

Programa estructura para el cálculo de los factores de estructura para Rayos X y electrones para cualquier tipo de celda

Francisco Cruz y Alberto Serra, Departamento de Metales, Universidad de La Habana. Manuel Antón, Laboratorio de Difracción de R-X CIME

RESUMEN

Se expone un programa en lenguaje FORTRAN IV, denominado ESTRUCTURA, que calcula las distancias interplanares, los ángulos entre planos cristalinos y los factores de estructura para rayos X y electrones para cualquier tipo de celda cristalina.

Como resultado del programa se puede obtener, según se necesite, tablas de las tres magnitudes mencionadas arriba, de dos cualesquiera de ellas o de una cualquiera de ellas. Se muestran resultados para un ejemplo de aplicación.

ABSTRACT

A FORTRAN IV language program, the so-called "STRUCTURE", for calculating the interplanar distances, the crystalline interplanar angles and the structure factors for X-rays and electrons for any type of crystalline cell, is exposed.

As a result of the program, it is possible to obtain, as needed, tables of the three above-mentioned magnitudes, of any two of them or of any one of them. The applicability of the program is shown through an example.

INTRODUCCIÓN

La interpretación y comparación de patrones de difracción de rayos X y electrones es un procedimiento muy frecuente y prácticamente imprescindible en la caracterización de materiales sólidos. Para estas caracteri-

zaciones es útil conocer a priori las principales características de los patrones de difracción de los diferentes materiales, estando entre las más importantes el factor de estructura. Por esto se ha desarrollado un programa en lenguaje FORTRAN IV denominado ESTRUCTURA que permite calcular las distancias interplanares, los ángulos entre planos cristalinos y los factores de estructura para rayos X y electrones para sustancias con cualquier tipo de celda cristalina. Los resultados se dan en forma de tablas y estas se pueden obtener en cualquier combinación de ellas asignándole valores adecuados a una variable de selección, lo cual le da al programa utilidad para propósitos diversos.

DESARROLLO

A. Descripción del programa

El programa consta de seis subprogramas y un programa principal. En este último se realiza el cálculo de las triadas de índices de Miller y las correspondientes distancias interplanares. Para el cálculo de los índices de Miller se emplea un sistema de lazos anidados y las distancias interplanares se calculan a partir de la expresión general:

$$r^{*2} = \frac{1}{d^2} = \frac{1}{V^2} \left[S_{11}h^2 + S_{22}k^2 + S_{33}l^2 + 2(S_{12}hk + S_{23}kl + S_{13}hl) \right] \quad 1$$

donde S_{ij} , con $i, j=1, 2, 3$ dependen de los parámetros de la celda y V es el volumen de la celda cristalina.

Las subrutinas tienen las siguientes características:

1. Subrutina CELDA. A partir de los parámetros de la red calcula el volumen de la celda V y los valores de los coeficientes S_{ij} .
2. Subrutina RANGO. A partir de los valores mayores y menores de los índices de Miller calcula números generadores de las triadas de índices de Miller.
3. Subrutina ORDEN. Actúa cuando ya han sido calculadas las distancias interplanares por el programa principal. Ordena los arreglos de las distancias interplanares y sus correspondientes índices de Miller por valores decrecientes de la distancia interplanar.
4. Subrutina ESTRUC. A partir del número de tipos de átomos, sus números atómicos, cantidad y posición respectiva en la celda y de los valores de los correspondientes factores de dispersión atómica calcula el factor de estructura para rayos X por la expresión:

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^n \left\{ f_j \cos 2\pi(hu_j + kv_j + lw_j) + if_j \sin 2\pi(hu_j + kv_j + lw_j) \right\} \quad 2$$

El cálculo del factor de estructura para electrones se obtiene a través de la aproximación de Born (1).

