



תכנית מחשב לקביעת החזרות קרני x מדגם רב-גבישי  
בעל כיוונית-גבישים אקראית בשיטת הדיפרקטומטר

ג' קימל, י' שריאל

כסלו תש"ס - דצמבר 1979

**Received 28 Dec 1979**

English title and abstract included



#### LEGAL NOTICE

This publication is issued by the Nuclear Research Centre - Negev, Israel Atomic Energy Commission. Neither the Nuclear Research Centre - Negev, nor its contractors, nor any person acting on their behalf or on behalf of the Israel Atomic Energy Commission

make any warranty or representation, express or implied, with respect to the accuracy, completeness, or usefulness of the information contained in this publication, or that the use of any information, apparatus, method or process disclosed in this publication will not infringe upon privately owned rights, or

assume any liability with respect to the use of, or for damages resulting from the use of any information, apparatus, method or process disclosed in this publication.

Mention of commercial products, their manufacturers, or their suppliers in this publication does not imply or connote approval or disapproval of the products by the Nuclear Research Centre - Negev or by the Israel Atomic Energy Commission.

#### הודעה משפטית

פרסום זה מתא לאור על ידי הקריה למחקר גרעיני - נגב, הוועדה לאנרגיה אטומית של ישראל.

הקריה למחקר גרעיני - נגב והתחלים מטעמה או בשמות, או מטעם הוועדה לאנרגיה אטומית של ישראל או בשמה

אינם אחראים או ערבים, אחריות או ערבות כלשהי, במפורש או שלא במפורש, לזיוק, לשלמות ולשימושיות של המידע הכלול בפרסום זה או לכך שהשימוש בכל מידע, מכשיר, שיטה או התליך הנתון בפרסום זה לא יפגע בזכויות פרטיות של אחרים,

ואינם מקבלים על עצמם כל התחייבות בין הדי שימוש או טקו השימוש בכל מידע, מכשיר, שיטה או התליך הנתון בפרסום זה.

הזכר של מוצרים מסחריים, של יצרניהם או של ספקיהם בפרסום זה אין משמעו אישור המוצרים על ידי הקריה למחקר גרעיני - נגב או על ידי הוועדה לאנרגיה אטומית של ישראל.

This publication and more information about its subject matter may be obtained at the following address:

Scientific and Technical Information Department  
Nuclear Research Centre - Negev  
P. O. Box 9087

84 190 Beer-Sheva, ISRAEL

ניתן להשיג את הפרסום הזה וכן מידע נוסף בנושא הפרסום על ידי פניה לכתובת:

יחידת המידע  
הקריה למחקר גרעיני - נגב (קש"ג)  
9087 ת"ד

באר שבע 84 190

תכנית מחשב לקביעת החזרות קרני x מדגם רב-גבישי בעל כיווניות-גבישים אקראית  
בשיטת הדיפרקטומטר

ג' קימל, י' שריאל

כסלו תש"ס - דצמבר 1979

#### תקציר

נכתבה תכנית מחשב שמטרתה לחשב את הזוויות והעצמות היחסיות בהחזרות קרני-x.  
מונוכרומטיות מדגם רב-גבישי בעל כיווניות-גבישים אקראית בשיטת הריפרקטומטר.  
התכנית מצטיינת בהזנה פשוטה של הנתונים הקריסטלוגרפיים ובאפשרות לחישובים  
חוזרים באותה הרצה תוך שינוי כל הנתונים או חלקם. היא מתאימה בעיקר ללימוד  
שגרת של מבנים קריסטלוגרפיים שונים כולל תמיסות מוצקות. קיבולת הזיכרון של  
התכנית היא גמישה כך שהיא ניתנת להתאמה לגודל הזיכרון של המחשב.

COMPUTER PROGRAM FOR THE DETERMINATION OF X-RAY REFLECTIONS FROM A RANDOMLY ORIENTED POLYCRYSTALLINE SAMPLE BY DIFFRACTOMETER

Giora KIMMEL and Joseph SARIEL

December 1979

ABSTRACT

A computer program was elaborated in order to calculate the angles and the relative intensities of the reflections for monochromatic x-ray diffraction from a randomly oriented polycrystalline sample of known crystallographic structure, by the diffractometer method. The program is advantageous in the simplicity of its crystallographic input and the possibility it affords to modify all or part of the input for recalculation in the same run. It is suitable mainly for the routine study of different crystallographic structures including solid solutions. The program's memory capacity is flexible so that it can be adapted to that of the computer.

עמודתוכן העניינים

1	מבוא	1
2	הנוסחות הבסיסיות	2
2	מקדמי ההחזרה האטומיים	2.1
3	מקדם המכנה	2.2
5	העצמה היחסית	2.3
6	פירוט הביצועים	3
7	תיאור התכנית	4
7	התכנית העיקרית XRINT	4.1
7	LOAD (טעינת הגחונים)	4.1.1
7	SHIFT	4.1.2
7	SFACT	4.1.3
8	INTENSITY	4.1.4
8	SWITCH	4.1.5
8	הסכרוטינה LAT	4.2
8	הסכרוטינה SPACG	4.3
9	הסכרוטינה MULTF	4.4
9	הסכרוטינה ATPS	4.5
9	הסכרוטינה EQPT	4.6
10	הפעלת התכנית	5
10	מקדמי ההחזרה האטומיים	5.1
10	זווית המונכרומוטור ואורך הגל (LOADLAM)	5.2
11	תיקוני דיספרסיה וטמפרטורה (LOADCOR)	5.3
11	סיווג הסריג ותחום זוויות Bragg (NSGIBR)	5.4
13	שם הדגם ופרמטרי הסריג (NAME-PARAM)	5.5
14	מיקום האטומים (NIA CIA X Y Z)	5.6
16	בחירת המשך הביצוע (SWITCH)	5.7
17	טעינת הסכרוטינה EQPT	5.8
17	טעינת הפונקציות AA ו-BR	5.9
18	דרגמה לפלט	6
19	סימוכין	

1 מבוא

במהלך העבודה השגרתית כדיפרקטומטריית קרני-x שמטרתה היא בעיקר אבחנה פזות ומעקב אחר תהליכים הקשורים במעברי פזות, מתברר כי יש צורך בחישובי עצמות החזרה של קרני-x.

