

Cálculo Cristalográfico - Programa de Cálculo Electrónico. PR 139 Fortran IV - BCL - Burroughs 7600

Análisis de los Reflejos de un Roentgenograma

Francisco J. FABREGAT-GUINCHARD
Investigador Titular en el
Instituto de Geología, UNAM
México 20, D. F.

RESUMEN

Programa de computación electrónica para el análisis de los reflejos de un roentgenograma, por paridades de sus respectivos índices, y selección del grupo espacial correspondiente.

ZUSAMMENFASSUNG

Komputerprogram für die Reflexanalyse von Röntgenogrammen anhand der Geradzähligkeit ihrer Indizes, und Auswahl der entsprechenden Raumgruppen.

INTRODUCCION

Al problema de la numeración de los reflejos de un roentgenograma, esto es, al de la asignación de sus índices, sigue otro no menos importante cual es el de la interpretación de éstos para deducir los elementos de simetría de su celda elemental, su tipo de red y el grupo espacial a que pertenece el cristal en estudio. Esa numeración de reflejos puede lograrse tanto a partir de los diagramas de polvo de la sustancia, cuanto de sus diagramas de cristal único. Claro está que cuanto más individualizados resulten los reflejos, tanto más precisa será su numeración y menos ambigüedades acarrearán su interpretación. Ello se logra con los métodos de Buerger y de Weissenberg; en menor grado con los de cristal oscilante... y con mayor incertidumbre empleando diagramas de Debye. Para éstos en particular, la

interpretación que se ofrece con este programa, permite un medio de afinarlos, analizando y suprimiendo los titubeos que pudieran llevar a incompatibilidades.

Para la interpretación de los diagramas, se hace preciso observar las "extinciones sistemáticas", o lo que es más fácil, las condiciones de reflejo de las manchas presentes, por la paridad de sus índices. El vínculo entre los reflejos presentes y la existencia de los elementos de simetría de la red cristalina, fue descubierto desde la segunda década de la roentgenocristalografía. Estas condiciones de paridad son sencillas para un símbolo en particular; más se convierte en una labor casi inabordable al tenerlos en cuenta a todos ellos. Para facilitar este análisis, se ha redactado este programa de computación electrónica.

DESCRIPCION DEL PROGRAMA

1. Una primera parte tiende a redactar el encabezado del problema. Dispone los datos generales de la especie cristalina: su nombre, las constantes paramétricas y angulares de su celda elemental, su relación paramétrica y la singonía que comporta.

Como no siempre es posible disponer de estos datos y particularmente cuando sólo se pretende el análisis de los reflejos de un diagrama de polvo, se puede prescindir de ellos iniciando la tabla de re-

sultados por su segunda parte:

2. Análisis de los reflejos: se requiere la lista de índices de todos los reflejos observados. La computadora examina cada símbolo con respecto a las condiciones de paridad. Para ello se procede a determinar a qué tipo de reflejo pertenece (HKL, HKO, HOO).

Es preciso hacer notar, que en obsequio a la generalización del problema, se utilizan los índices HKL de Miller, aún para la designación de cristales exagonales y trigonales, y en estos símbolos, HKIL, se prescinde del tercero, por tratarse de ejes homogéneos.

Mediante los símbolos generales, HKL, se determina el modo o red de Bravais. Con los de tipo HKO, los planos de deslizamiento y por los de tipo HOO, los ejes helicoidales, cual se indica en las siguientes tablas:

Tabla 1. Tipo de Red

Condiciones de reflejo (HKL)	Tipo de red	Símbolo
Todo HKL presenta	Simple primitiva	P.C (exag.), R
$H + K + L = 2n$	Centrada	I
$H + K = 2n$	Caras (001) centradas	C
$H + L = 2n$	Caras (010) centradas	B
$K + L = 2n$	Caras (100) centradas	A
$H + K = 2n$ $H + L = 2n$ $K + L = 2n$	Caras centradas	F
$H - K = 3n$	Exagonal triple	H
$-H + K + L = 3n$ 5	Romboédrica, numerada en ejes exagonales	R
$H - K + L = 3n$	Exagonal primitiva numerada en ejes romboédricos	P.C (exag.)
$H + K + L = 3n$		

