

CALCULO CRISTALOGRAFICO Prog. 17
PROGRAMAS PARA COMPUTADORA ELECTRONICA BENDIX, G-20
FORTRAN II

Francisco José FABREGAT GUINCHARD — Ricardo ESQUIVEL ESPARZA

FORMULA QUIMICA DE UNA ESPECIE MINERALOGICA.

Los datos del análisis de una especie mineralógica se suelen dar:

a/en porcentajes de sus óxidos,

b/en porcentajes de sus iones.

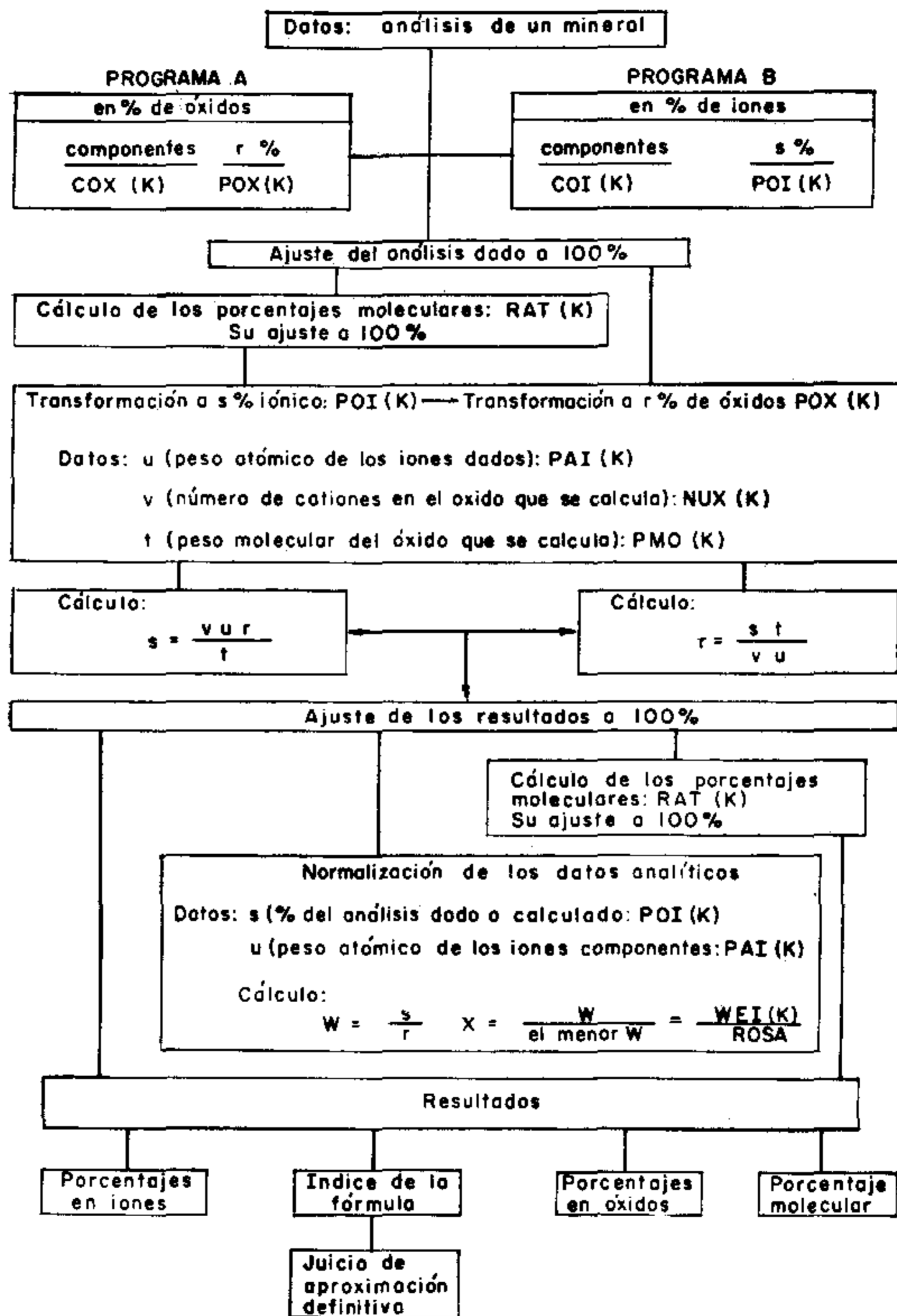
El programa ajusta a 100% los datos del análisis dado, calcula sus porcentajes en iones en el primer caso, o el de sus óxidos en el segundo; sus porcentajes moleculares correspondientes, ajustándolos todos a 100, y los índices de la fórmula química definitiva. Por ello se le considera en dos partes, según la naturaleza de los datos analíticos recibidos del laboratorio.

Este programa trata el problema de los análisis minerales en general: para el caso especial de sulfuros de Fe, Cf. progr. 7.

Es de hacer notar que los elementos que se dan en el análisis como "vestigios" se indican con un porcentaje de 0.05% en el programa. En él se considera un número máximo (14) de datos analíticos: su número concreto se escribirá en cada caso como M (línea octava).

