

DETERMINACION DE LOS ELEMENTOS DE SIMETRIA DE POSICION DE UN GRUPO ESPACIAL, A PARTIR DE SUS POSICIONES GENERALES.

Francisco J. Fabregat Guinchard
Investigador Titular en el Instituto de Geología,
Ciudad Universitaria, MEXICO 20, D.F.

RESUMEN

Se facilita el cálculo de la naturaleza y posición de los elementos de simetría de un grupo espacial a partir de sus posiciones generales, mediante un programa de cálculo electrónico.

ZUSAMMENFASSUNG

Die Berechnung der Natur und Stellung der Symmetrieelemente einer Raumgruppe auf Grund ihrer allgemeinen Stellungen wird durch ein Computerprogramm erleichtert.

INTRODUCCION

En un artículo de Acta Cryst. 23.3 (1967) 349 exponen H. Wondratschek y J. Neubuser un procedimiento para la determinación de los elementos de simetría de un grupo espacial, a partir de sus posiciones generales citadas en las International Tables for X-ray Crystallography, vol. 1 (1952), que fue vulgarizado en el Boletín de la Soc. Geológica Mexicana 31.1 (1968) 1, a cuyas publicaciones se hace referencia como parte introductora del programa de cálculo electrónico que aquí se presenta.

La determinación de estos elementos tiene importancia para el estudio de su representación geométrica, y muy en especial tratándose de los grupos del sistema cúbico, cuyo esquema topológico se omite en las citadas Tablas. La interpretación del problema mediante un programa de computación electrónica es también importante por la facilidad y seguridad que le da, permitiendo un cálculo fácil de numerosos elementos de simetría.

EL PROGRAMA

Como tarjetas de datos del programa se requieren:

- I: Indicación del grupo espacial de que se trata, por su número de orden y símbolos de SCHOENFLIESS y de HERMANN, seguido del número de sus posiciones generales.
- II: Un par de tarjetas por cada punto en posición general:
 1. Indicación de las coordenadas de la posición general,
 2. Coeficientes del punto correspondiente.

Las posiciones generales X, Y, Z se dan en esta forma:

$$\begin{aligned}X &= A_1x + A_2y + A_3z + R_1 \\Y &= A_4x + A_5y + A_6z + R_2 \\Z &= A_7x + A_8y + A_9z + R_3\end{aligned}$$

en donde los coeficientes A₁, A₂,... pueden ser 1 ó 0 y los R₁, R₂, R₃ son números racionales, que en las tarjetas de datos se escriben esos coeficientes con su signo, y los R₁,... se convierten en su fracción decimal correspondiente. Se citan algunos ejemplos:

Grupo espacial 178, Int. Tabl. 1 (1952) de símbolo D₆², P6₁22, tiene las 12 siguientes posiciones generales:

1.	X,	Y,	Z
2.	-Y,	X-Y,	½ + Z
3.	Y-X,	-X,	½ + Z
4.	-X,	-Y,	½ + Z
5.	Y	Y-X,	½ + Z
6.	X-Y	X,	½ + Z
7.	Y,	X,	½ - Z
8.	-X,	Y-X,	½ - Z
9.	X-Y,	-Y,	-Z
10.	-Y,	-X,	½ - Z
11.	X,	X-Y,	½ - Z
12.	Y-X,	Y,	½ - Z

de los que las tarjetas de datos para el programa, se redactarán como sigue:

Posición general X, Y, Z

$$\begin{aligned} X &= x + 0 + 0 + 0 \\ Y &= 0 + y + 0 + 0 \\ Z &= 0 + 0 + z + 0 \end{aligned}$$

Y la tarjeta escribirá:

<u>1. 0. 0. 0. 0.</u>	<u>1. 0. 0.</u>	<u>1. 0. 0.</u>
X	Y	Z

Posición general y-x, z, ½ -z

$$\begin{aligned} X &= -x + y + 0 + 0 \\ Y &= 0 + 0 + z + 0 \\ Z &= 0 + 0 - z + \frac{1}{2} \end{aligned}$$

en la tarjeta:

-1. 1. 0. 0. 0. 0. 1. 0. 0. 0. -1. 0.333

Posición general 2+y,3-x, ½ +z

$$\begin{aligned} X &= 0 + 1 + 0 + 2 \\ Y &= 1 + 0 + 0 + 3 \\ Z &= 0 + 0 + 1 + \frac{1}{2} \end{aligned}$$

0. 1. 0. 2 -1. 0. 0. 3. 0. 0. 1. 0.500

COMPILEADOR FORTRAN.

Los demás datos sobre el método se omiten aquí por razón de brevedad y para no repetir lo ya publicado, rogando la consulta de las referencias citadas.

Observación: en el artículo de Fabregat (Op. cit.) hay que corregir algunos errores de imprenta que se deslizaron en la Tabla I, p. 5. Para facilitar su búsqueda, se dan aquí las coordenadas de su posición en milímetros, referidas como origen al extremo izquierdo de la línea horizontal inferior:

<i>página</i>	<i>coord. mm</i>	<i>dice</i>	<i>debe decir</i>
5	(83,9)	=	.
"	(85,21)	=	.
"	(85,76)	I	i
7	(71,29)	a_{21}	a_{21}^2
"	(102,29)	a_{12}	a_{12}^2
"	(106,67)	r	r_2
"	(95,118)	a_{32} r_3	$a_{32} r_3$, r_3

Interpretación de resultados. Las posiciones generales estudiadas, quedan con numeración correlativa que se refiere al orden en que se hayan leído. Después aparece la indicación del elemento de simetría de orientación correspondiente, seguido de la indicación del tipo de determinante (A).

A continuación se dan las constantes del operador de simetría:

- a) Operador puntual: indicación del eje o plano de simetría de orientación correspondiente. En los casos de cumplir con ciertas especificaciones ya previstas en el programa, se halla señalado si ese fuese además un elemento de simetría de posición. La decisión puede ayudarse examinando el vector correspondiente, que no debería ser cero.
 - b) Dirección: Dirección cristalográfica del eje o de la normal al plano de simetría, en caso de ser uno u otro. Esta viene expresada por sus coordenadas.

