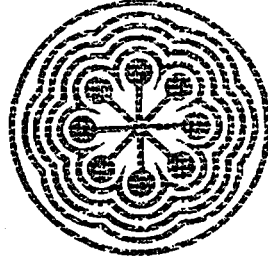




MX0600286

instituto nacional de investigaciones nucleares



IBA-DF 91-08

**POWDERSPEC, UN PROGRAMA PARA LA SIMULACION EFICIENTE DE
ESPECTROS DE RESONANCIA PARAMAGNETICA ELECTRONICA
DE POLVOS CON SIMETRIA ORTORROMBICA**

POWDERSPEC,
UN PROGRAMA PARA LA SIMULACIÓN EFICIENTE DE
ESPECTROS DE RESONANCIA PARAMAGNÉTICA ELECTRÓNICA
DE POLVOS CON SIMETRÍA ORTORRÓMBICA

L. GONZÁLEZ-TOVANY

Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares, Gerencia de
Investigación Básica, Apartado Postal 18-1027, Col. Escandón.
Delegación Miguel Hidalgo, 11801 México, D.F. México.

y

VIRGILIO BELTRÁN L.

Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de
México (UNAM), Circuito Exterior, C.U., A. Postal 70-543,
04510 México, D.F. México.

REPORTE TÉCNICO IBA-DF 91-08
GERENCIA DE INVESTIGACIÓN BÁSICA
ACTIVIDAD DEPARTAMENTAL AD.F-03/91
SEPTIEMBRE 1991

INTRODUCCIÓN

El estudio de polvos y muestras policristalinas por medio de la espectroscopia de resonancia paramagnética electrónica (EPR) ha adquirido importancia en la física del estado sólido y la física de superficies, a pesar de que este estudio resulta más complejo que el correspondiente a cristales individuales debido a que en los polvos los espines tienen una orientación azarosa.

En muchos de los trabajos que se hacen en EPR con el fin de medir tanto los valores de los parámetros del cristal como los del campo magnético que aparecen en el llamado hamiltoniano de espín, se utilizan cristales individuales. Sin embargo, crecer cristales es una tarea que no es fácil y muchas veces sólo es posible disponer de muestras en forma de polvo para efectuar las mediciones. Es necesario, por lo tanto, un conocimiento bien desarrollado de la técnica de polvos para llevar a cabo una estimación precisa de los parámetros mencionados. Este conocimiento podría, además, proporcionar buenas bases para discernir los efectos que producen las superficies de los polvos finos en los espectros de EPR.

Los valores de los parámetros del campo magnético y del cristal se calculan, usualmente, ajustandolos a las posiciones de las líneas del espectro de EPR de los iones paramagnéticos en los cristales individuales. Sin embargo, este procedimiento no es muy útil ni preciso en el caso de muestras policristalinas, debido a que la orientación al azar de los cristalitos "diluye" muchas de

las líneas del espectro y sólo sobreviven aquellas que son relativamente insensibles a la posición angular de los ejes cristalinos con respecto al campo magnético. Por lo tanto, los valores que se obtienen de los parámetros pueden ser muy imprecisos y muchas veces ni aún la simetría del campo cristalino puede ser averiguada, debido a que diferentes hamiltonianos de espín pueden ajustar igualmente bien¹ a las posiciones de las líneas sobrevivientes.

Entonces, con el objeto de obtener buenos valores de los parámetros espectroscópicos se hace necesario recurrir a algunos otros rasgos del espectro^{1,2} como son las diferentes intensidades de las líneas sobrevivientes^{3,4,5}, las distorsiones y desdoblamientos que se producen en estas líneas por la orientación azarosa de los cristalitos^{6,7,8} y las posiciones de las "divergencias" y de los "hombros"⁹ que aparecen como líneas localizadas, respectivamente, en los puntos singulares y en los extremos de los intervalos del campo magnético sobre los que se extiende el espectro. Todos estos rasgos dependen estrechamente de la función de absorción de las micro-ondas $i(H)$ o "patrón de polvos"¹⁰ de la muestra. Por lo tanto, se hace completamente necesario un conocimiento detallado de este "patrón de polvos" para disponer de una técnica confiable de polvos y muestras policristalinas.

