R(13)) \\ & + W^2(R(11)R(22) - R^2(12)/4) + UV(R(13)R(23)/2 - R(33)R(12))) \end{aligned}$$

y para un tipo de reflejo hkl en un nivel n,

$$\zeta_n = \zeta_1 \cdot (hU + kV + lW)$$

$$\xi_h^2 = 4(\sin^2 \theta_h - \zeta_n^2)$$

OBSERVACION: Ambas expresiones P y L se suelen dar simultáneamente por su producto PL, y aun multiplicarlas por un factor geométrico como se ha hecho en el caso tratado por el programa.

D - FACTOR DE DIFUSION ATOMICA, o FACTOR DE FORMA. Como los electrones de un átomo se hallan difundidos en él, no todos vibran en fase al recibir un haz de rayos X, llegando a interferencias parciales que disminuyen la amplitud de difusión del átomo total.

A $\theta = 0$, D sería igual al número atómico; mas luego decrece rápidamente con el aumento de $\sin \theta / \lambda$.

Para el cálculo mediante computadora electrónica se puede emplear la función de Forsyth y Wells (Acta Cryst. 12(1959)412),

$$f(x) = A \exp(-ax^2) + B \exp(-bx^2) + C$$

aplicando sólo los dos primeros términos del 2º miembro para la radiación de $\text{CuK}\alpha$, y todo para la radiación de $\text{MoK}\alpha$. En esa expresión, $x = \sin \theta / \gamma$.

A, a, B, b, C = se pueden consultar en las tablas adjuntas, del citado trabajo.

TABLA I
CONSTANTES ANALÍTICAS PARA EL CÁLCULO
DE LOS FACTORES DE DIFUSIÓN

	<i>A</i>	<i>a</i>	<i>B</i>	<i>b</i>	<i>C</i>
H	0.3882	7.151	0.6011	30.18	0.0076
He	0.9144	3.078	1.045	11.51	0.0370
Li	1.731	2.652	1.072	110.3	0.1767
Be	1.621	1.531	2.096	53.27	0.2631
B	1.574	1.210	2.936	54.04	0.4026
C	1.455	1.462	3.775	22.49	0.7241
N	1.459	2.001	4.471	17.02	1.023
O	2.113	2.867	4.637	14.75	1.211
F	3.258	3.484	4.360	15.44	1.344
F ⁻	4.408	4.565	4.101	24.91	1.406
Ne	4.032	3.189	4.538	12.52	1.397
Na	7.525	4.016	1.755	52.84	1.616
Mg	7.507	3.354	2.781	60.34	1.661
Mg ²⁺	4.497	2.022	4.093	6.126	1.402
Al	7.675	2.834	3.411	67.03	1.772
Si	7.741	2.395	4.275	69.49	1.862
Si ⁴⁺	5.138	1.459	3.442	3.982	1.420
P	7.680	1.946	5.334	50.51	1.874
S	7.603	1.637	6.354	39.98	1.924
Cl	7.511	1.328	7.487	31.76	1.881
Cl ⁻	7.579	1.328	8.336	27.01	1.955
A	7.430	1.087	8.616	19.31	1.884
K ⁺	7.330	0.8785	8.860	14.48	1.759
Ca	7.325	1.807	8.301	19.59	3.787
Cr	8.442	2.052	10.17	20.21	4.648
Cr ²⁺	6.839	1.575	10.44	10.77	4.581
Fe	11.04	2.788	8.630	24.38	5.441
Co	12.13	2.890	8.308	23.44	5.671
Ni	12.76	2.637	8.638	19.88	5.650
Cu	12.87	2.288	9.932	13.92	5.583
Cu ⁺	12.85	2.401	9.215	10.13	5.853
Zn	17.07	3.091	6.338	25.40	6.372
Ga	18.27	3.031	5.919	31.45	6.533
Ge	19.11	2.887	5.968	38.88	6.637
As	19.31	2.616	6.864	35.61	6.642
Rb ⁺	19.51	1.759	9.886	21.53	6.527
Se	15.36	1.980	11.44	21.84	6.804
Br	15.73	1.950	11.81	21.41	7.082
Kr	16.18	1.933	12.09	21.43	7.336
Sr	17.18	1.906	12.60	21.38	7.814
Y	17.63	1.878	12.89	20.92	8.066
Zr	18.18	1.861	13.13	20.85	8.270
Nb	18.52	1.879	13.39	20.38	8.676

	<i>A</i>	<i>a</i>	<i>B</i>	<i>b</i>	<i>C</i>
Mo	18.97	1.854	13.65	19.89	8.903
Ma	19.33	1.842	14.00	19.72	9.172
Ru	19.66	1.797	14.43	19.00	9.359
Rh	20.15	1.824	14.54	19.24	9.771
Pd	20.72	1.818	14.66	19.11	10.05
Ag	21.23	1.857	14.67	19.20	10.50
Cd	21.67	1.793	15.13	19.01	10.57
In	22.03	1.750	15.59	18.46	10.75
Sn	22.32	1.722	16.06	17.93	10.98
Sb	23.00	1.745	16.04	18.16	11.34
Te	23.38	1.710	16.43	17.69	11.56
I	23.98	1.699	16.61	17.93	11.77
Xe	24.27	1.647	17.22	17.44	11.87
Cs	24.98	1.786	16.74	18.56	12.76
Ba	25.47	1.742	17.15	18.16	12.86
La	25.58	1.649	17.91	16.98	12.87
Ce	25.97	1.585	18.52	16.38	12.86
Pr	26.46	1.610	18.53	16.53	13.33
Nd	26.97	1.625	18.62	16.73	13.74
Il	27.50	1.625	18.82	16.80	14.02
Sm	27.74	1.601	19.26	16.36	14.28
Eu	28.30	1.587	19.50	16.25	14.49
Gd	28.74	1.577	19.77	16.27	14.78
Tb	29.16	1.589	19.88	16.04	15.19
Dy	29.71	1.610	19.87	16.02	15.62
Ho	30.21	1.612	20.09	15.95	15.92
Er	30.66	1.597	20.39	15.90	16.13
Tu	31.13	1.555	20.83	15.70	16.23
Yb	31.55	1.581	20.86	15.76	16.73
Lu	32.12	1.582	21.01	16.03	17.04
Hf	32.44	1.604	21.15	16.12	17.55
T	32.90	1.621	21.25	16.15	18.01
W	33.26	1.590	21.69	15.86	18.21
Re	33.66	1.558	22.16	15.57	18.33
Os	33.98	1.545	22.55	15.39	18.63
Ir	34.45	1.523	22.85	15.12	18.79
Pt	34.85	1.542	22.61	14.94	19.30
Au	35.32	1.502	23.37	14.74	19.35
Hg	35.65	1.509	23.56	14.62	19.83
Tl	36.83	2.150	19.37	18.86	24.11
Pb	36.43	1.552	23.70	14.86	20.89
Bi	37.03	1.538	23.91	14.72	21.07
Po	37.37	1.510	24.31	14.30	21.26
85	37.56	1.498	24.76	14.10	21.61
Em	38.25	1.487	24.88	13.90	21.76
87	38.55	1.485	25.21	13.77	22.11
Ra	38.82	1.442	25.86	13.44	22.18
Ac	39.36	1.426	26.14	13.24	22.31
Th	39.88	1.462	25.98	13.41	22.98
Pa	40.21	1.451	26.38	13.31	23.27
U	40.59	1.477	26.34	13.35	23.88

Forsyth y Wells (Acta Cryst. 12(1959)412)

FACTOR DE MULTIPLICIDAD, M

[illegible][illegible]

Existe una revisión posterior de estas constantes analíticas: LEE.J.D. y PAKES.H.W.— Revised analytic constants for atomic scattering factors. Acta Cryst. A25 (1969) 712.

Estos factores de difusión atómica se pueden obtener también a partir de un polinomio de 9º grado, con los coeficientes dados por Brusentsev, F.A. (Soviet Phys. Cryst. 8.3 (1963) 263) en función de Z.

M — **FACTOR DE MULTIPLICIDAD.** El movimiento de un cristal durante su irradiación aumenta la proporción de caras en posición de reflejar, y por lo tanto la posibilidad de intensificar la difracción según su grado de simetría de aquel.

Este factor es

$M = 1$ Mét. de Laue, de ionización, de Weissenberg, Sauter Schiebold,

2 Jong Bouman y precisión

1 Método de cristal giratorio: oscilación. En caso del procedimiento de rotación, $M = N$ para reflejos generales, y $M = 2N$ para los demás, siendo N el período del eje de giro.

Tratándose de diagramas de polvo, este factor suele ser mayor, cual se puede ver en la tabla II.

T — **FACTOR DE TEMPERATURA.** Debido a la agitación térmica, los átomos vibran en derredor de las posiciones de equilibrio que tienen en el retículo cristalino. Este movimiento, que se restringe en el cero absoluto para dar difracciones nítidas, se incrementa con la temperatura, llegando a debilitar y difundir sus intensidades.

Debye calculó el factor de temperatura en e^{-2M} , siendo $M = B(\sin^2 \theta) / \lambda^2$. B es a su vez función de otras magnitudes; mas para el objeto perseguido por un cristalógrafo, lo mejor es limitar a ésta la extensión de la función, buscando en tablas los valores empíricos asignados para B en vibración isotropa (en cristales cúbicos). Cf. TABLA. Luego se podrá determinar exactamente B a partir de la estructura ya establecida, calculando ese coeficiente en sus vibraciones anisótropas concretas. Los valores de B son por lo general magnitudes comprendidas entre 0 y 2 con gradación aproximada en función de la dureza de la sustancia.

Los factores de temperatura de cada átomo se pueden multiplicar por sus respectivos factores de difusión atómica antes de efectuar el producto total de la expresión de intensidades.

Tabla III
COEFICIENTES DE DEBYE, B

Calculados para temperatura ambiente, según los límites de las temperaturas características halladas experimentalmente.

Elementos con estructuras cúbicas				Elementos con estructuras no cúbicas			
Li	4.99	—	1.81	Be	0.165	—	0.065
Na	6.075	—	1.81	Mg	1.285	—	0.885
K	7.90	—	2.82	Zn	1.085	—	0.425
Rb	11.15	—	5.07	Cd	1.875	—	0.87
Cs	13.50	—	8.29	Hg	3.525*	—	0.405*
Cu	0.445	—	0.34	La	1.24	—	0.925
Ag	0.58	—	0.505	Gd		0.815	
Au	0.625	—	0.405	U		0.295	
Ca	1.44	—	1.305	B	0.075	—	0.006
Sr	1.545	—	1.355	Ga	2.775	—	0.685
Ba		1.68		In	4.51	—	1.58
Al	0.645	—	0.47	Tl	1.645	—	1.515
Th	0.61	—	0.435	Ti	0.45	—	0.26
C (diam)	0.023	—	0.012	Zr	0.475	—	0.35
Si	0.24	—	0.16	Hf		0.345	
Ge	0.87	—	0.205	Sn (blan)	0.935	—	0.34
Sn (gris)		0.335		As	0.74	—	0.435
Pb	3.22	—	1.35	Sb	1.25	—	0.585
V	0.57	—	0.27	Bi	3.98	—	1.01
Nb	0.46	—	0.31	S		0.817	
Ta	0.29	—	0.25	Se	2.085		
Cr	0.28	—	0.18	Te	1.655		
Mo	0.20	—	0.165	Re	0.19	—	0.145
W	0.20	—	0.09	I		1.10	
Mn	0.365	—	0.255	Co	0.275		
Fe	0.355	—	0.185	Ru	0.15	—	0.125
Ni	0.295	—	0.17	Os	0.23	—	0.215
Rh	0.25	—	0.175				
Pd	0.365	—	0.32				
Ir		0.17					
Pt	0.28	—	0.225				

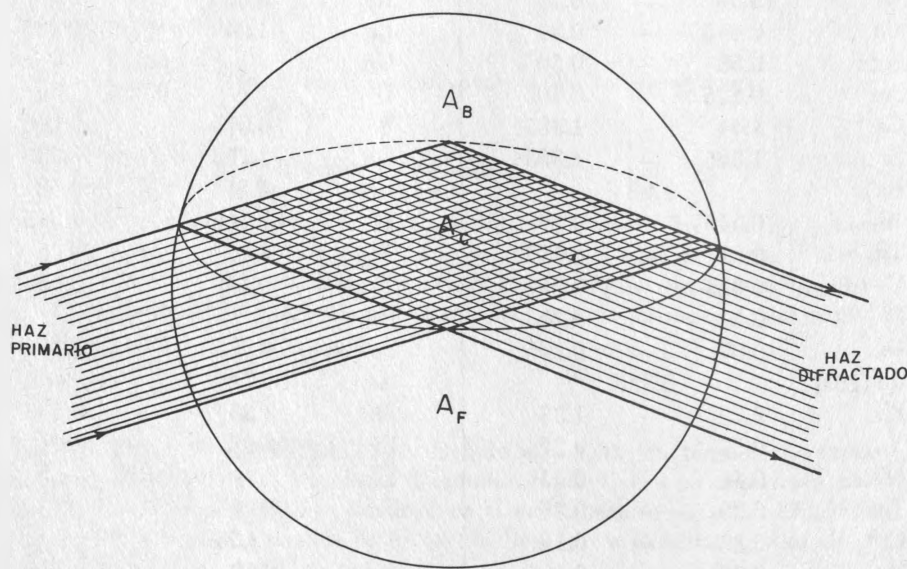
*) Corresponde a 93°K

**) Prácticamente se toma como factor el término medio de los indicados.

Int. Tab. 3(1962)234,238

A - FACTOR DE ABSORCION. El haz incidente que atraviesa al cristal es absorbido parcial y diferentemente por cada una de sus partes. Este factor suele ser difícil de determinar, y como actúa en sentido contrario al de temperatura (también de cálculo complicado e inseguro) se suele prescindir de ambos en los casos ordinarios.

Su cálculo es muy especializado para cada forma de cristal. Si éste llegase a tener aspecto cilíndrico, o tratándose de las barritas confeccionadas para el método de polvo, su determinación se hace más sencilla. La acción de los rayos X distingue en estos casos tres zonas de acción, según Bradley (Proc. Phys. Soc.(London) 47(1935)879).