Ejemplo: $[1.00 \text{ A} + 2.00 \text{ B} + 1.00 \text{ C}]$ [121]
 $[3.00 \text{ B} + 1.00 \text{ C}]$ [031]
 $[2.00 \text{ A} + 1.00 \text{ C}]$ [201]

- c) Vector: Indica la componente de translación, que se aplica a la componente helicoidal en caso de ejes, o a la componente de translación tratándose de planos de deslizamiento.

Ejemplo: $[0.00 \text{ A} + 0.00 \text{ B}] \circ$ el elemento es de simetría de orientación.

[1.00 A + 1.00 B] A+B, etc.

Aunque la computadora de todos los coeficientes con punto flotante, se leerán como enteros.

- d) Coordenadas: de un punto del elemento de simetría, que se expresa por sus coordenadas. Estas son tres números con punto flotante, que habría que reducir a fracción ordinaria. Así:

Ejemplo	(0.00, 0.00, 0.33)	- (0,0,%)
	(0.00, 0.00, 0.25)	- (0,0,%)
	(0.00, 0.00, 0.0833)	- (0,0,%)

Para facilitar esta conversión de fracciones decimales en ordinarias, se puede consultar la Tabla auxiliar adjunta. (CF. ANEXO)

BIBLIOGRAFIA

- THE INTERNATIONAL UNION OF CRYSTALLOGRAPHY. International Tables for X - Ray Crystallography. Kynoch Press, Birmingham, 1 (1952).
WONDRATCHEK, H. y NEUBÜSER, J. Determination of the symmetry elements in a space group from the "General Positions" listed in International Tables for X - Ray Crystallography. Vol. I, Acta Cryst. 23.3 (1967) p. 349-352.
FABREGAT - GUINCHARD, F.J. Los elementos de simetria de un grupo espacial. Soc. Geol. Mex., Bol. 31.1 (1968) p. 1 - 10.

C CALCULO CRYSTALOGRAFICO - FRGR. 142
 C FORTRAN IV - BCL - BURROUGHS 7600
 C
 C LOS ELEMENTOS DE SIMETRIA DE UN GRUPO ESPACIAL: METODO DE WONDratschek Y NEUBU
 C ESER
 C
 C SE TRATA DE DETERMINAR LOS ELEMENTOS DE SIMETRIA DE UN GRUPO ESPACIAL A PARTIR
 C DE LAS POSICIONES GENERALES QUE COMPORTA.
 C
 C TARJETAS DE DATOS
 C
 C 1.- CON LAS INDICACIONES DEL ORDINAL IM DEL GRUPO ESPACIAL DE QUE SE TRATA
 C , SEGUN LAS TABL. TABLES FOR X-RAY CRYSTALLOGRAPHY, VOL. I (1952)
 C DEL NUMERO N DE PUNTOS QUE TENGA EN POSICION GENERAL. ESTE VIENEN AL
 C EL NUMERO DE TARJETAS 2 QUE SE COLOQUEN, FORMATO (2I3)
 C
 C TARJETAS 2 Y SS.- CADA TARJETA CON LOS COEFICIENTES DE UN PUNTO EN POSICION
 C N GENERAL, EXPRESADOS EN ESTA FORMA.
 C X = A1 X' + A2 Y' + A3 Z' + R1
 C Y = A4 X' + A5 Y' + A6 Z' + R2
 C Z = A7 X' + A8 Y' + A9 Z' + R3
 C TANTAS TARJETAS N CUANTOS SEAN LOS PUNTOS EN POSICION GENERAL. FORM.(3.
 C 4F6.3,2X)) DEL GRUPO,
 C *****
 C

DIMENSION A(12,200),B(10,10)
 READ 155,IM,N

155 FORMAT(2I3)
 PRINT 88888

88888 FORMAT (' UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO',,10X,'INSTITUTO
 * DE GEOLOGIA',,14X,'* * * * *',,6X,'LABORATORIO DE CRYSTALOG
 * RAFA',,14X,'* * * * *',,10X)
 PRINT 49
 49 FORMAT(11X,'ELEMENTO DE SIMETRIA ESPACIAL:',,20X,'DIREC.- DIRECC
 *ION DEL EJE O DE LA NORMAL AL PLANO DE SIMETRIA ',,20X,'VECT.- CO
 *MPONENTE DE TRASLACION (VECTOR HELICOIDAL O TRASLACION DEL DESLIZA
 *MIENTO),,,20X,'COOR.- COORDENADAS DE UN PUNTO DEL ELEMENTO DE SI
 *METRIA.',,10X)
 PRINT 51,IM
 51 FORMAT(10X,'ELEMENTOS DE SIMETRIA DEL GRUPO ESPACIAL NO. ',,13,/,/
 DO 3 M=1,N

```

READ1, A(J,M), J=1,3), A(10,M), (A(J,M), J=4,6), A(11,M), (A(J,M), J=7,9)
*, A(12,M)
1 FORMAT (3(4F6,3,2X))
DIA = A(1,M)+A(5,M)+A(9,M)
DIT=A(1,M)*A(5,M)*A(9,M)+A(4,M)*A(8,M)*A(3,M)+A(2,M)*A(6,M)*A(7,M)
DAT=A(7,M)*A(5,M)*A(3,M)+A(4,M)*A(2,M)*A(9,M)+A(8,M)*A(6,M)*A(1,M)
DET=DIT-DAT
A1=A(1,M)
A2=A(2,M)
A3=A(3,M)
A4=A(4,M)
A5=A(5,M)
A6=A(6,M)
A7=A(7,M)
A8=A(8,M)
A9=A(9,M)
R1=A(10,M)
R2=A(11,M)
R3=A(12,M)
C=A(10,M)/2.
D=A(11,M)/2.
E=A(12,M)/2.
C ELEMENTOS PUNTUALES
PRINT 12,M
12 FORMAT(1X,'POSICION GENERAL NO. ',I2,' EL ELEMENTO DE SIMETRIA DE
*ORIENTACION EN EL PUNTO CONSIDERADO ES UN ')
F2=-1,
IF(DET.EQ.1,) GO TO 4
IF(DET.EQ.F2) GO TO 6
PRINT 5
5 FORMAT(10X,'ERROR EN EL DETERMINANTE DE LA MATRIZ')
GO TO 3
4 IDIA=DIA+2,
GO TO (7,8,9,10,11),IDIA
7 PRINT 13
JF=2
13 FORMAT(15X,'EJE DE ORDEN 2',/)
GO TO 28
8 PRINT 14
JF=3
14 FORMAT(15X,'EJE DE ORDEN 3',/)
GO TO 28
9 PRINT 15
JF=4
15 FORMAT(15X,'EJE DE ORDEN 4',/)
GO TO 28
10 PRINT 16
JF=6
16 FORMAT(15X,'EJE DE ORDEN 6',/)
GO TO 28
11 PRINT 17
JF=1
17 FORMAT(15X,'CENTRO DE ASIMETRIA, 1',/)
GO TO 28
6 IDIA=DIA+4,
GO TO (18,19,20,21,22),IDIA
18 PRINT 23
JF=-1
23 FORMAT(15X,'CENTRO DE SIMETRIA -1',/)
GO TO 28

