

矿物晶胞参数微机计算程序 的移植与应用

沈建都 卓肇琨

矿物X射线粉晶晶胞参数计算程序是地质矿产部南京地质矿产研究所首先在 Ti-59 机上开发的^[1]。中国有色金属工业公司北京矿产地质研究所将其移植到 Pc-1500 机上^[2]。原程序用 BASIC 语言编写, 计算方法是根据最小二乘法原理(柯亨法), 采用修正测定值的办法而计算的, 可以进行各晶系矿物晶胞参数的计算。

我们将该程序移植到了 Apple-II 型机上。移植后的程序中, 对要求输入的数据加了较详细的注释。因此, 在程序执行过程中, 操作者可以根据屏幕上的提示, 自如地将所要求的数据送入计算机, 而无需再查对或记住程序说明。对德拜照相法, 采用了直接输入 d (面间距) 值的方法。对衍射仪法, 仍用输入 θ (衍射角) 值的方法。在程序中, 加入了六方晶胞对三方晶胞的转换, 计算结果同时给出了三方晶系矿物的六方和三方两种晶胞参数。

计算结果由打印机以表格形式打出, 内容包括: 矿物名称、日期、衍射线序号、 hkl 值, 实测 d 值 (D_o), 计算 d 值 (D_c), 加权 d 值 (D_w), 实测 θ 值 (θ_o), 计算 θ 值 (θ_c), 加权 θ 值 (θ_w) 及精度 ($diff$), 最后打印出晶胞参数及其误差。

由于采用了 Apple-II 型机, 程序在运行和打印速度上有了明显的提高。三斜晶系矿物晶胞参数计算比 pc-1500 机缩短了 75 秒。以选取 15 条衍射线为准, 计算时间, 立方晶系 8 秒, 四方晶系 10 秒, 三(六)方晶系 11 秒, 斜方晶系 15 秒, 单斜晶系 21 秒, 三斜晶系 40 秒。

移植后的程序实际上只适用于已知矿物的晶胞参数计算。对于欲计算晶胞参数的矿物之衍射图谱, 必须已完成了指标化工作, 要能选取一定数量 (10~15 条) 指标可靠, 分布均匀。重现性好, 强度适中的衍射线。无论是用记录仪, 还是用定标器或计算机采集衍射角 θ 的数据, 都应保证精度。此外, 还要考虑到衍射线的分离与拟合 ($K\alpha_1$ 和 $K\alpha_2$)。掌握以上的使用条件, 才能使计算程序发挥有效的作用。总之, 矿物晶胞参数微机计算程序可以使计算速度和精确度都有所提高, 这对于矿床成因的研究和地质找矿也有一定的实际意义。

最后, 我们衷心地感谢杨子江高级工程师和林守江同志的热情帮助。

[1] 地质矿产部南京地质矿产研究所, 《在 Ti-59 机上实现各晶系晶胞参数计算的程序》

[2] 北京矿产地质研究所, 《pc-1500 机计算各晶系晶胞参数程序》