El coeficiente de transmisión A es,

$$A = \sum_{n=1}^7 \frac{a_n n!}{\mu^n R^n}$$

$$= a(\mu R)^{-1} + b(\mu R)^{-2} + c(\mu R)^{-3} + \dots$$

con

$$a = \frac{1}{\pi} \left(1 - \frac{\log(\sec \theta + \tg \theta)}{\sec \theta \tg \theta} \right)$$

$$b = \frac{1}{\pi} \left(2 \sin 2\theta \right)$$

$$c = \frac{1}{\pi} \left(-\frac{1}{4} + \frac{3}{4} \cos^2 \theta \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{\log(\sec \theta + \tg \theta)}{\sec \theta \tg \theta} \right) \right)$$

debiendo tenerse en cuenta que para $\theta = 0^\circ$ y $\theta = 90^\circ$,

$$A = \frac{1}{\pi} (\mu R)^{-4} - \frac{1}{16\pi} (\mu R)^{-3}$$

Estos coeficientes de la expresión anterior (a,b,c) se hallan tabulados en las Tablas Internacionales, vol.II, pág. 229.

R = radio del cilindro de polvo irradiado

μ = coeficiente de absorción lineal.

Luego de calculado el coeficiente A de transmisión, se pasa al A^* de absorción,

$$A^* = \frac{1}{A}$$

para multiplicarlo directamente por los otros factores de intensidad.

CALCULO DEL COEFICIENTE DE ABSORCION LINEAL, $\mu = \rho \sum \mu^*$

El coeficiente de absorción lineal de una sustancia es el producto de su densidad ρ por su coeficiente de absorción de masa $\mu^* = \frac{\mu}{\rho}$

$$\mu = \rho \left(p \left(\frac{\mu}{\rho} \right)_A + p \left(\frac{\mu}{\rho} \right)_B + p \left(\frac{\mu}{\rho} \right)_C + \dots \right) = G \sum p \left(\frac{\mu}{\rho} \right)$$

Así por ejemplo, en el mineral durangita, $\text{Na}(\text{Al}, 2 \text{ Fe}) [\text{F}, \text{O} | \text{AsO}_4]$

$$\rho = 3.921$$

ρ = porcentajes analíticos de sus elementos

μ/ρ = coeficiente de absorción en masa para $\text{CuK}\alpha$

	%	μ/ρ	$\rho (\mu/\rho)$
As	34.19	76.50	2615.53
Al	10.79	48.70	525.47
Na	11.01	30.90	340.21
F	8.00	17.50	140.00
Fe	4.62	324.00	1496.88
Mn	0.59	284.00	167.56
O	30.49	12.70	387.22
	99.69		5672.87 : 100 = 56.7287

$$\mu = 3.921 \quad 56.7287 = 222.4332 \text{ cms}^{-1}$$

Brown en Paiser (1960) da como factor de absorción para casos análogos al tratado $\exp(-\mu t \sec \theta)$.

F - FACTOR DE ESTRUCTURA. El factor de estructura está condicionado a la reiteración de los motivos moleculares (o atómicos), por las traslaciones de la red. Cada átomo del motivo puede considerarse como origen de una red de puntos idénticos, de modo que el cristal puede tenerse como el conjunto de todas esas redes interpenetrantes, de idénticas dimensiones y orientación semejante. Sus respectivos espacios interplanares son los mismos, e idénticos los ángulos de reflexión. La difracción resultante de dos series de planos no está en fase, aunque las dos ondas difractadas tengan el mismo período y la misma longitud: su amplitud resulta de su interferencia parcial.

Se llama factor de estructura $F(hkl)$ al efecto de la ordenación atómica sobre la intensidad de las difracciones. En la expresión de intensidades entra como $F^2(hkl)$.

$$F(hkl) = f_1 \cdot e^{i\varphi_1} + f_2 \cdot e^{i\varphi_2} + f_3 \cdot e^{i\varphi_3} + \dots + f_N \cdot e^{i\varphi_N} + \sum f_N \cdot e^{i\varphi_N}$$

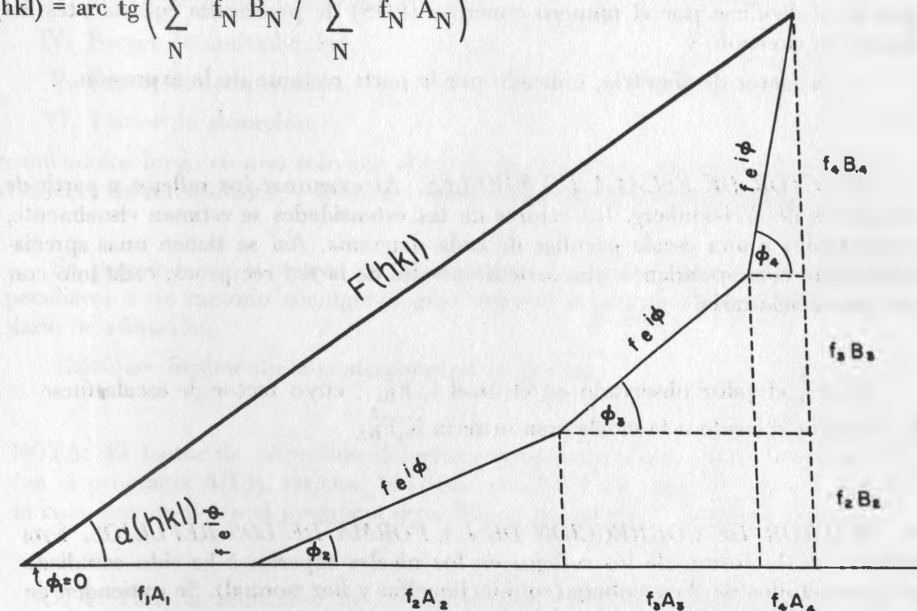
Aquí f_N representa al factor D de difusión atómica, para cada uno de los átomos integrantes.

Esta expresión puede darse en forma trigonométrica,

$$F(hkl)^2 = \left[\sum_N f_N \cos 2\pi(hx_N + ky_N + lz_N) \right]^2 + \left[\sum_N f_N \sin 2\pi(hx_N + ky_N + lz_N) \right]^2$$

$$= \left[\sum_N f_N A_N \right]^2 + \left[\sum_N f_N B_N \right]^2$$

$$\alpha(hkl) = \arctg \left(\frac{\sum_N f_N B_N}{\sum_N f_N A_N} \right)$$



En esas expresiones,

α es el ángulo de fase, del que depende el signo de F^2

x_N, y_N, z_N son las coordenadas del átomo N en la celda elemental, expresadas como fracción de sus traslaciones.

$\sum \sum$ la doble suma se refiere: una, a las posiciones de los átomos (factor trigonométrico o geométrico); la otra, a las especies de átomos (factor f de forma).

La expresión general del factor de estructura F tiene sus aplicaciones especiales a los diferentes grupos espaciales. Así, la presencia de centro de simetría elimina los términos seno, la de éste con otros elementos de simetría crea un coeficiente o factor de posiciones atómicas análogas, etc. Se pueden consultar esas formas especializadas de F para cada uno de los grupos de simetría, en el Vol.I de las Tablas Internacionales.

Se notará que las expresiones del factor de estructura constan de dos factores:

— un coeficiente numérico o factor de posiciones equivalentes generales, que habrá de dividirse por el número concreto (POS) de posiciones equivalentes del átomo en cuestión, y

— un factor de simetría, indicado por la parte restante de la expresión.

E — FACTOR DE ESCALA DE NIVELES. Al examinar los reflejos a partir de diagramas de Weissenberg, los valores de las intensidades se estiman visualmente, refiriéndolos a una escala peculiar de cada diagrama. Así se tienen unas apreciaciones que corresponden a una serie de niveles de la red recíproca, cada uno con una escala arbitraria.

Sea F_h^2 el valor observado en el nivel i , F_{hi}^2 , cuyo factor de escala fuese K_i . Su valor referido a la escala común sería $K_i F_{hi}^2$.

W — FACTOR DE CORRECCION DE LA FORMA DE LOS REFLEJOS. Esta variación de la forma de los reflejos en los niveles superiores ha sido estudiada para los métodos de Weissenberg (equi-inclinación y haz normal). Se extienden de un lado del diagrama y contraen del otro.

Owston da el factor de corrección

$$I = I_{(\text{medida})} (1 \pm K \cos \theta) \quad K = \text{constante empírica.}$$

con signo dependiente del lado del diagrama en el que la mancha se extiende o se contrae.

EJEMPLOS DE CALCULO

En los programas que siguen se propone como ejemplo el cálculo primario de los factores de estructura y de las intensidades del mineral Livingstonita, HgSb_4S_8 , grupo espacial $C2/c$, $C(2h)6$, Núm. 15, segunda posición, de las tablas Internacionales, con base en su diagrama de polvo. El cálculo se trata en su forma más generalizada para poderlo aplicar a otros casos.

En los primeros programas se calculan por separado:

- I. Algunas constantes necesarias. (Perfora tarjetas para ser utilizadas en los demás).
- II. Factores de Lorentz y de polarización
- III. Factor de difusión atómica.
- IV. Factor de multiplicidad.
- V. Factor de temperatura.
- VI. Factor de absorción.

reuniéndolos luego en uno solo con el factor de estructura, que es el definitivo para el cálculo de intensidades, y funciona independientemente de los demás.

Se prescinde de los otros factores citados en las páginas anteriores, por ser peculiares a un método roentgenológico especial o propios de un cálculo secundario de afinación.

Calcúlase finalmente la centrosimetría de la red.

NOTA: El factor de estructura del grupo considerado tiene sólo componente A (en el programa A(L)), tarjetas 144-165, con B=0. En caso de requerir también la componente B (en el programa sería B(L)), se calcularía de modo análogo.

NOTA: Para la reducción de las intensidades FSQ a porcentajes, se habrá de tomar el mayor valor de FSQ como 100. Una indicación valiosa es el compararlo con el correspondiente a la intensidad observada como más intensa; mas de no resultar correcto, se habría de correr de nuevo el programa con base en el FSQ ya conocido como mayor.

En los comentarios que encabezan cada programa se encuentra indicación de las tarjetas de entrada requerida para su funcionamiento.

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

C CALCULO CRISTALOGRAFICO.
C CALCULO DE CONSTANTES AUXILIARES THETA (EN GRADOS), SEN THETA/LAMBDA,
C SEN TH/LAMBDA**2, ZETA, XI. PARA CADA TERNO S, T, U.
C
C F.J.FABREGAT GUINCHARD.
C FORTRAN. BURROUGHS 5500.
C
C TARJETAS DE DATOS
C TARJETA 1.- CONSTANTES RETICULARES RECIPROCAS DEL CRISTAL (LOS ANGULOS
C POR SUS COSENUOS).(FORMATO 2)
C TARJETA 2.- LONGITUD DE ONDA EMPLEADA. (FORMATO 1).
C TARJETA 3.- METODO HUENTGENUGRAFICO UTILIZADO, MET.(FORMATO 8)
C 1 = METODOS DE LAUE
C 2 = METODOS DE POLVO
C 3 = METODOS DE CRISTAL GIRATORIO (OSCILACION) Y DIFRACTOMETR.
C 4 = METODO DE CRISTAL GIRATORIO. ROTACION.
C 5 = METODO DE WEISSENBERG. HAZ NORMAL
C 6 = ID. EQUI-INCLINACION
C 7 = ID. ANTI-EQUI-INCLINACION
C 8 = ID. CASO GENERAL
C 9 = METODO DE PRECESION DE JUERGER.
C TARJETA 4.- EJE DE GIRO PVW, DEL CRISTAL Y ORDEN GIR DE DICHO EJE,
C (FORMATO 6).
C CUANDO SEA MET = 1 A 3, SE PONDRAN 0 0 0.
C CUANDO SEA MET = 4, SE REQUIERE GIR, NO ASI EN LOS DEMAS CASOS.
C CUANDO SEA MET = 5 A 9, SE PONDRAN SUS RESPECTIVOS VALORES
C TARJETA 5 Y SS.- SIMBOLOS STU DE LOS REFLEJOS. UNA TERNA EN CADA TARJETA,
C ULTIMA TARJETA.- LA ULTIMA TARJETA DEBERA LLEVAR 999. PARA INDICAR EL CAMB
C BIO.

```

C ESTE PROGRAMA PERFORA TARJETAS, QUE SE EMPLEARAN EN EL CALCULO DE LOS
C FACTORES SIGUIENTES.
C .....
C

      DIMENSION AS(3), COSAS(3)
      READ 2, ALE, ALI, ALD, ALU, AS(1), AS(2), AS(3), COSAS(1), COSAS(2), COSAS
      1(3)
      PRINT 16
16 FORMAT (" CALCULO DE INTENSIDADES. PROGRAMA PRIMER0",/)
      PRINT 17
17 FORMAT (" CALCULO DE CONSTANTES AUXILIARES, THETA, SEN TH, (SEN TH
      1)**2, ZETQ, XIQ, ",/)
      2 FORMAT(3A4, A3, 3F9.6, 3F12.8)
      PRINT 7, ALE, ALI, ALD, ALU
      7 FORMAT(9H MINERAL=, 3A4, A3/)
      READ 1, ALAMB
      PRINT 5, ALAMB
      5 FORMAT(6H LAMBDA=, F10.6 //)
      1 FORMAT (F10.6)
      ALAM2=.5*ALAMB
      PRINT 10
10 FORMAT(60H      A*          H*          C*      COS ALFA* COS BETA* COS G
      1AMA*//)
      PRINT 11, AS(1), AS(2), AS(3), COSAS(1), COSAS(2), COSAS(3)
11 FORMAT(3F9.6, 3F12.5//)
      PRINT 9
      9 FORMAT(2X, 77H S   T   U       TH       SE       ES       ZETQ
      1   XIQ                      ,/)
      READ 8, MET