```

19 PRINT 24
JF=-6
24 FORMAT(15X,'EJE DE REFLEXION -6',/)
GO TO 28
20 PRINT 25
JF=-4
25 FORMAT(15X,'EJE DE REFLEXION DE ORDEN -4',/)
GO TO 28
21 PRINT 26
JF=-3
26 FORMAT(15X,'EJE DE REFLEXION DE ORDEN -3',/)
GO TO 28
22 PRINT 27
JF=-2
27 FORMAT(10X,'PLANO M DE SIMETRIA,',/)

C TIPO DE MATRIZ
28 CONTINUE
DATA (B(K,1),K=1,9) / 1.,0.,0.,0.,1.,0.,0.,0.,1./
DATA (B(K,2),K=1,9) / 1.,0.,0.,0.,0.,1.,0.,1.,0./
DATA (B(K,3),K=1,9) / 0.,0.,1.,0.,0.,1.,0.,1.,0./
DATA (B(K,4),K=1,9) / 0.,1.,0.,1.,0.,0.,0.,0.,1./
DATA (B(K,5),K=1,9) / 0.,0.,1.,1.,0.,0.,0.,1.,0./
DATA (B(K,6),K=1,9) / 0.,1.,0.,0.,0.,1.,0.,0.,0./
DATA (B(K,7),K=1,9) / 0.,1.,0.,1.,1.,0.,0.,0.,1./
DATA (B(K,8),K=1,9) / 1.,0.,0.,1.,1.,0.,0.,0.,1./
DATA (B(K,9),K=1,9) / 1.,1.,0.,0.,1.,0.,0.,0.,1./
DATA (B(K,10),K=1,9) / 1.,1.,0.,1.,0.,0.,0.,0.,1./
MAT=0.
ERN=0.
DO 33 L=1,10
DO 30 K=1,9
VN=B(K,L)
WN=ABS(A(K,M))
IF(VN,EQ,WN) GO TO 30
ERN=1.
30 CONTINUE
IF(ERN,EQ,0,) GO TO 31
ERN=0.
GO TO 33
31 MAT=L
PRINT 32,MAT
32 FORMAT(10X,' EL DETERMINANTE INDICADOR PUEDE SER EL NO. ',I2,/)
33 CONTINUE
PRINT 50
50 FORMAT(11X,'OPERADOR PUNTUAL', 9X,'DIRECCION',15X,'VECTOR',25X,'CO
*ORDENADAS',/)

C TABLA PARA DETERMINAR EL ELEMENTO DE SIMETRIA DE POSICION
JFE=JF+7
GO TO (34,35,36,37,38,39,40,40,40,40),MAT
IF(MAT.NE.0) GO TO 41
PRINT 42
42 FORMAT (10X,'ERROR: NO HAY DESIGNACION DE OPERADOR',/)
GO TO 3
41 GO TO (34,35,36,37,38,39,40,40,40,40),MAT

C APARTADO I
34 GO TO (3,3,3,3,44,45,3,46,47),JFE
46 PRINT 48,JF,R1,R2,R3
GO TO 3
45 PRINT 43,JF,C,D,E
GO TO 3

```

47 F2=-1.
  IF(A1.EQ.1..AND.A5.EQ.F2.AND.A9.EQ.F2) GO TO 52
  IF(A5.EQ.1..AND.A1.EQ.F2.AND.A9.EQ.F2) GO TO 55
  IF(A9.EQ.1..AND.A1.EQ.F2.AND.A5.EQ.F2) GO TO 56
  GO TO 3
52 PRINT 53,JF,R1,C,D,E
  GO TO 3
55 PRINT 54,JF,R2,C,D,E
  GO TO 3
56 PRINT 57,JF,R3,C,D,E
  GO TO 3
44 E1= (1.+A1) * R1/2
  E2= (1.+A5) * R2/2.
  E3= (1.+A9) * R3/2.
  F1=-1,
  IF (A1.EQ.F1.AND.A5.EQ.1..AND.A9.EQ.1..) GO TO 58
  IF (A5.EQ.F1.AND.A1.EQ.1..AND.A9.EQ.1..) GO TO 59
  IF (A9.EQ.F1.AND.A1.EQ.1..AND.A5.EQ.1..) GO TO 60
  GO TO 3
58 PRINT 61,JF,E1,E2,E3,C,D,E
  GO TO 3
59 PRINT 62,JF,E1,E2,E3,C,D,E
  GO TO 3
60 PRINT 63,JF,E1,E2,E3,C,D,E
  GO TO 3
C APARTADO II
35 E4=(R2+A6*R3)/2.
  E5=(R3-A6*R2)/2.
  E7=(A8*R2+R3)/2.
  E52=E4*A6
  E53=R1/2.
  E6=(A6*R1)/2.
  E8=4,* A8*R1
  E54=4,*A3*R2
  E55=4,*A4*R3
  IE56=E8-1.
  IE57=E8-2.
  IE58= E8-3.
  IE59= E54-1.
  IE60= E54-2.
  IE61= E54-3.
  IE62= E55-1.
  IE71= E55-2.
  IE72= E55-3,
  GO TO (3,3,64,3,65,3,3,3,66,3,67),JFE
66 PRINT 68,JF,A6,E4,E52,E53,E5
  GO TO 3
65 PRINT 69,JF,A6,R1,E4,E52,E5
  GO TO 3
67 JM1= MOD (IE56,4)
  JM2= MOD (IE57,4)
  JM3= MOD (IE58,4)
  IF(JM1.EQ.0) GO TO 100
  IF (JM2.EQ.0) GO TO 101
  IF (JM3.EQ.0) GO TO 102
  PRINT 70,JF,R1,E4,E7
  GO TO 3
100 PRINT 103,R1,E4,E7
  GO TO 3
101 PRINT 104,R1,E4,E7