5. Subrutina SELEC. Elimina las reflexiones cuyo factor de estructura es igual o menor que el 5% del mayor y luego reordena los datos por valores decrecientes de F_{hkl} sin alterar el orden anterior para las distancias interplanares.
6. Subrutina ÁNGULO. Calcula los ángulos entre planos cristalinos dos a dos utilizando la expresión general:

$$\Phi_{12} = \cos^{-1} \left\{ \frac{d_1 d_2}{V^2} \left[S_{11} h_1 h_2 + S_{22} k_1 k_2 + S_{33} l_1 l_2 + S_{12} (h_1 k_2 - h_2 k_1) + S_{23} (k_1 l_2 - k_2 l_1) + S_{13} (h_1 l_2 + h_2 l_1) \right] \right\}^3$$

donde el subíndice 1 corresponde al plano de referencia y el 2 al otro.

B. Entrada y salida

Los datos de entrada para el programa son: distancia interplanar máxima y mínima entre las cuales se desea el cálculo, nombre o identificador de la sustancia problema, parámetros de la red, valores máximos y mínimos de los índices de Miller, número de tipos de átomos en la celda, números atómicos, valores de los factores de dispersión atómica para cada tipo de átomos y las coordenadas de las posiciones atómicas en la red.

En la salida el programa puede imprimir:

- a) tabla de distancias interplanares y los índices de Miller respectivos
- b) tablas de valores correspondientes de las distancias interplanares, los índices de Miller, los factores de estructura para rayos X y electrones.
- c) la misma tabla anterior pero sin las reflexiones cuyo factor de estructura es menor o igual al 5% del mayor.
- d) tablas de ángulos entre planos reticulares. Estas tablas se pueden obtener solas o en cualquier combinación de ellas.

En la figura 1 se muestra un segmento de la tabla C para el diortosilicato de lantano, reportado como de estructura tetragonal con $a_0 = 6.846 \text{ \AA}$ y $b_0 = 24.855 \text{ \AA}$.

C. Requerimientos de computación

El programa se ha desarrollado para la computadora EC-1022 y requiere 36 K de memoria, pero puede ser utilizado en cualquiera de las computadoras del tipo EC. La entrada de datos es por tarjeta perforada.

CONCLUSIONES

1. El programa ESTRUCTURA, desarrollado en lenguaje FORTRAN IV para la computadora EC-1022, permite calcular las distancias interplanares, los factores de estructura para rayos X y electrones y los ángulos entre planos cristalinos para cualquier tipo de celda cristalina a partir de datos sobre la celda cristalina y los factores de dispersión atómica correspondientes.
2. El programa es aplicable a la interpretación de diagramas de difracción de rayos X y electrones y permite conocer los planos que contribuyen a una misma reflexión, a partir del ordenamiento decreciente de las distancias interplanares.

BIBLIOGRAFÍA

1. Hirsh, P.B. et al.

"Electron Microscopy of thin crystals". Butterworths. London, 1965

Recibido: 17 de abril de 1984.

CASO C

PLANOS CON FACTOR DE ESTRUCTURA MAYOR DEL 5 PORCIENTO

H	K	L	D(ANG)	FRX2	FELE(ANG) 2	H	K	L	D(ANG)	FRX2	FELE(ANG) 2
-2	0	-3	3.16362	64627.05	2541.810	0	-2	-3	3.16362	64626.93	2541.804
0	2	3	3.16362	64626.93	2541.804	2	0	3	3.16362	64626.05	2541.810
-2	0	3	3.16362	64626.95	2541.802	0	-2	3	3.16362	64626.93	2541.802
0	2	-3	3.16362	64626.93	2541.802	2	0	-3	3.16362	64626.95	2541.802
-1	-1	-6	3.14741	81588.06	1958.055	1	1	6	3.14741	81588.06	1958.055
-1	-1	6	3.14740	81589.06	1958.053	-1	1	-6	3.14740	81588.13	1958.053
-1	1	6	3.14740	81588.00	1958.051	1	-1	-6	3.14740	81588.00	1958.051
1	-1	6	3.14740	81588.13	1959.053	1	1	-6	3.14740	81588.06	1958.053
0	0	-8	3.10687	59504.56	27309.852	-	-	-	-	-	-