```

```

      8 FORMAT(14)
      READ 6, P, V, H, GIH
      6 FORMAT (4F4.0)
40 READ 3, S, T, U
      3 FORMAT (3F4.0)
      IF(S.EQ.999.) GO TO 15
      R11=(ALAM2*AS(1))**2
      R22=(ALAM2*AS(2))**2
      R33=(ALAM2*AS(3))**2
      R12=((ALAM2**2)/2.)*AS(1)*AS(2)*COSAS(3)
      R23=((ALAM2**2)/2.)*AS(2)*AS(3)*COSAS(1)
      R31=((ALAM2**2)/2.)*AS(1)*AS(3)*COSAS(2)
      SENQ=R11*S**2+R22*T**2+R33*U**2+R12*S*T+R31*S*U+R23*T*U
      SE=SQRT(SENQ)
      ES=SE**2
      TH=ARSIN(SE)
      GO TO (16, 18, 18, 18, 14, 14, 14, 14, 14), MET
C   CALCULO DE ZET PARA UN EJE DE GIRO PVH
14 NUM=4.*(R11*R22+R33-(R23**2)*R11-(R31**2)*R22-(R12**2)*R33+R23*R31*
      1R12
      DEN=(P**2)*(R22*R33-(R23/2)**2)+V**2*((R12*R31)/2-R11*R23)
      1+(V**2)*(R11*R33-(R31/2)**2)+P**2*((R12*R23)/2-R22*R31)
      2+(W**2)*(R11*R22-(R12/2)**2)+P*V*((R31*R23)/2-R33*R12)
      ZQ1=(NUM/DEN)
      ZEQ=ZQ1*((S*P+T*V+U*W)**2)
C   CALCULO DE XI PARA EL MISMO EJE PVH DE GIRO.
      XIQ=4.*(SENQ-ZEQ)
13 PRINT4, S, T, U, TH, SE, ES, ZEQ, XIQ
      4 FORMAT (2X, 3F4.0, 5F10.6)
      PUNCH 20, S, T, U, SE, ES, TH, ZEQ, XIQ
20 FORMAT (2X, 3F4.0, 3X, 5F10.6)

```

```

GO TO 40
18 PRINT 19, S, T, U, TH, SE, ES
19 FORMAT (2X,3F4.0,3F10.6)
PUNCH 21, S, T, U, SE, ES, TH
21 FORMAT (2X,3F4.0,3F10.6)
GO TO 40
15 CONTINUE
STOP
END

```

CÁLCULO DE INTENSIDADES. PROGRAMA PRIMERO

CÁLCULO DE CONSTANTES AUXILIARES. THETA = SEN TH * (SEN TH)**2. ZEIQ = XIQ.

MINERAL=LIVINGSTONITA

LAMBDA= 1.541780

A*	B*	C*	COS ALFA*	COS BETA*	COS GAMA*
0.034640	0.249200	0.048210	0.000000	0.24531	0.000000

S	T	U	TH	SE	ES	ZEIQ	XIQ
0.	0.	4.	0.149211	0.148658	0.022099		
-4.	0.	4.	0.178602	0.177654	0.031561		
2.	1.	1.	0.204855	0.203425	0.041382		
-8.	0.	2.	0.223705	0.221844	0.049215		
-4.	0.	6.	0.243675	0.241270	0.059211		
0.	0.	6.	0.224878	0.222988	0.049723		
2.	1.	3.	0.232118	0.230040	0.052918		
-6.	1.	3.	0.273230	0.269843	0.072815		
6.	1.	1.	0.257162	0.254337	0.064687		
-8.	0.	6.	0.303850	0.299196	0.089518		
4.	0.	6.	0.255872	0.253089	0.064054		
-6.	1.	5.	0.310676	0.305703	0.093454		
6.	1.	3.	0.281550	0.277845	0.077198		
-2.	1.	7.	0.331186	0.325165	0.105732		
12.	0.	0.	0.326198	0.320444	0.102684		
-8.	0.	8.	0.363244	0.355309	0.126244		
2.	1.	7.	0.336489	0.330364	0.109140		
4.	0.	8.	0.327871	0.322028	0.103702		
-12.	0.	6.	0.388719	0.379003	0.143643		
12.	0.	2.	0.339867	0.333362	0.111130		
-2.	1.	9.	0.396920	0.386580	0.149444		
-12.	0.	8.	0.437362	0.423551	0.179396		
-8.	0.	10.	0.430315	0.417157	0.174020		
0.	2.	0.	0.394354	0.384212	0.147619		
4.	0.	10.	0.403823	0.392937	0.154399		
-16.	0.	2.	0.443564	0.429161	0.184179		
-4.	2.	4.	0.437080	0.423296	0.179180		
-10.	1.	9.	0.474972	0.457313	0.209136		
-14.	1.	5.	0.466987	0.450198	0.202679		
-2.	1.	11.	0.468884	0.451891	0.204205		
0.	0.	12.	0.462264	0.445975	0.198894		
16.	0.	2.	0.453532	0.438143	0.191969		
-14.	1.	11.	0.606666	0.570131	0.325050		

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

C CALCULO CRISTALOGRAFICO.
 C CALCULO DE LOS FACTORES DE LORENTZ Y POLARIZACION
 C
 C F.J.FABREGAT GLINCHARD.
 C FORTRAN. BURROUGHS 5500.
 C
 C TARJETAS DE DATOS
 C TARJETA 1.- INDICACION DEL METODO ROENTGENOGRAFICO (MET) EMPLEADO.(FOR-
 C MATO 73).
 C 1 = METODOS DE LAUE
 C 2 = METODOS DE POLVO
 C 3 = METODO DE CRISTAL GIRATORIO. OSCILACION.
 C 4 = METODO DE CRISTAL GIRATORIO. ROTACION.
 C 5 = METODO DE WEISSENBERG. HAZ NORMAL
 C 6 = ID. EQUI-INCLINACION
 C 7 = ID. ANTI-EQUI-INCLINACION
 C 8 = ID. CASO GENERAL
 C 9 = METODO DE PRECESION DE BUENGER.
 C TARJETA 2.- EJE DE GIRO PVN DEL CRISTAL Y ORDEN GIR DE DICHO EJE.(FOR.77)
 C CUANDO MET = 1 A 3. SE PONDRAN CEROS.
 C CUANDO MET = 5 A 9. SE REQUIERE PVN.
 C SE PUEDE PRESCINDIR DE GIR PARA EL CALCULO DE ESTE FACTOR.
 C TARJETA 3.- LOS ANGULOS MU Y NU EN GRADOS Y FRACCION DECIMAL, QUE SE HU-
 C BIEREN EMPLEADO EN EL PROCEDIMIENTO DE WEISSENBERG.(FORMATO 74). EN
 C LOS OTROS PROCEDIMIENTOS SE SUPONE EL HAZ NORMAL. DE EMPLEAR ESOS ANGUL
 C LOS TAMBIEN EN ESTOS, HABRIA QUE AJUSTAR EL PROGRAMA.
 C ASI. SOLO SE REQUIEREN DICHS VALORES CUANDO SEA MET=8 (EN LOS 5.
 C 6 Y 7 DE WEISSENBERG SE EMPLEAN LAS COORDENADAS CILINDRICAS).

C EN TODO OTRO CASO SE PONDRÁ LA TARJETA CON 0. 0.
 C TARJETA 4.- EL ANGULO (-MU) DE PRECESION.(FORMATO 75). SOLO SE REQUIERE
 C CUANDO MET=9. EN TODO OTRO CASO SE PONDRÁ LA TARJETA CON 0.
 C TARJETA 5 Y 5S.- CON EL PAQUETE DE TARJETAS PERFORADAS POR EL PROGRAMA
 C ANTERIOR (NO. 45).
 C ULTIMA TARJETA.- CON 999. EN SUS COLUMNAS 3 A 6. PARA INDICAR EL FINAL.
 C
 C
 C

1 PRINT 65	1
65 FORMAT (" CALCULO DE INTENSIDADES. PROGRAMA SEGUNDO ".,/)	1
PRINT 66	1
66 FORMAT (" FACTORES DE POLARIZACION Y DE LORENTZ ".,/)	1
READ 73, MET	1
73 FORMAT (I4)	1
READ 77, P, V, W, GIR	2
77 FORMAT (4F4.0)	3
READ 74, BMU, HNU	4
74 FORMAT (2F12.5)	5
READ 75, CPU	6
75 FORMAT(F12.5)	7
PRINT 67, MET	8
67 FORMAT (" METODO ROENTGENOGRAFICO EMPLEADO = ".,I4.,/)	9
IF(MET.NE.7) GO TO 69	10
PRINT 68, BMU, HNU	11
68 FORMAT (10X,32H ANGULOS EXPERIMENTALES. MU = ,F9.5,8H NU = ,	12
IF9.5,/,/)	13
GO TO 71	14
69 IF(MET.NE.8) GO TO 71	15

```

PRINT 70, CMU
70 FORMAT (10X,30H ANGULO DE PRECESION, -MU = ,F9.5,/)
GO TO 71
71 PRINT 72
72 FORMAT (3X,44H S T L POL LOR P+L ,/)
73 GO TO (79,79,79,79,50,50,50,50,50), MET
79 READ 80, S, T, U, SE, ES, TH
80 FORMAT (2X,3F4.0,3X,3F10.6)
GO TO 81
80 READ 51, S, T, U, SE, ES, TH, 2EQ, XIQ
51 FORMAT (2X,3F4.0,3X,5F10.6)
81 CONTINUE
IF(S, EQ, 999.) GO TO 52
IF(1, -SE) 53, 55, 55
55 CUA=SE**2
C
C FACTOR DE POLARIZACION
POL=(1.+(COS(2.*TH))**2)/2.
C
C FACTOR DE LORENTZ
ZETN=SQRT(ZEQ)
GO TO (56,57,58,58,59,60,61,62,63), MET
C
A. PARA EL METODO DE LAUE
56 PLO=1./CUA
GO TO 64
C
B. PARA EL METODO DE POLVO
57 PLO=2./(((SIN(TH))**2)+COS(TH))
GO TO 64
C
C. PARA METODOS DE CRISTAL GIRATORIO Y DIFRACTOMETRICO
58 CTH=COS(TH)

```

```

PLO=1./(SE+CTH)
GO TO 64
C
D. PARA WEISSENBERG, HAZ ACRUAL.
59 PLO=SQRT(1./(CLA=CLA**2-ZETN/4.))
GO TO 64
C
E. PARA WEISSENBERG, EQUI-INCLINACION.
60 PLO=SQRT(1./(CLA=CLA**2-((ZETN/4.)*(1.-CUA))))
GO TO 64
C
F. PARA WEISSENBERG, ANTI-EQUI-INCLINACION.
61 PLO=SQRT(1./(CLA=CLA**2-(ZETN/4.)*CUA))
GO TO 64
C
G. PARA WEISSENBERG, CASO GENERAL (Y EQUI-CUNG DE JENG=BCUXAN)
62 RAM=BMU*1.5707963/90.
RAN=RNU*1.5707963/90.
COM=COS(RAM)
CON=COS(RAN)
PLO=SQRT(1./(4.+(COM**2)*(CON**2)-(COM+CON*XIQ)**2))
GO TO 64
C
H. PARA EL METODO DE PRECISION DE PLERGEN.
63 RBN=CNV*1.5707963/90.
SEM=SIN(RBN)
PLO=SQRT(1./(XIQ*(SEM**2)))
C
C CONJUNTO DE AMBOS FACTORES
64 ZZ=POL+PLO
PRINT 76, S, T, U, POL, PLO, ZZ
76 FORMAT (2X,3F4.0,3X,2F10.6,3X,F10.6)
53 CONTINUE
GO TO 78
52 CONTINUE

```

STOP
END

CALCULO DE INTENSIDADES. PROGRAMA SEGUNDO

FACTORES DE POLARIZACION Y DE LORENTZ

METODO ROENTGENGRAFICO EMPLEADO 2

S	T	U	PCL	LCH	P*L
0.	0.	4.	0.956778	91.517961	87.562407
-4.	0.	4.	0.938870	64.393783	60.457411
2.	1.	1.	0.920661	49.362561	45.446193
-8.	0.	2.	0.906415	41.676775	37.776446
-4.	0.	6.	0.890354	35.403338	31.521507
0.	0.	6.	0.905498	41.261422	37.362137
2.	1.	3.	0.899765	38.835811	34.943086
-6.	1.	3.	0.864974	28.524923	24.673306
6.	1.	1.	0.878994	31.969276	28.100814
-8.	0.	6.	0.836990	23.414380	19.597613
4.	0.	6.	0.880098	32.274364	28.404592
-6.	1.	5.	0.830559	22.476957	18.668449
6.	1.	3.	0.857523	26.969362	23.126856
-2.	1.	7.	0.810894	20.002723	16.220093
12.	0.	0.	0.815720	20.561438	16.772368
-8.	0.	8.	0.779387	16.948213	13.209217
2.	1.	7.	0.805543	19.415134	15.639719
4.	0.	8.	0.814104	20.371175	16.584255
-12.	0.	6.	0.753980	15.045850	11.344269
12.	0.	2.	0.802440	19.088837	15.317641
-2.	1.	9.	0.745779	14.511107	10.822083
-12.	0.	8.	0.705574	12.306970	8.683482
-8.	0.	10.	0.712526	12.645790	9.010452
0.	2.	0.	0.748345	14.674778	10.981798
4.	0.	10.	0.738680	14.086468	10.408206
-16.	0.	2.	0.699485	12.022411	8.409500
-4.	2.	4.	0.705852	12.320206	8.696240
-10.	1.	9.	0.669204	10.753526	7.196303
-14.	1.	5.	0.576801	11.051117	7.479402
-2.	1.	11.	0.674989	10.978983	7.410690
0.	0.	12.	0.681329	11.234735	7.654554
16.	0.	2.	0.689766	11.590014	7.994393
-14.	1.	11.	0.561215	7.489348	4.203134

