

# Programa para la proyección estereográfica y simulación de patrones de Laue

Enrique Vega, Alberto Serra, Juan García Rodríguez y Francisco Cruz  
Facultad de Física, Dpto. de Metales, Universidad de La Habana

## RESUMEN

---

Se presenta un programa para microcomputadora NEC PC 9801F en lenguaje BASIC que obtiene: la proyección estereográfica para cualquier sistema cristalino, las redes de Wulff y Polar, y simula patrones de Laue, tanto para transmisión como para retrorreflexión. Opcionalmente se pueden obtener las proyecciones y los lauegramas en tamaño normal con la adición de un graficador a la microcomputadora.

## ABSTRACT

---

A program in BASIC for a NEC PC 9801F which makes stereographic projections for any crystalline system, Wulff and Polar nets, and simulates transmission and back-reflection Laue patterns is presented. Optionally the projections and Laue patterns in standard sizes can be obtained with the use of a plotter matched to the computer.

## INTRODUCCIÓN

---

Uno de los dispositivos gráficos más útiles para el estudio de sustancias monocristalinas o en el análisis de textura lo constituye la proyección estereográfica.

En el estudio de los materiales monocristalinos por difracción de Rayos-X resulta casi imprescindible tener una buena colección de proyecciones estereográficas patrones, que se obtienen en general, en la literatura existente, para el sistema cúbico y para algunos casos particulares del sistema hexagonal.

En un material texturado la información sobre la orientación preferencial de los cristales que forman la muestra se obtiene de las figuras de polos que se construyen a partir de su proyección estereográfica ya que las posiciones de los máximos sobre esta proyección indica las direcciones de las normales de los planos orientados preferencialmente en la muestra, y que en caso particular del sistema cúbico los índices [u v w] coinciden con los índices (h k l) de los polos de la proyección patrón.

El programa que se presenta en este trabajo tiene también una aplicación de particular interés docente en aquellos centros donde no es posible obtener con facilidad lauegramas reales de sustancias monocristalinas ya que con este programa no sólo es posible una vez simular a los lauegramas de cualquier sistema cristalino en cualesquiera de las orientaciones patrones, sino que también es posible, una vez que el usuario se familiarice con la manipulación del programa, simular pequeñas rotaciones del cristal.

## DESARROLLO

---

El programa está desarrollado en lenguaje BASIC N88 para una microcomputadora NEC PC 9801F, la cual tiene acoplados una impresora EPSON y un graficador MILOT II. Las proyecciones estereográficas se obtienen para cualquier sistema cristalino en el tamaño normal de 18 cm de diámetro.

Los lauegramas están simulados para placas fotográficas de 10 x 13 cm, tanto para transmisión como para retroreflexión, pudiéndose variar a voluntad la distancia de la placa fotográfica a la muestra. Los lauegramas se obtienen geoméricamente a partir de la proyección estereográfica por lo que en ellos solo son válidas las posiciones de los puntos y no otro efecto que pueda poseer la muestra real.

El algoritmo matemático utilizado para la construcción de la proyección estereográfica está desarrollado en la bibliografía /1/ y los lauegramas se obtienen mediante las fórmulas de la regla estereográfica /2/. Las fórmulas para la construcción de la red de Wulff y la red Polar se obtuvieron analíticamente proyectando estereográficamente los meridianos (círculos mayores) y las paralelas (círculos menores) de la esfera de proyección sobre el plano ecuatorial de la misma /3/, obteniéndose para la red de Wulff las siguientes fórmulas:

Al proyectar los círculos menores se obtiene:

$$X^2 + \left(Y + \frac{R}{\sin \theta}\right)^2 = R^2 \cot^2 \theta$$

donde R es el radio de la proyección (que en este caso es el radio de la esfera de proyección (9 cm) y  $\theta$  es la latitud correspondiendo al ecuador el valor de  $0^\circ$ . X y Y son las coordenadas de la proyección sobre el plano ecuatorial con origen en el centro de la esfera de proyección.

