

Programa fortran IV para construir tablas de distancias y de ángulos entre planos cristalinos para cualquier tipo de celda

Lic. Manuel de Jesús Antón Lolo, Laboratorio de Difracción de Rayos X. CIME; Lic. Francisco Cruz Gandarilla, Laboratorio de Física de los Metales. Facultad de Física-Matemática, Universidad de La Habana.

RESUMEN

Se ha confeccionado un programa en *Fortran IV* que calcula las distancias y ángulos interplanares y permite determinar los planos equivalentes para cualquier tipo de celda cristalina presentando los resultados en forma tabular.

Los datos de entrada fundamentales son los parámetros de la red cristalina, los índices de Miller máximos y mínimos entre los cuales se desea realizar el cálculo y la menor distancia interplanar hasta la cual se desea obtener información.

El programa, denominado PSI, se emplea en difracción de rayos X y difracción de electrones y las tablas con los resultados pueden obtenerse en el orden en que se generan los índices de Miller para los distintos planos o en orden decreciente de distancias interplanares. Se muestra un ejemplo de aplicación a un estudio por difracción de electrones.

ABSTRACT

A program in *Fortran IV* language which computes the interplanar distances and angles has been made. It also permits the determination of the equivalent planes for any kind of crystalline cells presenting the results in a tabular form.

The main input data are the parameters of the crystalline lattice, the maximum and minimum Miller indices among which it is desired to perform the calculation, and the smallest interplanar distance to which it is desired to get information.

The program, called PSI, is used in X-rays and electron diffraction, the tables of results are obtained in the same order in which the Miller indices for the different planes are generated, or in diminishing order of interplanar distances. An electron diffraction study is shown as an application example.

INTRODUCCIÓN

En la interpretación de patrones de difracción de rayos X y de electrones es común enfrentar las tareas para determinar cuáles planos poseen distancias interplanares iguales y cuál es el ángulo entre distintos planos cristalinos.

En este trabajo se presenta un

programa *Fortran IV* denominado PSI que contribuye a la solución de estos problemas.

Se sabe que, en general, los planos cristalinos de una forma dada tienen el mismo espaciamiento, lo que determina que en un diagrama de difracción de polvos

todos los planos de la forma contribuyan igualmente a la intensidad de la reflexión correspondiente; esta contribución se mide mediante el factor de multiplicidad (1,2) y conocer cuántos planos contribuyen a una reflexión determinada constituye uno de los problemas iniciales para resolver, con vistas a realizar, por ejemplo, un análisis cuantitativo. En la práctica esto es una tarea que puede resultar tediosa y complicada, sobre todo en los casos de sustancias con celdas de bajas simetrías, pues aunque en estos casos las formas suelen contener pocos planos, pueden existir planos, a veces numerosos, que aunque no pertenecen a una forma determinada tienen distancias interplanares iguales o muy próximas y son indistinguibles dentro del error experimental con que se trabaja. En este caso constituye una ayuda poseer para cada material que se analice, un listado de los planos cristalinos con sus correspondientes distancias interplanares, presentados en orden decreciente de las distancias interplanares.

En el caso de difracción en mo-

DESARROLLO

Para facilitar la solución de los problemas anteriores se ha elaborado un programa en *Fortran IV* con el cual, a partir de los parámetros de la celda de la presunta sustancia a analizar y para un rango previamente escogido de variación de los índices de Miller, se generan triadas de índices de Miller compatibles con la celda supuesta y se calculan las distancias interplanares para cada familia de planos. Optativamente se puede solicitar del programa, ordenar los resultados por valores decrecientes de las distancias interplanares lo cual permite determinar los planos experimentalmente equivalentes. También optativamente se calculan los ángulos entre planos para todos los planos que estén comprendidos en el rango seleccionado.

Para esto el programa contiene 4 subrutinas, que constituyen bloques cualitativamente independientes,

nocristales (método de Laue, difracción de electrones, etc.) es necesario conocer los ángulos interplanares para asignar índices al patrón obtenido. Por ejemplo, en el caso de difracción de electrones, cuando se obtiene un diagrama de difracción de puntos, este no es más que una proyección de un plano de la red recíproca que contiene las simetrías correspondientes a un eje de zona de la red directa perpendicular al plano recíproco cuya proyección se observa (3). Para la identificación de ese plano recíproco frecuentemente no basta con la determinación de las distancias sino que es necesario medir los ángulos entre los distintos vectores de posición del plano.