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

```

C  PROGRAMA PARA EL CALCULO DE INTENSIDADES
C  FACTOR DE DIFUSION ATOMICA (FACTOR DE FORMA), FR
C
C  F.J.FABREGAT GUINCHARO.
C  FORTRAN =  BUHROUGHS 5500
C
C  TARJETAS DE DATOS
C
C  TARJETA 1.- RADIACION RON EMPLEADA
C
C          RON = 1, RADIACION DE CU K ALFA
C          RON = 2, RADIACION DE MO K ALFA
C
C  NUMERO N DE ESPECIES DE ATOMOS, (FORMATO 41).
C
C  TARJETA 2M.- TARJETAS CON LOS VALORES DE LA TABLA DE FORSYTH Y WELLS (AC-
C          TA CHYST.12(1959)412), UNA PARA CADA ESPECIE DE ATOMO, (FORMATO 42).
C
C  EN CADA UNA SE PONDRAN LOS 4 PRIMEROS VALORES Y O. COMO QUINTO, HABIENTE
C  DO EMPLEADO LA RADIACION DE COBRE.
C
C  DE HABER EMPLEADO LA RADIACION DE POLIBRENO, SE ESCRIBIRAN LOS CINCO.
C
C  TARJETA 3M.- UNA TARJETA PARA EL SIMBOLO QUIMICO DE CADA ESPECIE DE ATOMO.
C
C          (FORMATO 46).
C
C  TARJETA 4 Y 5S.- PAQUETE DE LAS TARJETAS PERFORADAS POR EL PROGRAMA 45.
C
C  ULTIMA TARJETA.- CON 999. EN SUS COLUMNAS 3 A 6 PARA INDICAR FINAL.
C
C
C  .....
C

```

DIMENSION AU(15),AL(15),BU(15),BL(15),ACO(3),FR(3),C(15)

READ 41, RON,M

41 FORMAT (F10.5,2X,12)

PRINT 56

```

56 FORMAT (1X,"CALCULO DE INTENSIDADES. PROGRAMA TERCERO",/)
PRINT 57
57 FORMAT (1X,"CALCULO DE LOS FACTORES DE DIFUSION ATOMICA",/)
DO 50 J=1,M
READ 42,AU(J),AL(J),BU(J),BL(J),C(J)
42 FORMAT (5F6.3)
50 CONTINUE
GO TO (53,54), KCM
54 PRINT 52
52 FORMAT (1X,"RADIACION EMPLEADA = MO K ALFA ",/)
GO TO 55
53 PRINT 51
51 FORMAT (1X,"RADIACION EMPLEADA = CU K ALFA ",/)
55 CONTINUE
READ 46,(ACQ(K), K=1,3)
46 FORMAT (A4)
PRINT 58
58 FORMAT (4X,"S T U FACT.DIFUS",10X,"ATUMOS",/)
5 READ 3,S,T,U,ES
3 FORMAT (2X,3F4.0,13X,F10.6)
IF(S.EQ.999.) GO TO 16
ES=ES/(RON**2)
DO 15 J=1,M
FR(J)=AU(J)*EXP(-AL(J)*ES)+BU(J)*EXP(-BL(J)*ES)+C(J)
PRINT 12,S,T,U,FR(J),ACQ(J)
12 FORMAT (2X,3F4.0,3X,F10.6,10X,A4)
15 CONTINUE
GO TO 5
16 CONTINUE
STOP
END

```

CALCULO DE INTENSIDADES. PROGRAMA TERCERO
 CALCULO DE LOS FACTORES DE DIFUSION ATOMICA

RADIACION EMPLEADA = CU K ALFA

S	T	U	FACT.DIFUS	ATOMOS
0.	0.	4.	51.536103	HG
0.	0.	4.	32.867714	SB
0.	0.	4.	9.959144	S
-4.	0.	4.	48.843856	HG
-4.	0.	4.	30.810068	SB
-4.	0.	4.	9.019244	S
2.	1.	1.	46.357354	HG
2.	1.	1.	28.963107	SB
2.	1.	1.	8.319877	S
-8.	0.	2.	44.571710	HG
-8.	0.	2.	27.669497	SB
-8.	0.	2.	7.902714	S
-4.	0.	6.	42.711466	HG
-4.	0.	6.	26.351667	SB
-4.	0.	6.	7.531852	S
0.	0.	6.	44.461451	HG
0.	0.	6.	27.590534	SB
0.	0.	6.	7.879025	S
2.	1.	3.	43.782650	HG
2.	1.	3.	27.106766	SB
2.	1.	3.	7.738095	S
-6.	1.	3.	40.065790	HG
-6.	1.	3.	24.530534	SB
-6.	1.	3.	7.094408	S
6.	1.	1.	41.485218	HG
6.	1.	1.	25.499819	SB
6.	1.	1.	7.317559	S
-8.	0.	6.	37.510289	HG
-8.	0.	6.	22.830172	SB
-8.	0.	6.	6.743950	S
4.	0.	6.	41.601197	HG
4.	0.	6.	25.579811	SB
4.	0.	6.	7.336913	S
-6.	1.	5.	36.969927	HG
-6.	1.	5.	22.477770	SB
-6.	1.	5.	6.675958	S
6.	1.	3.	39.350895	HG
6.	1.	3.	24.049129	SB
6.	1.	3.	6.990586	S
-2.	1.	7.	35.414212	HG
-2.	1.	7.	21.476271	SB
-2.	1.	7.	6.487365	S
12.	0.	0.	35.783154	HG
12.	0.	0.	21.712083	SB
12.	0.	0.	6.531368	S
-8.	0.	8.	33.186810	HG
-8.	0.	8.	20.072585	SB
-8.	0.	8.	6.224319	S
2.	1.	7.	35.014244	HG
2.	1.	7.	21.221761	SB
2.	1.	7.	6.439978	S

4.	0.	8.	35.658723	HG
4.	0.	8.	21.632438	SB
4.	0.	8.	6.516490	S
-12.	0.	6.	31.587618	HG
-12.	0.	6.	19.081850	SB
-12.	0.	6.	6.030216	S
12.	0.	2.	34.786588	HG
12.	0.	2.	21.077408	SB
12.	0.	2.	6.413108	S
-2.	1.	9.	31.102877	HG
-2.	1.	9.	18.783456	SB
-2.	1.	9.	5.969199	S
-12.	0.	8.	28.905694	HG
-12.	0.	8.	17.435061	SB
-12.	0.	8.	5.673078	S
-8.	0.	10.	29.267074	HG
-8.	0.	10.	17.656858	SB
-8.	0.	10.	5.724350	S
0.	2.	0.	31.253007	HG
0.	2.	0.	18.875802	SB
0.	2.	0.	5.988233	S
4.	0.	10.	30.705723	HG
4.	0.	10.	18.539415	SB
4.	0.	10.	5.918204	S
-16.	0.	2.	28.594594	HG
-16.	0.	2.	17.243939	SB
-16.	0.	2.	5.628021	S
-4.	2.	4.	28.919970	HG
-4.	2.	4.	17.443826	SB
-4.	2.	4.	5.675124	S
-10.	1.	9.	27.109090	HG
-10.	1.	9.	16.327022	SB
-10.	1.	9.	5.400342	S
-14.	1.	5.	27.473308	HG
-14.	1.	5.	16.552687	SB
-14.	1.	5.	5.458149	S
-2.	1.	11.	27.386066	HG
-2.	1.	11.	16.498693	SB
-2.	1.	11.	5.444422	S
0.	0.	12.	27.692945	HG
0.	0.	12.	16.688466	SB
0.	0.	12.	5.492375	S
16.	0.	2.	28.107380	HG
16.	0.	2.	16.944126	SB
16.	0.	2.	5.555680	S
-14.	1.	11.	22.032583	HG
-14.	1.	11.	13.087209	SB
-14.	1.	11.	4.465759	S

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

```

C  CALCULO CRISTALOGRAFICO.
C  FACTOR DE MULTIPLICIDAD

C
C  F.J.FABREGAT GLINCHARD
C  FORTRAN - BURROUGHS 5500
C
C  TARJETAS DE DATOS
C  TARJETA 1.- METODO ROENTGENOGRAFICO (MET) EMPLEADO.(FORMATO 37).
C
C      1 = METODOS DE LAGE
C      2 = METODOS DE POLVO
C      3 = METODOS DE CRISTAL GIRATORIO (OSCILACION) Y DIFRACCION.
C      4 = METODO DE CRISTAL GIRATORIO. ROTACION.
C      5 = METODO DE WEISSENBERG. HAZ NORMAL
C      6 =          ID.          EQUI-INCLINACION
C      7 =          ID.          ANTI-EQUI-INCLINACION
C      8 =          ID.          CASO GENERAL
C      9 = METODO DE PRECESION DE BUENGEN.
C
C  TARJETA 2.- EJE DE GIRO PVW DEL CRISTAL Y ORDEN N DE DICHO EJE (GIR.(FOR-
C      MATO 36).
C
C      ESTE DATO GIR ES UNICAMENTE NECESARIO SI ME1=4, EN TODOS LOS DEMAS CASO
C      PODRA PONERSE CERO.
C
C  TARJETA 3.- GRUPO DE DIFRACCION (LAU) O DE LAGE A QUE PERTENEZCA EL CRIS-
C      TAL.(FORMATO 29).
C
C      1 = 4/M -3 2/M      CLASES C1, C2, C3
C
C      2 = 2/M -3          CLASES C4, C5
C
C      3 = 6/M 2/M 2/M     CLASES H1, H2, H3, H6
C
C      4 = 6/M             CLASES H4, H5, H7
C
C      5 = -3 2/M          CLASES I1, I2, I3 (CON RED EXAGONAL)

```

```

C      6 = -3          CLASES 14, 15      (CON RED EXAGONAL)
C      7 = -3 2/M      CLASES 11, 12, 13  (CON RED ROMBOEDRICA).
C      8 = -3          CLASES 14, 15      (CON RED ROMBOEDRICA).
C      9 = 4/M 2/M 2/M  CLASES Q1, Q2, Q3, Q6
C     10 = 4/M          CLASES Q4, Q5, Q7
C     11 = 2/M 2/M 2/M  CLASES M1, M2, M3
C     12 = 2/M          CLASES M1, M2, M3 (1 POSICION, EJE Z VERTICAL)
C     13 = 2/M          CLASES M1, M2, M3 (11 POSICION, EJE Y VERTICAL)
C     14 = -1          CLASES A1, A2
C  TARJETAS 4 Y 55.- LOTE DE TARJETAS PERFORADAS POR EL PROGRAMA 95.
C  ULTIMA TARJETA.- CON 999, EN SUS COLUMNAS 3 A 6 PARA INDICAR FINAL.

```

```

C .....
C

```

```

      READ 37, MET

```

```

37 FORMAT (I4)

```

```

      READ 36,P, V, N, GIR

```

```

36 FORMAT (4F4.0)

```

```

      N=GIR

```

```

      READ 29, LAU

```

```

29 FORMAT (I4)

```

```

      PRINT 38

```

```

38 FORMAT (" CALCULO DE INTENSIDADES. PROGRAMA CUARTO.",/)

```

```

      PRINT 39

```

```

39 FORMAT (" FACTOR DE MULTIPLICIDAD, M.",/)

```

```

      PRINT 40

```

```

40 FORMAT (9X," S T U M ",/)

```

```

26 READ 27,S,T,U

```

```

      IF(S.EQ.999.) GO TO 28

```

```

27 FORMAT (2X,3F4.0)

```

```

      D=S

```

```

      Q=T

```

```

      R=U

```

```

      GO TO (30, 34, 32, 33, 30,30,30,30,31 ),MET

```

```

30 M=1

```

```

      GO TO 50

```

```

31 M=2

```

```

      GO TO 50

```

```

32 M=1

```

```

      GO TO 50

```

```

33 IF(S.EQ.0.OR.T.EQ.0.OR.U.EQ.0) GO TO 35

```

```

      M=N

```

```

      GO TO 50

```

```

35 M=2+N

```

```

      GO TO 50

```

```

34 S=ABS(S)

```

```

      T=ABS(T)

```

```

      U=ABS(U)

```

```

      IF(S+T.EQ.0.OR.T+U.EQ.0.OR.U+S.EQ.0) GO TO 13

```

```

      IF(S.EQ.0.OR.T.EQ.0.OR.U.EQ.0) GO TO 14

```

```

C

```

```

C TIPO DE REFLEJOS S T U

```

```

      IF(S.EQ.T.AND.T.EQ.U.AND.S.EQ.U) GO TO 16

```

```

      IF(S.EQ.T.OR.T.EQ.U) GO TO 15

```

```

      GO TO (1,2,2,4,4,6,4,6,3,5,5,7,7,8), LAU

```

```

1 M=48

```

```

      GO TO 50

```

```

2 M=24

```

```

      GO TO 50

```

```

3 M=16
  GO TO 50
4 M=12
  GO TO 50
5 M=8
  GO TO 50
6 M=6
  GO TO 50
7 M=4
  GO TO 50
8 M=2
  GO TO 50
15 GO TO (2,2,4,4,4,6,6,6,5,5,5,7,7,8), LAU
16 GO TO (5,5,4,4,4,6,6,8,8,5,5,5,7,7,8), LAU

```

C

C TIPO DE REFLEJOS OTU (CON UN CERU)

```

14 IF(S,EQ,0) GO TO 17
  IF(T,EQ,0) GO TO 18
  IF(U,EQ,0) GO TO 19
17 IF(T,EQ,U) GO TO 20
  GO TO (2,4,4,6,4,6,4,6,5,5,7,7,7,8), LAU
20 GO TO (4,4,6,6,6,6,6,5,5,7,7,7,8), LAU
18 IF(S,EQ,U) GO TO 21
  GO TO (2,4,4,6,6,6,4,6,5,5,7,7,8,8), LAU
21 GO TO (4,4,4,4,6,6,6,6,5,5,7,7,8,8), LAU
19 IF(S,EQ,T) GO TO 22
  GO TO (2,4,4,6,4,6,4,6,5,7,7,8,7,8), LAU
22 GO TO (4,4,6,6,6,6,6,6,7,7,7,8,7,8), LAU

```

C

C TIPO DE REFLEJOS SOO (CON DOS CERUS)

```

13 IF(S,NE,0) GO TO 23
  IF(T,NE,0) GO TO 24
  GO TO (6,6,8,8,8,8,6,6,8,8,8,8,8,8), LAU
24 GO TO (6,6,6,6,6,6,6,6,7,7,8,8,8,8), LAU
23 GO TO (6,6,6,6,6,6,6,6,7,7,8,8,8,8), LAU
50 PRINT 25,D,Q,R,M
25 FORMAT (10X,3F4,0,3X,14)
  GO TO 26
28 CONTINUE
  STOP
  END

```

CALCULO DE INTENSIDADES. PROGRAMA CUARTO.

