

DPTO. DE MINERALOGIA Y PETROLOGIA  
(Servicio de Difracción de Rayos X)  
UNIVERSIDAD DE GRANADA  
18002 GRANADA (ESPAÑA)

MANUALES DE USUARIO PARA LOS PROGRAMAS DE UTILIZACION DEL  
DIFRACTOMETRO DE RAYOS X

F. Nieto García, A. López Galindo (Responsables Científicos)  
E. Peinado Fenoll (Responsable Informático)

## AGRADECIMIENTOS

Los responsables de la realización de estos programas muestran su más profundo agradecimiento a **Daniel Martín Ramos** por su inestimable ayuda en las tareas de programación de la comunicación Ordenador/Difractómetro y, en general, por todo lo referente a sus aportaciones tanto en el campo informático como científico.

Asimismo, se desea hacer constar aquí también el más sincero sentimiento de gratitud hacia todos aquellos que han ayudado, con sus ideas y apreciaciones, a la realización de esta aplicación.

## I N D I C E

I. Programa de recogida de datos del difractómetro de Rayos X .....	1
II. Programa de tratamiento de diagramas .....	23
III. Programa de manipulación de ficheros .....	39

PROGRAMA DE RECOGIDA DE DATOS DEL DIFRACTOMETRO DE RAYOS X

### Objetivos del Programa

Este programa permite la recogida y almacenamiento de los datos generados por el análisis realizado por el Difractómetro de Rayos X, llevando a cabo después un tratamiento de dichos datos que dependerá en cada caso del tipo de análisis elegido.

Su realización se ha llevado a cabo con la intención de facilitar, mejorar y hacer más rápido y asequible el manejo del Difractómetro de Rayos X, sobre todo de cara a sus usuarios habituales, intentando ahorrarles tiempo y trabajo a la hora de su utilización.

En principio el programa tiene como objetivos los siguientes:

- 1) Recoger y almacenar en disco los datos generados por el análisis realizado por el Difractómetro de Rayos X.
- 2) Realizar una salida impresa (Gráficas y Tablas de Resultados) una vez tratados estos datos.

Además este programa se complementa con otro, independiente de este (ver Manual de Usuario correspondiente), que permite realizar otros tipos de análisis como son: Semicuantitativo, de Cristalinidad, de Relaciones de Intensidades, etc.

También está a disposición del usuario otro programa (independiente de los anteriores) que posibilita el mantenimiento de los discos utilizados en la recogida de datos y que permite realizar diversas operaciones: Borrar un fichero, Renombrarlo, Visualizarlo en pantalla, etc.

Con la conjunción de los tres programas se pretende automatizar (dentro de lo posible) el proceso de Conexión con el Difractómetro, Recogida de Datos y Tratamiento de los mismos.

### **INSTRUCCIONES DE USO**

#### Necesidades previas a su utilización

Antes de comenzar se deberán realizar las siguientes operaciones:

- 1) Comprobar que la Impresora dispone de papel suficiente y que además está situado de forma correcta; es decir que el doblez donde cada página se puede cortar esté situado una o dos líneas por encima de la cabez de impresión de la máquina.

De no hacerse así, los listados y gráficas pueden aparecer entre dos páginas haciendo más difícil su utilización y lectura.

NOTA: Una vez realizada la operación se deberá pulsar el segundo botón de la impresora (empezando por la izquierda) hacia la posición donde veamos escrita la palabra AUTO.

- 2) Se deberá estar en posesión del Disco de Programas y de un disco **YA FORMATEADO** para la recogida de datos.

## Pasos Preliminares

Para comenzar a trabajar se deberán realizar las siguientes operaciones previas:

- 1) Conectar y preparar el Difractómetro.
- 2) Conectar la Impresora (pulsando el interruptor que está en la parte derecha del aparato). Debemos comprobar que se enciende una pequeña luz verde en la parte inferior izquierda, lo cual indica que está lista para funcionar; en caso contrario, y si se enciende otra luz (ambar), nos estará indicando que hay alguna anomalía y que no se puede empezar a trabajar hasta que no la subsanemos (en algunos casos sólo nos estará indicando que falta papel). En cualquier caso pulsando el segundo botón (por la izquierda) a la posición AUTO, posiblemente la Impresora quede lista para funcionar. Si se enciende una luz ROJA nos estará indicando un mal funcionamiento de la máquina de difícil solución.
- 3) Conectar el Ordenador (pulsando el interruptor que está en la parte posterior derecha del aparato). Unos segundos después aparecerán en la pantalla una serie de mensajes (sin mayor interés para nosotros) y a continuación una pregunta:

Select Alternate CPU (y/n)?