Por otro lado, como se mencionó, el conocimiento preciso de la función de absorción $i(H)$ es útil para discernir los efectos de superficie en los espectros de EPR de polvos finos, pues éstos pueden ser utilizados para mostrar de mejor manera tales efectos,

debido a que su relación de superficie a volúmen es alta con respecto a la de los cristales paramagnéticos individuales¹. En este sentido los espectros de un polvo y de una muestra policristalina no serían iguales, pues el del polvo exhibiría efectos de superficie y el de la muestra no. Estos efectos aparecerían como distorsiones de un espectro de cristales orientados al azar que fuese conocido previamente con precisión.

Ahora bien, la función de absorción $i(H)$ con la que se calcula el espectro teórico de EPR se obtiene sumando las contribuciones de cada uno de los cristallitos, los cuales están orientados en todas las direcciones posibles. Esta suma sólo había podido ser expresada en forma analítica o cerrada por medio de una integral muy complicada, la llamada integral de Kneubühl^{11,12}, la cual en la mayoría de los casos sólo puede ser calculada numéricamente en una computadora.

Por otro lado, para simular tanto $i(H)$ como el espectro de EPR de muestras policristalinas existen también métodos numéricos que podrían llamarse de muestreo, como el de Montecarlo^{13,17}, pues se basan en la generación de números pseudoaleatorios; sin embargo, la aplicación de estos métodos consume mucho tiempo de computación, produce resultados ruidosos y sólo es útil cuando se tratan problemas particulares.

Resultados más generales sólo pueden obtenerse a partir de métodos analíticos, varios de los cuales han sido publicados tanto hace tiempo, como recientemente^{14,15,16,17}. En particular,

Beltrán-López y Castro-Tello¹⁷ desarrollaron un método analítico de aplicación general para calcular la función de absorción $i(H)$ y los espectros de EPR de muestras policristalinas en donde esta función se reduce a una integral de una sola variable: el ángulo azimutal ϕ . Sus autores aplicaron este método a iones ${}^6S_{5/2}$ en campos cristalinos cúbicos y axiales¹⁷ y a sistemas axialmente simétricos con tensores A y g anisotrópicos¹⁸, y obtuvieron buenas representaciones analíticas de los patrones de polvos correspondientes.

Este buen éxito alentó el esfuerzo de aplicar el método a campos cristalinos con menor simetría como la ortorrómbica, de tal manera que los autores del programa aquí reportado ya publicaron los resultados de tal esfuerzo¹⁹.

Se vió entonces que sería muy útil un programa para microcomputadoras basado en los resultados mencionados en la publicación anterior. Los autores se dieron a la tarea de desarrollarlo y aquí se reporta el listado completo del programa fuente.

DESCRIPCIÓN DEL PROGRAMA

Se dá el programa fuente con comentarios que describen cada paso en detalle. Estos comentarios aparecen en inglés debido a que el programa ha sido solicitado por investigadores extranjeros.

C*****

PROGRAM POWDRSPG

C*****

```
C*
C* THIS PROGRAM SIMULATES THE SECOND ORDER POWDER PATTERN AND *
C* SPECTRUM OF ELECTRON PARAMAGNETIC RESONANCE (EPR) IN CRYSTAL *
C* FIELDS WITH ORTHORHOMBIC SYMMETRY USING GAUSS-LEGENDRE QUA- *
C* DRATURES, FOR  $0 < \lambda < 1/3$  WHERE  $\lambda = E/D$  USED IN EPR, CO- *
C* RRESPONDING TO  $0 < \eta < 1$ , WHERE  $\eta$  IS THE ASYMMETRY PARAMETER *
C* USED IN NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE (NMR). *
C* *
C* L. GONZALEZ-TOVANY. INSTITUTO NACIONAL DE INVESTIGACIONES NU- *
C* CLEARES. MEXICO. *
C* VIRGILIO BELTRAN L. INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES. UNAM. *
C* *
```

