Sci. Annals, Fac. Phys. & Mathem., Univ. Thessaloniki, **17**, 153, (1977)

ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΔΟΜΗΣ ΕΚ ΤΗΣ ΣΕΙΡΑΣ CSD

Ὑπὸ

ΚΛΕΑΝΘΗ ΒΕΝΕΤΟΠΟΥΛΟΥ

Ἐπιμελητῆ τοῦ Ἐργαστηρίου Ἐφηρμοσμένης Φυσικῆς

(Παρελήφθη 17.6.77)

Abstract: *The CSD series of erystallographie programs are mainly used in erystal strueture determination. Some of the programs are used in educating students of Physics in crystallographic computing. The most important programs are used in research work, i.e. processing data before and after the X-RAY system of crystallographic programs (STEWART et al., 1972) or MULTAN (MAIN et al., 1971). These programs are described in this paper.*

After collecting the reflection data with the automatic diffractometer, the programs CSD507, CSD751 and CSD982 are used to prepare input data for the X-RAY system or for the MULTAN. After the refinement of the atom parameters, the programs CSD600, CSD611 and CSD623 are used for an explieit description of the structure. Finally, the programs CSD986 and CSD987 give tables of the observed and ealculated data, ready for publication.

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Τὰ προγράμματα τῆς σειρᾶς CSD γράφτηκαν γιὰ τὴν ἐπίλυση διαφόρων προβλημάτων τῆς Κρυσταλλοδομῆς. Χωρίζονται σὲ ἐκπαιδευτικὰ καὶ ἐρευνητικά. Σὰν ἐκπαιδευτικὰ χαρακτηρίζονται ὅσα χρησιμοποιοῦνται γιὰ τὴ λύση ἀσκήσεων Κρυσταλλοδομῆς ἢ γιὰ τὴν ἐξοικείωση τῶν φοιτητῶν μὲ τὴ χρησιμοποίηση τοῦ ἠλεκτρονικοῦ ὑπολογιστῆ σὲ ἐπιστημονικὰ προβλήματα.

Τὰ προγράμματα τῆς δεύτερης ὁμάδας χρησιμοποιοῦνται σὲ διάφορα στάδια τῆς ἐπιστημονικῆς ἔρευνας στὴ μελέτη τῶν κρυσταλλικῶν σωμάτων. Στὴν ἐργασία αὐτὴ περιγράφονται δώδεκα προγράμματα, τὰ πιὸ ἀντιπροσωπευτικὰ τῆς ὁμάδας καὶ τὰ πιὸ χρήσιμα στὸν προσδιορισμὸ μιᾶς δομῆς. Τὰ προγράμματα CSD ποὺ περιγράφονται παρακάτω ἀνήκουν στὴ δεύτερη ὁμάδα καὶ χρησιμοποιοῦνται στὴν ἀρχικὴ ἐπεξεργασία τῶν μετρήσεων τοῦ περιθλασιμέτρου PW1100 τῆς PHILIPS, στὴν προετοιμασία τῶν δεδομένων γιὰ

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

τὰ συστήματα προγραμμάτων X-RAY καὶ MULTAN, καθὼς καὶ στὴν ἀνάλυση τῶν ἀποτελεσμάτων καὶ τὴν περιγραφὴ τῆς δομῆς.

Μετὰ ἀπὸ τὴ γενικὴ εἰσαγωγὴ καὶ τὴν περιγραφὴ τῆς χρησιμότητας καὶ τῶν δυνατοτήτων κάθε προγράμματος, δίνονται καὶ ἀποσπάσματα ἀπὸ τὰ προγράμματα FORTRAN μὲ τὴν ἀναλυτικὴ περιγραφὴ τῶν «δεδομένων εἰσόδου» (input data). Δίνονται ἐπίσης δείγματα δεδομένων (sample data), καθὼς καὶ τὰ δελτία ἐλέγχου (control cards), ποὺ χρειάζονται γιὰ τὴν ἐκτέλεση τῶν προγραμμάτων μὲ τὸ λειτουργικὸ σύστημα EXEC-8 τοῦ ἠλεκτρονικοῦ ὑπολογιστῆ UNIVAC 1106. Ὅλα τὰ προγράμματα ποὺ περιγράφονται ἐδῶ, εἶναι καταχωρημένα στὴ βιβλιοθήκη τῆς μνήμης τοῦ ὑπολογιστῆ τοῦ Ἀριστοτελείου Πανεπιστημίου Θεσσαλονίκης.

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Κατὰ τὸν προσδιορισμὸ τῆς δομῆς ἑνὸς κρυσταλλικοῦ σώματος στὸ Ἐργαστήριο Ἐφηρμοσμένης Φυσικῆς τοῦ Ἀριστοτελείου Πανεπιστημίου Θεσσαλονίκης χρησιμοποιοῦνται σὰν βασικὰ μέσα ἔρευνας τὸ αὐτόματο περιθλασίμετρο, γιὰ τὴ μέτρηση τῶν σταθερῶν τοῦ κρυστάλλου καὶ τῶν ἐντάσεων τῶν ἀνακλάσεων τῶν ἀκτίνων X, καὶ ὁ ἠλεκτρονικὸς ὑπολογιστής, γιὰ τὴν ἐπεξεργασία τῶν μετρήσεων.

Τὸ περιθλασίμετρο τοῦ Ἐργαστηρίου Ἐφηρμοσμένης Φυσικῆς εἶναι τύπου PW1100 τοῦ οἴκου PHILIPS. Λειτουργεῖ κάτω ἀπὸ τὸν ἔλεγχο ἐνσωματωμένου ἠλεκτρονικοῦ ὑπολογιστῆ, ποὺ δέχεται ἀπὸ τηλέτυπο ἐντολὲς γιὰ τὴν ἐκτέλεση εἰδικῶν προγραμμάτων, κάνει τοὺς ἀπαραίτητους ὑπολογισμούς, κινεῖ τὸ τετρακύκλιο γωνιόμετρο, καὶ καταμετρεῖ τόσο τὶς γωνίες θέσεως τοῦ γωνιομέτρου καὶ τοῦ κρυστάλλου, ποὺ εἶναι στερεωμένος πάνω σ' αὐτό, ὅσο καὶ τὶς ἐντάσεις τῶν περιθλωμένων ἀκτίνων X. Τὰ ἀποτελέσματα τῶν μετρήσεων καταγράφονται πάνω στὸ χαρτὶ τοῦ τηλετύπου, ἢ καὶ σὲ διάτρητη χαρτοταινία.

Γιὰ τὴν ἐπεξεργασία τῶν δεδομένων χρησιμοποιεῖται ὁ ἠλεκτρονικὸς ὑπολογιστὴς UNIVAC 1106 τοῦ Πανεπιστημίου Θεσσαλονίκης καὶ εἰδικὰ κρυσταλλογραφικὰ προγράμματα. Τὰ προγράμματα αὐτὰ χωρίζονται σὲ τρεῖς ὁμάδες.

α) Προγράμματα τοῦ συστήματος X-RAY τοῦ Πανεπιστημίου τοῦ Maryland.

Τὸ σύστημα X-RAY (STEWART et al., 1972) εἶναι προϊὸν πολυετοῦς ἐργασίας μιᾶς ὁμάδας ἐπιστημόνων τοῦ Πανεπιστημίου τοῦ Maryland τῶν Η.Π.Α. Περιλαμβάνει σειρὰ προγραμμάτων, ποὺ λύνουν διάφορα προβλήματα τῆς Κρυσταλλοδομῆς, καὶ ἐλέγχονται ἀπὸ ἕνα κεντρικὸ πρόγραμμα,

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

πού ὀνομάζεται NUCLEUS. Τὸ πρόγραμμα αὐτό, ἀνάλογα μὲ τὴν περίπτωση, διαλέγει τὸ κατάλληλο μέρος τοῦ συστήματος καὶ ἐκτελεῖ ἄλλες ἐργασίες γενικῆς φύσεως, ὅπως εἶναι π.χ. ἡ ἀνάγνωση καὶ ὁ ἔλεγχος τῶν δεδομένων, ἡ καταχώρηση τῶν στοιχείων τοῦ προβλήματος σὲ δικό του ἀρχεῖο μέσα στὴ βοηθητικὴ μνήμη τοῦ ὑπολογιστῆ, ἡ ἐκτύπωση ἀποτελεσμάτων κ.ἄ.

Μὲ τὰ προγράμματα τοῦ συστήματος X-RAY γίνονται ὑπολογισμοὶ γιὰ τὴν ἐπεξεργασία τῶν μετρήσεων, ὅπως εἶναι ἡ ἀναγωγὴ τῶν σχετικῶν ἐντάσεων σὲ ἀπόλυτες τιμὲς τοῦ παράγοντα δομῆς, ἡ ἐφαρμογὴ τῆς θεωρίας τῆς στατιστικῆς Wilson στὴν ἐξαγωγὴ συμπερασμάτων σχετικὰ μὲ τὴν ὕπαρξη κέντρου συμμετρίας στὸν κρύσταλλο, ἡ βελτίωση τῶν παραμέτρων τῶν ἀτόμων (ἐλαχιστοποίηση τοῦ δείκτη ἀξιοπιστίας R), ὁ ὑπολογισμὸς τῶν ἀποστάσεων μεταξὺ τῶν ἀτόμων, κ.π.ἄ.

Τὰ προγράμματα τοῦ συστήματος X-RAY τὰ διαθέτει τὸ Πανεπιστήμιο τοῦ Maryland στοὺς ἐνδιαφερομένους, μαζὶ μὲ τὸ ἐγχειρίδιο περιγραφῆς (Write up), ὅπου περιέχονται καὶ ὁδηγίες γιὰ τὴν προετοιμασία τῶν δεδομένων. Στὸ σύστημα X-RAY γίνονται συνεχῶς συμπληρώσεις καὶ βελτιώσεις, κυκλοφορεῖ δὲ κάθε χρόνο σὲ νέα ἔκδοση.

β) Προγράμματα προσδιορισμοῦ τῆς δομῆς μὲ ἀμέσους μεθόδους (direct methods) — Σύστημα MULTAN τοῦ Πανεπιστημίου τοῦ York.

Στὴν ὁμάδα τῶν προγραμμάτων ποὺ ἐφαρμόζουν ἀμέσως μεθόδους γιὰ τὴν ἐπίλυση μιᾶς δομῆς ἀνήκει τὸ σύστημα MULTAN (MAIN et al., 1971), ποὺ χρησιμοποιεῖται γιὰ τὸν προσδιορισμὸ τῶν φάσεων τῶν παραγόντων δομῆς καὶ τὸν καθορισμὸ τῆς θέσεως τῶν ἀτόμων μέσα στὴν κυψελίδα μὲ σύνθεση Fourier.

Τὰ προγράμματα τοῦ συστήματος MULTAN γράφτηκαν στὸ Πανεπιστήμιο τοῦ York τῆς Ἀγγλίας, ἀπὸ μιὰ ὁμάδα εἰδικῶν ἐπιστημόνων, σὲ συνεργασία καὶ μὲ τὸ Πανεπιστήμιο τῆς Louvain τοῦ Βελγίου. Μὲ τὸ MULTAN πέτυχαν μέχρι σήμερα τὴν ἐπίλυση μεγάλου ἀριθμοῦ δομῶν, συνεχίζονται δὲ οἱ προσπάθειες γιὰ τὴν τελειοποίηση τοῦ συστήματος, ὥστε νὰ μπορεῖ νὰ προσδιορίζει μὲ βεβαιότητα τὴ θέση τῶν ἀτόμων καὶ στὰ πιὸ σύνθετα κρυσταλλικὰ σώματα, καθὼς καὶ στὰ μεγαλομοριακά, ὅπως εἶναι οἱ πρωτεΐνες καὶ ἄλλες ὀργανικὲς ἑνώσεις.

γ) Προγράμματα τῆς σειρᾶς CSD τοῦ Ἐργαστηρίου Ἐφηρμοσμένης Φυσικῆς τοῦ Πανεπιστημίου Θεσσαλονίκης.

Μὲ τὸ γενικὸ ὄνομα CSD, ἀπὸ τὰ ἀρχικὰ τῶν λέξεων Crystal Structure Determination, ὀνομάζεται ὁλόκληρη σειρὰ ἀπὸ 100 περίπου προγράμματα σὲ γλῶσσα Fortran, ποὺ χρησιμοποιοῦνται γιὰ τὴν ἐπίλυση διαφόρων εἰδικῶν προβλημάτων τῆς Κρυσταλλοδομῆς. Τὰ περισσότερα ἀπὸ τὰ προ-

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

γράμματα τῆς σειρᾶς CSD εἶναι καταχωρημένα στὴ βιβλιοθήκη τοῦ ἠλεκτρονικοῦ ὑπολογιστῆ UNIVAC 1106 τοῦ Πανεπιστημίου, ἕτοιμα γιὰ ἐκτέλεση, στὴ διάθεση κάθε ἐνδιαφερομένου. Λεπτομερεῖς ὁδηγίες γιὰ τὴ σύνθεση τῶν δεδομένων εἰσόδου (input data) κάθε προγράμματος δίνονται καὶ σὲ εἰδικὸ φυλλάδιο, ὅπου περιγράφονται οἱ δυνατότητες ὅλων τῶν προγραμμάτων CSD, τὰ δεδομένα ποὺ χρειάζεται, καὶ τὰ ἀποτελέσματα ποὺ δίνει.

Παραδείγματα χρήσεως τῶν προγραμμάτων CSD καὶ τῶν ἀρχείων ποὺ χρειάζεται κάθε πρόγραμμα, δίνονται παρακάτω, μαζὶ μὲ τὰ ἀπαραίτητα δελτία ἐλέγχου (control cards) γιὰ τὴν ἐκτέλεση τῶν προγραμμάτων στὸν ἠλεκρτονικὸ ὑπολογιστὴ UNIVAC 1106 μὲ τὸ λειτουργικὸ σύστημα (operating system) EXEC-8.

2. ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΩΝ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΩΝ CSD

2.1 ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ ΠΟΥ ΧΡΗΣΙΜΟΠΟΙΟΥΝΤΑΙ ΠΡΙΝ ΑΠΟ ΤΟ ΣΥΣΤΗΜΑ X-RAY

2.1.1 ΠΡΟΣΔΙΟΡΙΣΜΟΣ ΤΩΝ ΣΤΑΘΕΡΩΝ ΤΗΣ ΚΥΨΕΛΙΔΑΣ

Μετὰ ἀπὸ τὴν εὕρεση τοῦ προσανατολισμοῦ τοῦ κρυστάλλου ἐπάνω στὸ γωνιόμετρο τοῦ περιθλασιμέτρου PW1100 καὶ τὸν κατὰ προσέγγιση προσδιορισμὸ τῶν σταθερῶν τῆς κυψελίδας, μετροῦνται οἱ ἐντάσεις τῶν ἀνακλάσεων hkl, προκειμένου νὰ χρησιμοποιηθοῦν σὰν δεδομένα τοῦ X-RAY γιὰ τὸν ὑπολογισμὸ τῶν παραγόντων δομῆς. Ἀπὸ τὸν πίνακα τῶν ἀνακλάσεων ποὺ μετρήθηκαν διαλέγουμε τὶς ἰσχυρότερες (περίπου 100 ὡς 200, ἀνάλογα μὲ τὸ κρυσταλλικὸ σύστημα) καί, μὲ τὶς ἐντολὲς HKL καὶ CEN τοῦ περιθλασιμέτρου, μετροῦμε τὶς ἀντίστοιχες γωνίες θ. Στὸ περιθλασίμετρο PHILIPS ἡ γωνία θ ποὺ σχηματίζει ἡ προσπίπτουσα δέσμη ἀκτίνων X μὲ τὸ ἐπίπεδο hkl εἶναι ἴση μὲ τὴ γωνία ω τοῦ γωνιομέτρου.

Ἐπειδὴ μὲ τὴν ἐκτέλεση τῆς ἐντολῆς CEN τὸ περιθλασίμετρο ἀναζητεῖ τὴ θέση τοῦ μεγίστου (peak) τῆς ἀνακλάσεως κάνοντας συνδυασμένες κινήσεις τοῦ κρυστάλλου γύρω ἀπὸ τοὺς ἄξονες ω, χ καὶ φ, καὶ μετρώντας ταυτόχρονα τὴ στιγμιαία ἔνταση τῆς ἀνακλωμένης δέσμης, τὸ ἀποτέλεσμα ἀπέχει συνήθως ἀπὸ τὴν πραγματικὴ θέση τῆς ἀνακλάσεως. Πολλὲς φορὲς βρίσκεται καὶ πέρα ἀπὸ τὰ ὅρια ἀκριβείας τοῦ γωνιομέτρου. Γιὰ νὰ περιορίσουμε τὸ σφάλμα αὐτὸ παίρνουμε ὄχι μόνο μία ἀλλὰ περισσότερες μετρήσεις τῆς ἴδιας ἀνακλάσεως.

Τὰ ἀποτελέσματα τῶν μετρήσεων γράφονται ἀρχικὰ πάνω σὲ διάτρητη χαρτοταινία καὶ μεταφέρονται ὕστερα σὲ διάτρητα δελτία. Ἡ ἐπεξεργασία τῶν μετρήσεων γίνεται μὲ τὸν ἠλεκτρονικὸ ὑπολογιστή, μὲ τὴ βοήθεια εἰδικῶν κρυσταλλογραφικῶν προγραμμάτων.

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD920 (PROPARAM)

Τὸ πρόγραμμα CSD920 παίρνει σὰν δεδομένα εἰσόδου, γιὰ κάθε ἀνάκλαση, ἕνα δελτίο μὲ τὶς τιμὲς τῶν δεικτῶν hkl καὶ μέχρι δέκα δελτία μὲ τὶς τιμὲς τῆς γωνίας θ (THETA) καὶ τῆς ἐντάσεως (INT). Μετὰ τὴν ἀνάγνωση τῶν δεδομένων συγχωνεύει τὶς τιμὲς τῆς γωνίας θ κάθε ἀνακλάσεως, ὑπολογίζει τὴ μέση τιμή, καὶ παίρνει τὸ διπλάσιο (2θ), ὅπως ἀπαιτεῖ τὸ πρόγραμμα PARAM.

Ἐπειδὴ τόσο οἱ τιμὲς τῆς γωνίας θ, ὅσο καὶ οἱ ἐντάσεις τῶν ἀνακλάσεων παρουσιάζουν μικροδιαφορὲς μεταξύ τους, θεωροῦμε ὅτι ὅσο μεγαλύτερη εἶναι ἡ τιμὴ τῆς ἐντάσεως (γιὰ τὸ ἴδιο ἐπίπεδο hkl) τόσο πιὸ ἀξιόπιστη εἶναι ἡ μέτρηση. Συνεπῶς, τὸ μέγεθος αὐτὸ δίνεται στὸ πρόγραμμα σὰν παράγοντας στατιστικοῦ βάρους καὶ μπαίνει στὸν ὑπολογισμὸ τῆς μέσης τιμῆς τῆς γωνίας θ.

Οἱ γωνίες 2θ, μαζὶ μὲ τοὺς ἀντίστοιχους δεῖκτες hkl. ἐγγράφονται σὲ διάτρητα δελτία σύμφωνα μὲ τὸ format τῶν δεδομένων τοῦ προγράμματος PARAM (τοῦ συστήματος X-RAY). Τὰ δελτία αὐτὰ θὰ χρησιμοποιηθοῦν ἀργότερα γιὰ τὸν ἀκριβὴ προσδιορισμὸ τῶν παραμέτρων τῆς κυψελίδας.

ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΥ ΤΩΝ ΠΑΡΑΜΕΤΡΩΝ ΤΗΣ ΚΥΨΕΛΙΔΑΣ

Γιὰ τὸν σωστὸ προσδιορισμὸ τῶν σταθερῶν τῆς κυψελίδας χρησιμοποιεῖται συχνὰ τὸ πρόγραμμα PARAM τοῦ συστήματος X-RAY. Πολλὲς φορές, ἀντὶ τοῦ PARAM, χρησιμοποιοῦμε τὰ ἀντίστοιχα προγράμματα τῆς σειρᾶς CSD (CSD120, CSD124, CSD225, κ.ἄ.). Στὰ προγράμματα αὐτὰ ἐφαρμόζονται βασικοὶ τύποι τῆς γεωμετρικῆς θεωρίας τοῦ πλέγματος (Π. Ι. ΡΕΝΤΖΕΠΕΡΗ, 1976, Εἰσαγωγὴ εἰς τὴν Κρυσταλλοδομὴν καὶ τὴν Φυσικὴν τῶν Ἀκτίνων Χ). Στὸ κυβικὸ σύστημα ἔχουμε μόνο μία ἄγνωστη μεταβλητή, τὴν παράμετρο a, ἐνῶ στὸ ρομβικὸ ἔχουμε τρεῖς, τὶς παραμέτρους τῶν τριῶν κρυσταλλογραφικῶν ἀξόνων, στὸ μονοκλινὲς τέσσαρες, γιατὶ πρέπει νὰ προσδιορισθεῖ καὶ ἡ γωνία β, καὶ στὸ τρικλινὲς οἱ ἄγνωστες μεταβλητὲς εἶναι ἕξη, ἤτοι τὰ τρία μήκη τῶν ἀξόνων a, b, c, καὶ οἱ τρεῖς γωνίες α, β, γ.

Ἐπειδὴ συχνὰ τὰ δεδομένα τῶν μετρήσεων εἶναι πολὺ περισσότερα ἀπὸ ὅσα ἀπαιτοῦνται γιὰ τὴ λύση ἑνὸς συστήματος γραμμικῶν ἐξισώσεων μὲ μικρὸ σχετικὰ ἀριθμὸ ἀγνώστων, ἐφαρμόζουμε τὴ μέθοδο τῶν ἐλαχίστων τετραγώνων καὶ περιορίζουμε ἔτσι τὰ πιθανὰ σφάλματα στὸ ἐλάχιστο δυνατό. Ἀπὸ τὶς γνωστὲς σχέσεις τῆς Κρυσταλλοδομῆς (M. J. BUERGER, 1966, X-ray Crystallography, p.p. 103, 426-431), σχηματίζουμε τὶς «κανονικὲς ἐξισώσεις» τοῦ συστήματος.

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

2.1.2 ΑΡΧΙΚΗ ΕΠΕΞΕΡΓΑΣΙΑ ΤΩΝ ΕΝΤΑΣΕΩΝ

ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ CSD500 (CORR) ΚΑΙ CSD507 (DATALOAD)

Τὰ ἀποτελέσματα τῶν μετρήσεων τοῦ περιθλασιμέτρου καταγράφονται ἀρχικὰ σὲ διάτρητη χαρτοταινία καὶ ὕστερα, μὲ τὴ βοήθεια εἰδικῆς μονάδας τοῦ ἠλεκτρονικοῦ ὑπολογιστῆ, μεταφέρονται σὲ διάτρητα δελτία (κάρτες). Τὸ περιεχόμενο τῶν δελτίων αὐτῶν ἐγγράφεται σὲ μαγνητικὸ ἀρχεῖο (file) μὲ τὴ βοήθεια τοῦ προγράμματος CSD507 (DATALOAD). Τὸ πρόγραμμα αὐτὸ ἐλέγχει καὶ ἂν ἔχουν γραφεῖ σωστὰ τὰ δεδομένα σὲ κάθε δελτίο. Ἂν ἐπισημάνει λάθη, τὰ σημειώνει στὸν κατάλογο τῶν δεδομένων, γιὰ νὰ γίνει ἡ σχετικὴ διόρθωση. Ὅλα τὰ δελτία ποὺ βρέθηκαν σωστὰ καταχωροῦνται στὸ μαγνητικὸ ἀρχεῖο.

Ἂν ἀπὸ τὸν ἔλεγχο διαπιστωθεῖ ἁπλῆ μετατόπιση τῆς ἐγγραφῆς κατὰ μία στήλη, τὸ πρόγραμμα τὴν ἐπαναφέρει στὴν κανονική της θέση καὶ καταχωρεῖ τὴν ἀνάκλαση στὸ μαγνητικὸ ἀρχεῖο. Τέτοια μετατόπιση τῆς ἐγγραφῆς γίνεται πολὺ συχνά, ἀπὸ μικρὴ καθυστέρηση στὸ ξεκίνημα τοῦ κινητήρα τοῦ τηλετύπου, ὅταν ὁ χρόνος σαρώσεως (scan time) γιὰ τὴ μέτρηση τῆς ἀνακλάσεως εἶναι μεγάλος καὶ ὁ κινητήρας μένει γιὰ πολὺ χρόνο ἀκίνητος.

Ἂν τὰ λάθη ἀπὸ μετατόπιση τῆς ἐγγραφῆς εἶναι πολλά, μποροῦμε νὰ διορθώσουμε καὶ τὰ ἀρχικὰ δεδομένα, ἂν θέλουμε νὰ τὰ κρατήσουμε, τρυπώντας νέα δελτία μὲ κανονικὸ format, μὲ τὰ ὁποῖα θὰ ἀντικαταστήσουμε τὰ λανθασμένα.

ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ ΤΑΞΙΝΟΜΗΣΕΩΣ (CSD751, CSD752, CSD753, CSD754)

Μετὰ τὴν ἐγγραφὴ ὅλων τῶν μετρήσεων (reflection data) σὲ μαγνητικὸ ἀρχεῖο, χρησιμοποιοῦμε τὸ πρόγραμμα CSD751, ποὺ τοποθετεῖ τὶς ἀνακλάσεις κατὰ σειρὰ δεικτῶν hkl καὶ συγχωνεύει τὶς ἰσοδύναμες ἀνάλογα μὲ τὸ κρυσταλλικὸ σύστημα, καταχωρεῖ δὲ τὰ δεδομένα ἐξόδου (output data) σὲ ἄλλο μαγνητικὸ ἀρχεῖο.

Τὸ πρόγραμμα CSD751 μπορεῖ νὰ χρησιμοποιηθεῖ γιὰ ὅλα τὰ κρυσταλλικὰ συστήματα. Ὁ τρόπος γιὰ τὴν ἐπιλογὴ τῶν ἰσοδυνάμων ἀνακλάσεων ὁρίζεται, ἀνάλογα μὲ τὴ συμμετρία τοῦ κρυστάλλου, ἀπὸ τὶς σχέσεις ἰσοδυναμίας τῶν παραγόντων δομῆς στὶς διάφορες ὁμάδες ἀνακλάσεων.