A esta pregunta hay que responder siempre con 'n' (sin las comillas por supuesto), pues de lo contrario el Ordenador puede no funcionar correctamente.

Una vez hecho esto, colocaremos en la Unidad de Disco inferior (A:) el Disco de Programas. Volverán a aparecer en pantalla otra serie de mensajes (también sin ningún interés).

A partir de este momento el programa quedará listo para funcionar.

## **INSTRUCCIONES DE USO DEL PROGRAMA**

### Inicio del Programa

Una vez realizados los pasos anteriores aparecerá (o deberá aparecer, si todo ha ido correctamente) en la pantalla un título del programa y una pregunta que nos pide si deseamos que tras la recogida de datos se impriman resultados en papel o no. A esta pregunta deberemos responder con 'S' o 'N' para indicarle al programa nuestra elección.

**NOTA:** A partir de este momento, siempre que aparezca una pregunta del tipo anterior en que se espera una respuesta del tipo '(S/N)' deberemos escribir la respuesta en **MAYUSCULAS**, pues aunque el programa tiene cierto control sobre este particular (el mismo programa prepara el teclado para que al pulsar la tecla correspondiente se escriba en **MAYUSCULAS**), la pulsación en estos casos de letras minúsculas puede provocar resultados imprevisibles en algunas partes del programa.

Cuando hayamos respondido a la pregunta anterior, podremos ver la primera pantalla de información del programa (Ver Anexo 1, Pant. 1) en

la que se muestra un mensaje indicando que se comprueba que el Difractómetro esta preparado para funcionar y que lo mismo sucede para la Impresora (este último no aparecerá si se ha respondido negativamente a la pregunta anterior). Una vez hechas las comprobaciones pertinentes (si no se habían realizado anteriormente se puede hacer ahora), vemos en la parte inferior de la pantalla el mensaje:

**"Cuando sea así, pulsa una tecla para continuar"**

A partir de este momento, y cada vez que veamos un mensaje de este tipo, el programa quedará parado hasta que efectivamente no se pulse una tecla y será conveniente en estos casos pulsar siempre la tecla **ENTER** (↵), para evitar que la pulsación de alguna tecla especial pueda provocar resultados imprevistos en el programa.

Una vez pulsada la tecla **ENTER** (↵) aparecerá la siguiente pantalla de información (Ver Anexo 1, Pant. 2) que nos pedirá que introduzcamos el Disco de Datos en la Unidad B: (superior) y que pulsemos una tecla para continuar. Colocamos el Disco en la Unidad B: (teniendo en cuenta que debe estar **FORMATEADO**), y cuando estemos listos pulsaremos la tecla **ENTER** (↵).

A continuación el programa comenzará a pedir los Datos de Registro del operador que vaya a utilizar el Difractómetro. Estos Datos son los siguientes:

- 1) CLAVE
- 2) OPERADOR
- 3) FINANCIACION DEL TRABAJO
- 4) TEMA DEL TRABAJO
- 5) TIPO DE MUESTRA
- 6) OBSERVACIONES

- 1) **Clave:** En este momento el programa espera la introducción de los CUATRO caracteres que componen la Clave (cualquier intento de introducir más o menos caracteres será rechazado) y una vez tecleados se deberá pulsar **ENTER** (↵).  
Cada persona dispondrá de una Clave personalizada que le identificará para un posterior control de actividades con el Difractómetro.
- 2) **Operador:** Aquí el programa espera la introducción de entre 1 y 10 caracteres y a continuación **ENTER** (↵).  
Se deberá introducir en este caso el nombre del usuario (se recomienda poner las iniciales del nombre y los apellidos).
- 3) **Financiación del Trabajo:** En este punto se pueden introducir entre 1 y 20 caracteres y después **ENTER** (↵).
- 4) **Tema del Trabajo:** Igual que el anterior.
- 5) **Tipo de Muestra:** Se admitirán entre 1 y 10 caracteres y **ENTER** (↵). Es importante contestar a este apartado (Ej: Polvo, AO, etc), pues este dato figurará en la Tabla de Resultados junto a la Sigla de la Muestra.
- 6) **Observaciones:** En este punto se permiten entre 0 (no introducir

nada) y 30 caracteres y ENTER (←-).)

Después aparece el mensaje: ¿Todo correcto (S/N)? (en intermitente), en este momento pulsaremos la tecla 'S' si todo está conforme o 'N' en caso contrario.