C*****

```
C THE "X" AND "Y" ARRAYS FOR THE DIFFERENT REGIONS OF THE POW-
C DER PATTERN ARE DIMENSIONED.THE NAMES OF THE RESPECTIVE ARRAYS
C (XA,XB,XC,XD,XE) CORRESPOND TO THE REGIONS A,B,C,D,E.THE DI-
C MENSIONS ARE PROPORTIONAL TO THE SIZES OF THE VARIOUS REGIONS.
C XF AND FIN,AND,XU AND UIN ARE "X" AND "Y" ARRAYS,RESPECTIVELY,
C FOR THE FIRST AND THE UTMOST PARTS OF THE SPAN,I.E.,FOR THE
C FLAT PART OF THE SPAN BEYOND THE LIMITS OF THE POWDER PATTERN.
```

C*****

```

DIMENSION    FIN(1000),EIN(300),DIN(300),CIN(300)
DIMENSION    BIN(600),AIN(700),UIN(1000)
DIMENSION    XF(1000),XE(300),XD(300),XC(300)
DIMENSION    XB(600),XA(700),XU(1000)

```

C*****

C THE ARRAYS CSI,POW AND DER,FOR THE VARIABLE CSI,THE POWDER PA-
C TTERN AND FOR THE SIMULATED SPECTRUM RESPECTIVELY ARE DIMEN-
C SIONED.THESE DIMENSIONS CAN BE CHANGED.

C*****

```

DIMENSION    CSI(1200),POW(1200),DER(1200)

```

C*****

C THE ARRAYS OF CONSTANTS OF THE GAUSS-LEGENDRE NUMERICAL QUA-
C DRATURE ARE DIMENSIONED.

C*****

```

DIMENSION    XK(15),AK(15)

```

C*****

C THE NAMES OF THE INPUT AND THE RESULT FILES ARE ASKED BY THE
C PROGRAM.

C*****

```

CHARACTER *7 DATA,RESULT
PRINT *,'DATA?'
READ 1,DATA
PRINT *,'RESULT?'
READ 1,RESULT

```



```

FORMAT(A7)
OPEN(1,FILE=DATA)
OPEN(2,FILE=RESULT)

```

```

C*****
C THE FOLLOWING DATA ARE SUPPLIED IN THE FILE 'DATA':THE G VA-
C LUE FOR THE CENTRAL TRANSITION,E,D,THE SPIN S,THE MICROWAVE
C FREQUENCY,THE LORENTZIAN OR GAUSSIAN LINEWIDTH,THE LINESHAPE
C OPTION AND THE NUMBER OF INTERVALS FOR THE CONVOLUTION AND THE
C THE GRAPHS.

```

```

C*****
      READ(1,*)G,E,D,S,FREQ,WIDTH,LINE,SUIN

```

```

C*****
C THE VALUES FOR THE CONSTANTS HPL(PLANCK CONSTANT),VELIG(LIGHT
C VELOCITY) AND BETA(BOHR MAGNETON),NECESSARY FOR CALCULATING
C THE VALUES OF CSI FROM ITS DEFINITION IN EQ.( )HAVE BEEN SU-
C PPLIED TO THE PROGRAM. H0 AND ETA=3*LAMBDA=3(E/D) ARE CALCULA-
C TED BY THE PROGRAM AND USED FOR CALCULATING CSI FROM THE MAG-
C NETIC FIELD VALUES OF H IN GAUSS.

```

```

C*****
      FREQ=FREQ*1.0E9
      ETA=3.*(E/D)
      HPL=6.6251E-27

      VELIG=2.99793E10

      BETA=0.92729E-20
      D=D*HPL*VELIG*1.0E-4

      CANU=24.*HPL*FREQ*G*BETA
      D2=D*D
      TRES=3.-4.*S*(S+1.)
      CADE=D2*TRES
      FHCSI=CANU/CADE
      WIDTH=FHCSI*WIDTH
      WIDTH2=WIDTH*WIDTH

```

C*****

C THE NECESSARY CONSTANTS FOR CALCULATION ARE GIVEN.