Aunque pueden encontrarse tablas de ángulos interplanares (4), generalmente estas son válidas para unos pocos valores de la razón c/a y b/a y es muy frecuente verse obligado a realizar una gran cantidad de cálculos y tantear para poder asignar los índices de Miller a un diagrama de difracción de electrones, sobre todo en los casos de fases de bajas simetrías.

en tanto que realizan por separado diferentes fases de los cálculos, las cuales están debidamente concatenadas por el programa principal. El programa requiere en total 42 K.

La subrutina denominada *Celda* lee los parámetros de la celda que se supone o se conoce que se está analizando y calcula los coeficientes necesarios para el cálculo posterior de las distancias interplanares. Si la simetría de la celda es tal que posee parámetros redundantes, es necesario introducirlos explícitamente como en el caso de una celda triclinica.

La siguiente etapa del cálculo se realiza por la subrutina denominada *Rango*. Esta lee los valores máximo y mínimo de los índices de Miller entre los cuales se desea barrer para realizar el análisis. A partir de ellos se calcula un conjunto de seis números enteros que serán los generadores de las

triadas de índices de Miller en el rango elegido. La generación de estas triadas se realiza mediante un proceso iterativo de lazos nidificados y para cada triada de índices se calcula la distancia interplanar correspondiente almacenándose ordenadamente en los arreglos preparados al efecto. Sólo se almacenan aquellos conjuntos de valores para los cuales la distancia interplanar es mayor que una cierta distancia mínima previamente elegida, que se le da al programa al principio de cada muestra. Al finalizar esta etapa se imprime un número que dice la cantidad de triadas que se ha almacenado.

Si se desea obtener los resultados ordenados según valores decrecientes de las distancias interplanares se hace actuar a la subrutina *ORDEN*, lo cual se realiza dándole valores adecuados a una variable denominada *IORDEN* que se lee al principio de cada ejecución. En esta etapa se produce el ordenamiento mediante el método de los pares sucesivos.

Independientemente de que los resultados estén o no ordenados según las distancias interplanares se puede, si es necesario, imprimir un listado de las triadas de índices y sus correspondientes distancias interplanares; esto se realiza mediante los valores de una variable denominada *IMPRI*, la cual se lee al comienzo de la ejecución.

Finalmente, si el objetivo es obtener una tabla de los ángulos interplanares que forman entre sí los planos cristalinos, se realizan los cálculos correspondientes con la subrutina *ANGULO*, la cual, además imprime las tablas correspondientes en el ordenamiento seleccionado con anterioridad.

Si al finalizar esta etapa se desea ejecutar nuevamente el programa para otra muestra esto puede lograrse asignando valor cero a una variable denominada *NTEST* al comienzo de la ejecución; esto transfiere el control al principio nuevamente y se repite el proceso de cálculo para los datos correspondientes a la nueva muestra.

Se ilustra a continuación la utilización del programa en la

asignación de índices a un patrón de difracción de electrones de un cristal de lizardita ($Mg_3Si_2O_5(OH)_4$). Este compuesto se describe en la cartoteca ASTM-FILE 18-779 como de simetría monoclinica con $\beta=90^\circ$. El patrón que se analiza se muestra en la figura 1 y se aprecia que el plano recíproco correspondiente tiene simetría de orden 6. Para los 6 puntos del hexágono interior se obtuvo una distancia interplanar de 4.6 Å. En la tarjeta ASTM correspondiente aparecen reportados con esta distancia los planos de la forma 020 pero no se conoce que otros planos posean distancias equivalentes. La figura 2 muestra una de las tablas obtenidas por el programa, donde aparecen los índices hkl y las distancias interplanares correspondientes ordenadas por valores decrecientes de estas últimas. Se observa que los planos de índices 020, 020, $\bar{1}\bar{1}0$, 110, $\bar{1}10$, $\bar{1}\bar{1}0$ tienen distancias interplanares de 4.6 Å y por lo tanto, serán los planos correspondientes a esos índices los responsables de las reflexiones obtenidas. El siguiente paso es asignar los índices a esos 6 puntos del hexágono interior distribuyendo adecuadamente los índices anteriores. Se observa en el patrón que el ángulo entre los vectores de posición de dos puntos contiguos es de 60° .