FACTOR DE MULTIPLICIDAD, M.

S	T	U	M
0.	0.	4.	2
-4.	0.	4.	2
2.	1.	1.	4
-8.	0.	2.	2
-4.	0.	6.	2
0.	0.	6.	2
2.	1.	3.	4
-6.	1.	3.	4
6.	1.	1.	4
-8.	0.	6.	2
4.	0.	6.	2
-6.	1.	5.	4
6.	1.	3.	4
-2.	1.	7.	4
12.	0.	0.	2
-8.	0.	8.	2
2.	1.	7.	4
4.	0.	-0.	2
-12.	0.	6.	2
12.	-0.	2.	2
-2.	1.	9.	4
-12.	0.	8.	2
-8.	0.	10.	2
0.	2.	0.	2
4.	0.	10.	2
-16.	0.	2.	2
-4.	2.	4.	4
-10.	1.	9.	4
-14.	1.	5.	4
-2.	1.	11.	4
0.	0.	12.	2
16.	0.	2.	2
-14.	1.	11.	4

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

```

C  PROGRAMA PARA EL CALCULO DE INTENSIDADES
C  FACTOR DE TEMPERATURA, ET
C
C  F.J.FABREGAT GUINCHARD
C  FORTRAN - BURROUGHS 5500
C
C  TARJETAS DE DATOS
C  TARJETA 1.- NUMERO M DE ESPECIES DE ATOMOS.(FORMATO 1).
C  TARJETA 2M.- SIMBOLO QUIMICO DEL ATOMO Y SU COEFICIENTE B DE TEMPERATURA,
C  FORMAT35). UNA TARJETA POR ATOMO.
C  TARJETAS 3 Y 5S.- PAQUETE DE TARJETAS PERFORADAS POR EL PROGRAMA 45.
C  ULTIMA TARJETA.- CON 999. EN SUS 4 PRIMERAS COLUMNAS, PARA INDICAR FINAL.
C
C  .....
C

```

DIMENSION DATA(3),B(3),ET(3)

PRINT 2

2 FORMAT (" CALCULO DE INTENSIDADES, PROGRAMA QUINTO",/)

PRINT 3

3 FORMAT (" CALCULO DE LOS FACTORES DE TEMPERATURA (ISOTROPOS).",/)

PRINT 4

4 FORMAT (4X,"S T U FACT.TEMP.",10X,"ATOMO",/)

READ 1,M

C NUMERO DE ESPECIES DE ATOMOS. (M=3)

1 FORMAT (I2)

DO 36 I=1,M

READ 35, DATA(I),B(I)

35 FORMAT(A4,F5.3)

36 CONTINUE

50 READ 37,S,T,U,ES

37 FORMAT(2X,3F4.0,13X,F10.6)

IF(S.EQ.999.) GO TO 60

ES=ES/((1.54178)**2)

DO 38 J=1,M

38 ET(J)=EXP(-B(J)*ES)

PRINT 40,(S,T,U,ET(J),DATA(J),J=1,M)

40 FORMAT (2X,3F4.0,3X,F10.6,10X,A4)

GO TO 50

60 CONTINUE

STOP

END

CÁLCULO DE INTENSIDADES. PROGRAMA QUINTO

CÁLCULO DE LOS FACTORES DE TEMPERATURA (ISOTROPOS).

S	T	U	FACT. TEMP.	ATOMO
0.	0.	4.	0.993840	HG
0.	0.	4.	0.996701	SB
0.	0.	4.	0.996810	S
0.	0.	4.	0.985419	HG
0.	0.	4.	0.992175	SB
0.	0.	4.	0.992433	S
-4.	0.	4.	0.979241	HG
-4.	0.	4.	0.988843	SB
-4.	0.	4.	0.989211	S
2.	1.	1.	0.988495	HG
2.	1.	1.	0.993831	SB
2.	1.	1.	0.994034	S
-8.	0.	2.	0.967417	HG
-8.	0.	2.	0.982657	SB
-8.	0.	2.	0.983227	S
-4.	0.	6.	0.962047	HG
-4.	0.	6.	0.979520	SB
-4.	0.	6.	0.980192	S
0.	0.	6.	0.967490	HG
0.	0.	6.	0.982480	SB
0.	0.	6.	0.983055	S
2.	1.	3.	0.965438	HG
2.	1.	3.	0.981365	SB
2.	1.	3.	0.981977	S
-6.	1.	3.	0.952754	HG
-6.	1.	3.	0.974448	SB
-6.	1.	3.	0.975284	S
6.	1.	1.	0.957915	HG
6.	1.	1.	0.977268	SB
6.	1.	1.	0.978013	S
-8.	0.	6.	0.942235	HG
-8.	0.	6.	0.968679	SB
-8.	0.	6.	0.969701	S
4.	0.	6.	0.958318	HG
4.	0.	6.	0.977488	SB
4.	0.	6.	0.978225	S
-6.	1.	5.	0.939773	HG
-6.	1.	5.	0.967325	SB
-6.	1.	5.	0.968390	S
6.	1.	3.	0.949982	HG
6.	1.	3.	0.972931	SB
6.	1.	3.	0.973816	S
-2.	1.	7.	0.932135	HG
-2.	1.	7.	0.963112	SB
-2.	1.	7.	0.964312	S
12.	0.	0.	0.934025	HG
12.	0.	0.	0.964156	SB
12.	0.	0.	0.965323	S
-8.	0.	8.	0.919512	HG
-8.	0.	8.	0.956115	SB
-8.	0.	8.	0.957538	S
2.	1.	7.	0.930026	HG
2.	1.	7.	0.961946	SB

2.	1.	7.	0.963184	S
4.	0.	8.	0.933393	HG
4.	0.	8.	0.963807	SB
4.	0.	8.	0.964966	S
-12.	0.	6.	0.908940	HG
-12.	0.	6.	0.950220	SB
-12.	0.	6.	0.951829	S
12.	0.	2.	0.928796	HG
12.	0.	2.	0.961266	SB
12.	0.	2.	0.962525	S
-2.	1.	9.	0.905442	HG
-2.	1.	9.	0.948262	SB
-2.	1.	9.	0.949933	S
-12.	0.	8.	0.887594	HG
-12.	0.	8.	0.938220	SB
-12.	0.	8.	0.940204	S
-8.	0.	10.	0.890771	HG
-8.	0.	10.	0.940014	SB
-8.	0.	10.	0.941943	S
0.	2.	0.	0.906541	HG
0.	2.	0.	0.948878	SB
0.	2.	0.	0.950529	S
4.	0.	10.	0.902465	HG
4.	0.	10.	0.946594	SB
4.	0.	10.	0.948317	S
-16.	0.	2.	0.884777	HG
-16.	0.	2.	0.936626	SB
-16.	0.	2.	0.938660	S
-4.	2.	4.	0.887721	HG
-4.	2.	4.	0.938292	SB
-4.	2.	4.	0.940274	S
-10.	1.	9.	0.870221	HG
-10.	1.	9.	0.928353	SB
-10.	1.	9.	0.930643	S
-14.	1.	5.	0.873964	HG
-14.	1.	5.	0.930486	SB
-14.	1.	5.	0.932711	S
-2.	1.	11.	0.873078	HG
-2.	1.	11.	0.929962	SB
-2.	1.	11.	0.932221	S
0.	0.	12.	0.876165	HG
0.	0.	12.	0.931739	SB
0.	0.	12.	0.933925	S
16.	0.	2.	0.880207	HG
16.	0.	2.	0.934036	SB
16.	0.	2.	0.936150	S
-14.	1.	11.	0.805692	HG
-14.	1.	11.	0.890878	SB
-14.	1.	11.	0.894295	S

B5500 FORTRAN COMPILATION

```

C
C  CALCULO CRISTALOGRAFICO. FACTOR DE ABSORCION.
CC  MUESTRA CILINDRICA PARA DIAGRAMA DE DEBYE.
C
C  F.J.FABREGAT GUINCHARD.
C  FORTRAN . - BURROUGHS 5500
C
C  TARJETAS DE DATOS
C  TARJETA 1.- NOMBRE DEL MINERAL.(FORMATO 4)
C  TARJETA 2.- DENSIDAD DEN DEL MINERAL
C             DIAMETRO DIA DEL CILINDRO DE PULV.
C             NUMERO DE COMPONENTES DEL ANALISIS QUIMICO (HASTA 14).
C             NATURALEZA ASS DE LOS COMPONENTES ANALITICOS
C             ASS = 1( SI LOS DATOS SON OXIDOS.
C             ASS = 2, SI LOS DATOS SON ELEMENTOS
C             TODA ESTE CONJUNTO. FORMATO 9.
C  TARJETAS 3 Y 4.- PESOS MOLECULARES PMO DE LOS OXIDOS DEL ANALISIS.(FOR.2)
C  TARJETAS 5 Y 6.- COMPONENTES OXIDOS COX DEL ANALISIS.(FORMATO 3).
C  TARJETAS 7 Y 8.- NUMERO NUX DE CATIONES EN CADA OXIDO.(FORMATO 6).
C  TARJETAS 9 Y 10.- PESO ATOMICO PAI DE LOS ELEMENTOS PRESENTES.(FOR.2)
C  TARJETAS 11 Y 12).- COMPONENTES ELEMENTALES CCI.(FORMATO 3).
C  TARJETAS 13 Y 14.- PORCENTAJES ANALITICOS, DE LOS OXIDOS POX, (FORMAT 2)
C  TARJETAS 15 Y 16.- PORCENTAJES ANALITICOS, DE LOS ELEMENTOS, POI.(FORMA.2)
C
C  DE ESTAS TARJETAS DE DATOS, SE PERFORAN LAS TARJETAS 3 A 10 EN CASO
C  DE TENER LOS PORCENTAJES ANALITICOS EN OXIDOS. SI SE HUBIEREN DADO EN
C  PESOS DE ELEMENTOS, SE PERFORARIAN LAS 11 Y 12, LAS OTRAS EN BLANCO.
C  EN EL PRIMERO DE ESTOS CASOS, SE PERFORARIAN EN LAS TARJETAS 13 Y 14
C  LOS PORCENTAJES ANALITICOS DE LOS OXIDOS POX, EN EL SEGUNDO SE PERFORA

```

```

C  HAN EN LAS TARJETAS 15 Y 16 LOS PORCENTAJES DE LOS ELEMENTOS, POI
C  TARJETAS 17 Y 18.- COEFICIENTES DE ABSORCION DE MASA ACM DE LOS ELEMENTOS
C  COMPONENTES.(FORMAT 2)
C  TARJETAS 19 Y 20.- PAQUETE DE TARJETAS PERFORADAS POR EL PROGRAMA 45.
C  ULTIMA TARJETA.- CCR 999. EN SUS COLUMNAS 3 A 6, PARA INDICAR EL FINAL.
C
C  .....
C
C  A.- ANALISIS A PARTIR DE PORCENTAJES EN OXIDOS.
C
C
C  DIMENSION PMO(14),COX(42),NUX(14),PAI(14),CUI(42),POX(14),POI(14),
C  IAJU(14),AJI(14),AJC(14),ACM(14),APA(14)
C  READ 4,ARI,ARU,ARG,ARO
C  4 FORMAT(3A4,A3)
C  PRINT 51,ARI,ARU,ARG,ARO
C  51 FORMAT (1X,3A4,A3)
C  READ 9, DEN, DIA, P, ASS
C  9 FORMAT (2F10.5,2I4)
C  PRINT 11, DEN
C  11 FORMAT (5X,"DENSIDAD = ",F10.3)
C  RAD=DIA/2.
C  10 FORMAT (F10.5)
C  PRINT 12, RAD
C  12 FORMAT (5X,"RADIO DEL CILINDRO IRRADIADO = ",F10.5,/)
C  READ 2,(PMO(K), K=1,14)
C  2 FORMAT(7F10.3)
C  READ 3,(COX(K), K=1,42)
C  3 FORMAT(7(2A4,A2))
C  READ 6,(NUX(K), K=1,14)

```

```

6  FORMAT (7I10)
   READ 2, (PAI(K), K=1,14)
   READ 3, (COI(K), K=1,42)
   READ 2, (PCX(K), K=1,14)
   READ 2, (PCI(K), K=1,14)
   READ 2, (ACM(K), K=1,14)
   SUM1=0.
   SUM2=0.
   SUM3=0.
   GO TO (46,16), ASS
46 PRINT 7
7  FORMAT(4X,53H LOS DATOS DEL ANALISIS SON EN PORCENTAJES DE OXIDOS.
1//)
C  AJUSTE DE POX A 100.
   SUMA=0.0
   DO 25 K=1,14
25 SUMA=SUMA+PCX(K)
   SUMA=100.0/SUMA
   ADD=0.0
   DO 30 K=1,M
30 AJU(K)=SUMA*PCX(K)
C  CONVERSION DE PORCENTAJES OXIDOS EN PORCENTAJES ELEMENTALES.
   DO 40 K=1,P
40 CONTINUE
   GO TO 20
18 PRINT 19
19  FORMAT (4X,"LOS DATOS DEL ANALISIS SON EN PORCENTAJES ELEMENTALES"
1//)
20 SIM=0.0

```

```

DO 45 K=1,M
45 SIM=SIM+POI(K)
   SIM=100.0/SIM
DO 50 K=1,M
50 AJO(K)=SIM+PCI(K)
C  CALCULO DE LAS ABSORCIONES DE MASA
   DO 1 K=1,M
1  APA(K)=AJO(K)*ACM(K)/100.
   PRINT 72
72  FORMAT(1X,19H COMP.OXID. PCR.OX.,6X,28H COMP.ICNES PCR.ELM.
1X,6X,7H P*MU ,/)
   JL=1
   JK=2
   JM=3
   DO 90 K=1,M
90 CONTINUE
   DO 80 J=1,M
80 SUM1=AJU(J)+SUM1
   SUM2=SUM2+AJO(J)
   SUM3=SUM3+APA(J)
   PRINT 100
100  FORMAT(1H ,/)
   PRINT 85, SUM1, SUM2, SUM3
85  FORMAT (1X,13H TOTALES ,F7.3,18X,F7.3,15X,F7.3,3X//)

```

```

      ALI=SUM3*DEN
      PRINT 13, ALI
13  FORMAT (1X,"COEFICIENTE DE ABSORCION LINEAL, MU = ",F10.5,2X,"1/CM
      1S."/)
      PRINT 16
16  FORMAT (1X,"TABLA DE COEFICIENTES DE ABSORCION",)
      PRINT 27
27  FORMAT (3X,1CH S   1   0.9X,6H ABS.  )
15  READ 14, S, T, U, TH
      IF(S.EQ.999.) GO TO 17
14  FORMAT (2X,3F4.0,23X,F10.6)
C
C  COEFICIENTE DE TRANSMISION
      PI=3.141592653
      PE=1./PI
      SEC=1./COS(TH)
      TG=TAN(TH)
      IF(TH.EQ.0.OR.TH.EQ.90) GO TO 102
      A1=PE*(1.-(ALOG10(SEC+TG))/(SEC+TG))
      B1=PE*(SIN(2*TH))/2.
      C1=PE*(-0.25+0.75*((COS(TH))**2)*(0.5+(ALOG10(SEC+TG))/(2*SEC+TG))
1)
      AT=A1/(ALI*PAD)+B1/((ALI*HAD)**2)+C1/((ALI*HAL)**3)
      GO TO 101
102 AT=PE/(ALI*HAD)+PE/(16.+(ALI*HAL)**3)
C
C  COEFICIENTE DE ABSORCION
101 AA=1./AT
      PRINT 26, S, T, U, AA
26  FORMAT (2X,3F4.0,6X,F8.2)

```

```

      GO TO 15
17  CONTINUE
      STOP
      END

```

LIVINGSTONITA

DENSIDAD = 4.840
RADIO DEL CILINDRO IRRADIADO = 0.02000

LOS DATOS DEL ANALISIS SON EN PORCENTAJES DE OXIDOS.