C*****

```

ALN2=ALOG(2.0)
PI=3.14159265
PI2=PI/2.
PI4=PI/4.
SEPI4=3.*PI2
ETA2=ETA*ETA
SMAE2=6.+ETA2
UNTER=1./3.
DOTER=2.*UNTER
RDOTER=SQRT(DOTER)
CUTER=2.*DOTER
OCHTER=2.*CUTER
C1=3.+ETA
C12=C1*C1
C2=3.-ETA
C22=C2*C2
DOMAE=2.+ETA
DOMEE=2.-ETA

DETA=2.*ETA
CMAE=5.+ETA

CMEE=5.-ETA
CIETA=5.*ETA
GETA2=4.*ETA2
TEMAU=3.*ETA+1.
TEMEU=3.*ETA-1.
UMAE=1.+ETA
UMEE=1.-ETA
XK(1)=0.0

```

$XK(2)=0.2011940939$
 $XK(3)=-XK(2)$
 $XK(4)=0.3941513470$
 $XK(5)=-XK(4)$
 $XK(6)=0.5709721726$
 $XK(7)=-XK(6)$
 $XK(8)=0.7244177313$
 $XK(9)=-XK(8)$
 $XK(10)=0.8482065834$
 $XK(11)=-XK(10)$
 $XK(12)=0.9372733924$
 $XK(13)=-XK(12)$
 $XK(14)=0.9879925180$
 $XK(15)=-XK(14)$
 $AK(1)=0.2025782419$
 $AK(2)=0.1984314853$
 $AK(4)=0.1861610001$
 $AK(5)=AK(4)$
 $AK(6)=0.1662692058$
 $AK(7)=AK(6)$
 $AK(8)=0.1395706779$
 $AK(9)=AK(8)$
 $AK(10)=0.1071592204$
 $AK(11)=AK(10)$
 $AK(12)=0.0703660474$
 $AK(13)=AK(12)$
 $AK(14)=0.0307532419$
 $AK(15)=AK(14)$

C*****
C THE LIMITS OF THE REGIONS ARE CALCULATED.
C*****

$$XEI=-C12/6.$$

$$XEF=-C22/6.$$

```

XDI=XEF
XCU=-CUTER*(1.-ETA2)
XDO=-DOTER*ETA2
XBF=OCHTER*UMEE
XAI=XBF
XAF=OCHTER*UMAE

```

C*****

C THE INTEGRATION INTERVALS AND "X" INCREMENT ARE CALCULATED.

C*****

```

RAGX=XAF-XEI
RAGF=1.5*RAGX
XTI=XEI-RAGF
XTF=XAF+RAGF
RAGTX=XTF-XTI
RAGE=XEF-XEI
RAGA=XAF-XAI
DELX=RAGTX/SUIN
DELX2=DELX/2.

```

C*****

C THE NUMBER OF INTERVALS FOR EVERY REGION ARE CALCULATED.

C*****

```

NCF=NCAS(RAGF,DELX)
NCE=NCAS(RAGE,DELX)
NCA=NCAS(RAGA,DELX)
NCU=NCF

```

C*****

C FIRST REGION INTEGRAL.

C*****

```

XFT=XTI+DELX2
DO 6 IF=1,NCF
XF(IF)=XFT
FIN(IF)=0.0
6 XFT=XFT+DELX

```

C*****

C INTEGRAL IN REGION "E":-(3+ETA)2/6 < X < -(3-ETA)2/6

C*****

```

XET=XEI+DELX2
DO 8 I=1,NCE
XE(I)=XET
XM=XMAY(XET,C12)

SUME=0.0

DO 7 IE=1,15
PHI=PI4*(XK(IE)+1.)
SENP=SIN(PHI)
SENP2=SENP*SENP
PHI1=3.*(DETA-C1*SENP2)
PHI2=6.*(DETA*TEMAU+5.*C1*UMEE*SENP2)
DELTA=DELT(PHI1,PHI2,XM)
RO2=RON2(PHI1,PHI2,DELTA)
RAIZ=SQRT(1.-RO2)
7 SUME=SUME+AK(IE)*(1./(DELTA*RAIZ))
EIN(I)=SEPI4*SUME
8 XET=XET+DELX

```

C*****

C INTEGRAL IN REGION "D":-(3-ETA)2/6 < X < -4/3(1-ETA2)

C O -(3-ETA)2/6 < X < -2/3*ETA2.