```

```

      GO TO 3
102 PRINT 105,R1,E4,E7
      GO TO 3
64 PRINT 73,JF,E53,E4,E7
      GO TO 3
36 E9=(A7*R1+R3)/2,
E10=(R1-A7*R3)/2,
E66=(A3*R3+R1)/2,
E64=R2/2,
E11=(A6*R3+R2)/2,
E63=E9*A7
      GO TO (3,3,74,3,75,3,3,3,76,3,77),JFE
76 PRINT 78,JF,A7,E63,E9,E10,E64
      GO TO 3
75 PRINT 79,JF,A7,E63,R2,E9,E10
      GO TO 3
77 JN1=MOD(IE59,4)
JN2=MOD(IE60,4)
JN3=MOD(IE61,4)
IF(JN1.EQ.0) GO TO 106
IF(JN2.EQ.0) GO TO 107
IF(JN3.EQ.0) GO TO 108
PRINT 109,JF,R2,E66,E9
      GO TO 3
106 PRINT 110,R2,E66,E9
      GO TO 3
107 PRINT 111,R2,E66,E9
      GO TO 3
108 PRINT 112,R2,E66,E9
      GO TO 3
74 PRINT 113,JF,E66,E64,E9
      GO TO 3
37 E67=(R1+A2*R2)/2,
E68=(R2-A2*R1)/2,
E69=(A4*R1+R2)/2,
E70= E67*A2
E73= R3/2,
      GO TO (3,3,84,3,85,3,3,3,86,3,87),JFE
86 PRINT 114,JF,A2,E67,E70,E68,E73
      GO TO 3
85 PRINT 115,JF,A2,E67,E70,R3,E68
      GO TO 3
87 JQ1= MOD(IE62,4)
JQ2= MOD(IE71,4)
JQ3= MOD(IE72,4)
IF(JQ1.EQ.0) GO TO 119
IF(JQ2.EQ.0) GO TO 116
IF(JQ3.EQ.0) GO TO 117
PRINT 118,JF,R3,E67,E69
      GO TO 3
119 PRINT 120,JF,R3,E67,E69
      GO TO 3
116 PRINT 121,JF,R3,E67,E69
      GO TO 3
117 PRINT 122,JF,R3,E67,E69
      GO TO 3
84 PRINT 123,JF,E67,E69,E73
      GO TO 3
C APARTADO III
38 E12= (R1-A4*R2)/3.

```

```

E13= (R2-A8*R3)/3.
E31= (R3-A3*R1)/3.
E14= (R1-A4*R2+A3*R3)/2.
E15= (A4*R1+R2-A8*R3)/2.
E16= (A8*R2+R3-A3*R1)/2.
E27= (A8*R1+A3*R2+A4*R3)/3.
IE74= 3.*E27=1.
IE75= 3.*E27=2.
E28= E27*A8
E29= E27*A3
E30= E27*A4
GO TO (3,3,3,88,3,3,3,3,3,89),JFE
89 JQ1=MOD(IE74,3)
JQ2=MOD(IE75,3)
IF(JQ1.EQ.0) GO TO 124
IF(JQ2.EQ.0) GO TO 125
PRINT 126,JF,A8,A3,A4,E28,E29,E30,E12,E13,E31
GO TO 3
124 PRINT 127,A8,A3,A4,E28,E29,E30,E12,E13,E31
GO TO 3
125 PRINT 128,A8,A3,A4,E28,E29,E30,E12,E13,E31
GO TO 3
88 PRINT 129,JF,A8,A3,A4,E14,E15,E16
GO TO 3
39 E17= (A2*R2+R1-A7*R3)/2.
E18= (A6*R3-A2*R1+R2)/2.
E19= (A7*R1+R3-A6*R2)/2.
E24= (R1-A7*R3)/3.
E25= (R2-A2*R1)/3.
E26= (R3-A6*R2)/3.
E20= (A6*R1+A7*R2+A2*R3)/3.
E21= E20*A6
E22= E20*A7
E23= E20*A2
IE76= 3.*E20=2.
IE77= 3.*E20=1,
GO TO (3,3,3,90,3,3,3,3,3,91),JFE
91 JZ1=MOD(IE76,3)
JZ2=MOD(IE77,3)
IF(JZ1.EQ.0) GO TO 130
IF(JZ2.EQ.0) GO TO 131
PRINT 132,JF,A6,A7,A2,E21,E22,E23,E24,E25,E26
GO TO 3
130 PRINT 133,A6,A7,A2,E21,E22,E23,E24,E25,E26
GO TO 3
131 PRINT 134,A6,A7,A2,E21,E22,E23,E24,E25,E26
GO TO 3
90 PRINT 135,JF,A6,A7,A2,E17,E18,E19
GO TO 3
C APARTADO IV
40 E42= 1.+A5-A2*A2
E43= 1.+A1-A4*A4
E44= ((1.+A1)*R1+A2*R2)/2.
E45= (A4*R1+(1.+A5)*R2)/2.
E46= ((1.-A5)*R1+A2*R2)/3.
E47= (A4*R1+(1.-A1)*R2)/3.
E48=(A4*R3)*3.
E49=A1*R1+A2*R2
E50=A4*R1+A5*R2
E51=(A4*R3)*6.