Se le asigna arbitrariamente a uno de los puntos un índice cualquiera de los relacionados anteriormente, por ejemplo el 020 y a continuación se busca cuál de los otros planos se encuentra a 60° de éste para lo cual se utiliza la tabla de valores angulares de los planos con respecto al plano 020 que suministra el programa y de la cual se aprecia un segmento en la figura 3. En esta tabla se ve que el plano de índices $\bar{1}\bar{1}0$ forma un ángulo de 60° con el 020 por lo cual se procede a asignar índices $\bar{1}\bar{1}0$ a uno de los puntos vecinos inmediatos a 020. Ahora se puede asignar el índice al resto de los puntos del patrón de dos maneras: 1) usando las leyes de traslación de la red recíproca y comprobando con los resultados del programa o también, 2) usando los resultados del programa y luego comprobando

con las leyes de traslación de la red recíproca. La figura 4 muestra

un esquema del patrón de difracción ya completamente resuelto.

CONCLUSIONES.

El programa permite obtener a partir de los parámetros de la red un listado de distancias interplanares con sus correspondientes índices de Miller y tablas de ángulos interplanares para celdas de cualquier simetría. Al presentar los datos

según orden decreciente de distancias interplanares permite determinar los planos experimentalmente equivalentes. El programa es aplicable en estudios por difracción de rayos X y en difracción de electrones.

BIBLIOGRAFÍA

1. Cullity, B.D.
Elements of X-Ray Diffraction.
Ed. Revolucionaria, 1967.
2. Klug, H.P.; L.E.Alexander
X-Ray Diffraction Procedures.
John Wiley, 1974.
3. Hirsh, P.B.; A.Howie; R.B.Nicholson; D.W.Pashley; M.J.Whelan
Electron Microscopy of thin crystals, Butterworths.
London, 1965.
4. Andrews, K.W.; D.J.Dyson; S.R. Keown
Interpretation of Electron Diffraction Patterns. Adam Hilger Ltd. London, 1970.

Recibido: 8/9/1983.