Cuando se proyectan los círculos mayores se obtiene la siguiente fórmula:

$$(X + R \cot \varphi)^2 + Y^2 = R^2 (\cot \varphi + 1)$$

donde  $\varphi$  corresponde al ángulo azimutal correspondiendo al eje N - S el valor de  $0^\circ$ . R, X y Y tienen la misma interpretación que en la fórmula para la proyección de los círculos menores.

Para la red Polar se obtuvo la siguiente expresión:

$$X^2 + Y^2 = R^2 \left( \frac{1 - \sin \alpha}{1 + \sin \alpha} \right)$$

donde  $\alpha$  es la latitud, para el ecuador su valor es  $0^\circ$ . El resto de las variables y constantes tiene la misma interpretación que para la red de Wulff.

## ESTRUCTURA DEL PROGRAMA

---

El programa está compuesto de un programa principal, 3 subrutinas y 2 ficheros. Las subrutinas elaboran los datos relacionados con el sistema cristalino, y construyen la red de Wulff y la red Polar. Uno de los ficheros contiene los índices de Miller que elabora el programa y el otro es un fichero especial para los índices de Miller del sistema hexagonal. La utilización de estos ficheros reduce considerablemente el tiempo de ejecución del programa en relación con el tiempo que emplearía en generar estos índices cada vez que se ejecute el programa, además estos ficheros dan al usuario, familiarizado con el lenguaje BASIC, la posibilidad de agregar o eliminar índices a los mismos de acuerdo a su conveniencia.

## CARACTERÍSTICAS DEL PROGRAMA. Entradas y salidas

---

El programa comienza con una presentación que informa las posibilidades del mismo y pregunta: el sistema cristalino de interés así como sus parámetros reticulares (con excepción del sistema cúbico cuyos parámetros los fija el programa); la distancia que se desea simular de la muestra a las placas fotográficas; el valor máximo de los índices h k l y los índices de la proyección deseada.

El programa presenta un menú con las siguientes opciones:

- 1). Impresión de la proyección estereográfica en el impresor, o en el graficador.
- 2). Impresión de los lauegramas en el impresor.

- 3). Impresión de la red de Wulff.
- 4). Impresión de la Red Polar.
- 5). Obtención de otra proyección para el mismo sistema.
- 6). Opción para comenzar nuevamente.
- 7). Clave para abandonar el programa.

Al concluir la ejecución de cualesquiera de estas opciones el programa regresa a este menú.

En la figura 1 se muestra el listado de las coordenadas de los polos para la proyección estereográfica 100 del sistema cúbico para graficar en papel milimetrado, así como las coordenadas de los puntos de Laue, que corresponden a esta proyección, en el caso de que se desee construir estos gráficos. En este ejemplo la corrida se realizó para índices  $h k l$  máximos de 2. En la figura 2 se muestra la proyección estereográfica 100 para el sistema cúbico obtenida en el impresor y para índices  $h k l$  máximos de 3. La incertidumbre en las posiciones de los puntos que representan las proyecciones de los polos no es mayor de 1 mm. Si se utiliza el graficador la precisión es aún mayor. En la figura 3 se muestran los lauegramas que simulan el obtenido para un monocristal cúbico orientado con sus planos  $(n 0 0)$  perpendiculares al haz incidente y para una distancia de la muestra a las placas fotográficas de 2 cm.

Si se utiliza el graficador se obtienen de una vez la proyección estereográfica y los lauegramas.

En la figura 4 se presenta la red de Wulff con un paso de  $5^\circ$  obtenida en el impresor y en la figura 5 la red Polar con la misma precisión.

El tiempo de ejecución del programa es menor que 5 minutos dependiendo de los índices  $h k l$  máximos seleccionados, el programa ocupa menos de 7 cluster y puede ser ejecutado en cualquier NEC PC 9801F, sin necesidad de extensión de memoria.