Τὸ πρόγραμμα CSD751, μὲ δυνατότητα ἐπεξεργασίας μέχρι 15.000 ἀνακλάσεων, καταλαμβάνει σχεδὸν ὅλη τὴ διαθέσιμη μνήμη τοῦ ὑπολογιστῆ UNIVAC 1106 (262 kwords). Ἂν τὸ ἀρχεῖο ποὺ θὰ ἐπεξεργαστεῖ περιέχει περισσότερα δεδομένα, χρησιμοποιοῦμε, γιὰ τὸν ἴδιο σκοπό, τὸ πρόγραμμα CSD752. Αὐτὸ ἐκτελεῖ τὶς ἴδιες ἐργασίες, ὅπως καὶ τὸ CSD751, ἀλλὰ (στὴν ἴδια διαθέσιμη μνήμη) μπορεῖ νὰ δεχτεῖ μέχρι 30.000 ἀνακλάσεις. Τὸ πρό-

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

γραμμα CSD751 ἔχει τὴ δυνατότητα νὰ ἐκτυπώσει κατάλογο τῶν ἀνακλάσεων πρὶν ἀπὸ τὴν ταξινόμηση, μετὰ τὴν ταξινόμηση, καὶ μετὰ τὴν ἐγγραφὴ στὸ νέο ἀρχεῖο, ἀνάλογα μὲ τὴν ἐπιθυμία τοῦ ἐρευνητῆ. Τὸ πρόγραμμα CSD752 δὲν ἐκτυπώνει πίνακα τῶν ἀνακλάσεων μετὰ τὴν ταξινόμηση. Ἐκτυπώνει μόνο τὰ ἀρχικὰ δεδομένα καὶ τὰ τελικὰ ἀποτελέσματα, ὅπως προέκυψαν ἀπὸ τὴ συγχώνευση τῶν ἰσοδυνάμων ἀνακλάσεων.

Ἡ ταχύτητα ἐκτελέσεως τῶν δύο προγραμμάτων (CSD751, CSD752) εἶναι σχεδὸν ἡ ἴδια, ἐξαρτᾶται δὲ μόνο ἀπὸ τὸ πλῆθος τῶν δεδομένων. Ἐνδεικτικὰ ἀναφέρουμε ὅτι γιὰ τὴν ἐπεξεργασία 500, 1000, 2000 καὶ 4000 ἀνακλάσεων, μὲ τὸν ὑπολογιστὴ UNIVAC 1106 (operating system EXEC-8), χρειάζεται χρόνος περίπου 70, 170, 390, καὶ 840 δευτερολέπτων.

Ἂν παρατηρηθεῖ μεγάλη ἀνισότητα στὶς τιμὲς τῆς ἐντάσεως ἢ τοῦ background τῶν ἰσοδυνάμων ἀνακλάσεων, σημειώνεται ἕνα ἀστεράκι (*) στὸν κατάλογο τῶν τελικῶν τιμῶν καὶ δίνεται στὸ δείκτη JB τῆς ἀνακλάσεως τιμὴ μεγαλύτερη ἀπὸ τὸ μηδέν, ἐνῶ γιὰ τὶς κανονικὲς ἀνακλάσεις θὰ εἶναι JB = 0. Ὅταν ὑπάρχει μεγάλος ἀριθμὸς τέτοιων ἀνακλάσεων, χρησιμοποιοῦμε πρῶτα τὸ πρόγραμμα ἀναγωγῆς (CSD982), ποὺ διαλέγει καὶ ἀπορρίπτει τὶς μὴ ἀξιόπιστες μετρήσεις, καὶ ὕστερα μὲ τὰ προγράμματα CSD753 ἢ CSD754, ποὺ εἶναι ἀντίστοιχα μὲ τὰ προγράμματα CSD751 καὶ CSD752, κάνουμε τὴν ταξινόμηση καὶ τὴ συγχώνευση τῶν ἀνακλάσεων. Τὰ δεδομένα αὐτὰ εἶναι ἕτοιμα γιὰ τὸ σύστημα X-RAY ἢ γιὰ τὸ MULTAN.

ΑΝΑΓΩΓΗ ΤΩΝ ΕΝΤΑΣΕΩΝ - ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD982 (VENINTE2)

Τὸ πρόγραμμα ἀναγωγῆς τῶν ἐντάσεων CSD982 (VENINTE2) ἐκτελεῖ τὶς ἀκόλουθες ἐργασίες:

α. Ἐλέγχει τὸ συνεχὲς ὑπόβαθρο (background) τῆς ἀνακλάσεως καί, ἂν ἡ ἀσυμμετρία του εἶναι μεγάλη, ἀπορρίπτει τὴν ἀνάκλαση.

β. Ὑπολογίζει τὴν ὁλοκληρωμένη ἔνταση τῆς ἀνακλάσεως.

γ. Διορθώνει τὴν ἔνταση τῆς ἀνακλάσεως μὲ τὸν παράγοντα Lorentz-πολώσεως (1/Lp).

δ. Ὑπολογίζει τὸν παράγοντα δομῆς F, τὴν τυπικὴ ἀπόκλιση σ, καὶ τὸ στατιστικὸ βάρος w τῆς ἀνακλάσεως.

ε. Καταχωρεῖ τὰ ἀποτελέσματα σὲ νέο μαγνητικὸ ἀρχεῖο, γιὰ νὰ δοθοῦν σὰν δεδομένα εἰσόδου στὸ σύστημα X-RAY ἢ στὸ MULTAN καὶ ἐκτυπώνει πίνακα τῶν ἀνακλάσεων μὲ ὅλα τὰ σχετικὰ στοιχεῖα.

Τὸ πρόγραμμα CSD982 παίρνει τὰ ἀρχικὰ δεδομένα τῶν ἀνακλάσεων (reflection data) ἀπὸ τὸ πρῶτο μαγνητικὸ ἀρχεῖο, ὅπου τὰ καταχώρησε τὸ CSD507, ἢ ἀπὸ τὴν ἔξοδο τοῦ CSD751 (δεύτερο μαγνητικὸ ἀρχεῖο), δη-

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

λαδὴ μετὰ ἀπὸ τὴν ταξινόμηση καὶ τὴ συγχώνευση τῶν ἰσοδυνάμων ἀνακλάσεων. Ἂν ἔχει προηγηθεῖ ἐπεξεργασία μὲ τὸ πρόγραμμα ταξινομήσεως, ἀπορρίπτονται καὶ οἱ ἀνακλάσεις ποὺ ἔχουν δείκτη JB > 0.

Γιὰ τὴν ἐκτέλεση τοῦ προγράμματος εἶναι ἀπαραίτητα, ἐκτὸς ἀπὸ τὶς μετρήσεις τῶν ἀνακλάσεων, καὶ τὰ ἑξῆς δεδομένα εἰσόδου.

α. Οἱ σταθερὲς τῆς κυψελίδας (a, b, c, α, β, γ) καὶ οἱ συνθῆκες τοῦ πειράματος, δηλαδὴ τὸ μῆκος κύματος τῶν ἀκτίνων X, ἡ ταχύτητα σαρώσεως τοῦ περιθλασιμέτρου, ὁ τρόπος ὑπολογισμοῦ τοῦ χρόνου μετρήσεως τοῦ ὑποβάθρου, κ.ἄ.

β. Οἱ τιμὲς τῶν παραμέτρων τοῦ προγράμματος, μὲ τὶς ὁποῖες καθορίζεται ὁ τρόπος λειτουργίας του, ἀλλὰ καὶ τὸ εἶδος καὶ ἡ μορφὴ τῶν ἀποτελεσμάτων.

Μὲ τὶς παραμέτρους αὐτὲς ὁρίζουμε ἂν θέλουμε νὰ καταχωρηθοῦν στὸ ἀρχεῖο τῶν δεδομένων ἐξόδου οἱ ἐντάσεις ἢ οἱ παράγοντες δομῆς τῶν ἀνακλάσεων. Ἐπίσης ἂν θέλουμε, μποροῦν νὰ παραλείπονται οἱ πολὺ ἀδύνατες ἀνακλάσεις, ἢ νὰ θεωροῦνται πὼς ἔχουν I = 0. Δίνουμε ἀκόμα τοὺς ἀριθμοὺς τῶν μονάδων τοῦ ἠλεκτρονικοῦ ὑπολογιστῆ, ἀπὸ τὶς ὁποῖες θὰ πάρει τὰ δεδομένα εἰσόδου καὶ θὰ δώσει τὰ ἐξαγόμενα ἀποτελέσματα, καὶ καθορίζουμε ἂν θέλουμε ἢ ὄχι κατάλογο τῶν ἀνακλάσεων ἀπὸ τὸν ἐκτυπωτὴ (printer) καὶ διάτρητα δελτία μὲ κατάλληλη μορφὴ (format) γιὰ τὸ πρόγραμμα MULTAN.

Δίνουμε καὶ τὶς παραμέτρους ποὺ ἐλέγχουν τὴν ἀσυμμετρία τοῦ ὑποβάθρου τῆς ἀκτινοβολίας (background) γύρω ἀπ' τὴν ἀνάκλαση, καθὼς καὶ τὰ ὅρια τῶν γωνιῶν θ. Ἀπὸ τὶς παραμέτρους ICOR καὶ BGASYM θὰ ἐξαρτηθεῖ ἂν μία ἀνάκλαση μὲ σχετικὰ ἄνισες τιμὲς background θὰ ἀποκλεισθεῖ τελικὰ ἀπὸ τὸ ἀρχεῖο τῶν δεδομένων, ἐνῶ μὲ τὰ ὅρια THMIN καὶ THMAX διαλέγει μόνο τὶς ἀνακλάσεις ποὺ βρίσκονται μέσα σὲ μιὰ ὁρισμένη περιοχὴ γωνιῶν θ. Αὐτὸ μᾶς ἐπιτρέπει νὰ πάρουμε, ἂν θέλουμε, ἕνα μέρος μόνο ἀπὸ τὶς ἀνακλάσεις ποὺ μετρήσαμε, γιὰ νὰ κάνουμε πρόχειρους ὑπολογισμούς, ἢ νὰ ἀποκλείσουμε γιὰ κάποιο λόγο τὶς ἀνακλάσεις ποὺ ἔχουν πολὺ μεγάλη ἢ πολὺ μικρὴ γωνία θ. Οἱ ἀνακλάσεις μὲ μεγάλη γωνία θ εἶναι, κατὰ κανόνα, πολὺ ἀδύνατες καὶ ἡ πιθανότητα νὰ γίνουν σφάλματα στὴ μέτρησή τους εἶναι μεγάλη. Ἔτσι, ἐνῶ αὐξάνουν τὸ χρόνο τῶν ὑπολογισμῶν, οὐσιαστικὰ δὲν προσφέρουν τίποτα στὴν ἐπίλυση τῆς δομῆς, τοὐλάχιστο στὰ πρῶτα στάδια τῆς ἔρευνας. Οἱ ἀνακλάσεις μὲ πολὺ μικρὴ γωνία θ δὲν μποροῦν νὰ μετρηθοῦν μὲ ἀκρίβεια, ἐπειδὴ βρίσκονται πολὺ κοντὰ στὴν πρωτογενὴ δέσμη τῶν ἀκτίνων X, ὅπου τὸ background εἶναι πολὺ μεγάλο, ἀλλὰ καὶ ἐξ αἰτίας τοῦ φαινομένου τῆς «πρωτογενοῦς ἀποσβέσεως» (primary extinction). Τὸ φαινόμενο αὐτὸ παρουσιάζεται ἐντονώτερα στὶς ἀνακλάσεις μὲ μικρὴ γωνία θ (M. J. BUERGER, Crystal Structure Analysis, 1967, p. 588).

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

Ἀναλυτικώτερα τὸ πρόγραμα CSD982 ἐργάζεται μὲ τὴν ἑξῆς σειρά. Ἀφοῦ ἐξετάσει ἂν μία ἀνάκλαση βρίσκεται μέσα στὴν προκαθορισμένη περιοχὴ γωνιῶν θ, ἐλέγχει τὶς τιμὲς B_1 καὶ B_2 τοῦ συνεχοῦς ὑποβάθρου, ὅπως μετρήθηκαν ἀπὸ τὸ περιθλασίμετρο στὰ δύο ἄκρα τῆς ἀνακλάσεως. Ἡ ἀνάκλαση ἀπορρίπτεται ἂν ἡ διαφορὰ τῶν τιμῶν B_1 καὶ B_2 εἶναι μεγάλη. Σὰν κριτήριο γιὰ τὸν ἔλεγχο τῆς ἀσυμμετρίας αὐτῆς παίρνει τὴν τιμὴ τοῦ συντελεστοῦ C_1. Ἡ τιμὴ τοῦ C_1 ὁρίζεται στὴν ἀρχὴ τοῦ προγράμματος (συνήθως δίνουμε 0.2 - 0.3).

Γιὰ κάθε ἀνάκλαση, τὸ πρόγραμμα ὑπολογίζει τὶς τιμές:

$$B_{tot} = B_1 + B_2 \qquad B_m = B_{tot}/2 \qquad DB = |B_1 - B_2| \qquad DR = DB/B_m$$

Ἂν εἶναι $DR < C_1$, ἡ ἀνάκλαση θεωρεῖται πὼς μετρήθηκε σωστὰ καὶ προχωρεῖ στὴν ἐπεξεργασία της, ἐνῶ ἂν εἶναι $DR > C_2$ ($C_2 = 2C_1$), ἡ ἀνάκλαση ἀπορρίπτεται, ἐπειδὴ ἡ μεγάλη διαφορὰ τῶν B_1 καὶ B_2 ποὺ παρατηρεῖται εἶναι ἀπαράδεκτη.

Ἂν εἶναι $C_2 \geq DR \geq C_1$, τότε ἡ τύχη τῆς ἀνακλάσεως κρίνεται ἀπὸ τὴ σχετικὴ ἔνταση. Ὅταν ἡ ἀνάκλαση εἶναι ἰσχυρὴ, μικρὴ ἀσυμμετρία τοῦ background ἐλάχιστα θὰ ἐπηρεάσει τὴν τελικὴ τιμὴ τοῦ παράγοντα δομῆς. Ἂν ὅμως ἡ ἔνταση εἶναι χαμηλή, ἡ ἀνάκλαση πρέπει νὰ ἀποκλεισθεῖ, γιατὶ δὲν μποροῦμε νὰ προσδιορίσουμε μὲ ἱκανοποιητικὴ ἀκρίβεια τὴν πραγματικὴ τιμή της. Γιὰ τὸν σκοπὸ αὐτὸ ἐλέγχεται ἡ ὁλικὴ ἔνταση CSUM τῆς ἀνακλάσεως. Ἂν εἶναι CSUM<40DB, δηλαδὴ ἂν ἡ ἀνάκλαση δὲν εἶναι ἀρκετὰ ἰσχυρή, ἀπορρίπτεται. Ἂν ὅμως εἶναι CSUM>40DB, τότε ἡ ἀνάκλαση κρίνεται κατάλληλη γιὰ ἐπεξεργασία,.