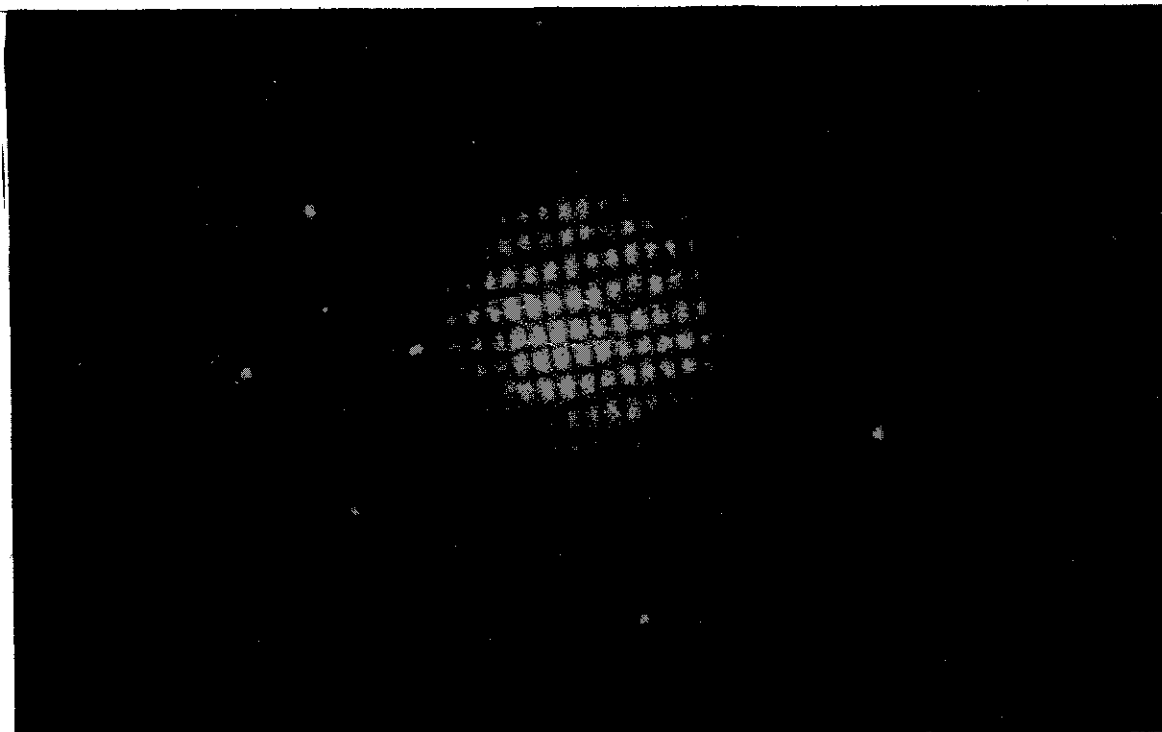


Figura 1. Patrón de difracción de electrones obtenido experimentalmente. Se advierte que el plano recíproco correspondiente posee simetría de orden 6.

H	K	L	D	H	K	L	D	H	K	L	D	H	K	L	D
0	0	-1	14.62000	0	0	1	14.62000	0	-1	0	9.20000	0	1	0	9.20000
0	-1	-1	7.78659	0	-1	1	7.78659	0	1	-1	7.78659	0	1	1	7.78659
0	0	-2	7.31000	0	0	2	7.31000	0	-1	-2	5.72329	0	1	2	5.72329
0	-1	2	5.72329	0	1	-2	5.72329	-1	0	0	5.31000	1	0	0	5.31000
-1	0	-1	4.99100	1	0	1	4.99100	-1	0	1	4.99100	1	0	-1	4.99100
0	-2	0	4.60000	0	2	0	4.60000	-1	-1	0	4.59895	1	1	0	4.59895
-1	1	0	4.59895	1	-1	0	4.59895	0	-2	-1	4.38793	0	2	1	4.38793
0	-2	1	4.38793	0	2	-1	4.38793	-1	-1	-1	4.38702	1	1	1	4.38702
-1	-1	1	4.38702	-1	1	-1	4.38702	-1	1	1	4.38702	1	-1	-1	4.38702
1	-1	1	4.38702	1	1	-1	4.38702	-1	0	-2	4.29617	1	0	2	4.29617
-1	0	2	4.29617	1	0	-2	4.29617	0	2	-2	3.89330	0	2	2	3.89330
0	2	-2	3.89330	0	-2	-2	3.89330	0	-2	2	3.89330	-1	-1	-2	3.89266
1	1	2	3.89266	-1	-1	2	3.89266	-1	1	-2	3.89266	-1	1	2	3.89266
1	-1	-2	3.89266	1	-1	2	3.89266	1	1	-2	3.89266	-1	-2	0	3.47682
1	2	0	3.47682	-1	2	0	3.47682	1	-2	0	3.47682	-1	-2	-1	3.38249
-1	-2	1	3.38249	1	2	-1	3.38249	1	2	1	3.38249	-1	2	-1	3.38249
-1	2	1	3.38249	1	-2	-1	3.38249	1	-2	1	3.38249	-1	-2	-2	3.13977
1	2	2	3.13977	-1	-2	2	3.13977	-1	2	-2	3.13977	-1	2	2	3.13977
1	-2	-2	3.13977	1	-2	2	3.13977	1	1	-2	3.13977	-2	0	0	2.65500
2	0	0	2.65500	-2	0	-1	2.61228	2	0	1	2.61228	-2	0	1	2.61228
2	0	-1	2.61228	-2	-1	0	2.55090	-2	1	0	2.55090	2	-1	0	2.55090
2	1	0	2.55090	-2	-1	-1	2.51294	2	1	1	2.51294	-2	-1	1	2.51294
-2	1	-1	2.51294	-2	1	1	2.51294	2	-1	-1	2.51294	2	-1	1	2.51294
2	1	-1	2.51294	-2	0	-2	2.49550	2	0	2	2.49550	-2	0	2	2.49550
2	0	-2	2.49550	-2	-1	-2	2.40847	2	1	2	2.40847	-2	-1	2	2.40847
-2	1	-2	2.40847	-2	1	2	2.40847	2	-1	-2	2.40847	2	-1	2	2.40847
2	1	-2	2.40847	-2	-2	0	2.29947	2	2	0	2.29947	-2	2	0	2.29947
2	-2	0	2.29947	-2	-2	-1	2.27155	-2	-2	1	2-27155	2	2	-1	2.27155
2	2	1	2.27155	-2	2	-1	2.27155	-2	2	1	2.27155	2	-2	-1	2.27155

Figura 2. Tabla de distancias interplanares y sus correspondientes índices de Miller ordenada según valor decreciente de la distancia inter planar. Se lee de izquierda a derecha.