## CONCLUSIONES

---

Se ha confeccionado un programa que obtiene los dispositivos más utilizados en el trabajo con materiales monocristalinos o texturados y que además brinda la posibilidad de la comparación de los lauegramas obtenidos en una cámara de Laue u otro equipo similar con los obtenidos por simulación con este programa.

Los resultados del programa constituyen un valioso material docente para aquellos centros que no cuentan con posibilidades de obtener los lauegramas reales de sustancia monocristalinas e imparten cursos de difracción de rayos-X.

SISTEMA CÚBICO

-PROYECCIÓN-

1 0 0

I. Miller			P. Estereográfica		Laua de transmisión		Laua de reflexión	
H	K	L	X(cm)	Y(cm)	X(cm)	Y(cm)	X(cm)	Y(cm)
0	0	1	0.00	-9.00	0.00	0.00	*	*
0	0	-1	0.00	9.00	0.00	0.00	*	*
0	1	0	9.00	0.00	0.00	0.00	*	*
0	1	1	6.36	-6.36	0.00	0.00	*	*
0	1	-1	6.36	6.36	0.00	0.00	*	*
0	1	2	4.02	-8.05	0.00	0.00	*	*
0	1	-2	4.02	8.05	0.00	0.00	*	*
0	-1	0	-9.00	0.00	0.00	0.00	*	*
0	-1	1	-6.36	-6.36	0.00	0.00	*	*
0	-1	-1	-6.36	6.36	0.00	0.00	*	*
0	-1	2	-4.02	-8.05	0.00	0.00	*	*
0	-1	-2	-4.02	8.05	0.00	0.00	*	*
0	2	1	8.05	-4.02	0.00	0.00	*	*
0	2	-1	8.05	4.02	0.00	0.00	*	*
0	-2	1	-8.05	-4.02	0.00	0.00	*	*
0	-2	-1	-8.05	4.02	0.00	0.00	*	*
1	0	1	0.00	-3.73	*	*	*	*
1	0	-1	0.00	3.73	*	*	*	*
1	0	2	0.00	-5.56	0.00	4.00	*	*
1	0	-2	0.00	5.56	0.00	-4.00	*	*
1	1	0	3.73	0.00	*	*	*	*
1	1	1	3.29	-3.29	*	*	*	*
1	1	-1	3.29	3.29	*	*	*	*
1	1	2	2.61	-5.22	1.50	3.00	*	*
1	1	-2	2.61	5.22	1.50	-3.00	*	*
1	-1	0	-3.73	0.00	*	*	*	*
1	-1	1	-3.29	-3.29	*	*	*	*
1	-1	-1	-3.29	3.29	*	*	*	*
1	-1	2	-2.61	-5.22	-1.50	3.00	*	*
1	-1	-2	-2.61	5.22	-1.50	-3.00	*	*
1	2	0	5.56	0.00	4.00	0.00	*	*
1	2	1	5.22	-2.61	3.00	1.50	*	*
1	2	-1	5.22	2.61	3.00	-1.50	*	*
1	2	2	4.50	-4.50	1.71	1.71	*	*
1	2	-2	4.50	4.50	1.71	-1.71	*	*
1	-2	0	-5.56	0.00	-4.00	0.00	*	*
1	-2	1	-5.22	-2.61	-3.00	1.50	*	*
1	-2	-1	-5.22	2.61	-3.00	-1.50	*	*
1	-2	2	-4.50	-4.50	-1.71	1.71	*	*
1	-2	-2	-4.50	4.50	-1.71	-1.71	*	*
2	0	1	0.00	-2.12	*	*	0.00	4.00
2	0	-1	0.00	2.12	*	*	0.00	-4.00
2	1	0	2.12	0.00	*	*	-4.00	0.00
2	1	1	2.02	-2.02	*	*	*	*
2	1	-1	2.02	2.02	*	*	*	*
2	1	2	1.80	-3.60	*	*	*	*
2	1	-2	1.80	3.60	*	*	*	*
2	-1	0	-2.12	0.00	*	*	4.00	0.00
2	-1	1	-2.02	-2.02	*	*	*	*
2	-1	-1	-2.02	2.02	*	*	*	*
2	-1	2	-1.80	-3.60	*	*	*	*
2	-1	-2	-1.80	3.60	*	*	*	*
2	2	1	3.60	-1.80	*	*	*	*
2	2	-1	3.60	1.80	*	*	*	*
2	-2	1	-3.60	-1.80	*	*	*	*
2	-2	-1	-3.60	1.80	*	*	*	*