También cabe advertir que para el cálculo de la fórmula, los términos de la columna WEII se dividen por el correspondiente del menor elemento significativo (ROSA), cuyo porcentaje analítico se considera a este efecto mayor que 0.05 de esa columna (> 5), teniendo a los menores que él como elementos isomórficamente sustituíbles con los anteriores. El programa proporciona estas indicaciones junto con los datos del problema, antes de dar las columnas de resultados, para favorecer el juicio definitivo del investigador.

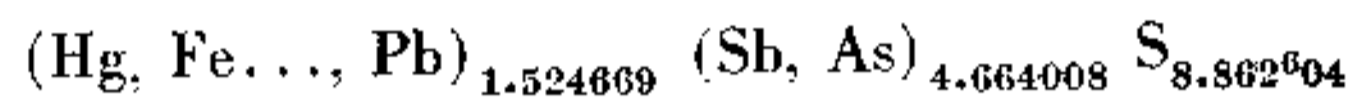
PROGRAMA PARA ESTABLECER LA FORMULA DE UN MINERAL



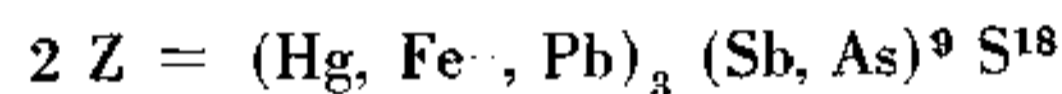
Así, por ejemplo: en el análisis de livingstonita, dado en porcentajes iónicos,

	WEI	(K)	ROSA
WEI1 = 0.875838	S		8.863
0.421546	Sb		4.266
0.098824	Hg		1.000
0.004007	Fe		0.041
0.003937	As		0.040
0.001178	Pb		0.012
ROSA = 0.098824			
	Hg _{1.000}	Sb _{4.266}	S _{8.863}

con algo más de S que la fórmula actualmente admitida de HgSb₄S₈. Si se le tienen en cuenta los posibles elementos isomórficamente sustituibles.



pudiendo tomar dos moléculas para aproximar las cantidades a números enteros (lo cual acontece realmente en el contenido de su celda elemental),



ADICIONES: En el caso de querer el programa cíclico (cálculo simultáneo de varios análisis de un mismo mineral), antes del CALL EXIT del programa,

```

READ 91, NUEV
91  FORMAT (I1)
    IF(1 — NUEV) 92,93,92
92  CALL EXIT

```

poniendo 93 a

```

93  READ 2, (POI (K), K = 1,14)

```

ya existente.

Datos: Después de los datos del primer análisis:

- una tarjeta con el número 1
- otras con los datos del nuevo análisis
- otra tarjeta con el número 1
- otras con los datos del nuevo análisis
- etc
- la penúltima en blanco
- luego END OF JOB

De modo análogo, para el cálculo simultáneo de varios minerales diferentes:

el 93 READ... será el 93 READ 4, ARI, ARU, ARG, ARO etc.

```

LABORATORIO
CRISTALOGRAFIA FABREGAT

E   FORTRAN
H   NAME FABREG
H   EQUIP = CARDRE, PRINTE;
C   ANALISIS DE MINERALES = CALCULO DE LA FORMULA
C   A.—ANALISIS A PARTIR DE PORCENTAJES EN OXIDOS.
    DIMENSIONES PMO(14), COX(42), NUX(14), PAI(14), COI(42), POX
1   POI(14), AJU(14), AJI(14), AJO(14), RAT(14), WEI(14)
C   ESTE NUMERO M = 14 SEGUN EL DE COMPONENTES ANALITICAS
    M = 11
    READ 4, ARI, ARU, ARG, ARO
4   FORMAT(3A4,A3)
    PRINT 4,ARI,ARU,ARG,ARO
    READ 2, (PMO(K), K = 1,14)
2   FORMAT(7F10.3)
    PRINT 2,(PMO(K), K = 1,14)
    READ 3,(COX(K), K = 1,42)
    PRINT 3,(COX(K), K = 1,42)
3   FORMAT(7(2A4,A2))
    READ 6,(NUX(K), K = 1,14)
6   FORMAT (7I10)
    PRINT 6,(NUX(K), K = 1,14)
    READ 2, (PAI(K), K = 1,14)
    PRINT 2,(PAI(K), K = 1,14)
    READ 3,(COI(K), K = 1,42)
    PRINT 3,(COI(K), K = 1,42)
93  READ 2,(POX(K), K = 1,14)
    PRINT 2,(POX(K), K = 1,14)
    RAT = 0
    SUM1 = 0
    SUM2 = 0
    SUM3 = 0
    DO 94 K = 1,14
94  WEI(K) = 0
    PRINT 7
7   FORMAT(X,53H LOS DATOS DEL ANALISIS SON EN PORCENTAJES
1   DE OXIDOS./)