במקרים רבים אי-אפשר להסתמך על כרטיסיות ASTM, שנועדו לעבודה שגרתית, עקב הסיבוכ הבאות:

- (א) הכרטיסיות אינן מעורכנות תמיד, בעיקר כאשר האינפורמציה המעודכנת היא מידע מגביש יחיד.
- (ב) חלק גדול מהאינפורמציה בכרטיסי ASTM נובע מהערכה חזותית (ויזואלית) של קווי ההשחרה על סרט, והיא כדיוק בלתי מספק.
- (ג) אין כמעט אינפורמציה על תמיסות מוצקות.
- (ד) האינפורמציה על-גבי כרטיסי ASTM מוגבלת לאורך גל מסויים או לחחום מסויים של זוויות Bragg, שאינן זהות לאלה של תנאי העבודה הנדרשים.

נהוג, איפוא, לחשב את זוויות ההחזרה ועצמות ההחזרה מחדש לפי נתונים קריסטלוגרפיים מעורכים, בכל מקרה שהאינפורמציה מכרטיס ASTM איננה מספקת. ירועות תכניות מחשב לא מעטות<sup>(1-4)</sup> לביצוע החישוב, אך לרוב הן משוכללות בכך שהן כוללות:

- (א) שימושים רבים לדיפרקציה, כגון דיפרקציות אלקטרונית, ניוטרונים, קרני-x כטיטת הדיפרקטומטריה, לאקנה, לגבישים יחידים או שיטות צילום שונות.
- (ב) השוואה בין העצמה המחושבת והעצמה הנצפית חוץ כדי ביצוע עידון (refining) של המבנה.
- (ג) שימוש באמצעי קלט-פלט משוכללים כגון סרטים מגנטיים ודיסקים, מלבד הכרטיסים. לעיתים הקלט הוא מסובך למדי, וכולל מלבד ממדי הסריג ומיקום האטומים גם את סימטריית Laue והחבורה המרחבית. לעיתים יש להוסיף את מקדמי הפיזור האטומיים של כל מקום בו מציינים מיקום של אטום, ולעיתים יש להשתמש בכמה תכניות יחד.

מצאנו, איפוא, לנכון לבנות תכנית מחשב המיועדת אך ורק לטכניקה דיפרקציית קרני-x (דיפרקטומטריית אבקה או Debye-Scherrer ללא חיקוני בליעה) שחהיה מתאימה לעבודה במכנים קריסטולוגרפיים שונים, כולל תמיסות מוצקות, ויחד עם זה שחהיה נוחה לעבודה שגרתית. התכנית קלה לטעינה (כרטיסים בלבד) ועבור חומדים בעלי מבנה גבישי פשוט ררוש לתת אך ורק את אורך הגל, ממדי הסריג, סיווג סריג Bravais ומיקום האטומים כלפי נקודת סריג כלשהי. במקרה זה התכנית משלימה אוטומטית את המיקונים האקוויוולנטיים עבור סריגים לא פרימיטיביים, ומחשבת את כל ההחזרות לפי סדר יורד של  $d_{hkl}$ .

עבור מקרים מסובכים יותר (מספר רב של אטומים בחא יחידה) יש אופציה להכניס סכרוטינה לחישוב מיקומי אטומים אקוויוולנטיים עקב העתקות החכורה המרחבית. ניתן גם להכניס פונקציה הנותנת ערך יחיר של גרום מבנה לכל אתר המכיל מספר אטומים אקוויוולנטיים ועל-ידי זה החישוב הוא מהיר.

## 2 הנוסחות הבסיסיות

הנוסחות הבסיסיות לחישוב עצמות ההחזרה כדיפרקציית קרני-x ניתנות, כין השאר, בסיווך 5.

### 2.1 מקדמי ההחזרה האטומיים

חישוב מקדמי ההחזרה האטומיים נעשה לפי הנוסחה:

$$f_{el} = \sum_{i=1}^4 a_i \exp[-b_i (\sin\theta/\lambda)^2] + c \quad [1]$$

עבור יסור I יהיו נתונים 9 מקדמים:

$$AASF(I, J), \quad J = 1, 9$$

$$\left. \begin{aligned} ASF(\text{INDEX}) &= a_i \\ BSF(\text{INDEX}) &= b_i \\ CCF &= c \end{aligned} \right\} \text{INDEX} = 1, 2, 3, 4$$

אשר יפוצלו בצורה:

בסמן :

$$SNL = \sin\theta/\lambda = 1/2d_{hkl} \quad [2]$$

$$SUMAF = \sum_i a_i \exp[-b_i (\sin\theta/\lambda)^2] \quad [3]$$

לאחר ההתחשבות בתיקוני הדיספרסיה:

$$DFP = \Delta f' \quad DFPP = \Delta f''$$

מקבלים:

$$f = f_{e\ell} + \Delta f' + i\Delta f'' = f_R + if_I \quad [4]$$

(  $f_R$  ו- $f_I$  הם החלק הממשי והחלק הדמיוני של  $f$ , בהתאמה ).