Si pulsamos 'N' iremos de nuevo al comienzo de la petición de Datos de Registro (desde Clave); si pulsamos 'S' pasaremos al siguiente paso del programa, la pantalla se borrará y aparecerá el mensaje "ESPERA UN MOMENTO" (en intermitente) y tras unos segundos pasaremos a la siguiente fase del programa.

### Menú Principal

Una vez superada la fase anterior aparecerá en pantalla el Menú Principal de Operaciones (Ver Anexo 1, Pant. 3) que nos muestra el tipo de operaciones que podemos realizar a partir de este momento.

Al final de la pantalla se dan dos mensajes indicativos de cómo hacer las elecciones en el Menú:

- El mensaje superior nos indica que para elegir una opción hay que pulsar la letra que le corresponda (ver ejemplo un poco más adelante).
- El segundo nos indica la forma de decirle al programa que ya hemos hecho todas las elecciones pertinentes.

A la hora de la utilización del Menú habrá que tener en cuenta lo siguiente:

- Sólo se admitirá la pulsación de MAYUSCULAS, pero con la salvedad, en este caso, de que tanto las minúsculas como cualquier otra pulsación que se salga del rango A - M será ignorada.
- Se podrán elegir tantas opciones como se deseen (entre 1 y 13).
- El programa tendrá en cuenta el orden en que se hayan elegido las opciones a la hora de llevarlas a cabo después en la conexión con el Difractómetro; o sea, que si se han elegido las siguientes opciones I, J, A, por ese orden, los trabajos en el Difractómetro también se realizarán en esa secuencia.
- Una vez pulsada la tecla de la opción elegida aparecerá en la pantalla, junto a la letra que identifica la opción, una pequeña flecha en intermitente que indica que esta opción ha sido elegida.

Ejemplo:

Supongamos que queremos elegir las opciones:

- Barrido General Rápido entre 2. y 64.
- Medida de Parámetros  $b_0$ .

cuando el Menú aparezca en pantalla, deberemos pulsar las teclas:

- 'A'
- 'J'

y a continuación ENTER (←-) para indicar que hemos terminado. Una vez pulsada la tecla ENTER (←-) pasamos a una pantalla de

comprobación en la que el programa nos muestra las opciones que hemos elegido y nos pide una confirmación de que esas opciones son exactamente las que queremos, preguntando y esperando una respuesta del tipo (S/N).

Si respondemos que no ('N') el Menú volverá a aparecer en pantalla y podremos cambiar nuestra elección.

Si respondemos que sí ('S') pueden ocurrir varias cosas:

1) Para las opciones de Barridos Generales, y dado que las condiciones quedan completamente definidas, el programa no requerirá más entrada de información.

2) Las opciones de Barridos de Zonas Concretas pedirán más datos en una pantalla que aparecerá a continuación (Ver Anexo 1, Pant. 4) y en la que se requerirán los Angulos Inicial y Final del Barrido. Se podrán indicar tantos Angulos Iniciales y Finales como se quiera (después de introducir el valor para cada Angulo se debe pulsar siempre ENTER (←)) y una vez que se haya finalizado la introducción de los datos se pulsará la tecla ESC. Entonces aparecerá una pantalla con todos los Angulos elegidos y se pedirá una confirmación (S/N) para saber si son correctos. Si respondemos que no ('N') se deberá volver a empezar desde el principio introduciendo de nuevo los datos. Si la respuesta es sí ('S') el programa seguirá adelante.

3) Para las demás opciones aparecerán una serie de Submenús para definir las operaciones a realizar y que son de la siguiente forma:

a) Para la opción I (Medida Fina de Espaciado) aparecerá primero en pantalla un Submenú pidiendo el CALIBRADO (Ver Anexo 1, Pant. 5) que será igual para todos los casos en que se requiera esta operación, y del cual sólo se podrá escoger una opción y se hará pulsando el número correspondiente a la que queramos escoger. A continuación se mostrará el Submenú de Espaciado propiamente dicho (Ver Anexo 1, Pant. 6), en el cual se podrán elegir tantas opciones como se deseen (desde 1 hasta 7) pulsando también los números correspondientes y una vez realizadas las elecciones que se deseen se pulsará ENTER (←). Después aparece una pantalla de confirmación de las elecciones realizadas a la que se responderá con S/N. En caso de que sea no ('N') se volverá al Submenú de CALIBRADO. Si se responde sí ('S') el programa continuará adelante.

b) Para la opción J (Medida de Parámetros  $b_0$ ) aparecerá primero el Submenú de CALIBRADO (igual que el anterior). Después veremos el Submenú de Parámetros  $b_0$  (Ver Anexo 1, Pant. 7), en el que se podrán elegir las opciones que se quieran (desde 1 hasta 3) y siguiendo el mismo procedimiento que en el caso anterior. También como en el caso anterior, se pedirá una confirmación del tipo S/N con los mismos resultados que en el punto a).

c) Para la opción K (Medidas de Cristalinidad) tendremos en pantalla el Submenú con las operaciones posibles (Ver Anexo 1, Pant. 8) en el que se podrán elegir también tantas opciones como se quiera (entre 1 y 4) haciéndolo como en los casos anteriores. También se pedirá confirmación de las opciones elegidas de forma similar a los casos a) y b).