C*****

```

          IF(ETA.LT.UNTER)GO TO 13
          IF(ETA.GT.RDOTER)GO TO 9
          XDF=XCU
          RAGD=XDF-XDI
          NCD=NCAS(RAGD,DELX)
          GO TO 10
9         XDF=XDO
          RAGD=XDF-XDI
          NCD=NCAS(RAGD,DELX)
10        XDT=XDI+DELX2
          DO 12. J=1,NCD
          XD(J)=XDT
          XME=XMAY(XDT,C12)
          XMD=XMAY(XDT,C22)

          SUME=0.0
          SUMD=0.0
          DO 11 J1=1,15
          PHI=PI4*(XK(J1)+1.)
          SEN2=(SIN(PHI))**2
          PHIE1=3.*(DETA-C1*SEN2)
          PHID1=3.*(C1-C2*SEN2)
          PHIE2=6.*(DETA*TEMAU+5.*C1*UMEE*SEN2)
          PHID2=6.*(C1*CMAE-5.*C2*UMAE*SEN2)
          DELTAE=DELT(PHIE1,PHIE2,XME)
          DELTAD=DELT(PHID1,PHID2,XMD)
          ROE2=RON2(PHIE1,PHIE2,DELTAE)
          ROD2=RON2(PHID1,PHID2,DELTAD)

```

```

RAIZE=SQRT(1.-ROE2)
RAIZD=SQRT(1.-ROD2)
SUME=SUME+AK(J1)*(1./<DELTA E*RAIZE>)
11   SUMD=SUMD+AK(J1)*(1./<DELTA D*RAIZD>)
DIN(J)=SEPI4*(SUME+SUMD)
12   XDT=XDT+DELX
IF(ETA.GT.RDOTER)GO TO 18
GO TO 14
13   CONTINUE

```

C*****

C INTEGRAL IN REGION "C".

C*****

```

XCI=XEF
XCF=XDO
RAGC=XCF-XCI
NCC=NCAS(RAGC,DELX)
GO TO 15
14   XCI=XCU
XCF=XDO
RAGC=XCF-XCI
NCC=NCAS(RAGC,DELX)
15   XCT=XCI+DELX2
DO 17 K=1,NCC
XC(K)=XCT
XM=XMAY(XCT,CETA2)
SUMG=0.0
DO 16 KC=1,15
PHI=PI4*(XK(KC)+1.)
COS2=COS(2.*PHI)
PHI1=3.*(3.-ETA*COS2)

```

```

PHI2=12.*(SMAE2-CIETA*COS2)
DELTA=DELT(PHI1,PHI2,XM)
RO2=ROP2(PHI1,PHI2,DELTA)
RAIZ=SQRT(1.-RO2)
16   SUMC=SUMC+AK(KC)*(1./(DELTA*RAIZ))
    CIN(K)=SEPI4*SUMC
17   XCT=XCT+DELX
    GO TO 21
18   XCI=XDO
    XGF=XCU
    RAGC=XGF-XCI
    NCC=NCAS(RAGC,DELX)
    XCT=XCI+DELX2
    DO 20 K3=1,NCC
    XC(K3)=XCT
    XME=XMAY(XCT,C12)
    XMD=XMAY(XCT,C22)
    SUME=0.0
    SUMD=0.0
    DO 19 KC=1,15
    PHI=PI4*(CXK(KC)+1.)
    SEN2=(SIN(PHI))**2
    PHIE1=3.*(DETA-C1*SEN2)
    PHID1=3.*(C1-C2*SEN2)
    PHIE2=6.*(DETA*TEMAU+5.*C1*UMEE*SEN2)
    PHID2=6.*(C1*CMAE-5.*C2*UMAE*SEN2)
    DELTAE=DELT(PHIE1,PHIE2,XME)
    DELTAD=DELT(PHID1,PHID2,XMD)
    ROE2=RON2(PHIE1,PHIE2,DELTAE)
    ROD2=RON2(PHID1,PHID2,DELTAD)
    RAIZE=SQRT(1.-ROE2)
    RAIZD=SQRT(1.-ROD2)
    SUME=SUME+AK(KC)*(1./(DELTAE*RAIZE))
19   SUMD=SUMD+AK(KC)*(1./(DELTAD*RAIZD))