TABLA II. REFLEJOS CARACTERISTICOS DE PLANOS DE DESLIZAMIENTO

Tipo de reflejo	Condición de reflejo	Plano de deslizamiento		Símbolo
		Posición	Componente	
HKO	$H = 2n$ $K = 2n$ $H + K = 2n$ $H + K = 4n$	(001)	$a/2$ $b/2$ $(a + b)/2$ $(a + b)/4$	a b n d
HOL	$H = 2n$ $L = 2n$ $H + L = 2n$ $H + L = 4n$	(010)	$a/2$ $c/2$ $(a + c)/2$ $(a + c)/4$	a c n d
OKL	$K = 2n$ $L = 2n$ $K + L = 2n$ $K + L = 4n$	(100)	$b/2$ $a/2$ $(b + a)/2$ $(b + a)/4$	b a n d
HKL	$L = 2n$ $M = 2n$ $H + L = 2n$ $2H + L = 4n$	(110)	$a/2$ $(a + b)/4$ $(a + b)/4 + a/2$ $(a + b + a)/4$	e b n d

TABLA III. REFLEJOS CARACTERISTICOS DE EJES HELICOIDALES

Tipo de reflejo	Condición de reflejo	Eje helicoidal		Símbolo
		Dirección	Componente	
HOO	$H = 2n$ $K = 4n$	100	$a/2$ $a/4$	2(1), 4(2) 4(1), 4(3)
OKO	$K = 2n$ $K = 4n$	010	$b/2$ $b/4$	2(1), 4(2) 4(1), 4(3)
OOL	$L = 2n$ $L = 2n$ $L = 4n$ $L = 6n$	001	$a/2$ $a/3$ $c/4$ $c/6$	2(1), 4(2), 6(3) 3(1), 3(2), 6(3), 6(4) 4(1), 4(3) 6(1), 6(5)
HOO	$H = 2n$	111	$(a + b)/4$	2(1)

TABLA IV. GRUPOS ESPACIALES CONGRUENTES CON EL SIMBOLO P. B 2(1)M

Orientaciones:		abc	cab	bca	acb	bac	cba
Gr.N°	Singonia	Símbolos Tabl. Int. 1952					
		Schoenflies	Hermann				
26	ORT (3)	C(2V)2	PM2(1)	P2(1)MA	PB2(1)M	PM2(1)B	PCM2(1) P2(1)AM
55	ORT (1)	D(2H)9	P2(1)/B 2(1)/A 2/M	PMCB	PCMA	PCMA	PBAM PMCB
57	ORT (1)	D(2H)11	P2(1)/B 2(1)/C 2(1)/M	PMCA	PBMA	PCMB	PCAM PMAB
62	ORT (1)	D(2H)16	P2(1)/N 2(1)/M 2(1)/A	PBNM	PMCN	PNAM	PMNB PCMN

NOTA: Para adaptarse a las máquinas de computación se transforma la escritura de los símbolos, colocando entre paréntesis los subíndices, la línea de quebrado por una diagonal y escribiendo todas las letras mayúsculas, así:

$$D_{2h}^{16} = P \begin{matrix} 21 & 21 & 21 \\ \hline \bar{1} & \bar{1} & \bar{1} \end{matrix} = Pnma$$