COMP.OXID. POR. UX.	COMP.IONES POR. ELM.	ML*	P*ML
SO2 40.089	S 28.084	91.300	25.641
SB2O3 43.900	SH 51.328	284.000	145.770
HGO 15.294	HG 19.825	223.000	44.210
FE0 0.206	FE 0.224	324.000	0.726
AS2O5 0.323	AS 0.295	76.500	0.225
PBO 0.188	PH 0.244	241.000	0.589
TOTALES 100.000	100.000	217.162	

COEFICIENTE DE ABSORCIÓN LINEAL, $\mu_0 = 1051.06215$ 1/CMS.

TABLA DE COEFICIENTES DE ABSORCIÓN

S	T	U	ABS.
0.	0.	4.	113.91
-8.	0.	4.	113.12
2.	1.	1.	112.34
-8.	0.	2.	111.75
-4.	0.	6.	111.09
0.	0.	6.	111.71
2.	1.	3.	111.48
-6.	1.	3.	110.06
6.	1.	1.	110.63
-8.	0.	6.	108.94
4.	0.	6.	110.68
-6.	1.	5.	108.68
6.	1.	3.	109.77
-2.	1.	7.	107.89
12.	0.	0.	108.08
-8.	0.	8.	106.60
2.	1.	7.	107.67
4.	0.	8.	108.02
-12.	0.	6.	105.55
12.	0.	2.	107.54
-2.	1.	9.	105.20
-12.	0.	8.	103.46
-8.	0.	10.	103.77
0.	2.	0.	105.31
4.	0.	10.	104.91
-16.	0.	2.	103.19
-4.	2.	4.	103.47
-10.	1.	9.	101.80
-14.	1.	5.	102.15
-2.	1.	11.	102.07
0.	0.	12.	102.36

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

C CALCULO CRISTALOGRAFICO.
C INTENSIDADES Y FACTORES DE ESTRUCTURA. CALCULO PRIMARIO
C
C F.J.FABREGAT GUINCHARD
C FORTRAN, BURROUGHS 5500
C
C TARJETAS DE DATOS
C TARJETA 1.- TITULO Y CONSTANTES RETICULARES RECIPROCAS DEL MINERAL (ANGU-
C LOS POR SUS COSENOS).(FORMATO 1).
C TARJETA 2.- LAS SIGUIENTES CONDICIONES EXPERIMENTALES.(FORMATO 3)
C LONGITUD DE ONDA EMPLEADA
C LON = 1, RADIACION CU K ALFA
C LON = 2, RADIACION DE MO K ALFA
C METODO ROENTGENOGRAFICO UTILIZADO
C MET = 1, METODO DE LAUE
C MET = 2, METODO DE POLVO
C MET = 3, METODO DE CRISTAL GIRATORIO, OSCILACION
C MET = 4, METODO DE CRISTAL GIRATORIO, OSCILACION.
C MET = 5, METODO DE WEISSENBERG, HAZ NORMAL
C MET = 6, METODO DE WEISSENBERG, EQUI-INCLINACION.
C MET = 7, METODO DE WEISSENBERG, ANTI-EQUI-INCLINACION.
C MET = 8, METODO DE WEISSENBERG, CASO GENERAL.
C MET = 9, METODO DE PRECESION DE BUERGER.
C DIAMETRO DIA DE LA CAMARA EMPLEADA, EN MM.
C EJE DE GIRO P.V.W. DEL CRISTAL (PARA MET= 5 A 9) Y PERIODO PER DE DICHO
C EJE (PARA MET=4).
C ANGULOS MU (CMU) Y NU (BNU) DE LAS CONDICIONES ROENTGENOGRAFICAS EMPLEA
C DAS, EN GRADOS Y FRACCION DECIMAL.(SOLO CUANDO MET = 8).
C ANGULO DE PRECESION -MU (CMU) EN GRADOS Y FRACCION DECIMAL.(SOLO CUANDO

C MET = 9).

C --- DE ESTAS 4 ULTIMAS INDICACIONES, SE PONDRAN CFRNS EN LOS VALORES NO EMP

C EMPLEADOS.

C TARJETA 3.- LAS SIGUIENTES CONDICIONES EXPERIMENTALES, (FORMATO 19.).

C DENSIDAD DENS OBSERVADA DE LA SUSTANCIA.

C DIAMETRO GRD DEL CILINDRO DE POLVO O GROSOR DE LA MUESTRA SUBCILINDRICA

C (O ESFERICA), EN CMS. CERO SI MAC = 2.

C NUMERO M DE ESPECIES DE ATOMOS CON SIMBOLO QUIMICO COI, Y DE COMPONENTE

C DEL ANALISIS QUIMICO.(HASTA M = 14).

C GRUPO DE DIFRACCION O DE LAUE LAU A QUE PERTENEZCA EL CRISTAL

C 1 = 4/M -3 2/M CLASES C1, C2, C3

C 2 = 2/M -3 CLASES C4, C5

C 3 = 6/M 2/M 2/M CLASES H1, H2, H3, H6

C 4 = 6/M CLASES H4, H5, H7

C 5 = -3 2/M CLASES T1, T2, T3 (CON RED EXAGONAL)

C 6 = -3 CLASES T4, T5 (CON RED EXAGONAL)

C 7 = -3 2/M CLASES T1, T2, T3 (CON RED ROMBOEDRICA).

C 8 = -3 CLASES T4, T5 (CON RED ROMBOEDRICA).

C 9 = 4/M 2/M 2/M CLASES Q1, Q2, Q3, Q6

C 10 = 4/M CLASES Q4, Q5, Q7

C 11 = 2/M 2/M 2/M CLASES R1, R2, R3

C 12 = 2/M CLASES M1, M2, M3 (I POSICION, EJE Z VERTICAL)

C 13 = 2/M CLASES M1, M2, M3 (II POSICION, EJE Y VERTICAL)

C 14 = -1 CLASES A1, A2

C NATURALEZA NAT DE LOS COMPONENTES ANALITICOS, SOLO CUANDO MAC=1, SINO O

C NAT = 1, SI LOS DATOS DEL ANALISIS SON EN OXIDOS

C NAT = 2, SI LOS DATOS DEL ANALISIS SON EN ELEMENTOS.

C INCLUSION DE LOS FACTORES DE TEMPERATURA Y DE ABSORCION EN EL CALCULO

C MAC = 1, SI SE INCLUYEN

C MAC = 2, NO SE INCLUYEN

C TARJETAS 4 Y 55 (CUANTAS M HAYA).- CON LAS SIGUIENTES CONSTANTES (FORMATO

C 10)

C VALORES AU(J),AL(J),BU(J),BL(J),CU(J) DE LA TABLA DE DIFUSION ATOMICA

C DE FORSYTH Y WELLS (ACTA CRYST.12(1959)412) PARA CADA ATOMO.

C DE SER LON=1 SE PONDRÁ CU(J)=0.0

C COEFICIENTES BT(J) ISOTROPOS DE TEMPERATURA, DE SER MAC=2, SE ESCRIBIRÁ

C 0.0

C TARJETAS 5 Y 6.- ESTAS TARJETAS 5 A 20 SOLO CUANDO SE CALCULEN LAS ABSORCI

C CIONES, MAC=1. DE NO SER ASI, SE SUPRIMEN

C PESOS MOLECULARES PMO DE LOS OXIDOS DEL ANALISIS (2 TARJETAS).

C TARJETAS 7 Y 8.- PESOS MOLECULARES PMO DE LOS OXIDOS DEL ANALISIS.(FOR.22)

C TARJETAS 9 Y 10.- COMPONENTES OXIDS COX DEL ANALISIS.(FORMATO 23).

C TARJETAS 11 Y 12.- NUMERO NUX DE CATIONES EN CADA OXIDO.(FORMATO 26).

C TARJETAS 13 Y 14.- PESO ATOMICO PAI DE LOS ELEMENTOS PRESENTES.(FOR.22).

C TARJETAS 15 Y 16.- COMPONENTES ELEMENTALES COI.(FORMATO 23).

C TARJETAS 17 Y 18.- PORCENTAJES ANALITICOS, DE LOS OXIDOS POX. (FORMAT 22)

C TARJETAS 19 Y 20.- PORCENTAJES ANALITICOS, DE LOS ELEMENTOS, POI.(FORM 22)

C DE ESTAS TARJETAS DE DATOS, SE PERFORARAN LAS TARJETAS 7 A 14 EN CASO

C DE TENER LOS PORCENTAJES ANALITICOS EN OXIDOS, SI SE HUBIEREN DADO EN

C PESOS DE ELEMENTOS, SE PERFORARIAN LAS 15 Y 16, LAS OTRAS EN BLANCO.

C EN EL PRIMERO DE ESTOS CASOS, SE PERFORARIAN EN LAS TARJETAS 17 Y 18

C LOS PORCENTAJES ANALITICOS DE LOS OXIDOS POX.,EN EL SEGUNDO SE PERFORA

C RAN EN LAS TARJETAS 19 Y 20 LOS PORCENTAJES DE LOS ELEMENTOS,POI

C TARJETAS 21 Y 22.- COEFICIENTES DE ABSORCION DE MASA ACM DE LOS ELEMENTOS

C COMPONENTES.(FORMAT 22)

C TARJETAS 23 Y 55.- CADA UNA CON UN TERNO DE COORDENADAS ATOMICAS (X,Y,Z) Y

C SU NUMERO CORRESPONDIENTE DE POSICIONES EQUIVALENTES (POS).(FORMATO 108

C SE CONTARA SU NUMERO EXACTO N, QUE EN EL EJEMPLO N=14, SE AJUSTARA A ES

C TE NUMERO LA TARJETA NUM.123 Y LAS 144 A 165 PARA EL CALCULO DEL FACTOR

C DE ESTRUCTURA.

C TARJETAS 24 Y 55.- TARJETAS DE INDICES CON LOS SIMBOLOS S T U Y MORIN SUS

C INTENSIDADES RESPECTIVAS (FORMATO 103). UNA POR TERNA HASTA TERMINARLAS

```

C      SE TRASLADARA A PRIMERA DE ESTAS TARJETAS LA QUE TENGA INTENSIDAD OBSER
C      VADA MAYOR. EN LAS OTRAS CON 100 SE PONDRÁ 99 PARA NO ESTORBAR EL
C      PORCENTAJE.
C      ULTIMA TARJETA. CON 999. EN SUS CUATRO PRIMERAS COLUMNAS Y CUALQUER NUME
C      RO O CERO EN LOS OTROS LUGARES, PARA INDICAR EL FINAL.
C
C      .....
C
      DIMENSION MIN(3),AS(3),COSAS(3),AU(14),AL(14),BU(14),BL(14),FR(14)
      1,CU(14),HT(14),ET(14),PMQ(14),COX(42),NUX(14),PAT(14),CQI(42),POX(
      214),POI(14),AJU(14),AJG(14),ACH(14),APA(14),X(15),Y(15),Z(15),POS(
      315),A(15),B(15)
      READ 1, MIN(1),MIN(2),MIN(3),AS(1),AS(2),AS(3),CHSAS(1),COSAS(2),
      1COSAS(3)
      1 FORMAT (3A5,3F9.6,3F12.8)
      PRINT 114
114 FORMAT (1X,"CALCULO DE INTENSIDADES Y FACTORES DE ESTRUCTURA",/)
      PRINT 2, MIN(1),MIN(2),MIN(3)
      2 FORMAT (11H MINERAL = ,3A5,/)
      READ 3,LUN,MET,DIA,P,V,W,PER,BMU,BNU,CMU
      3 FORMAT (214,F8.3,4F4.0,3F12.5)
      GO TO (4,5),LUN
      4 ALA= 1.54050
      PRINT 7
      7 FORMAT (1X,"RADIACION EMPLEADA, CU K ALFA = 1.54050",/)
      GO TO 10
      5 ALA=0.70926
      PRINT 8
      8 FORMAT (1X,"RADIACION EMPLEADA, MG K ALFA = 0.70926 ",/)
10 ALAMB=ALA