Ἐπειδὴ ἡ ἀσυμμετρία τῶν δύο τιμῶν τοῦ background ἐνδέχεται νὰ ὀφείλεται στὴν ἀσύμμετρη θέση τῆς ἀνακλάσεως μέσα στὴν περιοχὴ τῆς σαρώσεως (scan width), ὑποθέτουμε πὼς τὸ ψηλότερο background ἴσως νὰ ὀφείλεται στὸ σφάλμα αὐτό. Ἐλαττώνεται λοιπὸν ἡ μεγαλύτερη τιμὴ κατὰ ἕνα ποσό, ἀνάλογο τῆς διαφορᾶς DB καὶ ἀντίστροφο τῆς γωνίας θ, ἐκτὸς ἂν πρόκειται νὰ γίνει πιὸ κάτω λεπτομερέστερη διόρθωση (ἂν ἔχει δοθεῖ ICOR>0). Τὸ πρόγραμμα ἔχει καὶ τὴ δυνατότητα νὰ διορθώνει τὸ σφάλμα αὐτό, κατὰ τὴν κρίση τοῦ ἐρευνητῆ. Στὴν περίπτωση αὐτή, προστίθεται στὴν ἀρχικὴ ἔνταση τῆς ἀνακλάσεως μικρὴ ποσότητα CORR, ποὺ ἐξαρτᾶται ἀπὸ τὶς τιμὲς B_1 καὶ B_2 τοῦ background.

Ἂν παρατηρηθεῖ μεγάλη ἀσυμμετρία background στὴν περιοχὴ κοντὰ στὴν πρωτογενὴ δέσμη, μποροῦμε νὰ κάνουμε διόρθωση ἀνάλογη μὲ τὴ γωνία θ. Ἐπειδὴ στὴν περιοχὴ αὐτὴ ἔχουμε ἀπότομη μεταβολὴ τοῦ background ἡ ἀσυμμετρία τῶν δύο τιμῶν αὐτοῦ εἶναι κάτι ποὺ τὸ περιμένουμε. Σὲ μεγαλύτερες ὅμως γωνίες εἶναι σχεδὸν σταθερό, καὶ ἡ ἐνδεχομένη ἀσυμμετρία του ὀφείλεται σὲ κάποιο σφάλμα, ποὺ πρέπει νὰ διορθωθεῖ.

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

Ὁ ὑπολογισμὸς τῆς ὁλοκληρωμένης ἐντάσεως I_{int} μιᾶς ἀνακλάσεως καὶ ἡ διόρθωσή της ἀπὸ τὴν ἀσυμμετρία τοῦ background γίνονται μὲ τοὺς ἑξῆς τύπους:

Ὁλοκληρωμένη ἔνταση $I_{int} = CSUM - B_{tot}$

$C_1 = 4DB^2 / (I_{int} + 8DB)$ $\quad C_2 = DB - \sqrt{B_m}/2$

$C = C_1 + C_2$

α) Ἁπλῆ διόρθωση: $\quad I = I_{int} + C$

β) Διόρθωση ἀνάλογα μὲ τὴ γωνία θ: $\quad I = I_{int} + C.\theta / 45$

Ὕστερα ὑπολογίζεται ὁ παράγοντας Lorentz-πολώσεως, σὰν συνάρτηση τῆς γωνίας θ τῆς ἀνακλάσεως καὶ τῆς σταθερᾶς γωνίας θ_m τοῦ μονοχρωματιστοῦ τοῦ περιθλασιμέτρου, ἀπὸ τὴ σχέση:

$$\frac{1}{Lp} = \frac{\sin 2\theta \,.\, (1 + Q)}{Q + \cos^2 2\theta} \qquad \text{ὅπου: } Q = \cos^2 2\theta_m$$

Π.χ. γιὰ $\lambda = 0.71069$ εἶναι $\theta_m = 6.08^\circ$ καὶ $Q = 0.95563$.

Ἐφαρμόζοντας τὸν διορθωτικὸ παράγοντα 1/Lp, ὑπολογίζουμε προσωρινὰ τὸν παράγοντα δομῆς F_m καὶ τὴν τυπικὴ ἀπόκλιση αὐτοῦ σ. Ἂν εἶναι $F_m \geq \sigma$, ὁ παράγοντας δομῆς ἔχει τὴν ὁριστική του τιμὴ $F = F_m$. Γιὰ τὶς σχετικὰ ἀδύνατες ἀνακλάσεις, ποὺ ἔχουν $F_m < \sigma$, παίρνουμε τὸ τετράγωνο τοῦ παράγοντα δομῆς ἀπὸ τὸ ἡμιάθροισμα $(F^2_m + \sigma) / 2$, ἐνῶ γιὰ τὶς πολὺ-πολὺ ἀδύνατες ἀνακλάσεις, ποὺ ἔχουν $I < 0$, τὸ πρόγραμμα βάζει $F = 0$. Στὸ στάδιο αὐτὸ τῆς ἐπεξεργασίας ὑπολογίζεται καὶ τὸ στατιστικὸ βάρος w τῆς ἀνακλάσεως.

Τέλος, τὸ πρόγραμμα CSD982 καταχωρεῖ τὶς τελικὲς τιμὲς τοῦ παράγοντα δομῆς (ἢ τῆς ἐντάσεως), τῆς τυπικῆς ἀποκλίσεως, καὶ τοῦ στατιστικοῦ βάρους, μαζὶ μὲ τοὺς ἀντίστοιχους δεῖκτες hkl, σὲ νέο μαγνητικὸ ἀρχεῖο (τρίτο file), μὲ μορφὴ κατάλληλη γιὰ τὸ X-RAY, ἐκτυπώνει πλήρη πίνακα τῶν ἀνακλάσεων μὲ ὅλα τὰ στοιχεῖα αὐτῶν, καθὼς καὶ ἕνα πίνακα μὲ συγκεντρωτικὰ στοιχεῖα γιὰ τὸ σύνολο τῶν μετρήσεων, π.χ. μέγιστα καὶ ἐλάχιστα ἐντάσεων, γωνιῶν θ, κλπ. Τὸ πρόγραμμα CSD982 μπορεῖ νὰ ἑτοιμάσει δεδομένα καὶ γιὰ τὸ σύστημα MULTAN, μὲ κατάλληλη μορφή, σὲ διάτρητα δελτία ἢ σὲ μαγνητικὸ ἀρχεῖο.

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

2.2 ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ ΠΟΥ ΧΡΗΣΙΜΟΠΟΙΟΥΝΤΑΙ ΜΕΤΑ ΑΠΟ ΤΟ ΣΥΣΤΗΜΑ X-RAY

2.2.1 ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΗΣ ΔΟΜΗΣ

Μετὰ ἀπὸ τὸν ἀκριβὴ προσδιορισμὸ τῶν θέσεων τῶν ἀτόμων τῆς ἀσυμμέτρου μονάδας μὲ τὸ σύστημα X-RAY, χρησιμοποιοῦμε πάλι προγράμματα CSD γιὰ τὴν λεπτομερὴ περιγραφὴ τῆς δομῆς. Μὲ τὰ προγράμματα αὐτὰ βρίσκουμε τὶς θέσεις καὶ τῶν ἄλλων ἀτόμων τῆς κυψελίδας (τὸ X-RAY μᾶς δίνει τὴ θέση μόνο γιὰ ἕνα ἀπὸ κάθε ὁμάδα συμμετρικῶν ἀτόμων), ὑπολογίζουμε τὶς θέσεις τῶν κέντρων τῶν ἀτόμων σὲ σχέδιο κλινογραφικῆς ἢ ὀρθῆς προβολῆς τῆς δομῆς, καὶ ὑπολογίζουμε τὶς ἐνδατομικὲς ἀποστάσεις καὶ τὶς γωνίες ποὺ σχηματίζουν οἱ δεσμοὶ μεταξὺ τῶν ἀτόμων ποὺ εἶναι γειτονικὰ καὶ ἀνήκουν στὸ ἴδιο πολύεδρο συντάξεως.

ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD600 (SYMOPER)

Τὸ πρόγραμμα CSD600 παίρνει σὰν δεδομένα εἰσόδου τὶς θέσεις τῶν ἀτόμων τῆς ἀσυμμέτρου μονάδας καὶ ὑπολογίζει τὶς θέσεις τῶν ὑπολοίπων ἀτόμων τῆς κυψελίδας, χρησιμοποιώντας τὰ στοιχεῖα τῆς ὁμάδας συμμετρίας χώρου τοῦ κρυστάλλου. Εἶναι δυνατὸ νὰ πάρουμε καὶ τὶς θέσεις ἀτόμων ποὺ βρίσκονται ἔξω ἀπὸ τὴν κυψελίδα, φθάνει νὰ ὁρίσουμε κατάλληλα τὴν περιοχὴ στὰ γενικὰ δεδομένα τοῦ προγράμματος. Τὰ ἀποτελέσματα τοῦ CSD600 τὰ παίρνουμε ἢ τυπωμένα σὲ χαρτὶ ἀπὸ τὴν ἐκτυπωτικὴ μηχανὴ (printer), ἢ καὶ σὲ διάτρητα δελτία γιὰ νὰ χρησιμοποιηθοῦν σὰν δεδομένα εἰσόδου ἀπὸ ἄλλα προγράμματα (CSD611, CSD623).

ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD611 (PROJECT)

Τὸ πρόγραμμα CSD611 δίνει κλινογραφικὴ ἢ ὀρθὴ προβολὴ τῆς δομῆς. Παίρνει σὰν δεδομένα εἰσόδου τὶς συντεταγμένες x, y, z τῶν ἀτόμων, ὅπως τὶς ὑπολόγισε τὸ προηγούμενο πρόγραμμα CSD600. Δίνει τὶς θέσεις τῶν ἀτόμων σὲ σχέδιο κλινογραφικῆς ἢ ὀρθῆς προβολῆς, σὲ ὀρθογώνιες συντεταγμένες, ἀκόμα καὶ ἂν τὸ σύστημα τοῦ κρυστάλλου εἶναι πλαγιογώνιο.

ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD623 (BONDANGL)

Τὸ πρόγραμμα CSD623 ὑπολογίζει τὶς ἐνδατομικὲς ἀποστάσεις καὶ τὶς γωνίες ποὺ σχηματίζουν οἱ δεσμοὶ τῶν γειτονικῶν ἀτόμων. Παίρνει σὰν δεδομένα εἰσόδου τὶς συντεταγμένες τῶν ἀτόμων, ὅπως δόθηκαν ἀπὸ τὸ πρόγραμμα CSD600. Γιὰ τὴν ἐκτέλεση τοῦ προγράμματος χρειάζονται ἀκόμα καὶ οἱ θέσεις τῶν ἀτόμων ποὺ θεωροῦνται σὰν «κεντρικὰ ἄτομα» στὰ πολύεδρα συντάξεως.

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

Τὸ πρόγραμμα διαλέγει ἀπὸ τὸ σύνολο τῶν ἀτόμων μόνο ὅσα βρίσκονται κοντὰ στὸ κεντρικὸ, καὶ σὲ ἀπόσταση μικρότερη ἀπὸ τὸ ὅριο ποὺ τοῦ δίνουμε σὰν μέγιστο μῆκος δεσμοῦ. Ὕστερα ὑπολογίζει τὶς ἀποστάσεις ἀνάμεσα σ' ὅλα αὐτὰ τὰ ἄτομα, καθὼς καὶ τὶς γωνίες ποὺ σχηματίζονται ἀπὸ τοὺς δεσμούς. Γιὰ τὸν σκοπὸ αὐτὸ παίρνει ὅλους τοὺς δυνατοὺς συνδυασμοὺς τῶν ἀτόμων ἀνὰ τρία καὶ ὑπολογίζει τὶς ἀποστάσεις καὶ τὶς γωνίες.

2.2.2 ΣΥΝΘΕΣΗ ΠΙΝΑΚΩΝ FO/FC *ΓΙΑ ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΗ*

Γιὰ τὴν ἐκτύπωση συγκριτικοῦ πίνακα τῶν τιμῶν τῶν παραγόντων δομῆς ἐκ παρατηρήσεως καὶ ἐξ ὑπολογισμοῦ, κατάλληλου γιὰ δημοσίευση σὲ ἐπιστημονικὸ περιοδικό, χρησιμοποιοῦνται τὰ προγράμματα CSD986 καὶ CSD987. Μὲ τὸ πρῶτο πρόγραμμα τοποθετοῦνται οἱ ἀνακλάσεις σὲ κανονικὴ σειρὰ hkl, ἐνῶ μὲ τὸ CSD987 σχηματίζονται καὶ ἐκτυπώνονται οἱ τελικοὶ πίνακες.

Δεδομένα εἰσόδου εἶναι οἱ τιμὲς τῶν παραγόντων δομῆς ἀπὸ τὰ ἀποτελέσματα τοῦ προγράμματος CRYLSQ τοῦ συστήματος X-RAY. Σὲ πρώτη φάση χρησιμοποιεῖται τὸ πρόγραμμα LISTFC (τοῦ X-RAY), ποὺ ἔχει τὴ δυνατότητα, μὲ κατάλληλο χειρισμό, νὰ μεταφέρει τὶς τιμὲς τῶν παραγόντων δομῆς ἀπὸ τὸ ἀρχεῖο δεδομένων (binary data file) τοῦ συστήματος, σὲ διάτρητα δελτία (FCARDS), ἢ καὶ σὲ ἄλλο μαγνητικὸ ἀρχεῖο, ἀνεξάρτητο ἀπὸ τὸ σύστημα X-RAY.

ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ CSD986 (SORTF) ΚΑΙ CSD987 (EDITOR)

Τὰ ἀποτελέσματα τοῦ LISTFC δίνονται σὰν δεδομένα εἰσόδου στὸ πρόγραμμα CSD986, ποὺ ταξινομεῖ τὶς ἀνακλάσεις καὶ τὶς τοποθετεῖ κατὰ σειρὰ δεικτῶν hkl. Τὰ ἀποτελέσματα τοῦ CSD986 θὰ δοθοῦν ἀργότερα στὸ πρόγραμμα CSD987. Τὸ CSD986 δὲν εἶναι ἀπαραίτητο νὰ χρησιμοποιηθεῖ, ἂν ἔχει γίνει ταξινόμηση τῶν δεδομένων, πρὶν ἀπὸ τὴν ἐπεξεργασία τους, μὲ ἕνα ἀπὸ τὰ προγράμματα CSD751, CSD752, CSD753 ἢ CSD754.

Τὸ πρόγραμμα CSD987 παίρνει δεδομένα εἰσόδου (input data) ἀπὸ τὸ CSD986 ἢ ἀπὸ τὸ LISTFC. Ὑπολογίζει καὶ ἐκτυπώνει πίνακες τῶν τιμῶν F_o/F_c τῶν παραγόντων δομῆς, σὲ μορφὴ σελίδας ἐπιστημονικοῦ περιοδικοῦ, καὶ σὲ σχῆμα καὶ μέγεθος ποὺ καθορίζονται ἀπὸ τὸν ἐρευνητή. Τὸ ὕψος καὶ τὸ πλάτος τῆς σελίδας, δηλαδὴ ὁ ἀριθμὸς τῶν γραμμῶν καὶ τῶν στηλῶν, δίνονται στὸ πρόγραμμα μαζὶ μὲ τὰ ἄλλα στοιχεῖα ποὺ θὰ καθορίσουν τὴ μορφὴ τῶν πινάκων.

Τὸ πρόγραμμα ἔχει τὴ δυνατότητα νὰ ἐκτυπώνει τὶς τιμὲς F_o καὶ F_c σὰν ἀκεραίους ἀριθμοὺς ἢ σὲ δεκαδικὴ μορφὴ μὲ 1 ἢ 2 δεκαδικὰ ψηφία. Τὸ σημεῖο τῆς ὑποδιαστολῆς τῶν δεκαδικῶν ἀριθμῶν μπορεῖ νὰ εἶναι τελεία(.) ἢ κόμμα(,) ἀνάλογα μὲ τὴν ἐκλογὴ τοῦ συγγραφέα.

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

3. ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ FORTRAN (LISTINGS - TEST DATA)

****

3.1.1.1 ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD920

```
C      PROGRAM CSD920                                          P R O P A R A M
C      *************                                           ***************
C
C      BY CLEANTHIS VENETOPOULOS                            THESSALONIKI, 1975
C ------------------------------------------------------------------------------
C
C      READS HKL AND THETA (THE OUTPUT OF PW1100 HKL/CEN OPERATION)
C      AND GIVES THETA CARDS FOR PARAM OR CS0124
C
C------------------------------------------------------------------------------
C
C          INPUT DATA .....
C          ---------------
C
C      1.  ONE TITLE CARD
C          COL. 1-6  THE NAME OF THE CRYSTAL (THIS NAME WILL BE PUNCHED
C          ON THETA CARDS FOR PARAM OF X-RAY SYSTEM)
C          COL. 7-8  BLANK
C          COL. 9-80  ANY IDENTIFICATION OF THIS WORK
C
C      2.  THE REFLECTION DATA CARDS
C          FOR EACH REFLECTION, THE PROGRAM WILL READ ....
C          ONE CARD WITH H,K,L (FORMAT 4X,3I3)
C          AND THE CARDS WITH THE ANGLE THETA AND THE INTENSITY
C          (NO MORE THAN 10 CARDS FOR EACH REFLECTION),
C          AS TAKEN FROM DIFFRACTOMETER PAPER TAPE
C          (FORMAT 10X,F6.3,18X,I6)
C ------------------------------------------------------------------------------
C
      DIMENSION TITLE(12),THS(5)
        .
        .  (THE FORTRAN STATEMENTS)
        .
      END
```

TEST DECK (ΔΕΔΟΜΕΝΑ ΕΛΕΓΧΟΥ ΚΑΙ DATA) ΓΙΑ ΤΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD920

```
ΩRUN   920,VEN,CSD,10,100
ΩASG,A   CSD.
ΩXQT     CSD.CSD920
KLINO2     ****     CLEANTHIS VENETOPOULOS     ****     SEPTEMBER 1975
      1  1 -3
       *  11.600   30.09  326.79   13980
       *  11.605   30.12  326.78   13951
       *  11.610   30.12  326.78   13908
       *  11.605   30.10  326.78   14031
       *  11.605   30.11  326.78   14210
      1  1 -2
       *   8.085   31.38  315.00   23964
       *   8.090   31.37  314.99   23412
```

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

```
        =    8.085    31.35   314.99    23382
        =    8.090    31.37   314.99    23939
        =    8.090    31.35   314.99    23923
      1  1 -1
        =    5.185    30.02   287.73    35764
             .                           .
             .                           .
     -3  5  3
        =   16.415     5.81   120.32     6485
        =   16.410     5.78   120.33     6602
        =   16.415     5.78   120.33     6518
        =   16.415     5.77   120.33     6432
        =   16.415     5.80   120.33     6512
RFIN
```

3.1.1.2 ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD124

```
C         PROGRAM  CSD124
C         ***************
C
C         WRITTEN BY CLEANTHIS VENETOPOULOS, JUNE 1969
C         UPDATED DECEMBER 1975
C ---------------------------------------------------------------------
C
C         UNIT CELL PARAMETERS CALCULATION (FOR MONOCLINIC CRYSTAL)
C         BASED ON THE LEAST SQUARES METHOD.
C
C         READS INDICES AND THE ANGLE TWO THETA FOR EACH REFLECTION AND
C         CALCULATES THE CELL PARAMETERS A, B, C AND BETA
C
C ---------------------------------------------------------------------
C
C         THE FORMULAE USED IN THIS PROGRAM ARE FROM THE BOOK ....
C         M.J.BUERGER, X-RAY CRYSTALLOGRAPHY, P.P. 103 AND 426-431.
C
C ---------------------------------------------------------------------
C
C         INPUT DATA AS FOLLOWS...
C         ------------------------
C
C         1.  ONE TITLE CARD
C             FORMAT (20A4)
C
C         2.  ONE CARD WITH THE NAME (NAME) OF THE CRYSTAL MEASURED,
C             THE WAVELENGTH (WL) OF THE X-RAYS AND THE THETA-INDEX
C             ITH = (BLANK OR 2) / (1)  FOR  (TWO THETA) / (THEYA)
C             FORMAT (A6,4X,F10.5,I2)
C
C         3.  THE CARDS WITH THE REFLECTION DATA (HKL, THETA)
C             FORMAT (15X,3I4,F10.5)
C ---------------------------------------------------------------------
C
      DIMENSION TITLE(20)
        .
        .
        .  (THE FORTRAN STATEMENTS)
        .
        .
      END
```

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

TEST DECK (ΔΕΛΤΙΑ ΕΛΕΓΧΟΥ ΚΑΙ DATA) ΓΙΑ ΤΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD124

```
ΩRUN    124,VEN,CSD,10,100
ΩASG,A    CSD.
ΩXQT      CSD.CSD124
KLINO2     ****    ΚΛΕΑΝΘΗΣ ΒΕΝΕΤΟΠΟΥΛΟΣ     ****     SEPTEMBER 1975
KLINO2        0.71069 2
THETA  KLINO2      1   1  -3  23.20999
THETA  KLINO2      1   1  -2  16.17601
THETA  KLINO2      1   1  -1  10.38401
THETA  KLINO2      1   3  -1  12.71601
THETA  KLINO2      1   3   1  14.89399
THETA  KLINO2      1   3   3  27.84806
THETA  KLINO2      1   5  -3  26.49602
  .        .       .   .   .      .
  .        .       .   .   .      .
  .        .       .   .   .      .
THETA  KLINO2     -1  13   1  35.41204
THETA  KLINO2     -1   7  -3  32.39793
THETA  KLINO2     -2   2   4  32.45000
THETA  KLINO2     -2   6   2  25.37410
THETA  KLINO2     -3   5   3  32.82797
ΩFIN
```

3.1.2.1 ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD507

```
C      PROGRAM CSD507                                        D A T A L O A D
C      **************                                        ***************
C
C      BY CLEANTHIS VENETOPOULOS                THESSALONIKI, OCTOBER 1975
C-----------------------------------------------------------------------------
C
C      F R O M   C A R D S   T O   M A G N E T I C   F I L E
C      (COPY PROGRAM SPECIAL FOR CARDS OF PW1100 PAPER TAPE)
C
C      * LOADS CARDS OF PW1100 PAPER TAPE ON MAGNETIC FILE *
C-----------------------------------------------------------------------------
C
       DIMENSION ICARD(20)
         *
         *  (THE FORTRAN STATEMENTS)
         *
       END
```

TEST DECK (ΔΕΛΤΙΑ ΕΛΕΓΧΟΥ ΚΑΙ DATA) ΓΙΑ ΤΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD507

```
ΩRUN    507,VEN,CSD,10,100
ΩASG,A      FILE1
ΩUSE     12,FILE1
ΩASG,A    CSD.
ΩXQT      CSD.CSD507
    2 -10  -9   0 0      279      784      266
    1  -9  -9   0 0      307      701      310
    3  -9  -9   0 0      293     1697      302
    4  -8  -9   0 0      296      651      300
    2  -8  -9   0 0      273      573      275
```

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

```
    0  -8  -9   0 0     284     860     304
    1  -7  -9   0 0     317     981     270
    3  -7  -9   0 0     318    1372     296
    4  -6  -9   0 0     291     684     312
    2  -6  -9   0 0     303     564     292
    0  -6  -9   0 0     272    1008     287
   -1  -5  -9   0 0     289    1622     340
    .   .   .            .       .       .
    .   .   .            .       .       .
    .   .   .            .       .       .
   -4   8   9   0 0     397     880     399
   -3   9   9   0 0     412    2422     452
   -1   9   9   0 0     364     899     405
   -2  10   9   0 0     400     970     407
$FIN
```

3.1.2.2 ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD751

```
C      PROGRAM CSD751                                                    SORT1
C      **************                                                    *****
C
C      BY CLEANTHIS VENETOPOULOS
C      THESSALONIKI, NOVEMBER 1975
C ------------------------------------------------------------------------
C
C                  *   P R O G R A M   S O R T I N G   *
C
C      FOR THE ORIGINAL REFLECTION DATA, AS TAKEN FROM PW1100,
C      AFTER LOADING ON MAGNETIC FILE WITH THE PROGRAM CSD507
C
C      (NO MORE THAN 4200 REFLECTIONS)
C ------------------------------------------------------------------------
C
C      INPUT DATA AS FOLLOWS ....
C      -------------------------
C
C      1.  ONE CARD WITH ....
C          NREFL, NFILEA, NFILEB, INDEX, IOUT, ISYM0, ISYM1, ISYM2, ISYM3
C          ISYM4, NAME
C
C          NREFL = NUMBER OF REFLECTIONS, NO MORE THAN 4200
C                  (DEFAULT VALUE = 4200)
C
C          NFILEA = NUMBER OF FILE WITH THE ORIGINAL REFLECTION DATA
C          IF DATA IS TO BE READ FROM CARDS, GIVE NFILEA = 5 OR BLANK
C
C          NFILEB = NUMBER OF FILE FOR OUTPUT
C
C          INDEX = CODE NUMBER OF INDEX (M,K,L) THAT CHANGES MORE QUICKLY
C          WITH INDEX = 1   L CHANGES FIRST, K SECOND, H LAST
C          WITH INDEX = 2   L CHANGES FIRST, H SECOND, K LAST
C          WITH INDEX = 3   H CHANGES FIRST, K SECOND, L LAST
C          (FOR TETRAGONAL AND HEXAGONAL CRYSTALS,
C          IT IS RECOMENDED TO SET  INDEX = 3)
C
C          IOUT = OUTPUT LISTING CONTROL INDEX, AS BELOW
C          IOUT = 0  NO LISTING
C          IOUT = 1  LIST ALL REFLECTIONS BEFORE SORTING
C          IOUT = 2  LIST ALL REFLECTIONS AFTER SORTING
```