כמו כן בסמן :

$$AFRC = SUMAF + CCF + DFP = f_R \quad [5]$$

$$AFRS = -DFPP = -f_I \quad [6]$$

$$AFIC = DFPP = f_I \quad [7]$$

$$AFIS = SUMAF + CCF + DFP = f_R \quad [8]$$

## 2.2 מקדם המכנה

מקדם המכנה ניתן על-ידי הקשר:

$$F(h, k, \ell) = \sum_j f_j \cdot \exp[2\pi i (hx_j + ky_j + \ell z_j)] \quad [9]$$

בסמן :

$$\Delta GR_j = 2\pi (hx_j + ky_j + \ell z_j) \quad [10]$$

העצמה  $I$  מהמישור  $(hkl)$  יחסית למכפלת המקרם  $F$  בצמוד שלו:

$$I_{hkl} \propto F \cdot F^* \quad [11]$$

הכנסת  $(f_R + if_I)$  עבור  $f$ , והצורה הטריגונומטרית לאכספוננט ב-[9] יחד:



$$F = \sum_j (f_{R_j} + i f_{I_j}) \cdot \cos(\text{ARG}_j) + i \sum_j (f_{R_j} + i f_{I_j}) \cdot \sin(\text{ARG}_j) \quad [12]$$

ולאחר הפיכת האיברים הממשיים והדמיוניים:

$$F = \sum_j [f_{R_j} \cdot \cos(\text{ARG}_j) - f_{I_j} \cdot \sin(\text{ARG}_j)] + i \sum_j [f_{I_j} \cdot \cos(\text{ARG}_j) + f_{R_j} \cdot \sin(\text{ARG}_j)] \quad [13]$$

הכנסת גורם הטמפרטורה,  $B_j$ , ומשקלו היחסי של האטום באתר,  $C_j$ , חיתוך מכפיל נוסף:

$$\text{TEM}_j = C_j \exp[-B_j (\sin\theta/\lambda)^2] \quad [14]$$

ונקבל:

$$\text{SUM1} = \sum_j [\text{AFRC}_j \cdot \cos(\text{ARG}_j) + \text{AFRS}_j \cdot \sin(\text{ARG}_j)] \cdot \text{TEM}_j \quad [15]$$

$$\text{SUM2} = \sum_j [\text{AFIC}_j \cdot \cos(\text{ARG}_j) + \text{AFIS}_j \cdot \sin(\text{ARG}_j)] \cdot \text{TEM}_j \quad [16]$$

$$A2 = \text{SUM1}; \quad B2 = \text{SUM2} \quad [17]$$

$$FF^* = A2 \cdot A2 + B2 \cdot B2 \quad [18]$$

אם משתמשים בפרונקציה מוכנה עבור סיכום חלקי של  $F$  לגבי אטומים אקוויוולנטיים

יוצג הדבר בתכנית בצורה הבאה:

$$F1 = AA(H, K, L, X, Y, Z) = \sum_j \cos(\text{ARG}_j) \quad [19]$$

$$F2 = BB(H, K, L, X, Y, Z) = \sum_j \sin(\text{ARG}_j) \quad [20]$$

$$\text{SUM1} = \sum_j (\text{AFRC} \cdot F1 + \text{AFRS} \cdot F2) \quad [21]$$

$$\text{SUM2} = \sum_j (\text{AFIC} \cdot F1 + \text{AFIS} \cdot F2) \quad [22]$$

$$F = \sqrt{\text{SUM1}^2 + \text{SUM2}^2} \quad [23]$$

## 2.3 העצמה היחסית

ערכי  $F^2$  מקובצים עבור כל ערכי  $H, K, L$  בעלי ערך  $d_{hkl}$  מסויים, ואגב כך נמנה מקדם הריבוי  $P$ , שהוא מספר הערכים הנותנים  $F > 0$  לערכי  $d_{hkl}$  שווים.

הערך הממוצע של מקדם המכנה הוא:

$$SF = \bar{F} = \sqrt{\frac{\sum F^2}{P}} \quad [24]$$

כל ההחזרות מיוצגות על-ידי וקטורים כדלקמן:

$$H(I), K(I), L(I) \quad (h, k, \ell) \quad \text{אינדקסי מילר} \quad [25]$$

$$RSPD(I) = g_{hkl} \quad [25]$$

$$DS = 1/RSPD(I) = d_{hkl} \quad [26]$$

$$DT(I) = 2\theta_{hkl} \quad (\text{זווית ההחזרה}) \quad [27]$$

$$SF(I) = \bar{F}_{hkl} \quad [28]$$

$$AMULT(I) = P(h, k, \ell) \quad (\text{גורם הריבוי}) \quad [29]$$

העצמה מחושבת על-ידי:

$$AINT(I) = LPF(I) \cdot SF(I)^2 \cdot AMULT(I) \quad [30]$$

כאשר  $LPF(I)$  הוא מקדם לורנץ-פולריזציה המחושב עבור שיטת Debye-Scherrer לאבקה או שיטת הדיפרקטומטר עם מונוכרומטור לפי הנוסחה:

$$LPF = \frac{(1 + \cos^2 2\theta \cdot \cos^2 2\alpha)}{\sin^2 \theta \cdot \cos \theta} \quad [31]$$

כאשר  $\theta$  היא זווית Bragg, ו- $2\alpha$  היא זווית ההחזרה של המונוכרומטור.

כאשר יש מספר החזרות לערכי  $d_{hkl}$  קרובים מתחת לכושר ההפרדה, מסוכמים ערכי ה- $AINT(I)$  לערך כולל אחד.

3 פירוט הביצועים

פירוט הביצועים של תכנית המחשב ניתן בטבלה 1.