\* Puntos que para la placa situada a 3 cm de la muestra caen fuera de ella.

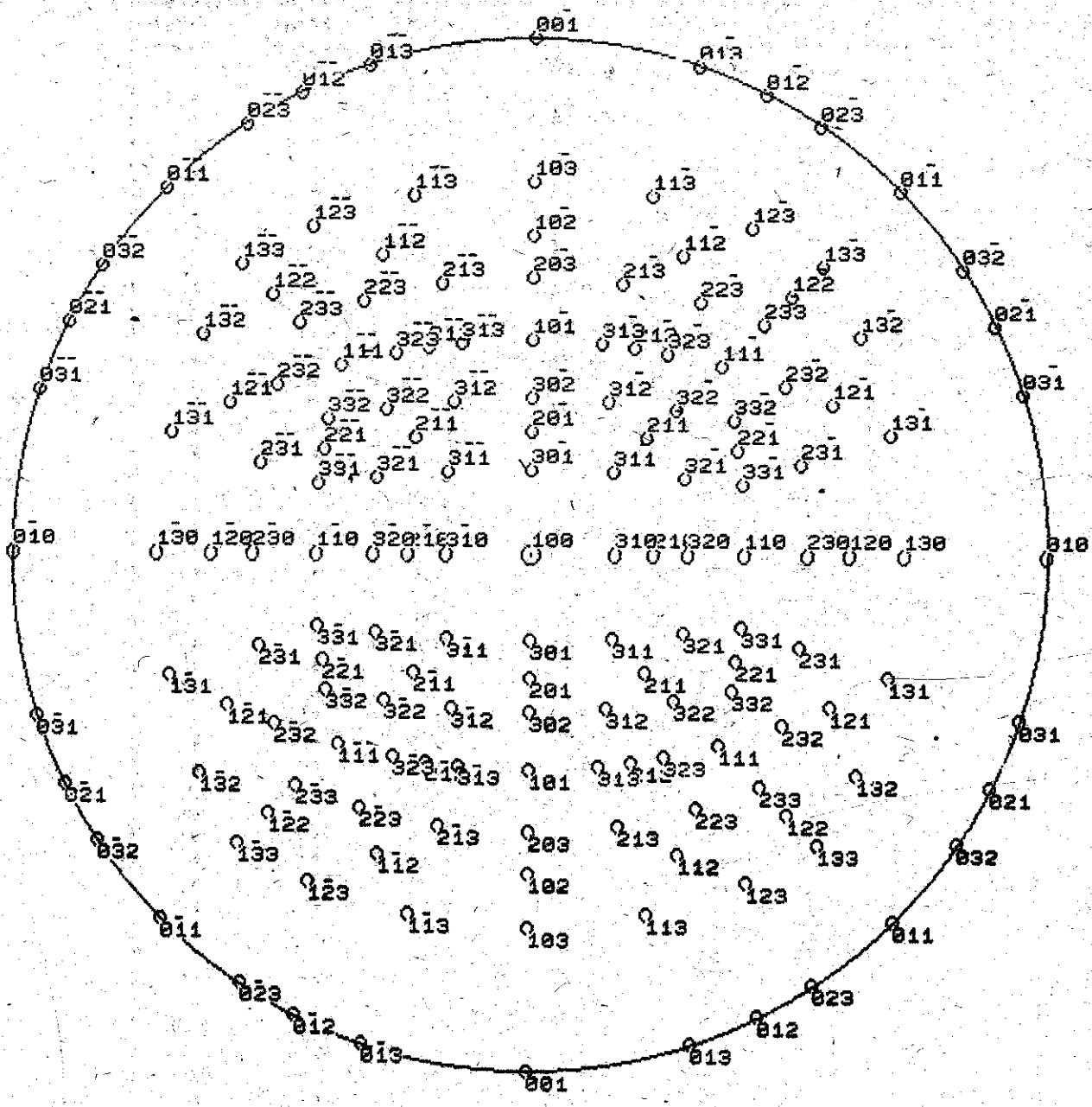