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

```
C          IOUT = 3  LIST ALL REFLECTIONS BEFORE AND AFTER SORTING
C          IOUT = 4  LIST ONLY THE REFLECTIONS OF THE MAGNETIC FILE
C          IOUT = 5  LIST THE REFLECTIONS BEFORE SORTING AND THOSE
C                    OF THE MAGNETIC FILE
C          IOUT = 6  LIST THE REFLECTIONS AFTER SORTING AND THOSE
C                    OF THE MAGNETIC FILE
C          IOUT = 7  LIST ALL REFLECTIONS BEFORE AND AFTER SORTING
C                    AND THOSE OF THE MAGNETIC FILE
C
C          ISYM = SYMMETRY INDEXES, SHOWING THE EQUIVALENT REFLECTIONS,
C                 ACCORDING TO SPACE GROUP OF THE CRYSTAL
C          IF (F(H,K,L).EQ.F(-H,-K,-L))  SET ISYM0 = 1   IF (NE)  SET 0
C          NOTE *** ISYM0=0 MEANS =NOT ANY CHANGE IN THE SUPPLIED DATA=
C                   IF (ISYM0.EQ.0) ALL THE OTHER INDEXES
C                   (ISYM1, ISYM2, ISYM3 AND ISYM4) ARE IGNORED
C          IF (F(H,K,L).EQ.F(-H,K,L))     SET ISYM1 = 1   IF (NE)  SET 0
C          IF (F(H,K,L).EQ.F(H,-K,L))     SET ISYM2 = 1   IF (NE)  SET 0
C          IF (F(H,K,L).EQ.F(H,K,-L))     SET ISYM3 = 1   IF (NE)  SET 0
C          IF (F(H,K,L).EQ.F(K,H,L))      SET ISYM4 = 1   IF (NE)  SET 0
C          IF (F(H,K,L).EQ.F(H,L,K).EQ.F(K,H,L).EQ.F(K,L,H).EQ.F(L,H,K)
C              .EQ.F(L,K,H))              SET ISYM4 = 2   IF (NE)  SET 0
C          (FOR CORRECT VALUES OF THIS INDEX, SEE INTERNATIONAL TABLES
C          FOR X-RAY CRYSTALLOGRAPHY (1965) SECTION 4.7., VOL.I, P.373)
C
C          NAME = ANY IDENTIFICATIONS OF THE PROBLEM
C
C     FORMAT (5I4,5I2,10X,10A4)
C
C     2.   THE REFLECTION DATA, FROM CARDS OR MAGNETIC FILE
C          FOR EACH REFLECTION GIVE   H, K, L, BG1, INT, BG2
C          (NO MORE THAN 4200 REFLECTIONS)
C
C     FORMAT (3I4,6X,3I8)
C
C ----------------------------------------------------------------------
C
      DIMENSION NAME(10)
      DIMENSION I1(4050),I2(4050),I3(4050),I4(4050),I5(4050),I6(4050)
        .
        .  (THE FORTRAN STATEMENTS)
        .
      END
```

TEST DECK (ΔΕΛΤΙΑ ΕΛΕΓΧΟΥ ΚΑΙ DATA) ΓΙΑ ΤΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD751

```
ØRUN   751,VEN,CSD,10,100
ØASG,A     FILE1
ØUSE    11,FILE1
ØASG,A     FILE2
ØUSE    12,FILE2
ØASG,A   CSD.
ØXQT     CSD.CSD751
      11  12   1   4 1 0 1 0 0      .     ORIGINAL REFLECTION DATA OF KLINO2
ØFIN
```

ΑΝΑΛΟΓΑ DATA ΑΠΑΙΤΟΥΝΤΑΙ ΚΑΙ ΓΙΑ ΤΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ CSD752, CSD753, CSD754

ΤΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ CSD753 ΚΑΙ CSD754 ΜΠΟΡΟΥΝ ΝΑ ΕΤΟΙΜΑΣΟΥΝ ΚΑΙ DATA ΓΙΑ ΤΟ ΣΥΣΤΗΜΑ MULTAN, ΦΤΑΝΕΙ ΝΑ ΟΡΙΣΟΥΜΕ, ΣΤΗ ΦΕΣΗ 37-40 ΤΟΥ ΠΡΩΤΟΥ ΔΕΛΤΙΟΥ ΤΩΝ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ, ΤΟΝ ΑΡΙΘΜΟ ΤΟΥ FILE ΕΞΟΔΟΥ.

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

3.1.2.3 ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD982

```
C     PROGRAM CSD982                                                    VENINTE2
C     **************                                                    ********
C
C     BY CLEANTHIS VENETOPOULOS, UNIVERSITY OF THESSALONIKI
C     WRITTEN FEBRUARY 1973
C     UPDATED DECEMBER 1976
C ------------------------------------------------------------------------------
C
C                        D A T A   R E D U C T I O N
C
C     A DATA PROCESSING PROGRAM FOR THE OUTPUT OF PW1100 DIFFRACTOMETER
C
C ------------------------------------------------------------------------------
C
C     PREPARES DATA FOR THE SYSTEMS X-RAY AND MULTAN
C
C ------------------------------------------------------------------------------
C
C     INPUT DATA AS FOLLOWS ....
C     -------------------------
C
C     1. ONE TITLE-CARD
C
C     FORMAT (20A4)
C
C     2.  THE CRYSTAL PARAMETERS  NAME, A, B, C, ALPHA, BETA, GAMMA
C
C     FORMAT (A6,4X,6F10.5)
C
C     3.  E, WL, Q, SPE, SWDA, SWOB, SMO, MXN, BMO, TIMERF, TIMEBG
C
C         E = THE AVERAGE RELATIVE ERROR IN THE INTENSITY OF STRONG
C             REFLECTIONS (IF IN DOUBT, SET E=0.02)
C         WL = WAVELENGTH OF X-RAYS
C         Q = COS(TH) OF MONOCHROMATOR
C         SPE, SWDA, SWOB, SMO, MXN, BMO = EXPERIMENT PARAMETERS,
C         AS GIVEN IN  =PAR= TABLE OF THE DIFFRACTOMETER TELETYPE
C         TIMERF = THE 'PRESET SCANTIME' FOR THE MEASUREMENT OF ONE
C                  REFLECTION (IF SMO.NE.0 THIS VALUE IS IGNORED)
C         TIMEBG = THE BACKGROUND MEASURING (FIXED) TIME
C                  (IF BMO.NE.0 THIS VALUE IS IGNORED)
C
C     FORMAT (3F8.5,3F8.2,3I4,2F6.2)
C
C     4.  INTORF,NORYWK,IN,IOUT,JPR,MULTAN,ICOR,THMIN,THMAX,BGASYM
C
C         INTORF = 1 OR BLANK  GIVES  FOBS  ON THE OUTPUT FILE
C                  2           GIVES  INT   ON THE OUTPUT FILE
C         NORYWK = 0 (OR BLANK)  MEANS OMIT WEAKS
C                  1             MEANS SET INT = 0
C         IN = UNIT NUMBER OF THE PERIPHERAL, WHICH WILL READ
C                        THE INPUT REFLECTION DATA
C         IN = 5 OR 0 OR BLANK FOR CARD READER
C              11  READ DATA FROM MAGNETIC FILE
C         IOUT = UNIT NUMBER OF THE PERIPHERAL FOR VENINTE2 OUTPUT
C                OF REFLECTION DATA FOR DATRDN (X-RAY)
C         IOUT = 0 OR BLANK FOR NO OUTPUT FOR X-RAY
C                1         WRITE OUTPUT DATA ON PUNCHED CARDS
C                12        WRITE OUTPUT DATA ON MAGNETIC FILE
C         JPR = PRINT CONTROL PARAMETER
C         JPR = 0 OR BLANK  FOR NORMAL PRINTING OF ALL REFLECTIONS
C         JPR = 1   DO NOT PRINT LISTING OF THE REFLECTIONS
```

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

```
C          MULTAN = 0    NO OUTPUT FOR MULTAN
C          MULTAN = 1    PUNCH CARDS (WITH  H, K, L, FOBS, ID) FOR MULTAN
C                   14   WRITE DATA FOR MULTAN ON FILE 14
C          ICOR = (0 OR BLANK)/(1)/(2)  FOR  (DO NOT APPLY BG-ASYMMETRY
C          CORRECTION)/(APPLY BG-ASYMMETRY CORRECTION)/(APPLY CORRECTION
C          AS A FUNCTION OF THE ANGLE THETA)
C          THMIN AND THMAX  ARE THE LIMITS OF THETA-RANGE.
C          ALL REFLECTIONS WITH THETA L.T. THMIN  OR  G.T. THMAX
C          WILL BE REJECTED
C          BGASYM = LIMIT OF BG ASYMMETRY
C          IF (DBG/BGMEAN .LT. BGASYM)  THE REFLECTION WILL BE CONSIDERED
C          AS WELL MEASURED
C          IF BGASYM = BLANK, THE PROGRAM SETS BGASYM=0.3
C
C     FORMAT (7I4,12X,3F10.5)
C
C     5.   THE REFLECTION DATA (FROM CARDS OR MAGNETIC FILE)
C          AS TAKEN FROM PW1100 DIFFRACTOMETER (BEFORE OR AFTER SORTING)
C          EACH RECORD CONTAINS H, K, L, BG1, INTENSITY, BG2, JB
C          JB IS AN INDEX FOR QUALITY OF THE MEASUREMENT
C          IF (JB.GT.0)   THE REFLECTION WILL BE REJECTED
C          BLANK RECORDS ARE IGNORED
C
C     FORMAT (3I4,6X,4I8)
C
C-----------------------------------------------------------------------
C
      DIMENSION TITLE(20)
        .
        .
        .   (THE FORTRAN STATEMENTS)
        .
        .
      END
```

TEST DECK (ΔΕΛΤΙΑ ΕΛΕΓΧΟΥ ΚΑΙ DATA) ΓΙΑ ΤΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD982

```
$RUN   982,VEN,CSD,10,100
$ASG,A     FILE2
$USE    11,FILE2
$ASG,A     FILE3
$USE    12,FILE3
$ASG,A   CSD.
$XQT     CSD.CSD982
KLINO2    ****    CLEANTHIS VENETOPOULOS    ****    SEPTEMBER 1975
KLINO2    5.08956   15.82915  5.38559   90.000    103.26022 90.000
    0.01 0.71069 0.95563    0.08     3.6     0.0    1   1   1
   2   1  11  12   0   0                    8.00000  45.00000   0.22
$FIN
```

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

3.2.1.1 ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD600

```
C     PROGRAM CSD600                                                    SYMOPER
C     **************                                                    *******
C
C     BY CLEANTHIS VENETOPOULOS, JANUARY 30, 1970
C     UPDATED FEBRUARY 1977
C-----------------------------------------------------------------------
C
C          S Y M M E T R Y   O P E R A T I O N
C
C-----------------------------------------------------------------------
C
C     THIS PROGRAM (CSD600) READS THE ATOM PARAMETERS
C     OF THE ASYMMETRIC UNIT AND
C     CALCULATES THE POSITION OF ALL ATOMS BETWEEN GIVEN LIMITS
C
C     GIVES LISTING OF THE ATOMS AND PUNCHED CARDS FOR CSD611, CSD623
C
C-----------------------------------------------------------------------
C
C     INPUT DATA AS FOLLOWS ....
C     -------------------------
C
C     1.  ONE TITLE-CARD
C
C     FORMAT (20A4)
C
C     2.  ONE CARD WITH THE NAME OF THE CRYSTAL AND ITS PARAMETERS
C         (CRNAME, A, B, C, ALFA, BETA, GAMA)
C
C     FORMAT (A6,4X,6F10.5)
C
C     3.  ONE CARD WITH THE DISTANCES FROM THE UNIT CELL
C         (DXMIN, DXMAX, DYMIN, DYMAX, DZMIN, DZMAX)  IN FRACTIONS OF
C         CELL PARAMETERS, OF THE WANTED ATOMS,
C         AND THE INDEXES ICENTR AND JOUT
C
C         DXMIN, DXMAX, .... DZMAX  AT COL 1-8, 9-16, ..... 41-48
C         IF ALL THESE PARAMETERS ARE ZERO, THE STANDARD LIMITS FOR
C         X,Y,Z ARE SET BY THE PROGRAM, I.E.  0.00000 TO 0.99999
C         (ONE UNIT CELL)
C         EXAMPLE...    IF  DXMIN = 0.2  AND  DXMAX = 0.5,
C                       THE PROGRAM WILL GIVE ALL THE ATOMS
C                       WITH  X = FROM -0.20000 TO 1.49999
C                       IF DYMIN IS ZERO OR BLANK, THE LOWER LIMIT FOR Y
C                       WILL BE 0.00000 AND IF DYMAX IS ZERO OR BLANK,
C                       THE UPPER LIMIT FOR Y WILL BE 0.99999
C                       SO, IF ONE HAS ATOMS AT 0.0 AND HE WANTS TO HAVE
C                       ALL THE EQUIVALENT ONES PRINTED OR PUNCHED,
C                       HE MUST GIVE DXMAX, DYMAX, DZMAX AT LEAST 0.00001
C
C         ICENTR (AT COL.70)  IS  0  FOR ACENTRIC CELL
C                                 1  FOR CENTRIC CELL. IN THIS CASE THE
C                                    PROGRAM TAKES THE ANTI-POSITIONS
C                                    (TWO ATOMS FOR EACH SYMTRY CARD)
C
C         JOUT    (AT COL.72)  IS  1  FOR PRINTED OUTPUT ONLY
C                                  2  FOR PRINTED AND PUNCHED OUTPUT
C
C     FORMAT (6F8.3,20X,2I2)
C
C     4.  THE SYMMETRY CARDS (AS IN THE FOLLOWING EXAMPLES)
C
```

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

```
C          FIRST CARD     (X, Y, Z)
C          COL. 1-8       SYMTRY 1
C          COL. 9-12      BLANK
C          COL. 13-19     0.00+1X
C          COL. 20-22     BLANK
C          COL. 23-29     0.00+1Y
C          COL. 30-32     BLANK
C          COL. 33-39     0.00+1Z
C          COL. 40-80     BLANK
C
C          SECOND CARD    (1/2+X, 1/2-Y, Z)
C          COL. 1-8       SYMTRY 2
C          COL. 9-12      BLANK
C          COL. 13-19     0.50+1X
C          COL. 20-22     BLANK
C          COL. 23-29     0.50-1Y
C          COL. 30-32     BLANK
C          COL. 33-39     0.00+1Z
C          COL. 40-80     BLANK
C
C      FORMAT (6X,I2,3(4X,F4.2,I2))
C
C      5.  ONE BLANK CARD
C
C      6.  THE ATOM CARDS, AS PREPARED FOR LOADAT PROGRAM OF X-RAY SYSTEM
C          OR THE OUTPUT OF ORFLS (CRYLSQ)
C          ANY OTHER CARDS, BETWEEN THE ATOM CARDS, ARE IGNORED
C
C      FORMAT (A4,3X,A4,I2,3F8.5)
C
C-----------------------------------------------------------------------
C
       DIMENSION TITLE(20)
         .
         .
         .  (THE FORTRAN STATEMENTS)
         .
         .
       END
```

