

Modelo de simulación de un cristal real en una computadora

J.Fuentes, C.Matías, O.Calzadilla. Facultad Física-Matemática, Universidad de La Habana

RESUMEN

En el trabajo se presenta un modelo de simulación de un cristal real, realizado en una computadora SU1040, que brinda la posibilidad de analizar varios tipos de defectos de la red cristalina.

ABSTRACT

In the paper is presented a simulation model of a real crystal which was done in a computer SU1040 and gives the user the possibility of analyzing different types of crystal defects.

INTRODUCCIÓN

El estudio de los cristales reales choca con la dificultad de la falta de simetría traslacional de estos y la posibilidad de aplicar los métodos tradicionales de cálculo de propiedades tales como el factor de estructura. Es de gran importancia, sin embargo, la presencia de átomos de un segundo elemento, vacancias, dislocaciones, etcétera, para las propiedades de los cristales.

En este trabajo se presenta un modelo de simulación para un cristal real elaborado con el objetivo de analizar la influencia de los defectos de la red cristalina en el factor de estructura.

Al concebir el modelo se tiene ante todo que satisfacer los siguientes requerimientos:

- Capacidad de almacenaje de grandes cantidades de datos.
- Posibilidad de variar determinados datos. Además de brindar la facilidad de calcular un nuevo juego de datos sin tener necesidad de hacer todos los cálculos otra vez, sino sólo aquella parte que fue variada.

El modelo fue diseñado para calcular como propiedad el factor de estructura. Esta constituido por dos programas. En la figura 1 se muestra la interrelación entre ambos programas así como también sus enlaces con las diferentes rutinas y ficheros que almacenan los resultados.

Al realizar la primera fase se emplea la rutina BUSQ-FD para bus-

car los valores de la función de dispersión atómica, en las tablas que entran como datos, a partir del valor de argumento que se calcula para cada trio de HKL; si es necesario se realiza una interpolación lineal para obtener el valor deseado de la función de dispersión. Posteriormente, para cada uno de los planos de la celda se llama de rutina PLANO que genera un par de números que caracterizan la posición de los átomos en el plano con una Z fija, a partir de la posición inicial.

La posición inicial y los parámetros a lo largo de los ejes "a" y "b" entran como dato. Al obtener el valor de las coordenadas se calcula el aporte al factor de estructura de ese átomo.

Después de generados todos los planos se calcula el factor de estructura aprovechando los valores calculados anteriormente en las llamadas sucesivas a la rutina PLANO.

Los valores calculados de la distancia interplanar, para los H, K, L, asociados y el del factor de estructura se guardan en memoria externa en un registro de un fichero auxiliar.

La rutina SORT-DISTANCIA, activada por un llamado, como paso siguiente, pasa todos los registros del fichero auxiliar al fichero CRIDEAL pero ahora ordenados según el valor decreciente de la distancia interplanar.

A través de las rutinas IMPRES y GRAFEST se obtienen los datos del fichero CRIDEAL en forma numérica o en forma de un gráfico de barras.

Como paso final de esta primera etapa se hace un llamado a la rutina CREAR-FICH para almacenar en un fichero llamado FICH la posición relativa de cada átomo.

Estos ficheros CRIDEAL y FICH constituyen el análisis del cristal ideal y da la respuesta al primer requerimiento del modelo. Una vez terminada esta primera fase del modelo se lleva a cabo por medio de la rutina SUSTIT el proceso de sustitución de unos átomos por otros.

En este programa, como se muestra en la figura 1, son recibidos

los valores, contenidos en los Ficheros CRIDEAL y FICH. El proceso de sustitución se fundamenta en la generación de números aleatorios que se hacen coincidir con la llave del registro donde se guardan las coordenadas de los átomos que pueden ser sustituidos. Se utiliza la rutina NUMAL para generar los números aleatorios con distribución uniforme. De tal forma se pueden introducir los átomos del segundo aleamiento en el cristal. La sustitución necesita como dato la función de dispersión del átomo introducido y se calcula el aporte al factor de estructura del cristal con defectos. El valor calculado del factor de estructura para un trío de H,K,L, dado, se imprime utilizando de nuevo las rutinas IMPRES y GRSFEST. Como característica propia de esta segunda fase esta la posibilidad que da de analizar de manera interactiva diferentes cantidades de defectos en una sola corrida del programa SUSTIT.

También es posible variar, en esta segunda fase, las distancias entre átomos y analizar la influencia de este corrimiento en el valor del factor estructura.

El modelo fue puesto a punto para el cristal $ZnIn_2S_4$ ajustándose los valores calculados a los que se reportan en la literatura para este cristal. Se realizan en este momento investigaciones sobre la posible influencia del yodo en este cristal además, de la influencia de la sustitución del Ba por Sr en ferritas duras de Bario.

Los programas fueron escritos en el superlenguaje PL/I para el sistema de operación OS por las ventajas que ofrecen para cumplimentar los requerimientos del modelo. El programa requiere alrededor de 100 K de memoria y el tiempo de ejecución es de unos 10 minutos para una variante completa.

El modelo para su más cómoda explotación se encuentra en una biblioteca de usuario en una máquina SU1040.

Quisiéramos agradecer la cooperación prestada por el Lic. Rigoberto Sardiñas del Centro de Cálculo del MINCEX y el asesoramiento de los licenciados Eduardo Quesada y Ave-

BIBLIOGRAFIA

1. Calzadilla, O.; J.Fuentes and
L. Hernández
Phys. Stat. Solidi (a)
Vol.54, No.2, pág k-99,
1979.
2. Hernández, L.; O.Vigil And
F. González
Phys. Stat. Solidi (a)
Vol.36, 33, 1976.
3. PL/User's Guide
C.R.Spowls Introducción a
la programación en lenguaje
PL/I. Madrid, 1971.