```

E32= 1.+A1+A2
E33= 1.+A5+A4
E34= E43*R1/2.
E35= E42*R2/2.
E36= E34+E35
E37= E36*E32
E38= E36*E33
E39= R1/2.
E40= R2/2.
E41= R3/2.
E91=1.+A5-A2
E92=1.+A1-A4
E93=E41*3
GO TO (92,3,3,93,94,3,3,3,95,96,3,3,97),JFE
95 PRINT 136,JF,E32,E33,E37,E38,E39,E40,E41
GO TO 3
94 PRINT 137,E91,E92,E44,E45,R3,E39,E40
GO TO 3
96 IE78=E48-1.
IE79=E48-2.
JG1= MOD(IE78,3)
JG2= MOD(IE78,3)
IF(JG1.EQ.0) GO TO 138
IF(JG2.EQ.0) GO TO 139
PRINT 140,JF,R3,E46,E47
GO TO 3
138 PRINT 141,R3,E46,E47
GO TO 3
139 PRINT 142,R3,E46,E47
GO TO 3
97 IE80= E51-1.
IE81= E51-2.
IE82= E51-3.
IE83= E51-4.
IE84= E51-5.
JH1= MOD(IE80,6)
JH2= MOD(IE81,6)
JH3= MOD(IE82,6)
JH4= MOD(IE83,6)
JH5= MOD(IE84,6)
IF(JH1.EQ.0) GO TO 143
IF(JH2.EQ.0) GO TO 144
IF(JH3.EQ.0) GO TO 145
IF(JH4.EQ.0) GO TO 146
IF(JH5.EQ.0) GO TO 147
PRINT 148,JF,R3,E49,E50
GO TO 3
143 PRINT 149,R3,E49,E50
GO TO 3
144 PRINT 150,R3,E49,E50
GO TO 3
145 PRINT 151,R3,E49,E50
GO TO 3
146 PRINT 152,R3,E49,E50
GO TO 3
147 PRINT 153,R3,E45,E50
GO TO 3
93 PRINT 154,JF,E49,E50,E41
GO TO 3
92 PRINT 154,JF,E46,E47,E93

```

3 CONTINUE
69 FORMAT(16X,I2,' = M',14X,'[0 1 -',F4.2,']',13X,'(',F4.2,', A + ',F4
*,2,', B + ',F4.2,', C)',5X,'(0 , 0 , ',F4.2,')',',//)
70 FORMAT(16X,I2,18X,'[100]',19X,'(',F4.2,' A)',23X,'0 , ',F4.2,', ',F
*,F4.2,',')',//)
103 FORMAT(17X,'4 = 4(1)',11X,'[100]',19X,'(',F4.2,' A)',23X,'0 , ',F4
*,2,', ',F4.2,',')',//)
104 FORMAT(17X,'4 = 4(2)',11X,'[100]',19X,'(',F4.2,' A)',23X,'0 , ',F4
*,2,', ',F4.2,',')',//)
105 FORMAT(17X,'4 = 4(3)',11X,'[100]',19X,'(',F4.2,' A)',23X,'0 , ',F4
*,2,', ',F4.2,',')',//)
73 FORMAT(16X,I2,18X,'[100]',21X,'-',28X,'(',F4.2,', ',F4.2,', ',F4.2
*,2,',')',//)
78 FORMAT(16X,I2,18X,'[ ',F4.2,', A + C]',12X,'(',F4.2,', A + ',F4.2,', C
*)',14X,'(',F4.2,', ',F4.2,', 0 )',//)
79 FORMAT(16X,I2,' = M',14X,'[ -',F4.2,', 0 , 1 ]',10X,'(',F4.2,', A + '
*,F4.2,', B ',F4.2,', C)',5X,'(0 , ',F4.2,', 0 , 0 )',//)
109 FORMAT(16X,I2,18X,'[010]',19X,'(',F4.2,', B)',23X,'(',F4.2,', 0 , '
*,F4.2,',')',//)
110 FORMAT(17X,'4 = 4(1)',11X,'[010]',19X,'(',F4.2,', B)',23X,'(',F4.2,
*,0 , ',F4.2,',')',//)
111 FORMAT(17X,'4 = 4(2)',11X,'[010]',19X,'(',F4.2,', B)',23X,'(',F4.2,
*,0 , ',F4.2,',')',//)
112 FORMAT(17X,'4 = 4(3)',11X,'[010]',19X,'(',F4.2,', B)',23X,'(',F4.2,
*,0 , ',F4.2,',')',//)
113 FORMAT(16X,I2,18X,'[010]',21X,'-',28X,'(',F4.2,', ',F4.2,', ',F4.2
*,2,',')',//)
114 FORMAT(16X,I2,18X,'[A + ',F4.2,', B]',12X,'(',F4.2,', A + ',F4.2,', B
*)',14X,'(0 , ',F4.2,', ',F4.2,',')',//)
115 FORMAT(16X,I2,18X,'[ 1 -',F4.2,', 0 ]',13X,'(',F4.2,', A + ',F4.2,', B
*,F4.2,', C)',5X,'(0 , ',F4.2,', 0 )',//)
118 FORMAT(16X,I2,18X,'[001]',19X,'(',F4.2,', C)',23X,'(',F4.2,', ',F4,
*,2,', 0 )',//)
120 FORMAT(17X,'4 = 4(1)',11X,'[001]',19X,'[ 1 -',F4.2,', C]',23X,'(',F4.2,
*, ',F4.2,', 0 )',//)
121 FORMAT(17X,'4 = 4(2)',11X,'[001]',19X,'(',F4.2,', C)',23X,'(',F4.2,
*, ',F4.2,', 0 )',//)
122 FORMAT(17X,'4 = 4(3)',11X,'[001]',19X,'(',F4.2,', C)',23X,'(',F4.2,
*, ',F4.2,', 0 )',//)
123 FORMAT(16X,I2,18X,'[001]',21X,'-',28X,'(',F4.2,', ',F4.2,', ',F4.2
*,2,',')',//)
126 FORMAT(16X,I2,12X,'[ ',F4.2,', A + ',F4.2,', B + ',F4.2,', C]',4X,'(',F
*,F4.2,', A + ',F4.2,', B + ',F4.2,', C)',5X,'(',F4.2,', ',F4.2,', ',F
*,F4.2,',')',//)
127 FORMAT(17X,'3 = 3(1)',5X,'[ ',F4.2,', A + ',F4.2,', B + ',F4.2,', C]',4X
,'(',F4.2,', A + ',F4.2,', B + ',F4.2,', C)',5X,'(',F4.2,', ',F4.2,
*, ',F4.2,',')',//)
128 FORMAT(17X,'3 = 3(2)',5X,'[ ',F4.2,', A + ',F4.2,', B + ',F4.2,', C]',4X
,'(',F4.2,', A + ',F4.2,', B + ',F4.2,', C)',5X,'(',F4.2,', ',F4.2,
*, ',F4.2,',')',//)
129 FORMAT(16X,I2,18X,'[ ',F4.2,', ',F4.2,', ',F4.2,', 1 ]',8X,'-',28X,'(',F
*,2(F4.2,', ',F4.2,',')',//)
132 FORMAT(16X,I2,12X,'[ ',F4.2,', A + ',F4.2,', B + ',F4.2,', C]',4X,'(',F
*,F4.2,', A + ',F4.2,', B + ',F4.2,', C)',5X,'(',2(F4.2,', ',F4.2,',')',F
*,2,',')',//)
133 FORMAT(17X,'3 = 3(1)',5X,'[ ',F4.2,', A + ',F4.2,', B + ',F4.2,', C]',4
*X,'(',F4.2,', A + ',F4.2,', B + ',F4.2,', C)',5X,'(',2(F4.2,', ',F4.2,
*,2,',')',//)
134 FORMAT(17X,'3 = 3(2)',5X,'[ ',F4.2,', A + ',F4.2,', B + ',F4.2,', C]',4
*X,'(',F4.2,', A + ',F4.2,', B + ',F4.2,', C)',5X,'(',2(F4.2,', ',F4.2,
*,2,',')',//)