- d) Para la opción L (Medidas de Relaciones de Intensidades) nos aparecerá el Submenú (Ver Anexo 1, Pant. 9) que permite elegir todas las opciones que se quieran (entre 1 y 3) con igual funcionamiento que las anteriores.
- e) Para la opción M (Calibrado) se actuará como en el apartado a) cuando aparece el Submenú de CALIBRADO (Ver Anexo 1, Pant. 5) ya que es el mismo.

### Fin del Menú Principal

Una vez realizadas todas las elecciones (con sus correspondientes confirmaciones) en el Menú Principal y Submenús, el programa mostrará en el centro de la pantalla (Ver Anexo 1, Pant. 10) la pregunta:

**Sigla de la Muestra:**

y en la parte inferior de la misma tres opciones:

F1 = REINICIAR EL PROGRAMA  
F2 = VOLVER AL MENU  
F3 = FINALIZAR

Aquí podemos hacer varias operaciones:

- 1) Escribir la Sigla de la Muestra y pulsar ENTER (↵), con lo cual el programa seguirá adelante (se borrará la pantalla y aparecerá el mensaje "Conexión con el Difractómetro", en intermitente).
- 2) Pulsar la tecla F1 (estas teclas están en la parte superior del teclado) en cuyo caso el programa volverá al principio (Apartado Inicio del Programa).  
**Importante:** En este caso si se ha utilizado ya el programa y se han hecho anteriormente algunas operaciones, al pulsar la tecla F1 y reiniciarse el programa se pueden borrar ficheros de datos ya creados con la consiguiente pérdida irrecuperable de estos datos. Por lo tanto, esta opción no debe elegirse a menos que se esté completamente seguro de que se quiere hacer realmente.
- 3) Pulsar la tecla F2 (que está junto a la anterior) y en este caso se volverá al Menú Principal de Operaciones, donde podremos cambiar las elecciones realizadas anteriormente (volviendo a pasar por los pasos definidos en el apartado anterior).
- 4) Pulsar la tecla F3 (idem) y en este caso le estaremos indicando al programa que hemos acabado nuestro trabajo. Cuando aparezca en la pantalla el indicativo:

A>  
A>

se deberán seguir los siguientes pasos:

- a) Sacar los discos de sus unidades.
- b) Apagar el Ordenador (pulsando el interruptor que está en la parte posterior).

- c) Apagar la Impresora y retirar los listados (si ha salido alguno.
- d) Apagar el Difractómetro.

### Conexión con el Difractómetro

Esta fase comenzará cuando aparezca en la pantalla el mensaje (intermitente) "CONEXION CON EL DIFRACTOMETRO". Tras unos segundos se verán varios mensajes:

- En la parte superior un título.
- En la parte inferior:

#### F1 - PARAR EL DIFRACTOMETRO

que nos indica que pulsando la tecla F1 (sólo es necesario pulsarla una vez y además conveniente, pues si se pulsa varias veces puede dar lugar a resultados inesperados en el programa) en cualquier momento (y mientras Ordenador y Difractómetro estén en conexión) se puede para el Difractómetro y tras unos segundos (segundos que dependerán de que el Difractómetro termine la operación u operaciones que estuviese realizando) aparecerá en la pantalla un pequeño Menú con dos opciones que son:

- 1.- Finalizar el trabajo definitivamente
- 2.- Pasar a la siguiente Muestra

Si elegimos la opción 1 se seguirán los mismos pasos que en el aptdo. 4) del anterior epígrafe (Fin del Menú Principal). Si elegimos la opción 2 volveremos al epígrafe anterior (Fin del Menú Principal) y podremos cambiar la Muestra (si así se quiere) y realizar nuevas operaciones.

NOTA: Si hemos elegido la opción 2 no se debe pulsar F2 cuando el programa nos pide una nueva Sigla de la Muestra, pues si lo hacemos así el programa puede realizar operaciones totalmente incoherentes y que no tendrían nada que ver con lo que le hubieramos indicado en el Menú o Submenús.