H1 = 0
K1 = -2
L1 = 0
D1 = 4.60000

H2	K2	L2	D2	PSI	H2	K2	L2	D2	Psi
0	2	0	4.60000	179.95	-1	-1	0	4.59895	60.01
1	1	0	4.59895	119.99	-1	1	0	4.59895	119.99
1	-1	0	4.59895	60.01	0	-2	-1	4.38793	17.47
0	2	1	4.38793	162.55	0	-2	1	4.38793	17.47
0	2	-1	4.38793	162.53	-1	-1	-1	4.38702	61.52
1	1	1	4.38702	113.48	-1	-1	1	4.38702	61.52
1	1	-1	4.38702	118.48	-1	0	-2	4.29617	90.00
1	0	2	4.29617	90.00	-1	0	2	4.29617	90.00
1	0	-2	4.29617	90.00	0	-2	-2	3.89330	32.18
0	2	2	3.89330	32.18	0	-2	2	3.89329	32.18
0	2	-2	3.89329	147.82	-1	-1	-2	3.89266	64.97
1	1	2	3.89266	115.03	-1	-1	2	3.89266	64.97
-1	1	-2	3.89266	115.03	-1	1	2	3.89266	115.03
1	-1	-2	3.89266	64.97	1	-1	2	3.89266	64.97
1	1	-2	3.89266	115.03	-1	-2	0	3.47682	40.90
1	2	0	3.47682	139.10	-1	2	0	3.47682	139.10
1	-10	0	3.47682	40.90	-1	-20	-1	3.38249	42.67
-1	-2	1	3.38249	42.67	1	2	-1	3.38249	137.33
1	2	1	3.38249	137.33	-1	2	-1	3.38249	137.33
-1	2	1	3.38249	137.33	1	-2	-1	3.38249	42.67

Figura 3. Tabla de ángulos interplanares medidos respecto al plano de índices 020. Se lee de izquierda a derecha.

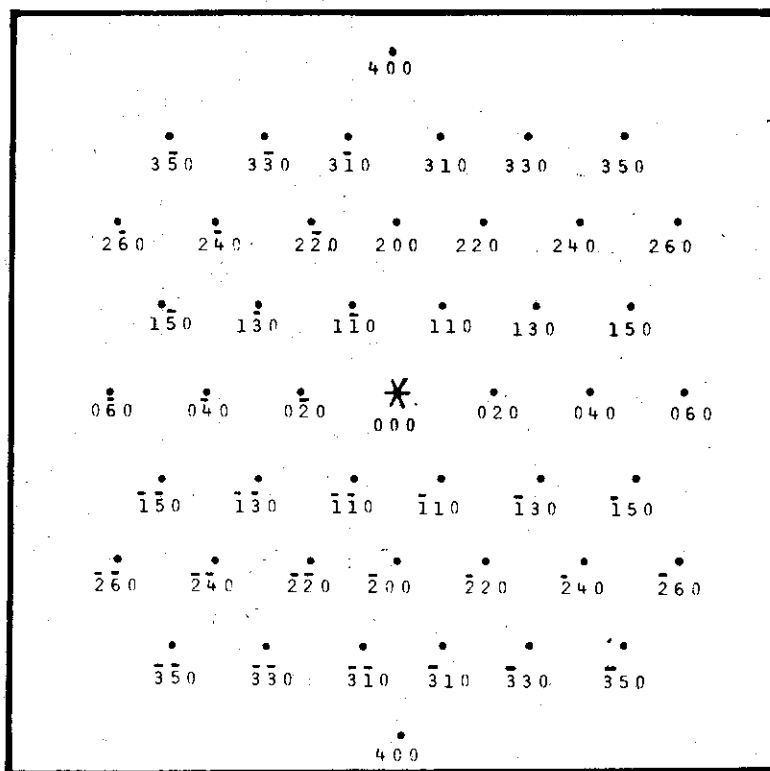


Figura 4. Esquema del patrón con los índices asignados.