

# ACTA GEOLOGICA HISPANICA

INSTITUTO NACIONAL DE GEOLOGIA  
(CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTIFICAS)

Año VIII - N.º 2

Marzo-Abril de 1973

Depósito legal: B. 6661-1966

## Modificación del programa ORTEP de C. K. Johnson

por C. MIRAVITLLES,\* F. LACASTA,\*\* J. L. BRIANSÓ\* y F. PLANA\*\*\*

### RESUMEN

Se presenta una modificación del programa Ortep, con vistas a su empleo en ordenadores de reducida capacidad de memoria. Con dichas modificaciones se pasa de una capacidad de 128 k a una de 84 k, que es la máxima permisible en el IBM 360/30 de que dispone la Facultad de Ciencias de la Universidad de Barcelona.

### RÉSUMÉ

On présente une modification du programme Ortep, a fin de pouvoir l'employer sur des ordinateurs de capacité de mémoire réduite. Avec ces modifications on réduit la capacité de mémoire de 128 k à 84 k, que correspond à celle du modèle 360/30 de la Faculté des Sciences de l'Université de Barcelone.

### INTRODUCCIÓN

El programa ORTEP (Oak Ridge thermal ellipsoid plot program) de C. K. JOHNSON (1965) es un programa muy complejo, escrito en Fortran IV que requiere aproximadamente 128 k en memoria y que tiene como objeto fundamental el dibujo, mediante "Plotter", de los átomos y sus elipsoides de vibra-

ción térmica de una o varias moléculas en compuestos cuya estructura se encuentre previamente calculada.

El programa permite realizar el dibujo de las moléculas en perspectiva, y si se desea pueden obtenerse dibujos con visión estereoscópica.

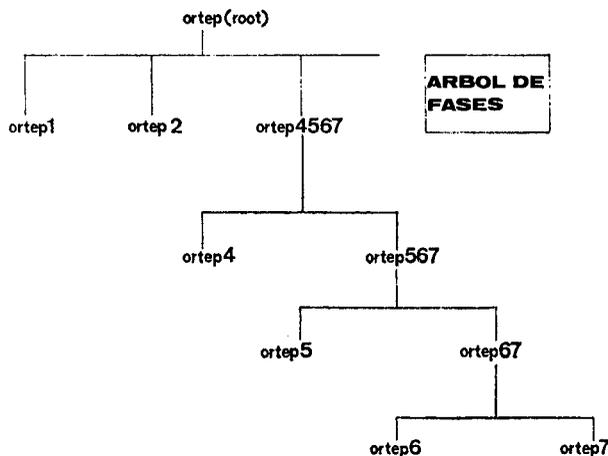


Fig. 1. — Arbol de fases del Ortep.

Calcula a partir de las coordenadas y de los factores anisotrópicos de agitación de los átomos y de las relaciones de simetría entre las moléculas, todas las distancias y ángulos inter o intramoleculares que se consideren necesarios para realizar el dibujo. El esquema molecular puede representarse desde cual-

\* Sección de Cristalografía, Instituto "Jaime Almera", C. S. I. C. Barcelona.

\*\* Centro de Cálculo, Facultad de Ciencias, Universidad de Barcelona.

\*\*\* Departamento de Cristalografía y Mineralogía, Universidad de Barcelona.

quier punto de vista, debiéndose buscar aquél que permita dar al dibujo una mayor perspectiva y una mayor visibilidad de la distribución atómica.

El programa original precisa de un ordenador con 128 k en memoria; las modificaciones realizadas en el programa fueron las necesarias para poder pasar este programa por un ordenador de sólo 84 k, que es el que disponemos (IBM 360-30).