TEST DECK (ΔΕΔΟΜΕΝΑ ΕΛΕΓΧΟΥ ΚΑΙ ΔΟΜΑ) ΓΙΑ ΤΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD600

```
---------------------------------------------------------------------
@RUN   600,VEN,CSD,10,100/500
@ASG,A   CSD.
@XQT     CSD.CSD600
KLINOZ    ****.   CLEANTHIS VENETOPOULOS    ****    SEPTEMBER 1975
KLINOZ    5.089556  15.82915  5.385593  90.00000  103.2602  90.00000
     0.5     0.4      0.1      0.1      0.5      0.5                    2
SYMTRY 1    0.00+1X   0.00+1Y   0.00+1Z
SYMTRY 2    0.00+1X   0.00-1Y   0.50+1Z
SYMTRY 3    0.50+1X   0.50+1Y   0.00+1Z
SYMTRY 4    0.50+1X   0.50-1Y   0.50+1Z
                                          (ONE BLANK CARD)
ATOM   ZN2+     .00000  .24928  .00000
ATOM   CA2+     .34804  .57242  .63841
ATOM   SI4+     .01395  .36176  .51825
ATOM   O     1  .14157  .95914  .85642
ATOM   O 2-  2  .18757  .14427  .94888
ATOM   O 2-  3  .14096  .29344  .34756
ATOM   O 2-  4  .12786  .34063  .81548
ATOM   O 2-  5  .10675  .54592  .94793
ATOM   H     1  .18600  .91600  .72500
ATOM   H     2  .32000  .98600  .94200
@FIN
```

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

3.2.1.2 ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD611

```
C     PROGRAM  CSD611                                                  PROJECT
C     ***************                                                  *******
C
C     BY CLEANTHIS VENETOPOULOS,  NOVEMBER 22, 1969
C     UPDATED FEBRUARY 1977
C-----------------------------------------------------------------------
C
C     CLINOGRAPHIC AND NORMAL PROJECTION CALCULATION
C
C     FOR ORTHOGONAL AND MONOCLINIC CRYSTALS
C
C-----------------------------------------------------------------------
C
C     INPUT DATA AS FOLLOWS....
C     -------------------------
C
C     1. ONE TITLE-CARD  (20A4)
C
C     2. ONE CARD WITH THE UNIT CELL PARAMETERS CRNAME, A, B, C, BETA
C        (GIVE ONLY THE NECESSARY ONES)
C     FORMAT (A6,4X,3F10.5,10X,F10.5)
C
C     3. ONE CARD WITH THE PROJECTION SPECIFICATIONS ICLIN, IORIEN,
C        ISIZE, LIMT, ILEFT, SCALE
C        COL. 1-3  BLANK
C        COL. 4  ICLIN  (0 OR BLANK)/(1)  FOR (NORMAL)/(CLINOGRAPHIC)
C        PROJECTION
C        COL. 5-6  BLANK
C        COL. 7-8  IORIEN  (12)/(23)/(31)  FOR  (A DOWN THE PAGE,
C        B ACROSS THE PAGE, C PAGE TO PAGE)/(B DOWN, C ACROSS)/(C DOWN,
C        A ACROSS, B PAGE TO PAGE) PROJECTION
C        (ONLY 12 OR 23 SPECIFICATION IS VALID FOR MONOCLINIC)
C        COL. 9-11  BLANK
C        COL. 12  ISIZE  (1 OR 0 OR BLANK)/(2)  FOR (NORMAL SIZE)/
C        (MAGNIFICATION ACCORDING TO NAUMANN'S RULE)
C        COL. 13-15  BLANK
C        COL. 16  LIMT  (0)/(1)/(2)  FOR  (ACCEPT THE ATOMS IN THE CELL
C        ONLY)/(ACCEPT ALL THE ATOMS SUPPLIED BY DATA)/(MOVE THE ATOMS
C        FROM OUTSIDE INTO THE CELL AND TAKE THE EQUIVALENT ONES)
C        COL. 17-19  BLANK
C        COL. 20  ILEFT  (0)/(1)  FOR (RIGHT-HAND COORDINATES)/(LEFT)
C        COL. 21-30  SCALE (SCALE FACTOR MM/ANGSTROM)
C        COL. 31-80  BLANK
C     FORMAT (5I4,F10.5)
C
C     4. THE CARDS (ONE FOR EACH ATOM) WITH THE ATOM PARAMETERS IN
C        FRACTIONAL COORDINATES.
C        THESE CARDS ARE THE OUTPUT DATA OF CSD600 PROGRAM (SYM.OPER.).
C        (BLANK CARDS MAY SEPARATE GROUPS OF CARDS).
C     FORMAT (7X,A4,A2,3F8.5,35X,A2)
C-----------------------------------------------------------------------
C
C  ****  AFTER PLOTTING THE GIVEN POINTS ON MILLIMETER PAPER,
C        TURN THIS PAPER 90 DEGREES COUNTER CLOCKWISE
C        TO GET YOUR FIGURE IN ITS REGULAR ORIENTATION
C -----------------------------------------------------------------------
C
      DIMENSION TITLE(20)
        .
        .  (THE FORTRAN STATEMENTS)
        .
      END
```

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

TEST DECK (ΔΕΛΤΙΑ ΕΛΕΓΧΟΥ ΚΑΙ DATA) ΓΙΑ ΤΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD611

```
ΩRUN    611,VEN,CSD,10,100
ΩASG,A    CSD.
ΩXQT      CSD.CSD611
KLINO2      ****     CLEANTHIS VENETOPOULOS     ****     SEPTEMBER 1975
KLINO2          5.08956  15.82915   5.38559  90.00000 103.26020  90.00000
    1   23     1     0      20.0
ATOM    ZN2+ 1   .00000  .24928   .00000   2.50
ATOM    ZN2+ 2   .00000  .75072   .50000   2.50
ATOM    ZN2+ 3   .50000  .74928   .00000   2.50
ATOM    ZN2+ 4   .50000  .25072   .50000   2.50
ATOM    ZN2+ 5   .00000  .24928  1.00000   2.50
ATOM    ZN2+ 6  1.00000  .24928   .00000   2.50
ATOM    ZN2+ 7  1.00000  .24928  1.00000   2.50
ATOM    ZN2+ 8   .00000  .75072  -.50000   2.50
ATOM    ZN2+ 9  1.00000  .75072  -.50000   2.50
ATOM    ZN2+10  1.00000  .75072   .50000   2.50
ATOM    ZN2+11  -.50000  .74928   .00000   2.50
ATOM    ZN2+12  -.50000  .74928  1.00000   2.50
ATOM    ZN2+13   .50000  .74928  1.00000   2.50
ATOM    ZN2+14  -.50000  .25072  -.50000   2.50
ATOM    ZN2+15  -.50000  .25072   .50000   2.50
ATOM    ZN2+16   .50000  .25072  -.50000   2.50
                                                        (ONE BLANK CARD)
ATOM    CA2+ 1   .34804  .57242   .63841   2.50
ATOM    CA2+ 2   .34804  .42758   .13841   2.50
ATOM    CA2+ 3   .84804  .07242   .63841   2.50
ATOM    CA2+ 4   .84804  .92758   .13841   2.50
ATOM    CA2+ 5   .34804  .57242  -.36159   2.50
ATOM    CA2+ 6  1.34804  .57242  -.36159   2.50
ATOM    CA2+ 7  1.34804  .57242   .63841   2.50
ATOM    CA2+ 8   .34804  .42758  1.13841   2.50
ATOM    CA2+ 9  1.34804  .42758   .13841   2.50
ATOM    CA2+10  1.34804  .42758  1.13841   2.50
  .       .        .        .        .
  .       .        .        .        .
  .       .        .        .        .
  .       .        .        .        .
ATOM    H    37 1.32000 1.01400   .44200   2.50
ATOM    H    38 1.32000 1.01400  1.44200   2.50
ATOM    H    39 -.18000  .48600  -.05800   2.50
ATOM    H    40 -.18000  .48600   .94200   2.50
ATOM    H    41  .82000  .48600  -.05800   2.50
ATOM    H    42 -.18000  .51400   .44200   2.50
ATOM    H    43 -.18000  .51400  1.44200   2.50
ATOM    H    44  .82000  .51400  1.44200   2.50
ΩFIN
```

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

3.2.1.3 ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD623

```
C     PROGRAM  CSD623                                                  BONDANGL
C     ***************                                                  ********
C
C     BY CLEANTHIS VENETOPOULOS,    15-2-1974
C     UPDATED FEBRUARY 1977
C-----------------------------------------------------------------------
C
C     CALCULATES INTERATOMIC DISTANCES AND BOND ANGLES
C     FOR CUBIC, TETRAGONAL, ORTHORHOMBIC AND MONOCLINIC CRYSTALS
C
C-----------------------------------------------------------------------
C
C     INPUT DATA AS FOLLOWS .....
C     ---------------------------
C
C     1.  ONE TITLE-CARD  (20A4)
C
C     2.  ONE CARD WITH THE CRYSTAL PARAMETERS
C         COL. 1-6    THE NAME OF THE CRYSTAL
C         COL. 7-10   BLANK
C         COL.11-20   A
C         COL.21-30   B
C         COL.31-40   C
C         COL.41-50   BLANK
C         COL.51-60   BETA
C         COL.61-80   BLANK
C         FORMAT (A6,4X,3F10.5,10X,F10.5)
C
C     3.  THE CARDS (NO MORE THAN 1000) WITH THE ATOM COORDINATES,
C         AS TAKEN FROM THE PROGRAM CSD600
C
C     4.  ONE BLANK CARD
C
C     5.  THE CARDS WITH THE ATOM PARAMETERS (MOTA, MA, X, Y, Z, MB)
C         AND THE MAXIMUM BOND LENGTH (BMAX),
C         FOR THOSE ATOMS, WHICH WILL BE CONSIDERED AS CENTRAL ATOMS
C         COL. 1-5    ATOM
C         COL. 6-7    BLANK
C         COL. 8-11   ATOM SYMBOL
C         COL.12-13   ATOM IDENTITY NUMBER
C         COL.14-21   X
C         COL.22-29   Y
C         COL.30-37   Z
C         COL.38-50   BLANK
C         COL.51-60   MAX BOND LENGTH
C         COL.61-72   BLANK
C         COL.73-74   THE SYM. OPER. NUMBER
C         COL.75-80   BLANK
C         FORMAT (7X,A4,I2,3F8.5,13X,F10.5,12X,I2)
C
C-----------------------------------------------------------------------
C
      DIMENSION TITLE(20)
        .
        .
        .  (THE FORTRAN STATEMENTS)
        .
        .
      END
```

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

TEST DECK (ΔΕΛΤΙΑ ΕΛΕΓΧΟΥ ΚΑΙ DATA) ΓΙΑ ΤΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD623

```
ØRUN    623,VEN,CSO,10,100
ØASG,A    CSO.
ØXQT      CSD.CSD623
KLINO2     ****     CLEANTHIS VENETOPOULOS     ****     SEPTEMBER 1975
KLINO2        5.08956  15.82915   5.38559  90.00000 103.26020  90.00000
ATOM    ZN2+ 1   .00000  .24928   .00000  2.50
ATOM    ZN2+ 2   .00000  .75072   .50000  2.50
ATOM    ZN2+ 3   .50000  .74928   .00000  2.50
ATOM    ZN2+ 4   .50000  .25072   .50000  2.50
ATOM    ZN2+ 5   .00000  .24928  1.00000  2.50
ATOM    ZN2+ 6  1.00000  .24928   .00000  2.50
ATOM    ZN2+ 7  1.00000  .24928  1.00000  2.50
ATOM    ZN2+ 8   .00000  .75072  -.50000  2.50
ATOM    ZN2+ 9  1.00000  .75072  -.50000  2.50
ATOM    ZN2+10  1.00000  .75072   .50000  2.50
ATOM    ZN2+11  -.50000  .74928   .00000  2.50
ATOM    ZN2+12  -.50000  .74928  1.00000  2.50
ATOM    ZN2+13   .50000  .74928  1.00000  2.50
ATOM    ZN2+14  -.50000  .25072  -.50000  2.50
ATOM    ZN2+15  -.50000  .25072   .50000  2.50
ATOM    ZN2+16   .50000  .25072  -.50000  2.50
ATOM    CA2+ 1   .34804  .57242   .63841  2.50
ATOM    CA2+ 2   .34804  .42758   .13841  2.50
ATOM    CA2+ 3   .84804  .07242   .63841  2.50
ATOM    CA2+ 4   .84804  .92758   .13841  2.50
ATOM    CA2+ 5   .34804  .57242  -.36159  2.50
ATOM    CA2+ 6  1.34804  .57242  -.36159  2.50
ATOM    CA2+ 7  1.34804  .57242   .63841  2.50
ATOM    CA2+ 8   .34804  .42758  1.13841  2.50
ATOM    CA2+ 9  1.34804  .42758   .13841  2.50
ATOM    CA2+10  1.34804  .42758  1.13841  2.50
  .       .        .        .        .
  .       .        .        .        .
  .       .        .        .        .
  .       .        .        .        .
ATOM    H    37 1.32000 1.01400   .44200  2.50
ATOM    H    38 1.32000 1.01400  1.44200  2.50
ATOM    H    39 -.18000  .48600  -.05800  2.50
ATOM    H    40 -.18000  .48600   .94200  2.50
ATOM    H    41  .82000  .48600  -.05800  2.50
ATOM    H    42 -.18000  .51400   .44200  2.50
ATOM    H    43 -.18000  .51400  1.44200  2.50
ATOM    H    44  .82000  .51400  1.44200  2.50
                                                    (ONE BLANK CARD)
ATOM    ZN2+ 2   .00000  .75072   .50000  2.50          2.00000
ATOM    CA2+ 1   .34804  .57242   .63841  2.50          2.50000
ATOM    SI4+ 1   .01395  .36176   .51825  2.50          1.80000
ATOM    O    14  .64157  .54086   .35642  2.50          2.50000
ØFIN
```