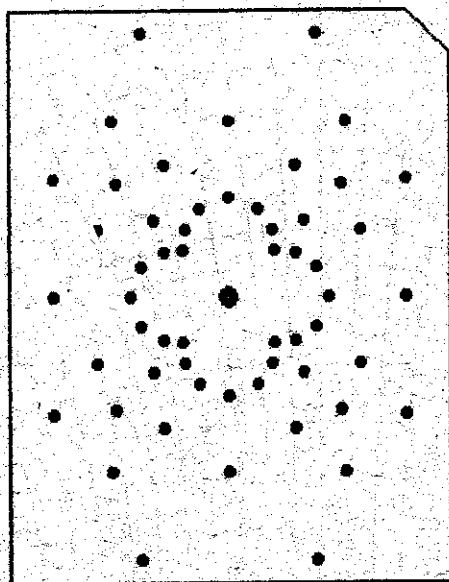
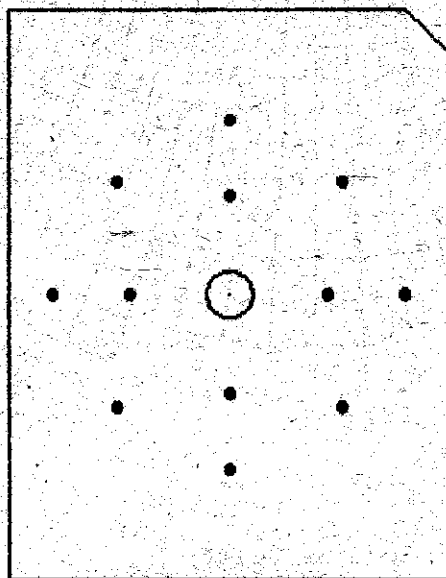