#### MODIFICACIONES REALIZADAS

Para lograr el objetivo antes expuesto, se ha reducido el número de sub-rutinas eliminando aquellas que no son estrictamente necesarias y modificando las restantes de modo que pudiera realizarse un "OVERLAY" agrupando dichas sub-rutinas en fases compatibles.

ortep root	main pgm eront paxes arccos atom axegb	axes norm unit mm mv	diff tmm pkts vm	vmv vv	
ortep 1	prime prelim eigen		ortep 2	searc f200 f400 stor	ortep 4567 xyz
ortep 4	f500 f600		ortep 567	draw ptxy proj symbol radial	ortep 5 f700
ortep 67	number		ortep 6	f800 bond	ortep 7 f900

Fig. 2. — Distribución de sub-rutinas en fases.

En la figura 1, puede verse la distribución de las fases en el "OVERLAY".

La distribución de sub-rutinas en fases se encuentra en la figura 2. Se cambiaron las sub-rutinas originales que controlan el "Plotter" por las que forman parte del "SOFTWARE" básico del "Plotter" Calcomp de que disponemos.

#### RESULTADOS OBTENIDOS

El programa se ha aplicado ya a todas las estructuras que se han resuelto en la Sección, como son: isonitrosoacetanilida, dihidracida malónica hidratada, N-etanol  $\beta$ -isatoxima, 2 etoxi isonitrosoacetanilida, 4 etoxi isonitrosoacetanilida, 3 metil N-etil isonitrosoacetanilida, etc.

Se ha incluido como ejemplo, el dibujo obtenido para la N-etanol  $\beta$ -isatoxima (fig. 3).

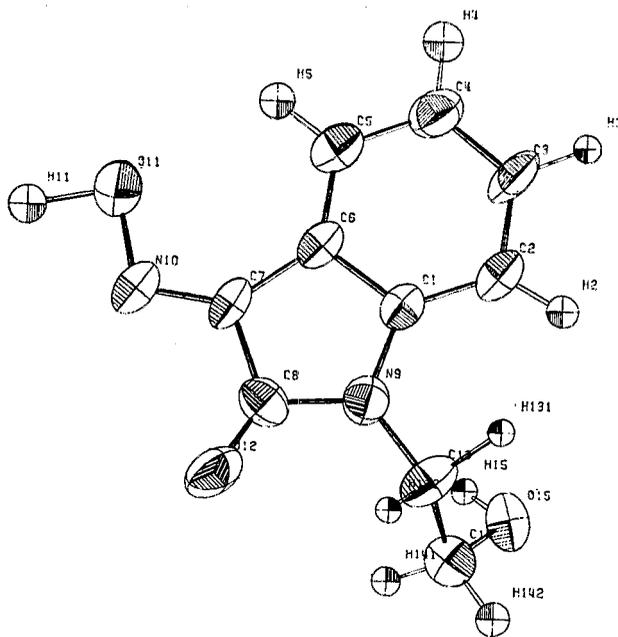


Fig. 3. — Molécula de la N-etanol  $\beta$ -isatoxima y sus elipsoides de agitación térmica.

#### BIBLIOGRAFÍA

- JOHNSON, C. K. (1965) ORTEP-O.R.N.L. 3794, Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.
- FLEISCHER, E. B. (1964): *Journal of the American Chem. Soc.*, 86, 3889.
- BRIANSÓ, J. L., MIRAVITLLES, C., PLANA, F. y FONT-ALTABA, M. (1972): *Acta Geológica Hispánica*, VII, núm. 3, 73-76.
- BRIANSÓ, J. L., MIRAVITLLES, C. y FONT-ALTABA, M. (1972): *Acta Geológica Hispánica*, VII, núm. 3, 77-82.
- PLANA, F., BRIANSÓ, J. L., MIRAVITLLES, C. y FONT-ALTABA, M. (1972): *Acta Geológica Hispánica*, VII, núm. 3, 83-87.
- MIRAVITLLES, C., BRIANSÓ, J. L. y FONT-ALTABA, M. (1972): *Acta Geológica Hispánica*, VII, núm. 3, 88-93.