$$D(2H)16 = P2(1)/N 2(1)/M 2(1)/A = PNMA$$

PRINT 26886

```

88888 FORMAT (' UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO',/10,' INSTITUTO
* DE GEOLOGIA',/14,' * * * * *',/6,' LACRATOPIO DE CRISTALOG
*RAFIA',/14,' * * * * *',/11)
PRINT 26888,HEMISFIO
24 FORMAT(10X,'NOMBRES',/34,/)
IF(LY=0) GO TO 18
PRINT 25,AL,B,CF,C,3A
25 FORMAT(10X,'CELDS ELECTRICALES',/10,' *',/7,' 4,3X',/ALFA='F6,2',/20X,'B'
* 4,3X',/DELTA='F5,2',/20X,'C',/7,' 4,3X',/GAMA='F6,2',/11)
CF=A/B
C1=CF/P
PRINT 26,FE,CI
26 FORMAT(19X,'RELACION PARAMETRICA',/7,' 4,3X',/11,'/7,' 4,3X',/11)
PRINT 27
27 FORMAT(10X,'SINGONIA',/11)
IF(LY=0) GO TO 4
IF(LX=0) GO TO 5
IF(LZ=0) GO TO 6
IF(LY=0) GO TO 7
IF(LX=0) GO TO 8
IF(LZ=0) GO TO 9
IF(LY=0) GO TO 10
14 PRINT 28
22 FORMAT(20X,1H,'**'/'HORIZONTAL',/11,' I POSICION',/11)
GO TO 10
10 LY=I+K+L
MY=I+K+L
NX=ND(LY,3)
LX=ND(MY,3)
IF(LX=0) OR (LY=0) GO TO 11
LQ=ND(LX,3)
IF(LQ=0) GO TO 12
PRINT 23
23 FORMAT(20X,1H,'**'/'EQUIVAL',/11)
GO TO 10
11 PRINT 12
12 FORMAT(20X,1H,'**'/'EQUIVAL',/11)
GO TO 10
6 IF(PE=0) AND (PA=0) AND (PB=0) GO TO 13
IF(PE=0) AND (PA=0) AND (PB=0) GO TO 14
IF(PE=0) AND (PA=0) AND (PB=0) GO TO 15
13 PRINT 16
16 FORMAT(20X,1H,'**'/'HORIZONTAL',/11,' II POSICION',/11)
GO TO 10
15 PRINT 17
17 FORMAT(20X,1H,'**'/'TRICLINICA',/11)
GO TO 10
7 PRINT 19
19 FORMAT(20X,1H,'**'/'TRICLINICA',/11)
GO TO 10
8 PRINT 20
20 FORMAT(20X,1H,'**'/'TETRAEDRAL',/11)
GO TO 10
9 PRINT 21
21 FORMAT(20X,1H,'**'/'ORTORHOMBICA',/11)
14 CONTINUE
PRINT 26
24 FORMAT(10X,'ANALISIS DE LOS REFLEJOS DEL DIAGRAMA DE DIFRACCION',/11)

```

```

GO TO 100
201 IF(LY=0) GO TO 131
IF(LZ=0) GO TO 132
GO TO 171
202 IF(LY=0) GO TO 137
IF(LZ=0) GO TO 135
IF(LY=0) GO TO 136
IF(LZ=0) GO TO 136
GO TO 129
GO TO 173
203 IF(LZ=0) GO TO 139
GO TO 129
204 IF(LY=0) GO TO 150
IF(LZ=0) GO TO 149
IF(LZ=0) GO TO 148
IF(LZ=0) GO TO 147
GO TO 175
205 IF(LY=0) GO TO 146
IF(LY=0) GO TO 145
IF(LY=0) GO TO 144
IF(LZ=0) GO TO 143
GO TO 177
206 IF(LY=0) GO TO 142
IF(LY=0) GO TO 141
IF(LZ=0) GO TO 140
IF(LZ=0) GO TO 139
GO TO 179
207 IF(LY=0) GO TO 154
IF(LY=0) GO TO 153
IF(LZ=0) GO TO 152
IF(LZ=0) GO TO 151
129 PRINT 29,1H,'**'/'L
29 FORMAT(21X,313,7F,11)
GO TO 99
169 PRINT 170,1H,'**'/'L
170 FORMAT(21X,313,7F,11,' *',/5X,'LUC DE ROTACION (100)',/2X,'2,3,4',/11)
GO TO 99
171 PRINT 172,1H,'**'/'L
172 FORMAT(21X,313,7F,11,' *',/5X,'EJE DE ROTACION (010)',/2X,'2,3,4',/11)
GO TO 99
173 PRINT 174,1H,'**'/'L
174 FORMAT(21X,313,7F,11,' *',/5X,'LUC DE ROTACION (001)',/2X,'2,3,4',/11)
GO TO 99
175 PRINT 176,1H,'**'/'L
176 FORMAT(21X,313,7F,11,' *',/5X,'PLANO DE REFLEXION (100)',/1X,'1H',/11)
GO TO 99
177 PRINT 178,1H,'**'/'L
178 FORMAT(21X,313,7F,11,' *',/5X,'PLANO DE REFLEXION (010)',/1X,'1H',/11)
GO TO 99
179 PRINT 180,1H,'**'/'L
180 FORMAT(21X,313,7F,11,' *',/5X,'PLANO DE REFLEXION (001)',/1X,'1H',/11)
GO TO 99
EJE HELICOIDAL
130 PRINT 30,1H,'**'/'L
30 FORMAT(21X,313,17F,11,' *',/5X,'H2H EJE HELIC.PARAL.(100)',/2(1),/4(2)
**')
GO TO 99
131 PRINT 31,1H,'**'/'L
31 FORMAT(21X,313,17F,11,' *',/5X,'H4H EJE HELIC.PARAL.(100)',/4(1),/4(3)
**')
GO TO 99

