

ПРОГРАММА VOLUME ДЛЯ ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ПОЛИЭДРОВ.

1. Пример файла задания входной информации *inp.dat*

Строка	Комментарий
test	Название
19.0064	a – параметры системы координат
19.0064	b
13.009067	c
90.000000	α
90.000000	β
120.00000	γ
6	Координационное число (6 – октаэдр, 4 – тетраэдр)
0.0	x – координаты центрального атома
0.0	y
0.352050	z
A1	символьная метка центрального атома
0.083333	x – координаты лиганда 1
0.000000	y
0.250	z
O1	символьная метка лиганда 1
0.000000	x – координаты лиганда 2
0.083333	y
0.250	z
O2	символьная метка лиганда 2
0.083333	x – координаты лиганда 3
0.083333	y
0.416667	z
O3	символьная метка лиганда 3
0.00	x – координаты лиганда 4
-0.083333	y
0.416667	z
O4	символьная метка лиганда 4
-0.083333	x – координаты лиганда 5
-0.083333	y
0.250	z
O5	символьная метка лиганда 5
-0.083333	x – координаты лиганда 6
0	y
0.416667	z
O6	символьная метка лиганда 6
0	0 – закончить ввод, либо 6(4) – ввод следующего полиэдра

2. Вывод информации

В результате работы программы создается файл с названием output.

Пример файла output

test
CELL CONSTANTS 19.00640 19.00640 13.00907

Печать контрольной
информации из файла

CELL CONSTANTS 90.00000 90.00000 120.00000
 CATION: Al .00000 .00000 .35205
 1 O1 .08333 .00000 .25000
 2 O2 .00000 .08333 .25000
 3 O3 .08333 .08333 .41667
 4 O4 .00000 -.08333 .41667
 5 O5 -.08333 -.08333 .25000
 6 O6 -.08333 .00000 .41667

inp.dat

ATOMS		DISTANCES			ANGLE
I	J	0-I	0-J	I-J	I-0-J
1	2	2.06666	2.06666	2.74333	83.167
1	3	2.06666	1.79311	2.68508	87.861
1	4	2.06666	1.79311	2.68507	87.861
1	5	2.06666	2.06666	2.74333	83.167
1	6	2.06666	1.79311	3.83868	167.987
2	3	2.06666	1.79311	2.68508	87.861
2	4	2.06666	1.79311	3.83868	167.987
2	5	2.06666	2.06666	2.74333	83.167
2	6	2.06666	1.79311	2.68507	87.861
3	4	1.79311	1.79311	2.74333	99.808
3	5	1.79311	2.06666	3.83868	167.987
3	6	1.79311	1.79311	2.74333	99.808
4	5	1.79311	2.06666	2.68508	87.861
4	6	1.79311	1.79311	2.74333	99.808
5	6	2.06666	1.79311	2.68508	87.861

Расчет межатомных
 расстояний и углов в
 координационном полиэдре

FACE DEFINED			PLANE NORMAL			AREA
BY POINTS	OX	OY	OZ			
1 2 3	.81346	.46965	-.34308			3.16619
1 2 5	.00000	.00000	1.00000			3.25878
1 3 4	.81346	-.46965	.34308			3.16619
1 4 5	.00000	-.93931	-.34308			3.16619
2 3 6	.00000	-.93931	-.34308			3.16619
2 5 6	-.81346	.46965	-.34308			3.16619
3 4 6	.00000	.00000	-1.00000			3.25878
4 5 6	.81346	.46965	-.34308			3.16619

Расчет координат нормалей
 к граням и площадей
 граней полиэдра

POLYHEDRAL VOLUME 9.42085
 QUAD.ELONG. 1.01657
 ANGLE VARIANCE 41.08363

Объем полиэдра
 квадратичное удлинение q_e
 угловая дисторсия av