מספר הפעולה	הקלט והסברוטינה הדרושה	הביצועים של התכנית X.RINT.	הכיצוע	הפלט
1	מיקום כל האטומים בתא היחידה	---	---	---
2	מיקום האטומים כלפי נקודה הסריג; מיקום הסריג (קוד NBR)	השלמת מיקום האטומים לפי מרכז הסריג	מיקום האטומים לפי מרכז הסריג	מיקום כל האטומים
3	סברוטינה של כל המקומות האקווי-וולנטיים בתא היחידה; מיקום אטומים מייצג בכל אתר	מיקום האטומים לפי המקומות האקווי-וולנטיים של החבורה המרחבית	מיקום האטומים לפי המקומות האקווי-וולנטיים של החבורה המרחבית	מיקום כל האטומים
4	סברוטינה של מקומות אקווי-וולנטיים סביב נקודת סריג; מיקום הסריג; מיקום אטום מייצג בכל אתר	השלמת מיקום האטומים לפי החבורה המרחבית ולפי מיקום הסריג	השלמת מיקום האטומים לפי החבורה המרחבית ולפי מיקום הסריג	מיקום כל האטומים
5	ששת פרמטרי הסריג $PR(I), I = 1, 6$	---	---	פרמטרי הסריג $Q(I)$ $I = 1, 6$
6	מספר פרמטרים $P(I)$ מינימלי; מספר קוד לסריג (NSG)	השלמת פרמטרי הסריג	השלמת פרמטרי הסריג	פרמטרי הסריג $Q(I)$ $I = 1, 6$
7	מספר פרמטרים $P(I)$ מינימלי; מספר קוד לסריג (NSG); אורך גל ותחום זוויות $[2\theta_{min}, 2\theta_{max}]$ לקביעת תחומים	אינרכסציה וסידור $hk\ell$ לפי מירווחי המישורים $d_{hk\ell}$	אינרכסציה וסידור $hk\ell$ לפי מירווחי המישורים $d_{hk\ell}$	מספר פרמטרים $P(I)$ מינימלי; מספר קוד לסריג (NSG); אורך גל ותחום זוויות $[2\theta_{min}, 2\theta_{max}]$ לקביעת תחומים
8	מספר הקוד IBR	השמטת $hk\ell$ בלתי מחזירים	השמטת $hk\ell$ בלתי מחזירים	סינון $hk$ שלא תורמים להחזרה
9	ציון האטומים או היונים לפי מספר קוד; הכנסת 9 מקדמים עבור האטומים או היונים	מקדמי פיזור אטומיים עקב פיזור אלסטי בלבד	מקדמי פיזור אטומיים עקב פיזור אלסטי בלבד	---
10	מקדמי תיקון דיספרסיה וגורמי טמפרטורה	מקדמי פיזור אטומיים עם תיקוני דיספרסיה וגורם הטמפרטורה	מקדמי פיזור אטומיים עם תיקוני דיספרסיה וגורם הטמפרטורה	---
11	מיקום כל האטומים לפי אחת הפעולות 1, 2, 3, 4; מקדם משקל לאטום באתר	מקדמי המבנה לפי מיקום כל האטומים	מקדמי המבנה לפי מיקום כל האטומים	מקדמי המבנה $SF(I)$
12	מיקום אטום מייצג באתר; מספר קוד של האטום; משקל יחסי של האטום ביחס לאתרים אחרים; הפונקציות AA ו-BB	מקדמי המבנה לפי מיקום האטום בכל אתר (חישוב מהיר)	מקדמי המבנה לפי מיקום האטום בכל אתר (חישוב מהיר)	מקדמי המבנה $SF(I)$
13	זווית המונוכרומטור $2\theta$ ; אורך הגל $\lambda$	מקדם לורנץ-פולריזציה; עצמות ההחזרה	מקדם לורנץ-פולריזציה; עצמות ההחזרה	LPF(I) AINT(I)
14	אורך הגל, $2\theta_{max}$ ו- $2\theta_{min}$ ואם נחוץ גם	זוויות ההחזרה $2\theta$	זוויות ההחזרה $2\theta$	DT(I)

4 תיאור התכנית

התכנית כוללת תכנית עיקרית - XPRINT ; סכרוטינות BRIT , LAT , SPACG , MULTF , ATPS ,  
EQPT , SELCT ; פונקציה FCHECK חיצונית, ופונקציות AA ו-BB פנימיות ואופציה 1.

4.1 התכנית העיקרית XPRINT

התכנית בנויה מהבלוקים הבאים:

LOAD , SHIFT , SFACT , INTENSITY , SWITCH.

## 4.1.1 LOAD (טעינת הנתונים)

LOADDIM טעינת שלושה גרלים הקובעים את ממרי הזיכרון .

LOADASF טעינת תשעה מקדמים לחישוב מקרמי ההחזרה האטומיים.

LOADLAM טעינת אורך הגל וזוויות המונוברומטור.

LOADCOR טעינת תיקוני הטמפרטורה ותיקוני הריספרסיה.

LOADLATTICE טעינת מספרי-קור לסריג Bravais (NBR , NBR , NSG) , וזווית מינימלית

ומכסימלית (MAXL , NCAST) .

LOADPARAM טעינת פרמטרי הסריג ושם הסריג.

LOADAUTOMPOS טעינת מיקום האטומים .

## 4.1.2 SHIFT

הזזת האטומים לפי המירכז המתאים (לפי הקוד NBR) , קריאה לסכרוטינה BRIT המשלימה

את פרמטרי הסריג. ניתן לקרוא לסכרוטינה ATPS ואז חייבנה העתקות אטומים לפי

החבורה המרחבית (סכרוטינה EQPT) .

## 4.1.3 SFACT

קריאה לסכרוטינה SPACG המחשבת את פרמטרי הסריג Q(I) ; אינדקסיה של המציינים

L(I) , K(I) , H(I) לפי סדר עולה של ווקטורי הסריג ההופכי RSD(I) .