```

```

      ALAM2=0.5*ALAMB
      PRINT 11, MET
11 FORMAT (1X,"METODO ROENTGENOGRAFICO = ",I2,/)
      GO TO (14,14,12,12,12,12,12,12,12,12),MET
12 PRINT 13, P, V, W, N
13 FORMAT (1X,"EJE DE GIRO DEL CRISTAL ",3F3.0," CON UN PERIODO DE ",
      1F3.0,/)
      GO TO 15
14 GO TO (15,16,16,16,16,16,16,16,16,15),MET
16 PRINT 134,DIA
134 FORMAT (1X,"DIAMETRO DE LA CAMARA = ",F7.3," MM",/,)
15 READ 19, DNS,GRO,M,LAU,NAT,HAC
19 FORMAT (2F10.5,4I4)
      GO TO (113,113,113,113,113,113,113,109,111),MET
109 PRINT 110,BMU,BNU
110 FORMAT (" CONDICIONES EXPERIMENTALES DEL ROENTGENOGRAMA , MU =",
      1F10.5," , NU =",F10.5," , EN GRADOS Y FRACCION DECIMAL ",/)
      GO TO 113
111 PRINT 112,CNU
112 FORMAT(" ANGULO DE PRECESION, -MU =",F10.5," , EN GRADOS Y FRACCION
      1 DECIMAL",/)
113 CONTINUE
      RAD=GRO/2.
      DO 17 J=1,M
      READ 18, AU(J),AL(J),BU(J),BL(J),CU(J),HT(J)
18 FORMAT (6F6.3)
17 CONTINUE
      GO TO (117,118),HAC
117 PRINT 20, DNS
20 FORMAT(" DENSIDAD DE LA SUSTANCIA = ",F10.5,/)
      PRINT 21, GRO

```

```

21 FORMAT (" GROSOR DE LA MUESTRA IRRADIADA = ",F10.5," CMS.","/)
      READ 22,(PMO(K), K=1,14)
22 FORMAT(7F10.3)
      READ 23,(COX(K), K=1,42)
23 FORMAT(7(2A4,A2))
      READ 26,(NUX(K), K=1,14)
26 FORMAT (7I10)
      READ 22, (PAI(K), K=1,14)
      READ 23,(COI(K), K=1,42)
      READ 22, (POX(K), K=1,14)
      READ 22, (POI(K), K=1,14)
      READ 22, (ACM(K), K=1,14)
      SUM1=0.
      SUM2=0.
      SUM3=0.
      GO TO (46,28), NAT
46 PRINT 37
37 FORMAT(4X,53H LOS DATOS DEL ANALISIS SON EN PORCENTAJES DE OXIDOS.
      1/)
C      AJUSTE DE POX A 100.

      SUMA=0.0
      DO 25 K=1,M
25 SUMA=SUMA+POX(K)
      SUMA=100.0/SUMA
      ADD=0.0
      DO 30 K=1,M
30 AJU(K)=SUMA*POX(K)
C      CONVERSION DE PORCENTAJES OXIDOS EN PORCENTAJES ELEMENTALES.
      DO 40 K=1,M
      POI(K)=NUX(K)*PAI(K)*POX(K)/PMO(K)

```

```

40 CONTINUE
      GO TO 31
28 PRINT 29
29 FORMAT (4X,"LOS DATOS DEL ANALISIS SON EN PORCENTAJES ELEMENTALES"
      1,/)
31 SIM=0.0
      DO 45 K=1,M
45 SIM=SIM+POI(K)
      SIM=100.0/SIM
      DO 50 K=1,M
50 AJO(K)=SIM*POI(K)
C      CALCULO DE LAS ABSORCIONES DE MASA
      DO 32 K=1,M
32 APA(K)=AJO(K)*ACM(K)/100.
      PRINT 72
72 FORMAT(1X,20H COMP.OXID. POR.0X.,5X,27H COMP.IONES POR.ELM. MU
      1,8X,7H P*MU ,/)
      JL=1
      JK=2
      JM=3
      DO 90 K=1,M
      PRINT 78, COX(JL), COX(JK), COX(JM), AJU(K), COI(JL),
      1COI(JK), COI(JM), AJO(K), ACM(K), APA(K)
78 FORMAT(2X,3A4,F7.3,7X,2A4,A3,F7.3,4X,F7.3,4X,F7.3)
      JL=JL+3
      JK=JK+3
      JM=JM+3
90 CONTINUE
      DO 80 J=1,M
      SUM1=AJU(J)+SUM1
      SUM2=SUM2+AJO(J)

```

```

80 SUM3=SUM3+APA(J)
PRINT 100
100 FORMAT(1H ,/)
PRINT 85, SUM1, SUM2, SUM3
85 FORMAT (1X,13H TOTALES ,F7.3,18X,F7.3,15X,F7.3,///)
ALI=SUM3*DNS
PRINT 33, ALI
33 FORMAT (1X,"COEFICIENTE DE ABSORCION LINEAL, MU = ",F10.5,2X,"1/CM
1S," ,/)
PRINT 152
152 FORMAT(4X,"S T U FST INT.CAL I,C I,0"
1,/)
118 N=14
DO 107 L=1,N
READ 108, X(L), Y(L), Z(L), POS(L)
108 FORMAT (3F6.3,10X,F4.0)
107 CONTINUE
SUM=0.0
SEM=0.0
105 READ 103, S, T, U, MOBIN
103 FORMAT (3F4.0,4X,I4)
IF(S.EQ.999.) GO TO 104
CALL CALGEN(AS,COSAS,ALAMB,ALAM2,S,T,U,MET,P,V,W,SE,ES,TH,ZEQ,XIQ)
CALL LORPOL (SE,ZEQ,MET,TH,ES,CNU,BMU,BNU,ZZ)
CALL DIFUSAT(AU,AL,BU,BL,CU,FR,ES)
CALL MULTIPL (S,T,U,MET,PER,LAU,MULT)
GO TO (115,116),MAC
115 CALL TEMP( HT,ET,ES )
CALL FARR (TH,ALI,RAD,AA)
GO TO 125
116 ET(J)=1.

```

```

AA=1.
125 XMULT=MULT
DO 621 L=1,14
PI=3.141592653
C CALCULO DEL PRIMER COMPONENTE
C=(8.0/POS(L))*((COS(2.0*PI*(S+T)/4.0))**2))
D=COS(2.0*PI*( S*X(L)+ U*Z(L)+ U/4.0))
E=COS(2.0*PI*(T*Y(L)-U/4.0))
IF(L.EQ.1.OR.L.EQ.2) GO TO 616
IF(L.EQ.3.OR.L.EQ.4.OR.L.EQ.5.OR.L.EQ.6) GO TO 619
IF(L.EQ.7.OR.L.EQ.8.OR.L.EQ.9.OR.L.EQ.10.OR.L.EQ.11.OR.L.EQ.12.OR.
1L.EQ.13.OR.L.EQ.14) GO TO 620
616 A(L)=FR(3)*ET(3)*C*D*E
GO TO 621
619 A(L)=FR(2)*ET(2)*C*D*E
GO TO 621
620 A(L)=FR(1)*ET(1)*C*D*E
621 CONTINUE
C CALCULO DEL SEGUNDO COMPONENTE (ANALOGO AL DEL PRIMERO)
B(L)=0.0
C VALOR TOTAL
FAC=(A(1)+A(2)+A(3)+A(4)+A(5)+A(6)+A(7)+A(8)+A(9)+A(10)+A(11)+A(12
1)+A(13)+A(14))
EBC = 0.0
IF(EBC.EQ.0) GO TO 150
FST = SQRT(FAC**2+EBC**2)
FSQ=FSQ**2
GO TO 151
150 FSQ=FAC**2
FST=FAC
151 BAC=FSQ*XMULT*ZZ*AA/1000.

```

```

        IF(MOBI=100)      628,626,628
626 BER=BAC
628 CALIN=(BAC/BER)*100.0
        PRINT 690, S, T, U, FST,FSQ,CALIN,MOBIN
690 FDMAT (2X,3F4.0,1X,F10.2,2X,F10.2,1X,F10.2,3X,14)
        SUM=SUM+FST
        SQ=SUM**2
        SEM=SEM+FSQ
        GO TO 105
104 CONTINUE
        PRINT 137
137 FORMAT (1H ,//)
C   PRESENCIA DE CENTRO DE SIMETRIA
        CEN=SQ/SEM
        IF(CEN=0.70)      120,121,122
120 PRINT 123, CEN
123 FORMAT(" LA ESTRUCTURA ES CENTRADA, CON UN COEFICIENTE DE ",F5.3,/,
        1)
122 PRINT 124, CEN
124 FORMAT (" LA ESTRUCTURA ES NO CENTRADA, CON UN COEFICIENTE DE ",
        1F5.3,/)
121 CONTINUE
        STOP
        END

```

```

SUBROUTINE CALGEN (AS,COSAS,ALAMU,ALAM2,S,T,U,MET,P,V,W,SE,ES,TH,
1ZEQ,XIQ)
        DIMENSION AS(3), COSAS(3)
        R11=(ALAM2*AS(1))**2
        R22=(ALAM2*AS(2))**2
        R33=(ALAM2*AS(3))**2
        R12=((ALAM2**2)/2.)*AS(1)*AS(2)*COSAS(3)
        R23=((ALAM2**2)/2.)*AS(2)*AS(3)*COSAS(1)
        R31=((ALAM2**2)/2.)*AS(1)*AS(3)*COSAS(2)
        SENQ=R11*S**2+R22*T**2+R33*U**2+R12*S*T+R31*S*U+R23*T*U
        SE=SQRT(SENQ)
        ES=(SE/ALAMU)**2
        TH=ARSIN(SE)
        GO TO (10,18,13,18,14,14,14,14,14), MET
C   CALCULO DE ZET PARA UN EJE DE GIRO PVW
14 NUM=4.*(R11*R22*R33-(R23**2)*R11-(R31**2)*R22-(R12**2)*R33+R23*R31*
1R12
        DEN=(P**2)*(R22*R33-(R23/2)**2)+V*W*((R12*R31)/2-R11*R23)
        1+(V**2)*(R11*R33-(R31/2)**2)+P*W*((R12+R23)/2-R22*R31)
        2+(W**2)*(R11*R22-(R12/2)**2)+P*V*((R31+R23)/2-R33*R12)
        ZQ1=NUM/DEN
        ZEQ=ZQ1*((S*P+T*V+U*W)**2)
C   CALCULO DE XI PARA EL MISMO EJE PVW DE GIRO.
        XIQ=4.*(SENQ-ZEQ)
18 CONTINUE
        RETURN
        END

```

SUBROUTINE LORPOL (SE,ZEQ,MET,TH,ES,CNU,BMU,BNU,7Z)	219
IF(1,-SE) 53,55,55	220
55 CUA=SE**2	221
C	222
C FACTOR DE POLARIZACION	223
POL=1.-2*CUA+2*(CUA**2)	224
C	225
C FACTOR DE LORENTZ	226
ZETN=SQRT(ZEQ)	227
GO TO (56,57,58,59,60,61,62,63), MET	228
C A. PARA EL METODO DE LAUE	229
56 PLO=1./CUA	230
GO TO 64	231
C B. PARA EL METODO DE PULVO	232
57 PLO=1./(SIN(2*TH)*SE)	233
GO TO 64	234
C C. PARA METODOS DE CRISTAL GIRATORIO Y DIFRACTOMETRICO	235
58 CTH=COS(TH)	236
PLO=1./(SE*CTH)	237
GO TO 64	238
C D. PARA WEISSENBERG, HAZ NORMAL.	239
59 PLO=SQRT(1./(CUA-CUA**2-ZETN/4.))	240
GO TO 64	241
C E. PARA WEISSENBERG, EQUI-INCLINACION.	242
60 PLO=SQRT(1./(CHIA-CUA**2-((ZETN/4.)*(1.-CUA))))	243
GO TO 64	244
C F. PARA WEISSENBERG, ANTI-EQUI-INCLINACION.	245
61 PLO=SQRT(1./(CUA-CUA**2-(ZETN/4.)*CUA))	246
GO TO 64	247
C G. PARA WEISSENBERG, CASO GENERAL (Y EQUI-CONG DE JONG-BOWMAN)	248

62 RAM=BMU*1.5707963/90.	249
RAN=BNU*1.5707963/90.	250
COM=COS(RAM)	251
CON=COS(RAN)	252
PLO=SQRT(4./(4.*(COM**2)*(CON**2)-(COM*CON-XIQ)**2))	253
GO TO 64	254
C H. PARA EL METODO DE PRECESION DE RUERGER.	255
63 RBN=CNU*1.5707963/90.	256
SEM=SIN(RBN)	257
PLO=SQRT(1./(XIQ*(SEM**2)))	258
C	259
C CONJUNTO DE AMBOS FACTORES	260
64 ZZ=POL*PLO	261
53 CONTINUE	262
RETURN	263
END	264
SUBROUTINE DIFUSAT(AU,AL,BU,BL,CU,FR,ES)	265
DIMENSION AU(14), AL(14), BU(14), BL(14), CU(14), FR(14)	
DO 15 J=1,M	267
FR(J)=AU(J)*EXP(-AL(J)*ES)+BU(J)*EXP(-BL(J)*ES)+CU(J)	268
15 CONTINUE	269
RETURN	270
END	271

SUBROUTINE MULTIPL (S,T,U,MET,PER,LAU,MULT)	272
D=S	273
Q=T	274
R=I	275
GO TO (30, 34, 32, 33, 30,30,30,30,31),MLT	276
30 MULT=1	277
GO TO 50	278
31 MULT=2	279
GO TO 50	280
32 MULT=1	281
GO TO 50	282
33 IF(S.EQ.0.OR.T.EQ.0.OR.U.EQ.0) GO TO 35	283
MULT=PER	284
GO TO 50	285
35 MULT=2*PER	286
GO TO 50	287
34 S=ABS(S)	288
T=ABS(T)	289
U=ABS(U)	290
IF(S+T.EQ.0.OR.T+U.EQ.0.OR.U+S.EQ.0) GO TO 13	291
IF(S.EQ.0.OR.T.EQ.0.OR.U.EQ.0) GO TO 14	292
C	293
C TIPO DE REFLEJOS S T U	294
IF(S.EQ.T.AND.T.EQ.U.AND.S.EQ.U) GO TO 16	295
IF(S.EQ.T.OR.T.EQ.U) GO TO 15	296
GO TO (1,2,2,4,4,6,6,6,3,5,5,7,7,8), LAU	297
1 MULT=48	298
GO TO 50	299
2 MULT=24	300
GO TO 50	301