```



```

                GIN(K3)=SEPI4*(SUME+2.*SUMD)
20             XCT=XCT+DELX
21             CONTINUE

```

C*****

```

C   INTEGRAL IN REGION "B":-2/3 ETA2 < X < 8/3(1-ETA)
C   O -4/3 (1-ETA2) < X < 8/3(1-ETA).

```

C*****

```

                IF (ETA.GT.RDOTER)GO TO 23
                XBI=XDO
                RAGB=XBF-XBI
                NCB=NCAS(RAGB,DELX)
                GO TO 24
23             XBI=XCU
                RAGB=XBF-XBI
                NCB=NCAS(RAGB,DELX)
24             XBT=XBI+DELX2

                DO 26 L=1,NCB

                XB(L)=XBT
                XM=XMAY(XBT,CETA2)
                SUMB=0.0
                DO 25 LB=1,15
                PHI=PI4*(CXK(LB)+1.)
                COS2=COS(2.*PHI)
                PHI1=3.*(3.-ETA*COS2)
                PHI2=12.*(SMAE2-CIETA*COS2)
                DELTA=DELT(PHI1,PHI2,XM)
                ROPO2=ROP2(PHI1,PHI2,DELTA)
                RONE2=RON2(PHI1,PHI2,DELTA)
                RAIZP=SQRT(1.-ROPO2)
                RAIZN=SQRT(1.-RONE2)

```

```

      SUMB1=1./(DELTA*RAIZP)
      SUMB2=1./(DELTA*RAIZN)
25     SUMB=SUMB+AK(CLB)*(SUMB1+SUMB2)
      BIN(L)=SEPI4*SUMB
26     XBT=XBT+DELX

```

C*****

C INTEGRAL IN REGION "A": $8/3(1-\text{ETA}) < X < 8/3(1+\text{ETA})$

C*****

```

      XAT=XAI+DELX2
      DO 29 M=1,NCA
      XA(M)=XAT
      XM=XMAY(XAT,CETA2)
      RAX=SQRT(XM)
      ARGU=(2.*SMAE2-3.*RAX)/(ETA*(10.-RAX))
      ABARGU=ABS(ARGU)
      IF(ABARGU.GT.1.0)ARGU=1.0
      PHI0=(ACOS(ARGU))/2.

      P2MEP0=(PI2-PHI0)/2.
      P2MAP0=(PI2+PHI0)/2.
      SUMEP=0.0
      SUMEN=0.0
      DO 28 MA=1,15
      PHI=P2MEP0*XK(MA)+P2MAP0
      COS2=COS(2.*PHI)
      PHI1=3.*(3.-ETA*COS2)
      PHI2=12.*(SMAE2-CIETA*COS2)
      PHI12=PHI1*PHI1
      PHI22=PHI2*PHI2
      DELTA2=PHI22-4.*PHI12*XM
      IF(DELTA2.LT.0.0)DELTA2=0.0
      DELTA=SQRT(DELTA2)
      ROP02=ROP2(PHI1,PHI2,DELTA)

```

```

RONE2=RON2(PHI1,PHI2,DELTA)
RAIZP=SQRT(1.-ROPO2)
RAIZN=SQRT(1.-RONE2)
DEPOS=DELTA*RAIZP
DENEG=DELTA*RAIZN
IF(DEPOS.LE.0.0.OR.DENEG.LE.0.0)GO TO 27
SUMEP=SUMEP+AK(MA)*(1./DEPOS)
SUMEN=SUMEN+AK(MA)*(1./DENEG)
GO TO 28
27 SUMEP=100.0
SUMEN=100.0
28 CONTINUE
AIN(M)=6.*P2MEP0*(SUMEP+SUMEN)
29 XAT=XAT+DELX

```

C*****

C UTMOST REGION INTEGRAL.