INTENSITY 4.1.4

בלוק זה מחושבים כל הנתונים הדרושים להוצאת האינפורמציה הסופית הדרושה, כלומר העצמות, הזוויות ובדומה, לפי סדר יורר של מירווחי סריג.

בלוק זה כולל את תת-הבלוקים והפעולות הבאות:

- ASF חישוב מקדמי ההחזרה האטומיים עבור כל החזרה לפי המשוואות [1], [2].
- FACTOR חישוב מקדמי המבנה לפי המשוואות [3] עד [10], והמשוואות [12] עד [25].
- MULT קריאה לסברוטינה MULTF המקבצת את מקדמי המבנה בעלי החזרות Bragg זהות ומוציאה את מקדמי המבנה SF ואת מקדם הריבוי P לפי המשוואה [24].
- TETALPF חישוב זוויות Bragg לפי חוק Bragg וחישוב מקדמי לורנץ-פולריזציה לפי המשוואה [31].
- AINT חישוב עצמות AINT ועצמות יחסיות CINT לפי המשוואה [11].

OUTPUT הרפסס טבלה של ההחזרות:  $AMULT_i, PLF_i, SF_i, DT_i, CINT_i, \theta_i, l_i, K_i, i$

SWITCH 4.1.5

הודעה על המשך תהליך החישוב על-ידי שימוש בקוד מתאים, .NCODE

LAT הסברוטינה 4.2

הסברוטינה LAT מכילה את הבלוקים הבאים:

PARAMETERS השלמת פרמטרי הסריג.

RECIPROCAL חישוב פרמטרי הסריג ההופכי.

SPACG הסברוטינה 4.3

הסברוטינה SPACG מכילה את הבלוקים הבאים:

INDEX איטרציות על אינדקסי מילר, לאחר קביעת תחומי הזוויות:

$\theta_{min}$	$\theta_{max}$	התכנית
NCAST	MAXL	MAIN
JKL	IHKL	SPACG

SELECT סילוק החזרות אפס, והפרדת (hkℓ) ממשפחות מישורים שונות בעלות  $d_{hkℓ}$  שווים למבנים קוביים וטרגובליים.  
 SPACE חישוב מרחקים בסריג ההופכי.  
 SORT סידור ההחזרות לפי סדר עולה של RSD(I), וקטורי הסריג ההופכי.

#### 4.4 הסברוטינה MULTF

הסברוטינה MULTF מכילה עניבה חיצונית GROUPING ובלוק פנימי. העניבה החיצונית מקבצת את כל ערכי F של ההחזרות בעלות d זהה (למשפחת {hkℓ} אחת לפחות) ומוציאה ערך ממוצע של SF לפי המשוואה [24] וכן את מספר ההחזרות שתרמו להחזרה זו.

בלוק פנימי בוחר את (hkℓ) מתוך כל המשפחה התורמת להחזרה אחת כך שהביטוי:  
 $Q_{hkℓ} = 3h + 2k + ℓ$  הוא בעל ערך מכסימלי. בדרך זו, למשל, המשפחה {321} בסריג הקובי תהיה מיוצגת על-ידי (321) והמשפחה {2 $\bar{1}$ 1ℓ} ההכסגונוליה תהיה מיוצגת על-ידי (11ℓ).

לעיתים עלול לקרות שמשפחות שונות ייוצגו על-ידי (hkℓ) מסויים, למשל {221} ו-{500} (בעלות אותן d). במקרה זה הייצוג יהיה על-ידי {221} בעל ערך  $Q_{hkℓ}$  הגבוה יותר, ואילו גורם ההכפלה יהיה סכום גורמי ההכפלה.

#### 4.5 הסברוטינה ATPS

הסברוטינה ATPS מבצעת העתקה של כל אטום למקומות האקוויוולנטיים. על-ידי טימוש בפונקציית FCHECK מתבצעת העברת כל האטומים לתא יחידה אחד, ואז היא מייצגת את כל האטומים הנופלים לאותו מיקום באמצעות אטום אחד. תהליך ההעתקה נעשה על-ידי קריאה לסברוטינה EQPT.

#### 4.6 הסברוטינה EQPT

הסברוטינה EQPT נטענת במיוחד לחבורה המרחבית הנדרשת בהרצה ספציפית. בסברוטינה זו מועבר כל אטום לכל המיקומים האקוויוולנטיים. אם התכנית אינה זקוקה להעתקות לפי החבורה, יש לטעון בסברוטינה זו גודל EQPT כלשהו.

5 הפעלת התכנית5.1 מקדמי ההחזרה האטומיים

לכל אטום או יון יש כרטיס, אשר פקודת הקריאה עבורו היא:

```
READ 500, I, NT(I), (AASFC(I,J), J = 1,9)
```

בפורמט: 500 FORMAT (I5, A5, 9F8.6)

I הוא מספר סידורי לאטום או ליון, לפי הסדר המופיע ב-<sup>(6)</sup> International Tables IV. J מסמן את המקדם (coefficient) מחשעת המקדמים לפי המשוואה [1] כאשר:

J	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Coefficient	$a_1$	$b_1$	$a_2$	$b_2$	$a_3$	$b_3$	$a_4$	$b_4$	c

NT הוא כינוי לאטום או ליון (אלפא-נומרי).

את ריזימת ה-I יטגור I בעל ערך 250.

את כרטיסי האטומים והיונים אפשר למקם בכל סדר שהוא כיניהם (כתנאי, כאמור, שה-I האחרון יהיה 250).

בשלב זה ניתנים לכך בסך-הכל 212 כרטיסים מוכנים לחשעת המקדמים. ניתן להכניס את כולם בראשית כרטיסי הנתונים באופן קבוע, ואז מבחינה בלצועית ניתן להתייחס אליהם כאל נתונים קבועים. אפשר גם להסתפק בהכנסת הנתונים רק עבור האטומים הנדרשים בהרצה הספציפית. ראוי לציין שזיון כל קושי לאחסן נתונים אלו באופן קבוע במחשב.