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

3.2.2.1 ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD986

```
C     PROGRAM CSD986                                                    SORTF
C     **************                                                    *****
C
C     BY CLEANTHIS VENETOPOULOS              THESSALONIKI, NOVEMBER 1974
C ------------------------------------------------------------------------
C
C     *   P R O G R A M   S O R T I N G   *
C
C     FOR FCARDS  OF PROGRAM LISTFC (X-RAY)
C     (NO MORE THAN 4400 REFLECTIONS)
C ------------------------------------------------------------------------
C
C     INPUT DATA AS FOLLOWS ....
C     --------------------------
C
C     1.  ONE CARD WITH  NREFL, NFILEA, NFILEB, INDEX, LIST, NAME
C
C         NREFL = NUMBER OF REFLECTIONS (NO MORE THAN 4400)
C         IF YOU DO NOT KNOW THE EXACT NUMBER OF REFLECTIONS,
C         LEAVE THIS FIELD BLANK
C
C         NFILEA = NUMBER OF FILE WITH THE INPUT REFLECTION DATA
C         IF DATA ARE TO BE READ FROM CARDS, GIVE NFILEA = S OR BLANK
C         NFILEB = NUMBER OF FILE FOR OUTPUT
C
C         INDEX = CODE NUMBER OF INDEX (H,K,L) THAT CHANGES MORE QUICKLY
C         WITH INDEX=1 H CHANGES FIRST, K SECOND, L LAST
C         WITH INDEX=2 L CHANGES FIRST, H SECOND, K LAST
C         WITH INDEX=3 L CHANGES FIRST, K SECOND, H LAST
C
C         LIST IS THE PRINTER OUTPUT CONTROL INDEX
C         LIST=0  DO NOT LIST REFLECTION DATA
C         LIST=1  LIST REFLECTION DATA BEFORE SORTING
C         LIST=2  LIST REFLECTION DATA AFTER SORTING
C         LIST=3  LIST REFLECTION DATA BEFORE AND AFTER SORTING
C
C         NAME = ANY IDENTIFICATIONS OF THE PROBLEM
C
C     FORMAT (5I5,15X,10A4)
C
C     2.  THE REFLECTION DATA (FROM CARDS OR MAGNETIC FILE)
C         AS TAKEN FROM PROGRAM LISTFC OF X-RAY
C ------------------------------------------------------------------------
C
        .
        .  (THE FORTRAN STATEMENTS)
        .
      END
```

TEST DECK (ΔΕΛΤΙΑ ΕΛΕΓΧΟΥ ΚΑΙ DATA) ΓΙΑ ΤΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD986

```
ØRUN   986,VEN,CSD,10,100
ØASG,A     FILE6
ØUSE    10,FILE6
ØASG,A     FILE7
ØUSE    11,FILE7
ØASG,A   CSD.
ØXQT     CSD.CSD986
        10   11    3    0                KLINO2   SEPTEMBER 1975
ØFIN
```

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

3.2.2.2 ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD987

```
C     PROGRAM CSD987                                                    EDITOR
C     **************                                                    ******
C
C     BY CLEANTHIS VENETOPOULOS              THESSALONIKI, OCTOBER 1974
C ------------------------------------------------------------------------------
C
C
C                  ********************************
C                  *                              *
C                  *   P R O G R A M   E D I T O R *
C                  *                              *
C                  ********************************
C
C
C     READS THE OUTPUT (FCARDS) OF LISTFC (X-RAY) AND WRITES PAGES
C     WITH (UP TO) 250 ROWS AND (UP TO) 10 COLUMNS OF HKL, FO, FC
C     (THE FO/FC VALUES GIVEN AS INTEGER OR REAL WITH 1 OR 2 DECIMALS)
C ------------------------------------------------------------------------------
C
C     INPUT DATA AS FOLLOWS ....
C     -------------------------
C
C     1.  ONE CARD WITH THE PARAMETERS NCARDS, NR, NC, IN, NOD, IPOINT,
C         SF, IEDIT, ISTART, LESS, ILESS, INDEX, IBLANK, NAME
C
C         COL. 1-8   NCARDS
C         NCARDS = NUMBER OF FCARDS (IF YOU DO NOT KNOW THE EXACT NUMBER
C         OF REFLECTIONS, LEAVE THIS FIELD BLANK AND REMEMBER TO PUT
C         AN EOF-CARD AFTER THE LAST FCARD)
C
C         COL. 9-12   NR
C         NR = NUMBER OF ROWS OF THE TABLE (MAX NR = 250)
C
C         COL.13-16   NC
C         NC = NUMBER OF COLUMNS OF THE TABLE (MAX NC = 10)
C
C         NOTE.
C         THE FULL PAGE OF ZEITSCHRIFT FUER KRISTALLOGRAPHIE IS
C         11.3 X 17.8 CM  ( R = 17.8 / 11.3 = 1.575 )
C         THE FULL PAGE OF ACTA CRYSTALLOGRAPHICA IS 16.5 X 22.0 CM
C         ( R = 22.0 / 16.5 = 1.333 )
C
C         COL.17-20   IN
C         IN = (5 OR BLANK) / (FILE NUMBER)  FOR  INPUT DATA FROM
C                  (CARDS) / (MAGNETIC FILE)
C
C         COL.21-24   NDO
C         NOD = NUMBER OF DECIMAL DIGITS IN FO, FC  (BLANK = INTEGER)
C
C         COL.   25   BLANK (NO PUNCH)
C
C         COL.   26   IPOINT
C         IPOINT = POINT OR COMMA
C         PUNCH  (P)/(C)  FOR USE OF  (.)/(,)  AS DECIMAL POINT
C         OF REAL NUMBERS
C         (COMMA IS USED AS DECIMAL POINT IN GREEK EDITIONS)
C
C         COL.27-32   SF
C         SF = SCALE FACTOR FOR FO/FC  (BLANK = 1)
C
C         COL.33-36   IEDIT
C         IEDIT = 1 OR BLANK  FOR  PRINT WITH SINGLE SPACING
C                 2           FOR  PRINT WITH DOUBLE SPACING
```

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

```
C
C          COL.37-40    ISTART
C          ISTART = 1   LEAVE ONE BLANK LINE AT THE BEGINING OF PAGE.
C                                                THEN PRINT HEADINGS
C                   2   LEAVE TWO BLANK LINES
C                   3         THREE
C                   .          .
C                   .          .
C                  10         TEN
C                   .          .
C                   .          .
C                   0 (OR BLANK)    START PRINTING FROM THE BEGINING OF
C                                                          THE PAGE
C
C          COL.41-42    LESS
C          LESS = (0 OR BLANK)/(1)  FOR  (PRINT)/(OMIT LESS-THANS)
C
C          COL.43-44    ILESS
C          ILESS = (0 OR BLANK)/(1)  FOR  (DO NOT)/(DO) PRINT AN *
C                                  TO INDICATE =LESS THAN= REFLECTIONS
C
C          COL.45-46    INDEX
C          INDEX = 1   H IS TO BE PRINTED IN ALL REFLECTIONS
C                  2   K IS TO BE PRINTED IN ALL REFLECTIONS
C                  3   L IS TO BE PRINTED IN ALL REFLECTIONS
C
C          COL.47-48    IBLANK
C          IBLANK = 1    IF ONE INDEX (H,K,L) IS SIMILAR WITH THE ABOVE,
C                                                   DO NOT PRINT IT
C                   2   IF TWO INDICES (H,K,L) ARE SIMILAR WITH THE ABOVE,
C                                                   DO NOT PRINT THEM
C
C          COL.49-50    BLANK (NO PUNCH)
C
C          COL.51-80    NAME
C          NAME = ANY IDENTIFICATION OF THE PROBLEM (CRYSTAL, NAME ETC)
C
C          FORMAT (I8,4I4,1X,A1,F6.1,2I4,4I2,2X,5A6)
C
C      2.  THE FCARDS AS TAKEN FROM THE LISTFC PROGRAM (X-RAY SYSTEM)
C          THESE CARDS MAY BE WRITTEN ON A MAGNETIC FILE. IN THIS CASE,
C          THE VARIABLE =IN= (COL. 17-20 OF DATA CARD NR 1)
C          MUST NOT BE EQUALE TO 5 OR BLANK
C
C      3.  ONLY IF NCARDS = 0 OR BLANK IN THE FIRST CARD,
C          PUT AN EOF-CARD (END OF FILE)
C
C ----------------------------------------------------------------------
C
        .
        .   (THE FORTRAN STATEMENTS)
        .
      END
```

TEST DECK (ΔΕΛΤΙΑ ΕΛΕΓΧΟΥ ΚΑΙ DATA) ΓΙΑ ΤΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ CSD987

```
ΩRUN   987,VEN,CSD,10,100
ΩASG,A     FILE7
ΩUSE    11,FILE7
ΩASG,A   CSD.
ΩXQT     CSD.CSD987
          55   3  11   1 P          1   5 1   3 2  KLINO2 SEPTEMBER 1975
ΩFIN
```

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Εὐχαριστῶ θερμὰ τὸν Καθηγητὴ κ. Παναγιώτη Ρεντζεπέρη, Διευθυντὴ τοῦ Ἐργαστηρίου Ἐφηρμοσμένης Φυσικῆς τῆς Φ. Μ. Σχολῆς, δάσκαλό μου στὴν Κρυσταλλοδομή, ἀλλὰ καὶ γενικώτερα στὴ διεξαγωγὴ τῆς ἐπιστημονικῆς ἔρευνας, γιὰ τὶς πολλὲς καὶ χρήσιμες ὑποδείξεις κατὰ τὴ θεωρητικὴ μελέτη τῶν κρυσταλλογραφικῶν προγραμμάτων, καθὼς καὶ γιὰ τὴν κριτικὴ ἀνάγνωση τοῦ χειρογράφου τῆς ἐργασίας αὐτῆς.

Ἡ ἐπεξεργασία καὶ οἱ δοκιμὲς τῶν προγραμμάτων CSD ἔγιναν μὲ τὸν ἠλεκτρονικὸ ὑπολογιστὴ τοῦ Ἀριστοτελείου Πανεπιστημίου Θεσσαλονίκης, πρὸς τὸ ὁποῖο ἐκφράζω τὶς εὐχαριστίες μου.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Buerger M. J. (1966), X-ray Crystallography. (Wiley and Sons, New York).

Buerger M. J. (1967), Crystal Structnre Analysis. (Wiley and Sons, New York).

Main P., Woolfson M. M. and Germain G. (1971), MULTAN – a Computer Program for the Automatic Solution of Crystal Structures, Univ. of York, England and Univ. of Louvain, Belgium.

Ρεντζεπερη Π. Ι. (1976), Εἰσαγωγὴ εἰς τὴν Κρυσταλλοδομὴν καὶ τὴν Φυσικὴν τῶν Ἀκτίνων Χ. Πανεπιστήμιον Θεσσαλονίκης.

Stewart J., Kruger G., Ammon H. Dickinson C. and Hall S. (1972), The X-ray System of Crystallographic Programs for any Computer. Technical rep. 192, Computer Science Center, University of Maryland.

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΔΟΜΗΣ ΕΚ ΤΗΣ ΣΕΙΡΑΣ CSD

Ὑπὸ

ΚΛΕΑΝΘΗ ΒΕΝΕΤΟΠΟΥΛΟΥ

Τὰ προγράμματα τῆς σειρᾶς CSD χρησιμοποιοῦνται κυρίως στὸν προσδιορισμὸ τῆς κρυσταλλικῆς δομῆς. Μερικὰ ἀπ' αὐτὰ χρησιμοποιοῦνται στὴν ἐκπαίδευση τῶν φοιτητῶν τῆς Φυσικῆς στοὺς ὑπολογισμοὺς τῆς Κρυσταλλοδομῆς. Τὰ σπουδαιότερα προγράμματα χρησιμοποιοῦνται στὴν ἐπιστημονικὴ ἔρευνα, δηλαδὴ στὴν ἐπεξεργασία τῶν δεδομένων, πρὶν καὶ μετὰ ἀπὸ τὸ σύστημα X-RAY (STEWART et al., 1972) ἢ τὸ σύστημα MULTAN (MAIN et al., 1971).

Μετὰ τὴ μέτρηση τῶν ἐντάσεων τῶν ἀνακλάσεων μὲ τὸ αὐτόματο περιθλασίμετρο, χρησιμοποιοῦνται τὰ προγράμματα CSD507, CSD751, καὶ CSD982 καὶ προετοιμάζουν δεδομένα γιὰ τὸ σύστημα X-RAY ἢ τὸ σύστημα MULTAN. Μετὰ τὸν προσδιορισμὸ τῆς δομῆς καὶ τὴ βελτίωση τῶν παραμέτρων τῶν ἀτόμων, χρησιμοποιοῦνται τὰ προγράμματα CSD600, CSD611 καὶ CSD623 γιὰ τὴ λεπτομερὴ περιγραφὴ τῆς δομῆς. Τέλος, τὰ προγράμματα CSD986 καὶ CSD987 δίνουν πίνακες τῶν δεδομένων, ἕτοιμους γιὰ δημοσίευση.

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη Θεόφραστος - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.