C*****

```

XUT=XAF+DELX2
DO 30 IU=1,NGU
XU(IU)=XUT
UIN(IU)=0.0
30 XUT=XUT+DELX

```

C*****

C THE "X" ARRAYS AND THE "Y" ARRAYS ARE JOINTED IN ORDER THE
C CONVOLUTION IS MADE POSSIBLE.

C*****

```

DO 31 NF=1,NCF

```

```

      CSI(NF)=XF(NF)
31      POW(NF)=FIN(NF)
      DO 32 NE=1,NCE
      NFE=NE+NCF
      CSI(NFE)=XE(NE)
32      POW(NFE)=EIN(NE)
      DO 33 ND=1,NCD
      NFD=ND+NCF+NCE
      CSI(NFD)=XD(ND)
33      POW(NFD)=DIN(ND)
      DO 34 NC=1,NCC
      NFC=NC+NCF+NCE+NCD
      CSI(NFC)=XC(NG)
34      POW(NFC)=CIN(NG)
      DO 35 NB=1,NCB
      NFB=NB+NCF+NCE+NCD+NCC
      CSI(NFB)=XB(NB)
35      POW(NFB)=BIN(NB)
      DO 36 NA=1,NCA
      NFA=NA+NCF+NCE+NCD+NCC+NCB
      CSI(NFA)=XA(NA)
36      POW(NFA)=AIN(NA)
      DO 37 NU=1,NCU
      NFU=NU+NCF+NCA+NCB+NCC+NCD+NCE
      CSI(NFU)=XU(NU)
37      POW(NFU)=UIN(NU)

      NC=NCF+NCA+NCB+NCC+NCD+NCE+NCU

```

C*****

C THE CONVOLUTION WITH A DERIVATIVE LORENTZIAN OR GAUSSIAN IS
C MADE.

C*****

```
IF(LINE.EQ.2)GO TO 40
DO 39 J1=1,NC
FLJ=FLOAT(J1)
SUM=0.0
DO 38 K1=1,NC
FLK=FLOAT(K1)
DIF=(FLK-FLJ)*DELX
DIF2=DIF*DIF
ANUM=DIF*POW(K1)
DENO=(WIDTH2+DIF2)**2
FPRI=ANUM/DENO
38 SUM=SUM+FPRI
DER(J1)=SUM
39 CONTINUE
GO TO 54
40 DO 43 J2=1,NC

FLJ=FLOAT(J2)
SUM=0.0
DO 42 K2=1,NC
FLK=FLOAT(K2)
DIF=(FLK-FLJ)*DELX
DIF2=DIF*DIF
ANUM=DIF*POW(K2)
AREX=ALN2*(DIF2/WIDTH2)
IF(AREX.GT.100.0)GO TO 41
FPRI=ANUM*EXP(-AREX)
GO TO 42
41 FPRI=0.0
42 SUM=SUM+FPRI
DER(J2)=SUM
43 CONTINUE
```

C*****

C THE GREATEST ABSOLUTE VALUE DERIVATIVE IS FOUND FOR NORMALI-
C ZATION.

C*****

```

54     DERN=0.0
      DO 55 L1=1,NC
      DABS=ABS(DER(L1))
      IF(DERN.GT.DABS)GO TO 55
      DERN=DABS
55     CONTINUE
      DO 56 M1=1,NC
56     DER(M1)=DER(M1)/DERN

```

C*****

C THE ARRAYS CSI,POW AND DER ARE WRITTEN FOR INPUT TO GRAPH
C SOFTWARE.