Figura 2  
 Proyección 100 para el sistema cúbico.



-LAUE DE TRANSMISIÓN-



-LAUE DE REFLEXIÓN-

Figura 3. Lauegramas que simulan la difracción de un monocristal cúbico con sus planos (n 00) orientados perpendicularmente al haz incidente, para una distancia de la muestra a las placas fotográficas de 2 cm.

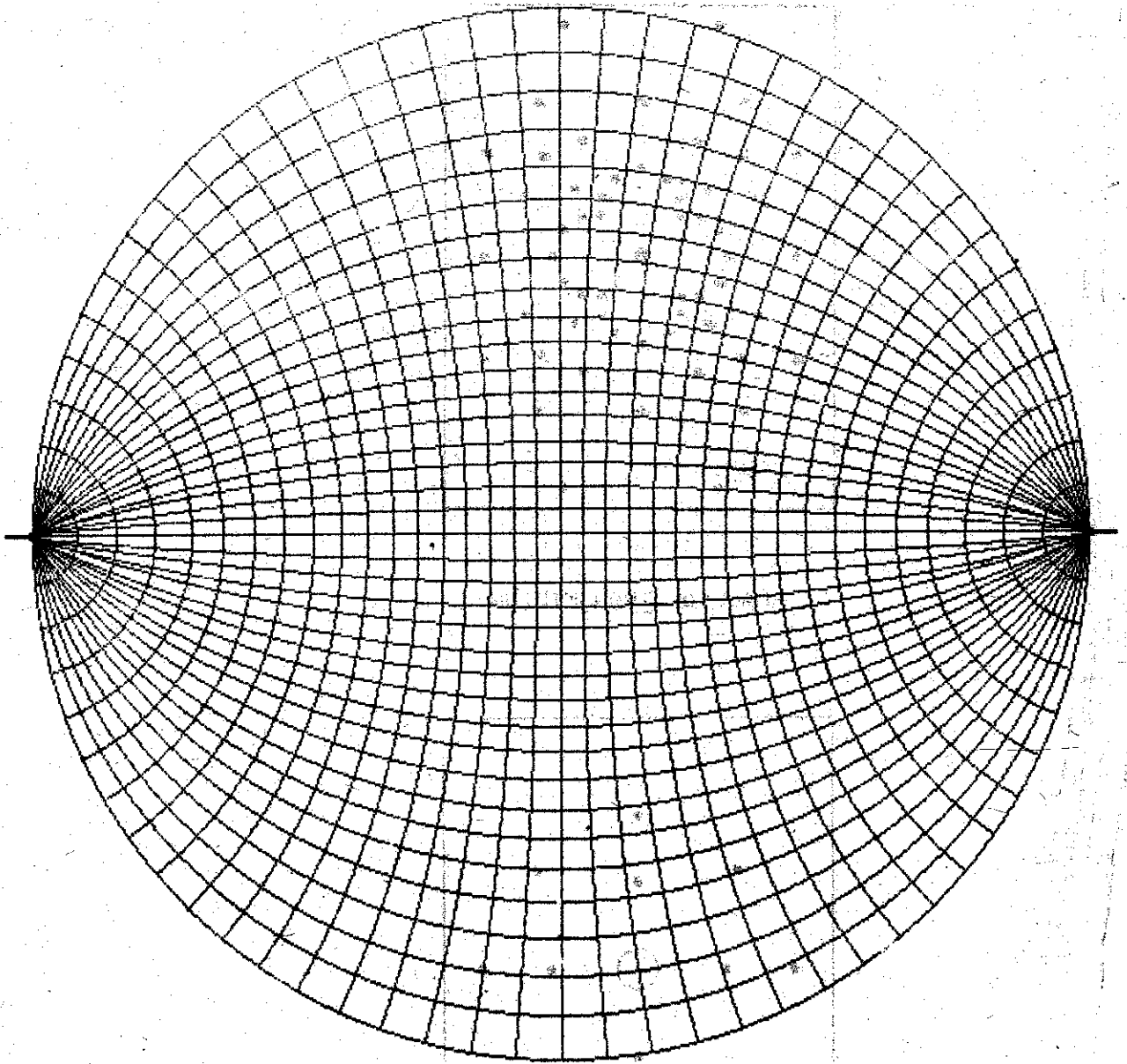


Figura 4. Red de Wulff.

UNIVERSITY OF TORONTO

UNIVERSITY OF TORONTO LIBRARY  
130 St. George Street, Toronto, Ontario M5S 1A5  
416-978-2011