```

```

**/21X,'REFLEJOS INCIDENCIALES HOO OOO OOL HHO HFO HOL OPL HHL H
*HL',/35X,'SIMPLOL',/22X,'M A L
* * * * *',/11)
3 1=0
K=0
L=0
REACT,1,K+L
2 FORMAT(313)
IF(LY=0) GO TO 63
JZ=ND(I,2)
KV=ND(I,4)
KZ=ND(K,2)
HM=ND(K,4)
LZ=ND(L,2)
IV=ND(L,3)
JV=ND(L,4)
KV=ND(L,6)
IY=I+K
JY=I+L
VY=I+L
IU=I+L
LV=ND(IY,2)
MV=ND(IY,4)
NV=ND(JY,2)
IR=ND(JY,4)
RW=ND(KY,2)
KR=ND(KY,4)
LV=ND(LV,4)
UZ=I+Y+L
UZ=I+Y
IX=I+K+L
JX=I+K+L
IF(LY=0) AND (K=0) AND (L=0) GO TO 200
IF(LY=0) AND (K=0) AND (L=0) GO TO 201
IF(LY=0) AND (K=0) AND (L=0) GO TO 202
IF(LY=0) AND (K=0) AND (L=0) GO TO 203
IF(LY=0) AND (K=0) AND (L=0) GO TO 204
IF(LY=0) AND (K=0) AND (L=0) GO TO 205
IF(LY=0) AND (K=0) AND (L=0) GO TO 206
IF(LY=0) AND (K=0) AND (L=0) GO TO 207
IF(LY=0) AND (K=0) AND (L=0) GO TO 3
IXX=ND(KZ,2)
IF(XX=0) GO TO 155
IF(LY=0) AND (LZ=0) GO TO 150
KXX=ND(IX,3)
LXX=ND(JX,3)
IF(LY=0) OR (LX=0) GO TO 162
JXX=ND(IY,3)
IF(XX=0) GO TO 161
104 KXX=ND(IY,2)
IF(XX=0) GO TO 157
KXX=ND(JY,2)
IF(XX=0) GO TO 155
IYX=ND(IY,2)
IF(YY=0) GO TO 157
IF(LZ=0) AND (K=0) AND (L=0) GO TO 160
IF(LZ=0) AND (K=0) AND (L=0) GO TO 160
GO TO 155
200 IF(LY=0) GO TO 131
IF(LZ=0) GO TO 130

```

```

132 PRINT 32,I,KoL
32 FORMAT(21X,313,21X,"*",5X,"K=2H EJE HELIC.PARAL.(1010) 2(1),4(2)
  *)
GO TO 99
133 PRINT 33,I,KoL
33 FORMAT(21X,313,21X,"*",5X,"K=4H EJE HELIC.PARAL.(1010) 4(1),4(3)
  *)
GO TO 99
134 PRINT 34,I,KoL
34 FORMAT(21X,313,21X,"*",5X,"L=2H EJE HELIC.PARAL.(1001) 2(1),4(2)
  *,6(3)*)
GO TO 99
135 PRINT 35,I,KoL
35 FORMAT(21X,313,21X,"*",5X,"L=3H EJE HELIC.PARAL.(1001) 3(1),3(2)
  *,6(3),6(4)*)
GO TO 99
136 PRINT 36,I,KoL
36 FORMAT(21X,313,21X,"*",5X,"L=4H EJE HELIC.PARAL.(1001) 4(1),4(3)
  *)
GO TO 99
137 PRINT 37,I,KoL
37 FORMAT(21X,313,21X,"*",5X,"L=6H EJE HELIC.PARAL.(1001) 6(1),6(5)
  *)
GO TO 99
138 PRINT 38,I,KoL
38 FORMAT(21X,313,21X,"*",2X,"H=2H EJE HELIC.PARAL.(1110) 2(1)*)
GO TO 99
C PLANOS DE DESLIZAMIENTO
139 PRINT 39,I,KoL
39 FORMAT(21X,313,31X,"*",2X,"H=2H PLANO DESL.PERP.(1001) A*)
GO TO 99
140 PRINT 40,I,KoL
40 FORMAT(21X,313,31X,"*",2X,"K=2H PLANO DESL.PEPP.(1001) B*)
GO TO 99
141 PRINT 41,I,KoL
41 FORMAT(21X,313,31X,"*",21X,"H=2H PLANO DESL.PERP.(1001) I*)
GO TO 99
142 PRINT 42,I,KoL
42 FORMAT(21X,313,31X,"*",21X,"H=4H PLANO DESL.PERP.(1001) I*)
GO TO 99
143 PRINT 43,I,KoL
43 FORMAT(21X,313,31X,"*",19X,"H=2H PLANO DESL.PERP.(1010) A*)
GO TO 99
144 PRINT 44,I,KoL
44 FORMAT(21X,313,31X,"*",19X,"L=2H PLANO DESL.PERP.(1010) C*)
GO TO 99
145 PRINT 45,I,KoL
45 FORMAT(21X,313,31X,"*",17X,"H=L=2H PLANO DESL.PERP.(1010) I*)
GO TO 99
146 PRINT 46,I,KoL
46 FORMAT(21X,313,31X,"*",17X,"H=L=4H PLANO DESL.PERP.(1010) I*)
GO TO 99
147 PRINT 47,I,KoL
47 FORMAT(21X,313,41X,"*",15X,"K=2H PLANO DESL.PERP.(100) B*)
GO TO 99
148 PRINT 48,I,KoL
48 FORMAT(21X,313,41X,"*",15X,"L=2H PLANO DESL.PERP.(100) C*)
GO TO 99
149 PRINT 49,I,KoL
49 FORMAT(21X,313,41X,"*",13X,"K=L=2H PLANO DESL.PERP.(100) L*)