C*****

```

      DO 58 IES=1,NC
      WRITE(2,57)CSI(IES),POW(IES),DER(IES)
57     FORMAT(3X,F7.3,5X,F7.3,5X,F7.3)
58     CONTINUE
      STOP
      END

```

```
FUNCTION NCAS(RAX,DELX)
```

```
C*****
```

```
C THIS FUNCTION CALCULATES THE NUMBER OF INTERVALS OF A REGION
```

```
C*****
```

```

CAS=RAX/DELX
CPE=AINT(CAS)
NGAS=IFIX(CPE)
PFC=CAS-CPE
IF(PFC.GE.0.5)NGAS=NGAS+1
RETURN
END
```

```
FUNCTION XMAY(CSI,C)
```

```

XMAY=6.*CSI+C
RETURN
END
```

```
FUNCTION DELT(FI1,FI2,X)
```

```

ARG=(FI2*FI2)-(4.*(FI1*FI1)*X)
DELT=SQRT(ARG)
RETURN
END
```

```
FUNCTION ROP2(FI1,FI2,DELTA)
```

```

FI12=FI1*FI1
ROP2=(FI2+DELTA)/(2.*FI12)
RETURN
END
```

```
FUNCTION RON2(FI1,FI2,DELTA)
FI12=FI1*FI1
RON2=(FI2-DELTA)/(2.*FI12)
RETURN
END
```


REFERENCIAS

- 1.- D. Cordischi, R.L. Nelson and A.J. Tench, *Trans. Faraday Soc.* **65**, 2740 (1969).
- 2.- R. H. Sands, *Phys. Rev.* **99**, 1222 (1955).
- 3.- B. T. Allen, *J. Chem. Phys.* **43**, 3820 (1965).
- 4.- S. Eidels-Dubovoi and V. Beltrán-López, *J. Magn. Reson.* **32**, 441 (1978).
- 5.- T. Yamamura, A. Hasegawa, Y. Yamata and M. Miura, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **43**, 3377 (1970).
- 6.- H.W. de Wijn and R.F. van Balderen, *J. Chem. Phys.* **46**, 1381(1967).
- 7.- B. Bleaney and R.S. Rubins, *Proc. Phys. Soc. London.* **77**, 103(1961); **78**, 778(1961).
- 8.- F.H. Hurd, M. Sachs and W.D. Hersberger, *Phys. Rev.* **93**, 373 (1954).
- 9.- D.L. Griscom and R.E. Griscom, *J. Chem. Phys.* **47**, 2711 (1967).
- 10.- M.H. Cohen and F. Reif, "*Solid State Physics*". Vol. 5, p.338, Academic Press, New York, 1957.
- 11.- F.K. Kneubühl, *J. Chem. Phys.* **33**, 1074 (1960).
- 12.- J. Rubio O., E. Muñoz P., J. Boldú O., Y. Chen and M.M. Abraham, *J. Chem. Phys.* **70**, 633 (1979).
- 13.- D.L. Griscom, P.C. Taylor, D.A. Ware and P.J. Bray, *J. Chem. Phys.* **48**, 5158 (1967); P. C. Taylor and P. J. Bray

- , *J. Magn. Reson.* **2**, 305 (1970).
- 14.- M. Lardon and Hs.H. Günthard, *J. Chem. Phys.* **44**, 201 (1966).
- 15.- Y. Siderer and Z. Luz, *J. Magn. Reson.* **37**, 449 (1980).
- 16.- V. Beltrán-López and J. Jiménez M., *J. Magn. Reson.* **48**, 302 (1982).
- 17.- V. Beltrán-López and J. Castro-Tello, *J. Magn. Reson.* **39**, 437 (1980).
- 18.- V. Beltrán-López and J. Castro-Tello, *J. Magn. Reson.* **47**, 19 (1982).
- 19.- L. González-Tovany and V. Beltrán-López, *J. Magn. Reson.* **89**, 227 (1990).