5.2 זווית המונוכרומטור ואורך הגל (LOADLAM)

פקודת הקריאה לזווית המונוכרומטור ולאורך הגל היא:

```
READ 100, ALF, ALAM, NLAM
```

בפורמט: 100 FORMAT (2F10.5, I5)

ALF היא זווית המונוכרומטור ( $\alpha$ ). אם אין מונוכרומטור ניתן להשאיר מקום זה ריק.

ALAM הוא אורך הגל ( $\lambda$ ) של קרן x מונוכרומטית.

NLAM הוא מספר קור לאורך גל (במקום ALAM), ואז אורך הגל ייקרא מתוך רשימת אורכי הגל המקובלים שהוכנסה מראש ב-DATA בתחילת התכנית.

### 5.3 תיקוני דיספרסיה וטמפרטורה (LOADCOR)

תיקוני הדיספרסיה והטמפרטורה מוכנסים לפי האינפורמציה הבאה:  
 בכל כרטיס יש מספר קור לאטום או ליון (IEL).  
 גורם הטמפרטורה הוא B(IEL) (משוואה [14]).  
 מקדמי הדיספרסיה הם:

$$DFP1(IEL) = \Delta f'_1$$

$$DFP2(IEL) = \Delta f''_1$$

פקודת הקריאה היא:

```
READ 510, IEL, B(IEL), DFP1(IEL), DFP2(IEL)
```

510 FORMAT, (I5, SX, 3F10.5) בפורמט:

בסוף רשימת הערכים לאטומים הנדרשים, יבוא כרטיס בו יופיע IEL בעל ערך 250 לסמל את סגירת הרשימה.

אם אין צורך במקדמי תיקון כלשהם, יש להכניס רק את הכרטיס לסימול סגירת הרשימה.

מיותר לומר שללא הכנסת ערכים ל- $B_i$ , ולתקוני הדיספרסיה, יהיו ערכים אלו מאופסים.  
 הערה: חשוב לזכור שגם ללא הכנסת מקדמי תיקון דיספרסיה, חובה להכניס את הכרטיס הסוגר הנ"ל.

### 5.4 סיווג הסריג ותחום זוויות Bragg (NSGIBR)

פקודת הקריאה לסיווג הסריג ותחום זוויות Bragg היא:

```
READ 200, NSG, NBR, IBR, MAXL, NCAST
```

200 FORMAT (5I5) בפורמט:

המשתנים הם מספרי קוד המשמשים לניחוח התכנית והינם:

NSG הוא קוד למערכת הסימטריה של הסריג לפי:



NSG	1	2	3	4	5	6	7
Lattice	tri- clinic	mono- clinic	ortho- rhombic	tetra- gonal	cubic	hexa- gonal	rhombo- hedral

NBR הוא מספר קוד הנותן את מירכוז הגביש לפי:

NBR	1	2	3	4	5	6	7
Bravais lattice	P	A	B	C	F	I	R

בהתאם לקוד NBR יועתקו האטומים מהראשית  $(0,0,c)$  לנקודות הראשיות הנוספות בהתאם למירכוז (ראה פרק 1).

כל אחד מ-14 סריגי Bravais ניתן להגדרה על-ידי שני הקודים NSG ו-NBR, לדוגמה: סריג BCC - קובי I, כלומר  $NBR = 6$ ;  $NSG = 5$ .  
סריג רומבוהדרי אפשר להציג כ-1  $NBR = 7$ ;  $NSG = 7$ ,  
או גם כהכסגונלי R,  $NBR = 7$ ;  $NSG = 6$ .

IBR הוא מספר קוד עבור סילוק החזרות שאינן תורמות בתוך סברוטינה SPACG. בהתאם לקוד זה הסברוטינה SPACG מבצעת אינדקסציה רק על החזרות כדלקמן:

	6	5	4	3	2	1	IBR
לפי מיקום האטומים	$h + k + \ell = 2N$	$h, k, \ell$ כולם זוגיים או אי-זוגיים	$k + \ell = 2N$	$h + \ell = 2N$	$k + \ell = 2N$	$h, k, \ell$	המישור המחזיר

$BR = 7$  מאפשר סילוק החזרות במקרה כלשהו על-ידי כך שבמקום ערכי  $f_i$  כמשוואה [9] יוצב ערך  $IEL(I)$ .

אם כל האטומים זהים יוצרים התאבכות הורסת יתקבל ל-F ערך אפסי בתוך הסברוטינה, ואם כי F זה איננו נכון, הרי גם בערכי  $f_i$  נכונים יתקבל האיפוס. לכן כדאי להוריד את ערכי  $(h, k, \ell)$  התורמים לכך כבר בתוך הסברוטינה SPACG.

MAXL היא הזווית 2θ המכסימלית הדרושה.

NCST היא הזווית 2θ המינימלית הדרושה.

כאשר גורל הזיכרון במחשב מוגבל ניתן להכניס כנתון את גורל הזיכרון הקיים, והתכנית מבצעת באופן אוטומטי חלוקה של חחום זוויות 20 לקטעים, ומחשבת את החזרות בכל קטע באופן שלא תהיה גלישה (overflow) בזיכרון.

### 5.5 שם הרגם ופרמטרי הסריג (NAME-PARAM)

שם הסריג NAME(4) - בפורמט אלפא נומרי עם שדה של ער 20 מקומות.

פרמטרי הסריג נקראים כוקטור PR(6). פקודת הקריאה היא:

READ 400, (NAME(J), (I = 1,4), (PR(1), I = 1,6)

400 FORMAT (A20, 6F10.5)

אם תא היחידה מוגדר על-ידי NSG יש צורך להכניס מספר פרמטרים מינימלי לפי הפירוט בטבלה 2.