```

```

*2,''),//)
135 FORMAT(16X,I2,18X,['',2(F4.2,' ',''),F4.2,'1',8X,'-',28X,'(',2(F4.2,
  *',''),F4.2,'')'],//)
136 FORMAT(16X,I2,18X,['',F4.2,' A + ',F4.2,' B]',7X,'(',F4.2,' A + ',
  *F4.2,' B)',14X,'(',2(F4.2,' ',''),F4.2,'')'],//)
137 FORMAT(17X,'-2 = M',14X,['',2(F4.2,' ','-'),'0'],9X,'(',F4.2,' A + ',
  *F4.2,' B + ',F4.2,' C)',5X,'(',2(F4.2,' ',''),'0')'],//)
140 FORMAT(16X,I2,18X,['[001]',19X,'(',F4.2,' C)',23X,'(',2(F4.2,' ',''),
  *'0')'],//)
141 FORMAT(17X,'3 = 3(1)',11X,['[001]',19X,'(',F4.2,' C)',23X,'(',2(F4,
  *2,' ',''),'0')'],//)
142 FORMAT(17X,'3 = 3(2)',11X,['[001]',19X,'(',F4.2,' C)',23X,'(',2(F4,
  *2,' ',''),'0')'],//)
148 FORMAT(16X,I2,18X,['[001]',19X,'(',F4.2,' C)',23X,'(',2(F4.2,' ',''),
  *'0')'],//)
149 FORMAT(17X,'6 = 6(1)',10X,['[001]',19X,'(',F4.2,' C)',23X,
  *(',2(F4.2,' ',''),'0')'],//)
150 FORMAT(17X,'6 = 6(2)',10X,['[001]',19X,'(',F4.2,' C)',23X,
  *(',2(F4.2,' ',''),'0')'],//)
151 FORMAT(17X,'6 = 6(3)',10X,['[001]',19X,'(',F4.2,' C)',23X,
  *(',2(F4.2,' ',''),'0')'],//)
152 FORMAT(17X,'6 = 6(4)',10X,['[001]',19X,'(',F4.2,' C)',23X,
  *(',2(F4.2,' ',''),'0')'],//)
153 FORMAT(17X,'6 = 6(5)',10X,['[001]',19X,'(',F4.2,' C)',23X,
  *(',2(F4.2,' ',''),'0')'],//)
154 FORMAT(16X,I2,18X,['[001]',21X,'-',28X,'(',2(F4.2,' ',''),F4.2,'')'],//)
  *)
48 FORMAT(16X,I2,20X,'-',21X,'(',2(F4.2,' ',''),F4.2,'')',15X,'-',//)
43 FORMAT(16X,I2,' = CENTRO',11X,'-',23X,'-',28X,'(',2(F4.2,' ',''),F4,
  *2,''),//)
53 FORMAT(16X,I2,18X,['[100]',19X,'(',F4.2,' A)',23X,'(',2(F4.2,' ',''),
  *F4.2,''),//)
54 FORMAT(16X,I2,18X,['[010]',19X,'(',F4.2,' B)',23X,'(',2(F4.2,' ',''),
  *F4.2,''),//)
57 FORMAT(16X,I2,18X,['[001]',19X,'(',F4.2,' C)',23X,'(',2(F4.2,' ',''),
  *F4.2,''),//)
61 FORMAT(16X,I2,' = M',14X,['[100]',19X,'(',F4.2,' A + ',F4.2,' B + ',
  *F4.2,' C)',5X,'(',2(F4.2,' ',''),F4.2,'')'],//)
62 FORMAT(16X,I2,' = M',14X,['[010]',19X,'(',F4.2,' A + ',F4.2,' B + ',
  *F4.2,' C)',5X,'(',2(F4.2,' ',''),F4.2,'')'],//)
63 FORMAT(16X,I2,' = M',14X,['[001]',19X,'(',F4.2,' A + ',F4.2,' B + ',
  *F4.2,' C)',5X,'(',2(F4.2,' ',''),F4.2,'')'],//)
68 FORMAT(16X,I2,18X,['B + ',F4.2,' C)',12X,'(',F4.2,' B + ',F4.2,' C
  *),14X,'(',F4.2,' ',' 0 ',',',F4.2,'')'],//)
  CALL EXIT
  END

