

Programa patrón para modelado de patrones de difracción de polvos para cualquier tipo de celda.

Francisco Cruz y Alberto Serra, Dpto. Metales Universidad de La Habana
Manuel Antón, Laboratorio Difracción de Rayos X, CIME

RESUMEN

Se expone un programa en lenguaje FORTRAN IV denominado PATRON que realiza un modelado esquemático del patrón de difracción de rayos X para muestras de polvo, simulando los resultados que se obtienen al emplear las técnicas de Debye Scherrer y difractométricas. El programa consta de ocho subprogramas y un programa principal rector. Los datos para el programa son las características de la celda cristalina, la base atómica, la radiación incidente y el rango angular en que se desea el esquema del patrón. El programa calcula la intensidad de cada línea y hace un dibujo del patrón dentro del rango angular deseado. Las intensidades se obtienen normalizadas con respecto a la línea de mayor intensidad. Se muestra un ejemplo para una red de alta simetría.

ABSTRACT

A FORTRAN IV language program, the so-called "PATTERN", which carries out a schematic modelling of X-Ray diffraction patterns for powder samples, is exposed. This program simulates the results which are obtained when the Debye - Scherrer and diffractometric techniques are used and it comprises a main leading program and eight subprograms. The data required for the program are the following: crystalline cell characteristics, atomic base, incident radiation and angular zone within which the pattern scheme is desired to fall.

The program calculates the intensity of each line and makes a drawing of the pattern within the desired angular zone. The intensities are normalized with respect to the line of greater intensity. An example is given for a high-symmetry lattice.

INTRODUCCIÓN

La comparación de patrones de difracción de polvos es un paso necesario en cualquier trabajo de caracterización de materiales sólidos por difracción, y por ello es frecuentemente deseable, calcular el patrón de difracción como paso previo al trabajo de identificación de fases. Para realizar este cálculo se ha desarrollado un programa denominado PATRON en lenguaje FORTRAN IV que calcula el patrón de una sustancia dada y dibuja un esquema del mismo a partir de información sobre las características de la celda cristalina, la base atómica, la radiación empleada y el rango angular en que se desea obtener el patrón, además puede obtenerse la información en forma tabulada.

DESARROLLO

A. DESCRIPCIÓN DEL PROGRAMA

El programa PATRON consta de ocho subprogramas dirigidos por un programa principal relativamente sencillo donde también se realiza el cálculo de las triadas de índices de Miller y de las distancias interplanares correspondientes. Los índices de Miller se obtienen mediante generación de números enteros por medio de un algoritmo iterativo y las distancias interplanares a partir de la expresión general:

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

donde la S_{ij} con $i, j = 1, 2, 3$ dependen de los parámetros de la red.

Las subrutinas denominadas CELDA, RANGO y ORDEN ya han sido descritas en la exposición de un programa anterior (1) denominado ESTRUCTURA. Las demás subrutinas realizan las siguientes tareas:

1. *Subrutina ATOM.* Lee los datos sobre los tipos de átomos en la celda, su cantidad y sus coordenadas, imprime estos resultados y los almacena en arreglos preparados para su posterior utilización.
2. La subrutina ESTRUC. Calcula el factor de estructura para las distintas reflexiones a partir de datos sobre la celda cristalina, los factores de dispersión atómica y los datos almacenados en ATOM, para ello usa la expresión:

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

3. *Subrutina MULTIP.* Calcula el factor de multiplicidad para las distintas reflexiones.

4. *Subrutina INTENS.* Calcula la intensidad de cada reflexión, para lo cual usa la expresión:

$$I_i = |F_{hkl}|^2 p \left(\frac{1 + \cos^2 2\theta_i}{\sin^2 \theta_i \cos \theta_i} \right) e^{-\frac{B}{2d_i^2}} \quad 3.$$

donde B es el factor térmico, p la multiplicidad, $|F_{hkl}|^2$ el factor de estructura y θ_i el ángulo de Bragg de la reflexión i-ésima.

5. *Subrutina SELEC.* Elimina aquellas reflexiones cuya intensidad es menor del 1% de la de mayor intensidad y reordena nuevamente por valores decrecientes de la distancia interplanar.

6. *Subrutina GRAFIC.* Construye un gráfico esquemático del patrón de polvos para rayos X tal como se vería en un difractograma y con las intensidades normalizadas respecto a la reflexión más intensa a la cual se le asigna el valor de 100.

B. ENTRADA Y SALIDA DEL PROGRAMA

Los datos del programa son: valores máximo y mínimo del rango angular del patrón y valor del salto o resolución del patrón, longitud de onda de la radiación incidente, nombre y parámetros de la celda de la sustancia escogida, valores máximos y mínimos del rango escogido para los índices de Miller, nombre, cantidad y posiciones de los átomos en la celda, los factores de dispersión atómicos, el factor térmico y algunas variables de control y selección. El programa imprime en la salida todos los datos de entrada para su comprobación y además se obtienen:

- Tablas de conjuntos de valores de los índices de Miller, las distancias interplanares y factores de estructuras.
- Tabla donde aparecen sólo las reflexiones cuyas intensidades son mayores del 1% de la mayor y donde se tabulan las distancias interplanares, el ángulo de Bragg, el factor de estructura, la multiplicidad, la intensidad y los índices de Miller.
- Gráfico esquemático del patrón de difracción.

En la figura se muestra un segmento del gráfico para el NaCl, que por su alta simetría es de los que más dificultades presenta para el programa debido a la gran cantidad de planos prácticamente equivalentes que da lugar a altos factores de multiplicidad y exige del programa una cuidadosa labor de selección.

C. REQUERIMIENTOS DE COMPUTACIÓN

El programa se desarrolló para la computadora EC-1022 y requiere para su almacenamiento y explotación 75 Kbytes. Puede ser usado en cualquier computadora del tipo EC.

CONCLUSIONES

El programa PATRON, desarrollado en lenguaje FORTRAN IV para la computadora EC-1022, permite calcular el patrón de difracción de polvos de cualquier sustancia a partir de datos sobre la celda cristalina, de la radiación incidente y de los factores de dispersión atómica. Se obtiene un gráfico esquemático del patrón utilizable en registros difractométricos y de Debye-Scherrer. Las intensidades se dan normalizadas con respecto a la reflexión de mayor intensidad, a la cual se le asigna el valor de cien.

BIBLIOGRAFÍA

1. Cruz, F., M. Antón, A. Serra

"Programa ESTRUCTURA para el cálculo de los factores de estructura para rayos X y electrones para cualquier tipo de celda" (pendiente de publicación Revista de la Sociedad Cubana de Física).

Recibido: 17-4-1984