```

CALCULO CRISTALOGRAFICO Prog. 17

```
C    AJUSTE DE POX A 100.  
      SUMA=0.0  
      DO 25 K = 1,M  
25   SUMA = SUMA + POX(K)  
      SUMA = 100.0/SUMA  
      ADD = 0.0  
      DO 30 K = 1,M  
      AJU(K) = SUMA * POX(K)  
C    CALCULO DE PORCENTAJES MOLECULARES  
      RAT(K) = AJU(K)/PMO(K)  
30   ADD = ADD + RAT(K)  
      ADD = 100.0/ADD  
      DO 35 K = 1,M  
35   RAT(K) = ADD * RAI(K)  
C    CONVERSION DE PORCENTAJES OXIDOS EN PORCENTAJES IONICOS  
      DO 40 K = 1,M  
      POI(K) = NUX(K) * PAI(K) * POX(K) / PMO(K)  
40   CONTINUE  
      SIM = 0.0  
      DO 45 K = 1,M  
45   SIM = SIM + POI(K)  
      SIM = 100.0/SIM  
      DO 50 K = 1,M  
50   AJO(K) = SIM * POI(K)  
C    NORMALIZACION  
      DO 55 K = 1,M  
55   WEI(K) = AJO(K) / PAI(K)  
      PRINT 56, (WEI(K), K = 1,M)  
56   FORMAT (6HWEI1 = ,F10.6)  
      ROSA = 0.0  
      ROSA = WEI(1)  
      DO 60 K = 2,M  
      IF (ROSA - WEI(K) 60,60,65  
65   IF (ROSA - 0.05) 60,67,67  
67   RESO = ROSA  
      ROSA = WEI(K)  
      IF (ROSA - 0.05) 63,60,60  
63   ROSA = RESO  
60   CONTINUE  
      DO 70 K = 1,M  
      IF (ROSA) 75,70,75  
75   WEI(K) = WEI(K) / ROSA
```

```
70 CONTINUE
   PRINT 68,ROSA
68  FORMAT (6HROSA=,F10.6)
   PRINT 4,ARI,ARU,ARG,ARO
   PRINT 72
72  FORMAT (7X,77HCOMP, OXIDOS PORC. OX PORC. MOLEC. COMP.
1 IONES PORC. IONES FORMULA.)
   JL=1
   JK=2
   JM=3
   DO 90 K = 1,M
   PRINT 78,COX(JL),COX(JK),COX(JM),AJU(K),RAT(K),COI(JL).
1 COI(JK),COI(JM),AJO(K),WEI(K)
78  FORMAT (9X,3A4,F7.3,4XF9.3,9X2A4,A3,F7.3,5XF7.3)
   JL=JL+3
   JK=JK+3
   JM=JM+3
90  CONTINUE
   DO 80 J = 1,M
   SUM1=AJU(J)+SUM1
   SUM2=SUM2+RAT(J)
80  SUM3=SUM3+AJO(J)
   PRINT 85, SUM1,SUM2, SUM3
85  FORMAT(2X19HTOTALES,F7.3,4X,F9.3,20XF7.3)
   PRINT 100
100 FORMAT(1H1)
   READ 91,NUEV
91  FORMAT(I1)
   IF(1-NUEV) 92,93,92
92  CALL EXIT
   END
```

VANADINITA (DATOS):

35.457	141.950	181.900	229.820	223.210	81.380	56.080
79.540	159.700	18.016	16.000	0.000	0.000	0.000
CL	P2O5	V2O5	AS2O5	PBO	ZNO	CAO
CUO	FE2O3	H2O	O=CL			
1	2	2	2	1	1	1
1	2	2	1	0	0	0
35.457	30.975	50.950	74.910	207.210	65.380	40.080
63.540	55.850	1.008	16.000	0.000	0.000	0.000
CL	P	V	AS	PB	ZN	CA
CU	FE	H	O			
2.230	0.950	17.410	0.000	76.700	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

LOS DATOS DEL ANALISIS SON EN PORCENTAJES DE OXIDOS.

WEI1=	0.075231
WEI1=	0.016011
WEI1=	0.228977
WEI1=	0.000000
WEI1=	0.411033
WEI1=	0.000000
WEI1=	0.000000
WEI1=	0.000000
WEI1=	0.000000
WEI1=	0.000000
WEI1=	0.000000
WEI1=	0.000000
ROSA=	0.075231

VANADINITA (RESULTADOS):

Comp. Oxidos	Porc. Oxidos	Porc. Moléc.	Comp. iones	Porc. iones	Fórmula
CL	2.292	12.358	CL	2.667	1.000
P2O5	0.976	1.315	P	0.496	0.213
V2O5	17.895	18.807	V	11.666	3.044
AS2O5	0.000	0.000	AS	0.000	0.000
PBO	78.836	67.520	PB	85.170	5.464
ZNO	0.000	0.000	ZN	0.000	0.000
CAO	0.000	0.000	CA	0.000	0.000
CUO	0.000	0.000	CU	0.000	0.000
FE2O3	0.000	0.000	FE	0.000	0.000
H2O	0.000	0.000	H	0.000	0.000
O=CL	0.000	0.000	O	0.000	0.000
TOTALES	100.000	100.000		100.000	