```

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO
INSTITUTO DE GELOGIA
* * * * *
LABORATORIO DE CRYSTALOGRAFIA
* * * * *

ELEMENTO DE SIMETRIA ESPACIAL!

DIREC.- DIRECCION DEL EJE O DE LA NORMAL AL PLANO DE SIMETRIA
VECT.- COMPONENTE DE TRASLACION (VECTOR HELICOIDAL O TRASLACION DEL DESLIZAMIENTO).
COOR.- COORDENADAS DE UN PUNTO DEL ELEMENTO DE SIMETRIA.

ELEMENTOS DE SIMETRIA DEL GRUPO ESPACIAL NO. 178

POSICION GENERAL NO. 1 EL ELEMENTO DE SIMETRIA DE ORIENTACION EN EL PUNTO CONSIDERADO ES UN
CENTRO DE ASIMETRIA, 1

EL DETERMINANTE INDICADOR PUEDE SER EL NO. 1

OPERADOR PUNTUAL	DIRECCION	VECTOR	COORDENADAS
1	[000]	(0.00, 0.00, 0.00)	

POSICION GENERAL NO. 2 EL ELEMENTO DE SIMETRIA DE ORIENTACION EN EL PUNTO CONSIDERADO ES UN
EJE DE ORDEN 3

EL DETERMINANTE INDICADOR PUEDE SER EL NO. 7

OPERADOR PUNTUAL	DIRECCION	VECTOR	COORDENADAS
1	[001]	(0.33 C)	(0.00, 0.00, 0)
3 = 3(1)			

POSICION GENERAL NO. 3 EL ELEMENTO DE SIMETRIA DE ORIENTACION EN EL PUNTO CONSIDERADO ES UN
EJE DE ORDEN 3

EL DETERMINANTE INDICADOR PUEDE SER EL NO. 10

OPERADOR PUNTUAL	DIRECCION	VECTOR	COORDENADAS
3	[001]	(0.67 C)	(0.00, 0.00, 0)

POSICION GENERAL NO. 4 EL ELEMENTO DE SIMETRIA DE ORIENTACION EN EL PUNTO CONSIDERADO ES UN
EJE DE ORDEN 2

EL DETERMINANTE INDICADOR PUEDE SER EL NO. 1

OPERADOR PUNTUAL	DIRECCION	VECTOR	COORDENADAS
2	[001]	(0.50 C)	(0.00, 0.00, 0.25)

POSICION GENERAL NO. 5 EL ELEMENTO DE SIMETRIA DE ORIENTACION EN EL PUNTO CONSIDERADO ES UN

EJE DE ORDEN 6

EL DETERMINANTE INDICADOR PUEDE SER EL NO. 7

OPERADOR PUNTUAL	DIRECCION	VECTOR	COORDENADAS
6 = 6(2)	[001]	(0.83 C)	(0.00, 0.00, 0)

POSICION GENERAL NO. 6 EL ELEMENTO DE SIMETRIA DE ORIENTACION EN EL PUNTO CONSIDERADO ES UN EJE DE ORDEN 6

EL DETERMINANTE INDICADOR PUEDE SER EL NO. 10

OPERADOR PUNTUAL	DIRECCION	VECTOR	COORDENADAS
6 = 6(1)	[001]	(0.17 C)	(0.00, 0.00, 0)

POSICION GENERAL NO. 7 EL ELEMENTO DE SIMETRIA DE ORIENTACION EN EL PUNTO CONSIDERADO ES UN EJE DE ORDEN 2

EL DETERMINANTE INDICADOR PUEDE SER EL NO. 4

OPERADOR PUNTUAL	DIRECCION	VECTOR	COORDENADAS
2	[A + 1.00 B]	(0.00 A + 0.00 B)	(0 , 0.00 , 0.17)

POSICION GENERAL NO. 8 EL ELEMENTO DE SIMETRIA DE ORIENTACION EN EL PUNTO CONSIDERADO ES UN EJE DE ORDEN 2

EL DETERMINANTE INDICADOR PUEDE SER EL NO. 8

OPERADOR PUNTUAL	DIRECCION	VECTOR	COORDENADAS
2	[0.00 A + 1.00 B]	(0.00 A + 0.00 B)	(0.00, 0.00, 0.33)

POSICION GENERAL NO. 9 EL ELEMENTO DE SIMETRIA DE ORIENTACION EN EL PUNTO CONSIDERADO ES UN EJE DE ORDEN 2

EL DETERMINANTE INDICADOR PUEDE SER EL NO. 9

OPERADOR PUNTUAL	DIRECCION	VECTOR	COORDENADAS
2	[1.00 A + 0.00 B]	(0.00 A + 0.00 B)	(0.00, 0.00, 0.00)

POSICION GENERAL NO. 10 EL ELEMENTO DE SIMETRIA DE ORIENTACION EN EL PUNTO CONSIDERADO ES UN EJE DE ORDEN 3

EL DETERMINANTE INDICADOR PUEDE SER EL NO. 10

OPERADOR PUNTUAL	DIRECCION	VECTOR	COORDENADAS
3 = 3(1)	[001]	(0.83 C)	(0.00, 0.00, 0)

