

Programa para efectuar los cálculos geométricos de una estructura cristalina

por XAVIER SOLANS y MANUEL FONT-ALTABA *

RESUMEN

Ha sido elaborado un programa para ordenador de tipo medio que permite calcular las posiciones equivalentes de los átomos de la unidad asimétrica en la celda fundamental, las distancias y ángulos inter e intra-moleculares, así como sus desviaciones standard, y los planos medios que determinan los átomos de la unidad asimétrica o parte de ella. Estos cálculos los efectúa a partir de los parámetros de la red y de las coordenadas, con sus desviaciones standard.

SUMMARY

A new computer program for obtaining the equivalent positions within the unit cell, the inter and intramolecular distances and angles, and the mean plane is presented. The unit cell, the symmetry and the atomic coordinates are the lists employed by the program.

INTRODUCCIÓN

Determinadas por difracción de rayos X o de neutrones, y afinadas las coordenadas de los átomos que componen una estructura cristalina, es de interés cristalográfico y químico la interpretación de los resultados obtenidos, y para ello es preciso determinar las relaciones geométricas entre los átomos de la estructura cristalina.

El cálculo de las distancias y ángulos de enlaces, así como de los ángulos de conformación y de los posibles planos medios que contiene la unidad asimétrica o parte de ella, permite determinar las distorsiones que presentan las moléculas covalentes y las resonancias electrónicas de sus enlaces debidas a la configuración cristalina. Además suministra información para efectuar un estudio teórico sobre la estabilidad de la molécula.

El cálculo de las distancias inter e intramoleculares permite estudiar las fuerzas que enlazan a las distintas moléculas, como son puentes de hidrógeno, momentos

dipolares, fuerzas de repulsión y de Van der Waals..., así como la compacidad molecular y cristalina.

Existen varios programas para efectuar alguno de los cálculos mencionados, pero la ventaja que ofrece éste es de reunir todos ellos en una sola ejecución. Con lo que se disminuye el tiempo real para efectuarlos, no sólo por disminuir el número de ejecuciones sino también por tener una mayor velocidad de cálculo debida a su estructuración.

Otra ventaja es la de ocupar menos memoria que aquellos programas.

Descripción del programa

El programa ha sido escrito en FORTRAN F, ocupando 60 K de memoria, lo que permite ser procesado en cualquier ordenador de tipo medio. Utiliza una cinta magnética de trabajo, o en su defecto puede utilizar un archivo en disco.

Las subrutinas que utiliza en parte provienen de las S.S.P. de I.B.M., mientras que las otras son originales (ver tabla 1).

TABLA 1

Subrutina	Función que realiza
GMPRD	Multiplica matrices (de S.S.P. de I.B.M.)
INVRS	Invierte una matriz (de S.S.P. de I.B.M.)
XVMV	Raíz cuadrada o no del producto de un vector
PV	Producto vectorial de dos vectores.
XSDG	Suma y diferencia entre vectores o matrices
GCOOR	Generación de coordenadas por simetría o matriz de equivalencia

* Sección Cristalografía, Instituto "Jaime Almera" del C.S.I.C. Barcelona, y Departamento de Cristalografía y Mineralogía de la Universidad de Barcelona.

La duración de la ejecución en un ordenador I.B.M. 360/30 para la estructura cristalina del Hexaclorofenol, de grupo espacial $I4_1/a$, $Z = 16$ y de 13 átomos en la unidad asimétrica, es de 25 minutos. Mientras que ha sido de una hora para la estructura del 2 Metoxi Isonitroso Acetanilida, de 48 átomos en la unidad asimétrica $P2_12_12_1$, $Z = 4$.

Los datos de entrada del programa son los parámetros de la red, las matrices y vectores de simetría, el tipo de red, la tabla de enlaces y las coordenadas de los átomos pertenecientes a una misma unidad asimétrica, con sus desviaciones standard. El número máximo de coordenadas permitido por el programa es de cien.

Los cálculos que se efectúan a partir de ellos, imprimiendo su correspondiente tabla, son:

- a) Coordenadas de los átomos en la celda elemental.
- b) Distancia entre átomos enlazados.
- c) Ángulo entre átomos enlazados.
- d) Ángulo de conformación entre átomos enlazados.
- e) Planos medios.
- f) Ángulo entre planos medios.
- g) Distancias inter e intramoleculares.
- h) Ángulos inter e intramoleculares.

identificación, las matrices, y la traslación de la red que relacionan el nuevo átomo con la unidad asimétrica de entrada.

Las expresiones utilizadas para el cálculo de las distancias y ángulos de enlace así como para el ángulo de conformación pueden leerse en la tabla 2, en donde mod expresa el módulo del vector.

Las desviaciones standard son deducidas por la expresión:

$$\sigma = \sum \frac{d F(x_i^{A_j})}{d x_i^{A_j}} \sigma(x_i^{A_j})$$

en donde $x_i^{A_j}$ es la coordenada i del átomo A_j $F(x_i^{A_j})$ representa cualquiera de las tres funciones anteriores, que dependen de cada una de las coordenadas de los átomos que intervienen en su cálculo. La sumación, pues, está extendida para todas las coordenadas de los átomos que intervienen.

Los planos medios son determinados aplicando el método de mínimos cuadrados a las distancias que separan dicho plano con cada uno de los átomos que lo componen, pudiéndose utilizar unos factores de peso para cada coordenada, que es igual a la inversa de su desviación standard.

Las distancias y ángulos inter e intramoleculares son calculados con las expresiones de la tabla 2, se imprime el resultado en una tabla en donde se especifica nombre de identificación de los átomos que

TABLA 2

Función	Átomos que intervienen	Expresión utilizada
Distancia	$A_1 - A_2$	mod $(A_1 A_2)$
Ángulo	$A_1 - A_2 - A_3$	arc tg $\frac{\text{mod } (A_2 A_1 \times A_2 A_3)}{A_2 A_1 \cdot A_2 A_3}$
Ángulo Conformación	$A_1 - A_2 - A_3 - A_4$	arc tg $\frac{\text{mod } ((A_1 A_2 \times A_2 A_3) \times (A_2 A_3 \times A_3 A_4))}{(A_1 A_2 \times A_2 A_3) \cdot (A_2 A_3 \times A_3 A_4)}$

En el cálculo de las coordenadas de los átomos en la celda elemental, el programa da los resultados de la celda que viene definida por las coordenadas fraccionarias (m, n, p), en donde m, n, p valen 0 o 1. A partir de las coordenadas de los átomos y de las matrices de simetría y de equivalencia según el tipo de red, genera todas las posiciones equivalentes a la unidad asimétrica dada, trasladando aquellas que salen fuera de la celda elemental considerada por el programa mediante una traslación de la red.

Imprime el programa una tabla con las coordenadas de los átomos de la celda elemental con su nombre de

intervienen y la relación por simetría, transformación de equivalencia según el tipo de red y traslación de la red de cada uno de los átomos con la unidad asimétrica en que han sido introducidas en el programa las coordenadas de los átomos.

BIBLIOGRAFÍA

- AHMED, F. R. (1969): Crystallographics programs for a I.B.M. 360 system. National Research Council of Canada.
 ROLLET, J. S. (1965): Computing Methods in Crystallography. Pergamon press. Oxford, pp. 3-82.
 SOLANS, X. y MIRAVITLES, C. (1974): *Acta Geológica Hispánica*, t. IX, n.º 3, pp. 109-110.