

Modificación del programa Bond-Scand de M. E. Pippy y F. R. Ahmed

por XAVIER SOLANS* y CARLOS MIRAVITLLES**

RESUMEN

Se presenta una modificación del programa Bond-Scand, con vistas a su empleo en ordenadores de reducida capacidad de memoria. Con dicha modificación se pasa de una capacidad de 100 K a 81 K, pudiendo ser ejecutada en el ordenador IBM 360/30 de que dispone la Facultad de Ciencias de la Universidad de Barcelona.

RÉSUMÉ

On présente une modification du programme Bond-Scand a fin de pouvoir l'employer sur des ordinateurs de capacité de mémoire réduite. Avec ces modifications on réduit la capacité de mémoire de 100 K à 81 K, que correspond à celle du modèle 360/30 de la Faculté des Sciences de l'Université de Barcelone.

INTRODUCCIÓN

El programa BOND-SCAND (Scand of interatomic distances and angles) de M. E. PIPPY y F. R. AHMED (1969) es un programa escrito en FORTRAN IV que requiere aproximadamente de 100 K en memoria, tiene por objeto fundamental calcular las distancias inter e intramoleculares y los ángulos entre átomos, así como sus desviaciones standard, a partir de las coordenadas de los átomos de una estructura ya resuelta, con sus desviaciones standard, los parámetros de la red y las matrices que condicionan su simetría.

El motivo de su modificación ha sido la reducción de su ocupación en memoria para que pueda ser procesado en el IBM 360/30 de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Barcelona.

DESCRIPCIÓN DEL PROGRAMA

El programa lee los datos, ya sea de una cinta magnética generada por el programa NRC-2 de

F. R. AHMED (1969), o bien por fichas perforadas.

Define la Transformación que pasa del sistema de coordenadas de la red x, y, z, a un sistema ortogonal X, Y, Z, dicha transformación viene definida por la matriz:

$$T = \begin{pmatrix} a \cos \gamma & b \cos \beta & c \cos \alpha \\ 0 & b \sin \gamma & c (\cos \alpha - \cos \beta \cos \gamma) / \sin \gamma \\ 0 & 0 & V / (a b \sin \gamma) \end{pmatrix}$$

Calcula las coordenadas de los átomos para este nuevo sistema ortogonal, así como las nuevas desviaciones standard de ellas. La varianza expresada en Å² vendrá dada por:

$$\begin{pmatrix} \sigma^2 (X) \\ \sigma^2 (Y) \\ \sigma^2 (Z) \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} \sigma^2 (x) \\ \sigma^2 (y) \\ \sigma^2 (z) \end{pmatrix}$$

Genera las coordenadas de las posiciones equivalentes por la simetría de la red y calcula las distancias intra e inter-moleculares, con su desviación standard. Esta última viene definida por:

$$\sigma^2 (d_{AB}) = \{(\Delta X)^2 [\sigma^2 (X_A) + \sigma^2 (X_B)] + (\Delta Y)^2 [\sigma^2 (Y_A) + \sigma^2 (Y_B)] + (\Delta Z)^2 [\sigma^2 (Z_A) + \sigma^2 (Z_B)]\} / d_{AB}^2$$

Finalmente, calcula los ángulos entre dos enlaces AB y BC, por la expresión:

$$\theta = \arccos [-d_{AB}^2 - d_{BC}^2 + d_{AC}^2] / (2 d_{AB} d_{BC})$$

y su desviación standard por:

$$\sigma^2 (\theta) = \frac{\sigma^2 (A)}{d_{AB}^2} + \frac{\sigma^2 (C)}{d_{BC}^2} - \sigma^2 (B) \left[\frac{1}{d_{AB}^2} - \frac{2 \cos \theta}{d_{AB} d_{BC}} + \frac{1}{d_{BC}^2} \right]$$

* Departamento de Cristalografía y Mineralogía de la Facultad de Ciencias, Universidad de Barcelona.

** Sección de Cristalografía del Instituto "Jaime Almera", Universidad de Barcelona.

siendo

$$\sigma^2 (A) = 1/3 [\sigma^2 (X_A) + \sigma^2 (Y_A) + \sigma^2 (Z_A)]$$

análogamente significan $\sigma^2 (B)$ y $\sigma^2 (C)$

La salida impresa del programa viene dada por las siguientes tablas:

- a) Distancias intra-moleculares
- b) Distancias inter-moleculares
- c) Tabla de coordinación de los átomos de la unidad asimétrica
- d) Ángulos de enlace.

MODIFICACIONES REALIZADAS

Se ha llevado a cabo una reestructuración del programa, dirigida a poder aplicar las técnicas del "overlay", dicha reestructuración ha consistido en modificar el orden de proceso para agrupar las variables dentro de cada fase.

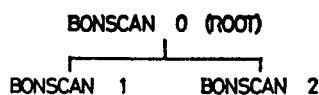


FIG. 1. — Árbol de Fases.

La figura 1 representa el árbol de fases, en la figura 2 se muestra la distribución de las subrutinas en cada una de las fases.

Se ha logrado con dicha técnica una reducción de

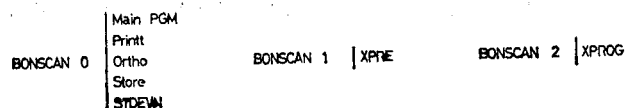


FIG. 2. — Subrutinas.

19 K de memoria sin modificar en absoluto las dimensiones de las variables.

El número máximo de átomos en la unidad asimétrica que puede procesar el programa es de 150, y el número máximo de distancias no-equivalentes que puede almacenar en memoria es de 1.000.

RESULTADOS OBTENIDOS

El programa se ha aplicado a las estructuras resueltas en el departamento 2-Cloro Isonitroso-acetanilida, 4-Metoxi Isonitroso-acetanilida y 3-Metil N-etil Isonitroso-acetanilida con buenos resultados.

El tiempo de ejecución de la versión original, para 58 átomos en la unidad asimétrica de una red con grupo espacial $P 2_1/C$, en un ordenador del modelo 50, es de aproximadamente 7 minutos, en este tiempo se incluye la compilación del programa. La versión modificada para 24 átomos de una red del mismo grupo espacial, en un ordenador del modelo 30, es aproximadamente de 21 minutos, de los cuales 12 son de compilación.

BIBLIOGRAFÍA

- AHMED, F. R. (1969): Crystallographics programs for a IBM 360 system. *National Research Council of Canada*.

Recibido para su publicación 11 de marzo 1974