POSICION GENERAL NO. 11 EL ELEMENTO DE SIMETRIA DE ORIENTACION EN EL PUNTO CONSIDERADO ES UN

EJE DE ORDEN 2			
EL DETERMINANTE INDICADOR PUEDE SER EL NO. 8			
OPERADOR PUNTUAL	DIRECCION	VECTOR	COORDENADAS
2	[2.00 A + 1.00 B]	(0.00 A + 0.00 B)	(0.00, 0.00, 0.08)
POSICION GENERAL NO. 12 EL ELEMENTO DE SIMETRIA DE ORIENTACION EN EL PUNTO CONSIDERADO ES UN EJE DE ORDEN 2			
EL DETERMINANTE INDICADOR PUEDE SER EL NO. 9			
OPERADOR PUNTUAL	DIRECCION	VECTOR	COORDENADAS
2	[1.00 A + 2.00 B]	(0.00 A + 0.00 B)	(0.00, 0.00, 0.25)

- A N E X O -

Prgr. 141

CONVERSIÓN DE FRACCIONES ORDINARIAS PROPIAS A DECIMALES

Se ha redactado este programa para contar con una Tabla de Conversión de las fracciones ordinarias que resulten como salida al programa anterior, en quebrados propios. En la linea superior de abscisas se leen los numeradores, y en la columna izquierda de ordenadas, los denominadores. El cociente de ambos se encuentra con tres cifras decimales en el campo de la Tabla, siempre que no sea mayor que la unidad, en cuyo caso se le ha reemplazado por asteriscos.

```

SSET OLDFMTIO
C TABLA DE FRACCIONES DECIMALES

DIMENSION FR(20,20),N(20),JFE(20,20)
PRINT 88888

88888 FORMAT (' UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO',/10X,'INSTITUTO
* DE GEOLOGIA',/14X,'* * * * *',/6X,'LABORATORIO DE CRISTALOG
*RAFIA',/14X,'* * * * * *',//)
DO 5 K=1,20
N(K)=1*K
5 CONTINUE
PRINT 4,(N(K),K=1,20)
4 FORMAT(19X,' TABLA DE CONVERSIÓN DE FRACCIONES ORDINARIAS EN DECIM
*ALES.',//,2X,'D',3X,20(12,4X),//)
DO 1 J=1,20
DO 2 I=1,20
DNU=I
DEN=J
FR(I,J)=DNU/DEN
2 CONTINUE
PRINT 3,J,(FR(I,J),I=1,20)
3 FORMAT (1X,I12,2X,20(F4,3,2X))
1 CONTINUE
PRINT 6
6 FORMAT(//,1X,'** LOS NUMERADORES EN ABCISAS Y DENOMINADORES EN ORD
*ENADAS',//)
CALL EXIT
END

```

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO
 INSTITUTO DE GEOLOGIA
 LABORATORIO DE CRYSTALOGRAFIA

TABLA DE CONVERSION DE FRACCIONES ORDINARIAS EN DECIMALES.

D	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
1	***	***	***	***	***	***	***	***	***	***	***	***	***	***	***	***	***	***	***	
2	.500	.499	.498	.497	.496	.495	.494	.493	.492	.491	.490	.489	.488	.487	.486	.485	.484	.483	.482	
3	.333	.334	.335	.336	.337	.338	.339	.340	.341	.342	.343	.344	.345	.346	.347	.348	.349	.350	.351	
4	.250	.251	.252	.253	.254	.255	.256	.257	.258	.259	.260	.261	.262	.263	.264	.265	.266	.267	.268	
5	.200	.201	.202	.203	.204	.205	.206	.207	.208	.209	.210	.211	.212	.213	.214	.215	.216	.217	.218	
6	.167	.166	.165	.164	.163	.162	.161	.160	.159	.158	.157	.156	.155	.154	.153	.152	.151	.150	.149	
7	.143	.142	.141	.140	.139	.138	.137	.136	.135	.134	.133	.132	.131	.130	.129	.128	.127	.126	.125	
8	.125	.124	.123	.122	.121	.120	.119	.118	.117	.116	.115	.114	.113	.112	.111	.110	.109	.108	.107	
9	.111	.112	.113	.114	.115	.116	.117	.118	.119	.120	.121	.122	.123	.124	.125	.126	.127	.128	.129	
10	.100	.101	.102	.103	.104	.105	.106	.107	.108	.109	.110	.111	.112	.113	.114	.115	.116	.117	.118	
11	.091	.092	.093	.094	.095	.096	.097	.098	.099	.100	.101	.102	.103	.104	.105	.106	.107	.108	.109	
12	.083	.084	.085	.086	.087	.088	.089	.090	.091	.092	.093	.094	.095	.096	.097	.098	.099	.100	.101	
13	.077	.076	.075	.074	.073	.072	.071	.070	.069	.068	.067	.066	.065	.064	.063	.062	.061	.060	.059	
14	.071	.072	.073	.074	.075	.076	.077	.078	.079	.080	.081	.082	.083	.084	.085	.086	.087	.088	.089	
15	.067	.068	.069	.070	.071	.072	.073	.074	.075	.076	.077	.078	.079	.080	.081	.082	.083	.084	.085	
16	.063	.064	.065	.066	.067	.068	.069	.070	.071	.072	.073	.074	.075	.076	.077	.078	.079	.080	.081	
17	.059	.060	.061	.062	.063	.064	.065	.066	.067	.068	.069	.070	.071	.072	.073	.074	.075	.076	.077	
18	.056	.057	.058	.059	.060	.061	.062	.063	.064	.065	.066	.067	.068	.069	.070	.071	.072	.073	.074	
19	.053	.054	.055	.056	.057	.058	.059	.060	.061	.062	.063	.064	.065	.066	.067	.068	.069	.070	.071	
20	.050	.051	.052	.053	.054	.055	.056	.057	.058	.059	.060	.061	.062	.063	.064	.065	.066	.067	.068	

** LOS NUMERADORES EN ABCISAS Y DENOMINADORES EN ORDENADAS