```

```

GO TO 99
150 PRINT 50,I,KoL
50 FORMAT(21X,313,41X,"*",13X,"K=L=4H PLANO DESL.PERP.(100) D*)
GO TO 99
151 PRINT 51,I,KoL
51 FORMAT(21X,313,49X,"*",11X,"L=2H PLANO DESL.PEPP.(1110) C*)
GO TO 99
152 PRINT 52,I,KoL
52 FORMAT(21X,313,49X,"*",11X,"H=2H PLANO DESL.PERP.(1110) B*)
GO TO 99
153 PRINT 53,I,KoL
53 FORMAT(21X,313,49X,"*",9X,"H=L=2H PLANO DESL.PERP.(1110) H*)
GO TO 99
154 PRINT 54,I,KoL
54 FORMAT(21X,313,49X,"*",6X,"2H=L=4H PLANO DESL.PERP.(1110) C*)
GO TO 99
C REDES DE GRAVITAS
155 PRINT 55,I,KoL
55 FORMAT(21X,313,77,"*",41X,"*",3X,"MKL SIN RESTRICCION. KCH PRIMITI
  *VA P.CC(XAG),P*)
GO TO 99
156 PRINT 56,I,KoL
56 FORMAT(21X,313,49X,"*",5X,"H=L=2H RED CENTRADA",18X,"I")
GO TO 99
157 PRINT 57,I,KoL
57 FORMAT(21X,313,49X,"*",5X,"H=K=2H RED DE CARAS (001) CENTRADAS C
  *)
GO TO 99
158 PRINT 58,I,KoL
58 FORMAT(21X,313,49X,"*",5X,"H=L=2H RED DE CARAS (010) CENTRADAS B
  *)
GO TO 99
159 PRINT 59,I,KoL
59 FORMAT(21X,313,49X,"*",5X,"K=L=2H RED DE CARAS (100) CENTRADAS A
  *)
GO TO 99
160 PRINT 60,I,KoL
60 FORMAT(21X,313,49X,"*",5X," INDICES MKL DE PAPIADA NO RECICLADA
  * P*)
GO TO 99
161 PRINT 61,I,KoL
61 FORMAT(21X,313,49X,"*",5X,"H=K=3H RED EXAGONAL TRIPLE",11X,"I")
GO TO 99
162 PRINT 62,I,KoL
62 FORMAT(21X,313,49X,"*",5X,"H=L=3H PLD RUMBOPOLICA",7X,
  *)
GO TO 99
63 CONTINUE
PRINT 64
64 FORMAT(///,10X,"MCM DE GRAVITAS")
18 PRINT 102
182 FORMAT(///,25X,"(100)",10X,"(101)",10X,"(100)",15X,"EJES 2",///
  *,22X,"(100)",22X,"(100)",14X,"PLANOS A",///,2X,"(100)",2X
  *,2X,"(100)",2X,"(100)",2X,"(100)",2X,"(100)",2X,"(100)",2X,"(100)",2X
  *)
PRINT 111
211 FORMAT(11.1)
GO TO 210
209 CALL GAIT
END

```

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO
 INSTITUTO DE GELOGIA
 LABORATORIO DE CRYSTALOGRAFIA

NOMBRE: COSALITA

CELDA ELEMENTAL: $a = 19.0990$ ALFA = 90.00
 $b = 23.8700$ BETA = 90.00
 $c = 4.0550$ GAMA = 90.00

REFINACION PARAMETRICA = 0.7997 | 1 | 0.1699

SIMBOLO = ORTOCLINTICA.