טבלה 2 פירוט הפרמטרים הנדרשים לקלט PR(I) (הזוויות  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  במעלות).

System	NSG	Input, P(I)					
		P(1)	P(2)	P(3)	P(4)	P(5)	P(6)
triclinic	1	a	b	c	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$
monoclinic*	2	a	b	c	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$
orthorhombic	3	a	b	c			
tetragonal	4	a	c				
cubic	5	a					
hexagonal	6	a	c				
rhombohedral	7	a	a				

\*בגלל הווריאציות בסריג מונוקליני בעניין בחירת הזווית השונה מ- $90^\circ$ , יינתנו הנתונים כמו בסריג טריקליני.

הפרמטרים הנוספים יושלמו על-ידי הסברטינה SPACG.

5.6 מיקום האטומים (NIA CIA X Y Z)

הנתונים הדרושים לקביעת מיקום האטומים הם:  
NIA מספר קוד לאטום.

CIA משתנה המציין את משקל האטום באתר.

XIA, YIA, ZIA - קואורדינטות האטום או היון.

לסגירת רשימת מיקום האטומים נכנים  $NIA \geq 100$ . פקודת הקריאה היא:

READ 510, NIA, CIA, XIA, YIA, ZIA

510 FORMAT (I5, F5.3, 3F10.5)

אם  $CIA = 0$  (אין כתיון) התכנית תעבור ל-1. CIA =

אם  $NIA = 11111$ , השלמת מיקום האטומים תהיה לפי הסברוטינה ATOMP. במקרה זה

$CIA \leq 1$ .

אם  $NIA = 11112$ , מקדמי המבנה יחושבו על-ידי שימוש בפונקציות:

$AA(H,K,L,X,Y,Z)$ ;  $BB(H,K,L,X,Y,Z)$  אשר לקוחות מתוך ה-International Tables I<sup>(7)</sup>.

ערכי CIA(I) יהיו לפי מספר האטומים באתר I. האטומים במקרה זה לא יעברו למיקומים  
נוספים ( $NBR = 1$ ).

בכל הרצה ניתן להשתמש מספר פעמים בלתי מוגבל ב-ATOMP עבור חבורה מרחבית מסוימת  
אחת, ובפונקציות AA ו-BB עבור חבורה מרחבית מסוימת אחת (לא חייבת להיות זהה לזו  
של ATOMP). ניתן, לכן, להשתמש בחישוב אוטומטי בשתי חבורות מרחביות (אחת לפי  
EQPT והשניה לפי AA ו-BB).

הסיבה לכך היא שסברוטינות ופונקציות אלו מוכנסות לקומפילציה, וזו נעשית פעם אחת  
בכל הרצה.

ניתן לקבץ מספר מכנים גבישיים עבור כל אחת מהחבורות המרחביות הללו.

החישוב לפי הפונקציות AA ו-BB הוא מהיז יותר והוא מומלץ למכנים בעלי יותר מ-30  
אטומים לתא יחידה.

בכל מקרה ש-11112 NIA # יעבור כל אטום לכל המיקומים האקוויוולנטיים לפי המרכזו של סריג Bravais לפי מספר הקוד NBR המתאים. ההעברה נעשית לפי הטבלה 5 (בבלוק SHIFT). הואיל ו-NBR הוא קוד של המרכזו, הרי אם NBR מציינן את מרכזו הסריג, יש צורך לתאר את מיקום האטומים רק עבור הראשית (0,0,0).

טבלה 3 מספר הקוד NBR למרכזים השונים וההעתקות המתאימות.

NBR	מרכז	$(x, y, z)$ transforms to
1	P	$(x, y, z)$
2	A	$(x, y, z); (x, y + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2})$
3	B	$(x, y, z); (x + \frac{1}{2}, y, z + \frac{1}{2})$
4	C	$(x, y, z); (x + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, z)$
5	F	$(x, y, z); (x, y + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}); (x + \frac{1}{2}, y, z + \frac{1}{2}); (x + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, z)$
6	I	$(x, y, z); (x + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2})$
7	R	$(x, y, z); (x + \frac{2}{3}, y + \frac{1}{3}, z + \frac{1}{3}); (x + \frac{1}{3}, y + \frac{2}{3}, z + \frac{1}{3})$

אם  $1 \leq \text{NBR}$  יש צורך לתאר את המיקום של כל האטומים כתא היחידה. למשל, במבנה היהלום מקבלים את המיקומים:

עבור NBR = 1			עבור NBR = 5		
x	y	z	x	y	z
0	0	0	0	0	0
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$
0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$			
$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$			
$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$			
$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{3}{4}$			
$\frac{3}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$			
$\frac{3}{4}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{1}{4}$			

## 5.7 בחירת המשך הביצוע (SWITCH)

הבלוק SWITCH מוסר אינפורמציה על המשך התכנית על-ידי שימוש במספר הקוד NCODE.  
הקלט הוא:

READ 200, NCODE

200 FORMAT(15)

השימוש ב-NCODE הוא לפי טבלה 4.

טבלה 4 המשך הביצוע וכרטיסי הנתונים הנוספים הנדרשים למספרי הקוד NCODE השונים.