3 MULT=16	302
GO TO 50	303
4 MULT=12	304
GO TO 50	305
5 MULT=8	306
GO TO 50	307
6 MULT=6	308
GO TO 50	309
7 MULT=4	310
GO TO 50	311
8 MULT=2	312
GO TO 50	
15 GO TO (2,2,4,4,4,6,6,6,5,5,5,7,7,8), LAU	314
16 GO TO (5,5,4,4,4,6,8,8,5,5,5,7,7,8), LAU	315
C	316
C TIPO DE REFLEJOS OTU (CON UN CERO)	317
14 IF(S.EQ.0) GO TO 17	318
IF(T.EQ.0) GO TO 18	319
IF(U.EQ.0) GO TO 19	320
17 IF(T.EQ.U) GO TO 20	321
GO TO (2,4,4,6,4,6,4,6,5,5,7,7,7,8), LAU	322
20 GO TO (4,4,6,6,6,6,6,6,5,5,7,7,7,8), LAU	323
18 IF(S.EQ.U) GO TO 21	324
GO TO (2,4,4,4,6,6,4,6,5,5,7,7,8,8), LAU	325
21 GO TO (4,4,4,4,6,6,6,6,5,5,7,7,8,8), LAU	326
19 IF(S.EQ.T) GO TO 22	327
GO TO (2,4,4,6,4,6,4,6,5,5,7,7,8,7,8), LAU	328
22 GO TO (4,4,6,6,6,6,6,6,7,7,7,8,7,8), LAU	329
C	330
C TIPO DE REFLEJOS SOO (CON DOS CEROS)	331
13 IF(S.NE.0) GO TO 23	332

```

IF(T,NE,0) GO TO 24 333
GO TO (6,6,8,8,8,8,6,6,8,8,8,8,8,8), LAU 334
24 GO TO (6,6,6,6,6,6,6,6,7,7,8,8,8,8), LAU 335
23 GO TO (6,6,6,6,6,6,6,6,7,7,8,8,8,8), LAU 336
50 CONTINUE 337
S=0 338
T=Q 339
U=R 340
RETURN 311
END 312

SUBROUTINE TEMP( BT, ET, ES ) 313
DIMENSION BT(14), ET(14)
DO 38 J=1,M 315
38 ET(J)=EXP(-BT(J)*ES) 316
RETURN 317
END 318

```

```

SUBROUTINE FAHR (TH,ALI,RAD,AA) 321
C COEFICIENTE DE TRANSMISION 322
PI=3.141592653 323
PE=1./PI 324
SEC=1./COS(TH) 325
TG=TAN(TH) 326
IF(TH.EQ.0.OR.TH.EQ.90) GO TO 102 327
A1=PE*(1.-(ALOG10(SEC+TG))/(SEC+TG)) 328
B1=PE*(SIN(2*TH))/2. 329
C1=PE*(-0.25+0.75*((COS(TH))**2)*(0.5+(ALOG10(SEC+TG))/(2*SEC+TG)) 330
1) 331
AT=A1/(ALI*RAD)+B1/((ALI*RAU)**2)+C1/((ALI*RAD)**3) 332
GO TO 101 333
102 AT=PE/(ALI*RAD)=PE/(16.*(ALI*RAD)**3) 334
C COEFICIENTE DE ABSORCION 335
101 AA=1./AT 336
RETURN 337
END

```

CÁLCULO DE INTENSIDADES Y FACTORES DE ESTRUCTURA

MINERAL = SIMULACION

RADIACION EMPLEADA, CU K ALFA = 1.54050

MÉTODO ROENTGENOGRAFICO = 2

DIÁMETRO DE LA CÁMARA = 114.560 MM.

DENSIDAD DE LA SUSTANCIA = 4.84000

GROSOR DE LA MUESTRA IRRADIADA = 0.04000 CMS.

LOS DATOS DEL ANALISIS SON EN PORCENTAJES DE OXIDOS.

COMP.OXID.	POR.OX.	COMP.IONES	POR.ELM.	MU*	P*MU
S02	40.089	S	28.084	91.300	25.641
SB203	43.900	SB	51.328	284.000	145.770
HG0	15.294	HG	19.825	223.000	44.210
FE0	0.206	FE	0.224	324.000	0.726
AS205	0.323	AS	0.295	76.500	0.225
PB0	0.188	PB	0.244	241.000	0.589
TOTALES	100.000		100.000		217.162

COEFICIENTE DE ABSORCION LINEAL, MU = 1051.06215 1/CMS.

S	T	U	FST	INT.CAL	I.C	I.O
4.	0.	6.	57.39	3293.07	100.00	100
0.	0.	4.	11.07	122.47	5.90	10
-4.	0.	4.	-4.16	17.27	1.14	5
2.	1.	1.	-0.00	0.00	0.00	1
-8.	0.	2.	-33.09	1095.24	44.66	15
-4.	0.	6.	-17.12	293.20	9.92	2
0.	0.	6.	-10.15	103.04	2.08	5
2.	1.	3.	-0.00	0.00	0.00	1
-6.	1.	3.	-0.00	0.00	0.00	1
6.	1.	1.	0.00	0.00	0.00	1
-8.	0.	6.	35.12	1233.65	25.44	10
4.	0.	6.	57.39	3293.07	100.00	99
-6.	1.	5.	0.00	0.00	0.00	1
6.	1.	3.	-0.00	0.00	0.00	1
12.	0.	2.	37.77	1426.29	22.70	20
12.	0.	0.	15.77	248.62	2.18	3
-2.	1.	7.	0.00	0.00	0.00	1
-8.	0.	8.	-9.20	84.60	1.15	3
2.	1.	7.	-0.00	0.00	0.00	1
4.	0.	8.	10.21	104.33	1.81	1
-12.	0.	6.	-8.88	78.85	0.91	1
-12.	0.	8.	22.63	511.89	4.44	5
-2.	1.	9.	-0.00	0.00	0.00	1
-8.	0.	10.	27.26	743.13	6.71	10
0.	2.	0.	55.09	3034.85	16.96	30
-14.	1.	11.	0.00	0.00	0.00	1

4.	0.	10.	22.19	492.25	5.19	2
-16.	0.	2.	6.18	38.14	0.32	1
-14.	1.	5.	0.00	0.00	0.00	1
-4.	2.	4.	-2.59	6.73	0.12	1
-10.	1.	9.	-0.00	0.00	0.00	1
-2.	1.	11.	0.00	0.00	0.00	1
0.	0.	12.	-2.92	8.52	0.03	1
16.	0.	2.	31.04	963.36	7.65	5

LA ESTRUCTURA ES NO CENTRADA,

ADVERTENCIA

Todos los programas que anteceden han sido corridos satisfactoriamente con varios ejemplos, dejando al lector interesado, su aplicación a todos los casos posibles.

Es pertinente poner aquí una advertencia: al establecer los programas se ha cumplido con el cometido propuesto; si bien no está en el designio del autor entrar por ahora en la crítica de algunas funciones utilizadas, aunque de reconocimiento general. Con ello se alude por ejemplo, a la fundamental de Forsyth y Wells que sirve para el cálculo del factor de forma, al modo propuesto por Bradley para hallar el factor de absorción, . . . Además, para el cálculo de los factores de estructura e intensidades, se ha recurrido a una simulación en vez de actuar con el ejemplo de Livingstonita, ya que se suponen arbitrariamente varios datos (análisis de la sustancia, diámetro de la muestra irradiada, etc.) que no son ciertamente los empleados por Buerger para el cálculo de su estructura, de la que se han tomado las posiciones atómicas y otros datos pertinentes.

BOLETINES DEL INSTITUTO DE GEOLOGIA

50.— <i>Las Meteoritas Mexicanas</i> , por JOSE C. HARO, 1931.	\$ 50.00 M.N.	\$ 5.00 Dlls.
51.— <i>Zonas Mineras de los Estados de Jalisco y Nayarit</i> , por TOMAS BARRERA, 1931.	Agotado.	Out of Print.
53.— <i>Topografía Sepultada en la Región de Santa Rosalía, B. C.</i> , por IVAN F. WILSON, 1948.	\$ 25.00 M.N.	\$ 2.50 Dlls.
54.— <i>Paleontología y Estratigrafía del Plioceno de Yepomera, Edo. de Chihuahua (Primera Parte)</i> , 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.	Agotado.	Out of Print.
Pt. III.— <i>Fauna Pérmica de El Antimonio, Oeste de Sonora, México</i> , por G. ARTHUR COOPER y otros, 1965.	\$ 30.00 M.N.	\$ 3.00 Dlls.
59.— <i>Los Depósitos de Bauxita en Haiti 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, Región Central Meridional de México</i> , por CARL FRIES, JR., 1960.	\$ 50.00 M.N.	\$ 5.00 Dlls.
61.— <i>Fenómenos Geológicos de Algunos Volcanes Mexicanos</i> , por LUIS BLASQUEZ L., ARMANDO REYES LAGOS, FEDERICO MOOSER y JOSE L. LORENZO, 1961.	\$ 20.00 M.N.	\$ 2.00 Dlls.
62.— <i>Reconocimiento Geológico en la Sierra Madre del Sur, entre Chilpancingo y Acapulco, Edo. de Guerrero</i> , 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 GOMEZ, 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 Damos 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</i> , BOLEITA, por FRANCISCO J. FABREGAT, 1963.	\$ 40.00 M.N.	\$ 4.00 Dlls.

- 67.—Pt. I.—*Salinidad, Batimetría, Temperatura y Distribución de los Sedimentos Recientes de la Laguna de Términos, Campeche, México*, por AMADO YAÑEZ 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 ANGEL 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 AGUSTIN AYALA CASTAÑARES, 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 GARCIA-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, Huitzuco y Mayanacán, Estado de Guerrero* por JOSE MA. BOLIVAR, 1963. \$ 30.00 M.N. \$ 3.00 Dlls.
- 70.—*Derrames Cineríticos Las Américas de la Región de El Oro Tlalpujahua, Estados de México y Michoacán*, parte centromeridional de México por CARL FRIES JR., C. S. ROSS y ALBERTO OBREGON PEREZ. En preparación. Being prepared.
- 71.—*Estudios Geológicos en los Estados de Durango y San Luis Potosí*, por DIEGO A. CORDOBA, 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. Partes I-III.*
- Pt. I.—*Discusión de Principios y Descripción de la Determinación Geoquímica por el Método Plomo Alfa o Larsen*, por CESAR RINCON ORTA, 1965.
- Pt. II.—*Nuevas aportaciones Geocronológicas y Técnicas empleadas en el Laboratorio de Geocronometría*, por CARL FRIES, JR. y CESAR RINCON 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. Partes I-II*
- Pt. I.—*Geología del area de Plomosas, Chih.* por INTHER W. BRIDGES.

- Pt. II.—*Notas sobre la Geología de la Región de Placer de Guadalupe y Plomosas, 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 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. Partes I-III.*
- Pt. I.—*Los Minerales de Manganeso de Molango, Hgo.*, por LIBERTO DE PABLO GALAN.
- Pt. II.—*Caolinita de Estructura Desordenada de Concepción de Buenos Aires, Edo. de Jalisco, México*, por LIBERTO DE PABLO GALAN.
- Pt. III.—*Nota Preliminar sobre la Identificación por Rayos X, de Oxido Tálico Tl_2O_3* por JESUS RUIZ ELIZONDO, GLORIA AVILA 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. \$ 40.00 M.N. \$ 4.00 Dlls.
- 79.—*Los Minerales Mexicanos*, 5. LIVINGSTONITA, por FRANCISCO J. FABREGAT G., 1966. \$ 40.00 M.N. \$ 4.00 Dlls.
- 80.—*"Biogeología Subsuperficial del Arrecife Alacranes, Yucatán"*, por FEDERICO BONET. 1967 \$ 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 CESAR RINCON ORTA.
- Pt. II.—*Nuevos datos sobre Mackayita*, por RICHARD V. GAINES.
- Pt. III.—*Ilvita de El Guariche, Mich.* por LIBERTO DE PABLO.
- Pt. IV.—*Cálculo Cristalográfico*, por FRANCISCO J. FABREGAT y RICARDO ESQUIVEL ESPARZA, 1967. \$ 30.00 M.N. \$ 3.00 Dlls.
- 83.—*Los 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.—*Composición y distribución de los Sedimentos Recientes de la Laguna Madre, Tamaulipas*, por AMADO YAÑEZ y CARMEN SCHLAEPFER. 1968.

Pt. II.— <i>Minerales Pesados de los Sedimentos de la Laguna Madre, Tamaulipas</i> , por CARMEN J. SCHLAEPFER. 1968.			\$ 40.00 M.N.	\$ 4.00 Dlls.
85.— <i>Los Minerales Mexicanos</i> , 7. VANADINITA y ENDLICHITA, por FRANCISCO J. FABREGAT G., 1970.			\$ 50.00 M.N.	\$ 5.00 Dlls.
86.— <i>Ecología y Distribución de los Micromoluscos Recientes de la Laguna Madre, Tamaulipas, México</i> , por ANTONIO GARCIA-CUBAS JR., 1968.			\$ 50.00 M.N.	\$ 5.00 Dlls.
87.— <i>Ecología y Distribución de los Foraminíferos Recientes de la Laguna Madre, Tamaulipas, México</i> , por AGUSTIN AYALA-CASTAÑARES y LUIS R. SEGURA., 1968.			\$ 50.00 M.N.	\$ 5.00 Dlls.
88.— <i>Geología Marina de la Laguna de Tamiahua, Veracruz, México</i> , por RODOLFO CRUZ.			\$ 40.00 M.N.	\$ 4.00 Dlls.
89.— <i>Algunos programas de Cálculo Cristalográfico mediante computadora electrónica</i> , por FRANCISCO J. FABREGAT UINCHARD			\$ 50.00 M.N.	\$ 5.00 Dlls.

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

Se terminó de imprimir este libro el día
 31 de marzo de 1970, en los talleres de
 OFFSET ALTAMIRA, S. A., Calle
 Norte 35 No. 826, México 15, D. F. Se
 imprimieron 1,200 ejemplares.