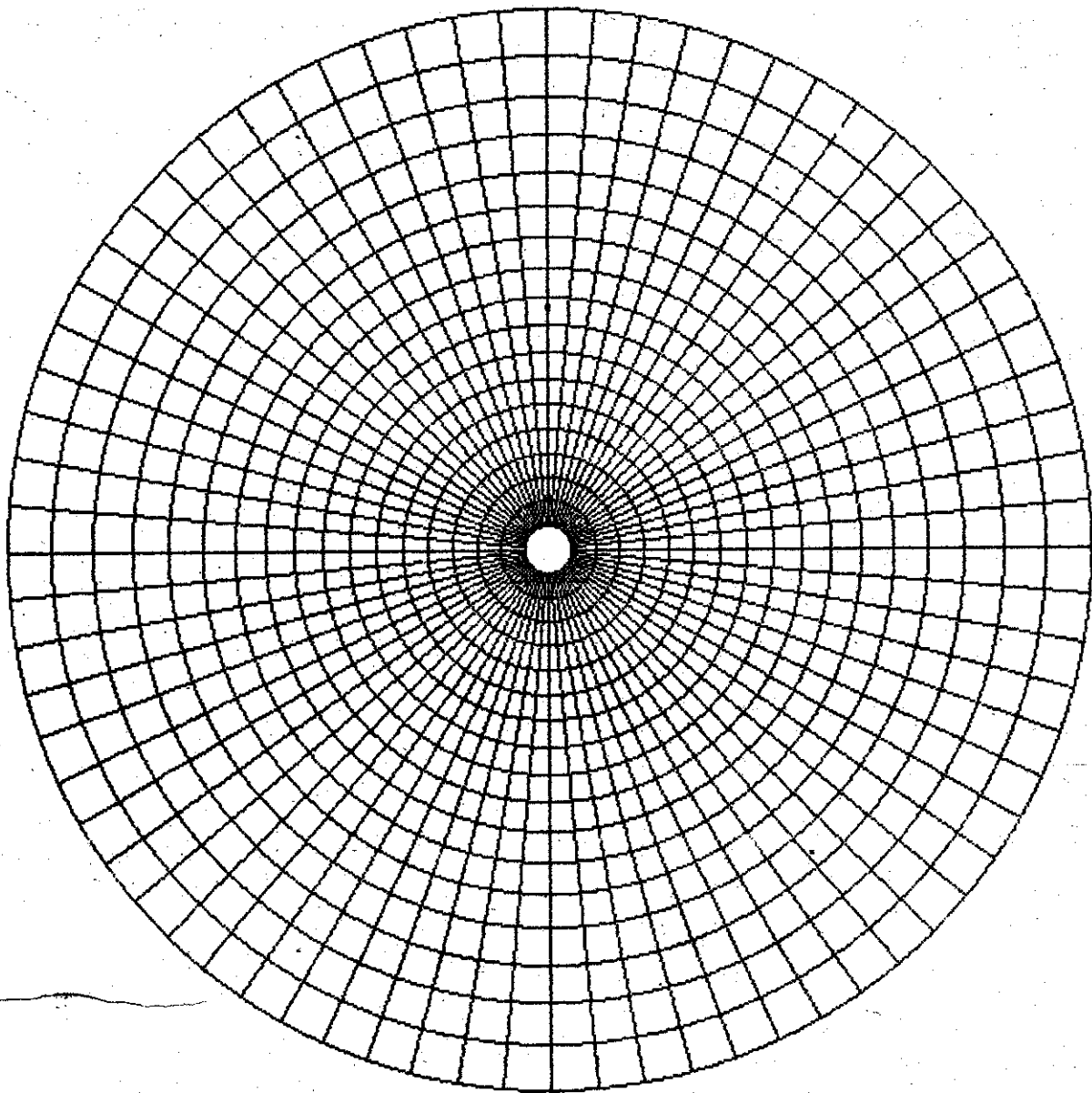


Figura 5. Red Polar .

## BIBLIOGRAFÍA

---

1. Joharia, O. and G. Tomas  
*The Stereographic Projection and its Applications*. Techniques of Metals Research. R. F. Bunshah, Editor. 1969.
2. Cullity, B. D.  
*Elements of X - Ray diffraction*. Edición Revolucionaria, 1967.
3. Rey Pastor, J.; L. A. Santaló y M. Balazat  
*Geometría analítica*. Edición Revolucionaria, 1966.

Recibido: 9 de septiembre de 1986.