ANALISIS DE LOS REFLEJOS DEL DIAGRAMA DE DIFRACCION.

REFLEJOS INCONDICIONADOS		HOO	OKO	OOL	HHO	HKO	HOL	OKL	HHL	HKL	SIMBOLOS	
H	K											
3	1	0										
2	3	0										
3	2	0										
4	2	0										
4	3	0										
0	6	0										
1	1	1										
4	4	0										
5	2	0										
5	3	0										
3	0	1										
1	7	0										
0	4	1										
5	4	0										
2	7	0										
6	2	0										
4	1	1										
6	3	0										
1	8	0										
2	5	1										
1	6	1										
6	4	0										
6	5	0										
6	6	0										
7	4	0										
4	7	1										
5	6	1										
7	0	1										
7	6	0										
4	8	1										
8	5	0										
4	10	0										
6	9	0										
5	8	1										
H*K=4H												O
H=2H												A
K=2H												B
H*K=2H												N
H=2H												A
K=2H												2(1), 4(2)
H*L=2H												N
H=2H												2(1)
K=2H												B
H*K=4H												O
H*L=4H												O
H*K=4H												O
K=2H												R
K=2H												B
H=2H												A
H*K=4H												O
H*K=L=2H												I
H=2H												A
K=2H												R
H*K=L=2H												I
H*L=2H												I
H*K=2H												N
H=2H												A
H=2H												2(1)
K=2H												B
H*K=L=2H												I
H*K=L=2H												I
H*L=4H												O
H=2H												B
H*K=2H												C
H=2H												A
H*K=2H												N
H=2H												A
H*K=L=2H												I

MODO DE BRAVAIS:

	(100)	(010)	(001)
EJES	2	2	2
3			
4		4 ₁	
6			
PLANOS			
A			x
B	x		x
C			
D		x	x
N			x
H			x

GRUPO ESPACIAL :

$P \frac{2}{4} \frac{2}{1} \frac{2}{m}$

Basados en estas observaciones, el examen sintetizado antes se puede interpretar así:

a) Modo de Bravais: Aunque la inmensa mayoría de los tipos de red resultan indicar una Celda I, el haber uno que se interpreta de Celda C, hace que los reflejos se tengan en su total por incondicionados, lo cual significa *red P*.

b) Los ejes posibles aparecen ser 2(1) ó 4(1); mas tratándose de cristales ortoclínicos, únicamente es admisible el eje 2(1).

c) En cuanto a planos, los hay b, d y el conjunto (a, b, d, n), respectivamente perpendiculares a las tres direcciones citadas. La discusión cabe para este conjunto (a, b, d, n) que obliga tenerlo como indicador de un plano m de simetría.

Con esas observaciones, se puede concretar el símbolo ortoclínico:

Pb2(1)m

con la ambigüedad de no saber si la orientación del cristal es la misma que la citada en las Tablas Internacionales. Para no ser prolijo con otras discu-

siones, el símbolo citado cabe pertenecer a uno de los grupos citados en la Tabla IV, con sus símbolos enmarcados. Desde luego, no se trata de cristal enantiomorfo ORT 222 = ORT (2), sino de uno hemimórfico ORT MM2 = ORT (3) u holoédrico ORT MMM = ORT (1), y por otras consideraciones podría precisarse la elección.

En la presentación de Berry (1939 y 1960) citada por Berry y Thompson (1962), se le adjudica el Gr. N° 62 con orientación c a b respecto a la a b c propuesta por las Tablas Internacionales, que está conforme con la designación hecha con ayuda de este programa de computación.

BIBLIOGRAFIA

X Ray Power Data for Ore Minerals: The Peacock Atlas. The Geological Society of America, Memoir 85 BERRY, L. G. y THOMPSON, R. M. (1962). 148.

Internat. Tables for X Ray Crystallography: Vol. I, Symmetry groups. Kynoch Press - Birmingham THE INTERNAT. UNION OF CRYSTALLOGRAPHY. (1952).

Handbook of X-Ray Analysis of Polycrystalline Materials. Consultants Bureau. New York MIRKIN, L. I., (1964).