

# Dos nuevas versiones del programa "PATRÓN" para el modelado de patrones de difracción de polvos

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

## RESUMEN

---

Se exponen dos nuevas versiones del programa PATRON /1/, desarrollado en el lenguaje SS FORTRAN soportado sobre CPM para una microcomputadora NEC - 9801F. Este programa permite obtener el patrón de difracción de polvos simulando las técnicas de Debye - Scherrer y difractométricas.

## ABSTRACT

---

Two new versions of the PATRON, program /1/, developed in SS FORTRAN language over CPM system for a personal microcomputer are showed.

These programs simulate the results which are obtained when the Debye-Scherrer and diffractometric techniques are used.

## INTRODUCCIÓN

---

Debido a las facilidades de acceso a las microcomputadoras NEC, los autores del Programa PATRON /1/ desarrollado para computadoras tipo EC, presentan ahora dos variantes del mismo programa PATRON 1 y PATRON 2, desarrollados para microcomputadoras NEC - 9801F con todas las posibilidades que brinda esta nueva concepción.

El programa *PATRÓN 2* consta de un programa principal, 11 subrutinas y un fichero de datos. Estas subrutinas son dirigidas por el programa principal y es en ellas donde se realizan los procesos fundamentales de cálculo. El objetivo fundamental del programa es obtener el patrón de difracción de polvos para la sustancia analizada, en el rango angular previamente señalado y para una radiación de longitud de onda dada.

Para el cálculo de la distancia interplanar se utilizan las fórmulas del apéndice I del Cullity /2/. Dentro del proceso de cálculo del factor de estructura, los factores de dispersión atómica se obtienen a partir de la fórmula 3, pág. 71 de la tabla internacional de Rayos - X, Vol. II /3/, donde los valores de las constantes que aparecen en esta fórmula fueron obtenidos de la tabla 2.2B del mismo volumen y se encuentran en un fichero de datos que forma parte del programa. En este fichero también se encuentran los valores de la longitud de onda del borde de absorción K de cada uno de los elementos, así como el número atómico de cada uno de ellos. Estos últimos datos se utilizan para el cálculo de la corrección al factor de dispersión atómica debido a la cercanía de la longitud de onda del borde de absorción K de los átomos de la sustancia analizada con la longitud de onda de la radiación incidente.

Esta corrección se realiza mediante la fórmula (5) del apéndice III del James /4/ mediante las fórmulas de Hönl (ecuación 4.61 del James /4/).

El cálculo del factor de estructura para las distintas reflexiones se realiza a partir de la expresión que aparece en la página 118 del Cullity /2/.

Para el cálculo de las intensidades integradas relativas se utiliza la ecuación 4 - 12 del Cullity /2/ agregándole la expresión del factor de temperatura;  $\exp(-2B \sin^2\theta/\lambda)$ . Para el cálculo del factor de temperatura se ha considerado la aproximación sugerida por Parai - Kochic /5/, asignando el mismo valor de B a todos los átomos que componen la sustancia estudiada. Los valores de las intensidades se seleccionan entre aquellos que son mayores que el 1 % de la intensidad máxima.

## ENTRADAS Y SALIDAS

Debido a que en la microcomputadora NEC-9801F la entrada de los datos es a través de un teclado para facilitar al usuario la introducción de algunos de los datos al programa, se desarrolló un programa complementario destinado a formar ficheros con los datos. En este programa, se recogen las características fundamentales de la muestra a analizar, sirviendo a su vez de fuente de información permanente y actualizable al programa básico. Este programa recibe el nombre de FICHERO y en él se introducen:

los parámetros de la red cristalina de la muestra analizada; los símbolos químicos de los elementos que componen la muestra; el número de átomos que estos elementos poseen dentro de la celda unitaria y sus respectivas posiciones en esta.

En la versión *PATRÓN 1*, es necesario introducir también el valor numérico de la longitud de onda de la radiación y se deja a criterio del usuario la corrección por la cercanía de esta radiación al borde de absorción K, mientras que en la versión *PATRÓN 2*, la longitud de onda de la radiación se selecciona de un menú y las correcciones por la cercanía del borde de absorción K se realizan siempre de forma automática. El valor de B queda a elección del usuario en ambas versiones.

Entre los principales resultados que brinda el programa se obtienen:

- i) Una tabla con los índices de Miller, las distancias interplanares y los factores de estructura. Esta tabla se obtiene a voluntad del usuario.
- ii) Una tabla con las reflexiones correspondientes a cada pico con sus ángulos, de Bragg, intensidades relativas, índices de Miller, distancias interplanares, factores de estructura y factores de multiplicidad.
- iii) El gráfico del patrón de difracción en el intervalo previamente fijado y con el paso escogido. Esta salida también es optativa. La figura 1 muestra un ejemplo del gráfico obtenido.

#### PLANOS CON INTENSIDADES MAYORES DEL UNO POR CIENTO

CITA	I	H K L	DTEOR	FSTRX**2	P
13.724	9.2	1 1 1	3.2494	371.	8.
15.899	100.0	2 0 0	2.8140	7678.	6.
22.794	54.6	2 2 0	1.9898	5584.	12.
27.019	1.5	3 1 1	1.6969	130.	24.
28.325	14.7	2 2 2	1.6247	4444.	8.
33.223	5.4	4 0 0	1.4070	3722.	6.
37.775	12.1	4 2 0	1.2585	3222.	24.
42.146	7.5	4 2 2	1.1488	2851.	24.

GRÁFICO DE INTENSIDADES RELATIVAS .VS. ÁNGULOS

H	K	L	CITA	*****	*****	*****
				*****	*****	*****
			12.000	*		
			13.000	*		
1	1	1	14.000	*XXXXX		9.2 %
			15.000	*		
2	0	0	16.000	*XX		100.0 %
			17.000	*		
			18.000	*		
			19.000	*		
			20.000	*		
			21.000	*		
			22.000	*		
2	2	0	23.000	*XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX		54.6 %
			24.000	*		
			25.000	*		
			26.000	*		
			27.000	*		
2	2	2	28.000	*XXXXXXX		14.7 %
			29.000	*		
			30.000	*		
			31.000	*		
			32.000	*		
1	0	0	33.000	*XXX		5.4 %
			34.000	*		
			35.000	*		
			36.000	*		
			37.000	*		
4	2	0	38.000	*XXXXXX		12.1 %
			39.000	*		
			40.000	*		
			41.000	*		
4	2	2	42.000	*XXXX		7.5 %
			43.000	*		
			44.000	*		
			45.000	*		

ÁNGULOS EN GRADO

Figura 1

BIBLIOGRAFÍA

- Cruz, F.; A. Serra y M. Antón  
Programa PATRÓN para modelado de patrones de difracción de polvos para cualquier tipo de celda. IV Conferencia Científica de Ciencias Naturales y Exactas. Universidad de La Habana, 1984.
- Cullity, B.D.  
Elements of X-RAY DIFFRACTION. Edición Revolucionaria, 1967.
- International Tables for X-Ray Crystallography. Vol. II. Kynoch Press, England 1968.
- James, R.W.  
The Optical Principles of the Diffraction of X-Rays. G. Bell and Sons LTD, London, 1967.

S. Parai-Kochic, M.A.

Curso Práctico de Análisis Estructural por Rayos-X Tomo 2, M.G.U.  
1960. (Edición en Ruso).



LIBRARY OF THE  
MOSCOW STATE UNIVERSITY  
PHYSICS DEPARTMENT  
119884, MOSCOW, U.S.S.R.