NCODE	המשך הביצוע	כרטיסי הנתונים הנדרשים
שלילי	חוזר על החישוב באורך גל חדש ובאותו תחום זוויות Bragg (NEW ALFALAM)	ALF,ALAM (סעיף 5.2) B,DFP * (סעיף 5.3) NCODE (סעיף 5.7)
אפס (כרטיס ריק)	כנ"ל, אך מתאים מחדש את $\theta_{max}$ כך ש- $d_{hkl}$ הקטן ביותר יהיה זהה (עד $180^\circ = 2\theta$ ). (NEW ALFALAM)	ALF,ALAM (סעיף 5.2) B,DFP * (סעיף 5.3) NCODE (סעיף 5.7)
1	סדרת נתונים חדשה	כל הנתונים מסעיפים 5.2 עד 5.7
2	סדרת נתונים לסריג חדש, אך עם אותו אורך גל	כל הנתונים מסעיפים 5.4 עד 5.7
3	חזרה על החישוב, בשינוי פרמטרי סריג בלבד	NAME ,PR(I) (סעיף 5.5) NCODE (סעיף 5.7)
4	חזרה על החישוב, תוך שינוי פרמטר הסריג ושינוי מיקום האטומים	NAME ,PR(I) (סעיף 5.5) NI CIA X Y Z (סעיף 5.6) NCODE (סעיף 5.7)
5	חזרה על החישוב עם אותו סריג אך מיקום אטומים שונה	NIA CIA X Y Z (סעיף 5.6) NCODE (סעיף 5.7)
6	STOP	END OF FILE
7	חזרה על החישוב בתחום $2\theta_{min}$ עד $2\theta_{max}$ חדש	NSG ,NBR ,MAXL ,NCAST (סעיף 5.4) NCODE (סעיף 5.7)

\*אם אין צורך בתיקוני ריספרסיה או טמפרטורה, יש להכניס כרטיס מסיים כאמור

בסעיף 5.3.

5.8 טעינת הסברוטינה EQPT

הסברוטינה EQPT מוכנסת, אם יש צורך, לפי החבורה המרחבית הרצויה עבור הרצה מסוימת. אפשר להשתמש בה לחישובים בשרשרת במשך הוויצה, בעל פעם שברטיס הנחונים האחרון של המיקומים האטומיים מציין מספר קוד 11111 = NIA.

מכנה הסברוטינה הוא כדלקמן:

```

SUBROUTINE EQPT (X, Y, Z, EX, EY, EZ, NSA)
C SPACE GROUP NNKN
REAL EX(1), EY(1), EZ(1)
NSA = 6
EX(1) = X $ EY(1) = Y $ EZ(1) = Z
  :
  :
EX(6) = -X $ EY(6) = Y + 0.5 $ EZ(6) = -Z
RETURN
END

```

השמה ל-EX(I) נעשית לפי פעולות החבורה המרחבית. אם NBR מתאר את המירכוז אפשר להסתפק בפעולות סביב הראשית (0,0,0). אם אין צורך להשתמש בחבורה מרחבית כלשהי, יש להכניס סברוטינה EQPT שתהיה דמה (dummy).

5.9 טעינת הפונקציות AA ו-BB

פונקציות אלו יוכנסו כאשר יש צורך לחסוך בזמן הרצה, למכנים המכילים מעל 50 אטומים כתא היחידה. במקרה זה החישוב נעשה לפי הפונקציה המיוחדת לחבורה.

הפונקציה מוכנסת לאחר משפט ה-DATA באופן הבא:

AA(H,K,L,X,Y,Z) = .....

BB(H,K,L,X,Y,Z) = .....

התכנית מחשבת את מקדמי המכנה לפי פונקציה זו בכל פעם שהברטיס האחרון של מיקומי האטומים מתחיל ב-11112.

```

NCOEF = -1
MOROCHE 2TETA= 0.00000
LAMBDA = 2.29000
ION TEMP.FAC.R DISPERSION CORRECTIONS
N = 122
CU GD ICS CL TYPE1 3.5000 3.5000 7.5000 90.0000 90.0000 90.0000

I0**
CU 62 -0.000000 -0.000000 -0.00000 X 1.00
GD 139 0.500000 0.500000 0.50000 X 1.00

H K L PHK1 I/I1 2TETA FCAL (PF MULT
1 0 0 3.5000 18.80 78.19 30.84 1A+00 6
1 1 0 2.475 100.00 55.12 75.91 A+90 12
1 1 1 2.021 5.30 69.03 27.62 4+2A 8
2 0 0 1.750 17.71 81.73 67.29 7+1E 6
2 1 0 1.565 8.94 94.03 25.58 2+7E 24
2 1 1 1.429 52.10 106.52 61.08 2+81 24
2 2 0 1.277 36.50 135.43 56.35 4+64 12
3 0 0 1.117 157.88 157.88 23.09 10+0A 6
2 2 1 1.167 33.27 157.88 23.09 10+0A 24

```

Referencesסימוכין

1. I. F. Ferguson and J. E. Kirwan, "A program for the calculation of x-ray reflection intensities", *Computer Phys. Commun.* 5, 328-348 (1973).
2. I. F. Ferguson, "A program for the calculation of x-ray reflection intensities, part 2", *Computer Phys. Commun.* 10, 42-55 (1975).
3. C. M. Clark D. K. Smith, and G. G. Johnson, *A Fortran IV Program for Calculating X-Ray Powder Diffraction Patterns*, Version 5, Department of Geosciences, Pennsylvania State University, University Park, Pennsylvania, 1973.
4. K. Yvon, W. Jeitschko, and E. Parthé, "LAZY PULVERIX, a computer program for calculating x-ray and neutron diffraction power patterns", *J. Appl. Cryst.* 10, 73-74 (1977).
5. B. E. Warren, *X-Ray Diffraction*, Addison-Wesley Publishing Company, Reading, Massachusetts, 1969.
6. *International Tables for X-Ray Crystallography*, Vol. IV, J. A. Ibers and W. C. Hamilton, Editors, The Kynoch Press, Birmingham, 1974.
7. *International Tables for X-Ray Crystallography*, Vol. I, N. F. M. Henry and K. Lonsdale, Editors, The Kynoch Press, Birmingham, 1952.