- En la parte central superior, primero el tipo de operación que se va a realizar (con el mismo título que el elegido en el Menú Principal, p.e. si la opción elegida fue la 'A', en la pantalla aparecerá: Barrido General Rapido entre 2° y 64°). Debajo la palabra "INSTRUCCIONES" y más abajo aparecerán (de forma rápida) las instrucciones que en ese momento se están mandando al Difractómetro. Se borrarán estas "instrucciones" y aparecerá el mensaje "LEYENDO DATOS DEL DIFRACTOMETRO" (en intermitente); en este momento podrán ocurrir dos cosas:

- 1) Si la opción que se va a realizar es un Barrido (de cualquier tipo) la pantalla se borrará y aparecerá un "rectángulo" dibujado en ella, en las esquinas inferior izquierda e inferior derecha el ángulo inicial y el ángulo final (respectivamente) del Barrido, en la esquina superior izquierda la Sigla de la Muestra y en la esquina superior derecha el mensaje "F1-PARAR EL DIFRACTOMETRO" (con funcionamiento semejante al explicado renglones más arriba) y

a partir de ese momento se empezará a dibujar la gráfica del Barrido (que aparecerá conforme se vayan recogiendo los datos del mismo). Esta gráfica es "provisional" y sólo sirve para ver sobre la marcha si los resultados que se están obteniendo son aproximadamente los esperados.

- 2) Si la opción elegida no es un Barrido, entonces en la pantalla sólo aparecerán los números que se están leyendo del Difractómetro en ese momento, apareciendo el Angulo a la izquierda y la Intensidad a la derecha.

Estas operaciones se irán repitiendo (dependiendo de cuantas se hayan elegido en el Menú Principal) hasta terminar y recoger en el Disco de la Unidad B: (superior) todos los datos que envíe el Difractómetro.

Cuando termine de realizar todas las operaciones aparecerá en pantalla el mensaje "ESPERA UN MOMENTO" (en intermitente) lo cual nos indicará que el programa va a pasar a la siguiente fase.

### Salida de Datos

Esta fase empezará con un título en la parte superior de la pantalla y a continuación (casi de forma inmediata) aparecerá en el centro un mensaje que indica que el programa está leyendo los datos que han sido almacenados en el disco. Una vez realizada esta operación pueden ocurrir varias cosas:

- 1) Para las opciones de Barridos aparecerá a continuación un mensaje en la pantalla indicando que el programa está procediendo a la localización de los Picos de la Muestra. Después se borrará la pantalla y se dibujará la gráfica que tendrá en las dos esquinas inferiores el ángulo inicial y el ángulo final y en la esquina superior izquierda la Sigla. También aparecerá una pequeña escala indicativa en la parte inferior (que se prolongará en vertical hasta la parte superior de la gráfica con unas líneas de puntos) y además el diagrama quedará dividido en cuatro zonas horizontales por medio de unas líneas discontinuas. Unas serie de pequeñas líneas continuas en la parte inferior indicarán los lugares en que se han encontrado los Picos y se corresponderán con los datos aparecidos en la Tabla de Resultados (ver un poco más adelante). La gráfica se dibujará ajustada al máximo valor de las intensidades leídas para que el dibujo no se salga (en principio) de la pantalla. Una vez dibujada en pantalla, esta misma gráfica se imprimirá en papel (cada gráfica irá en una página separada) y a continuación, en la página siguiente del listado, aparecerá una Tabla de Resultados que constará de un pequeño encabezamiento con datos sobre el Tipo de Barrido, Sigla, etc., y una tabla propiamente dicha con los siguientes datos:

- Nº de Orden
- Valor del Angulo donde fué hallado el pico
- Espaciado
- Intensidad
- Y junto a la anterior (entre paréntesis) la Intensidad Relativa.

Una vez terminado el listado, el programa nos preguntará si

queremos aumentar la Sensibilidad del Diagrama y a esta pregunta responderemos S/N.

Si pulsamos 'S', se nos pedirá el coeficiente por el que se quiere multiplicar la Sensibilidad, escribiremos entonces el número que queramos y pulsaremos ENTER (←). En ese momento se borrará la pantalla y se dibujará la nueva gráfica, que también saldrá por Impresora. El programa entonces preguntará de nuevo si se quiere aumentar la Sensibilidad y lo seguirá haciendo hasta que pulsemos 'N'.

Cuando pulsemos 'N' el programa seguirá adelante.

La siguiente pregunta que veremos aparecer será si deseamos que la gráfica quede **expandida** a dos páginas. Si respondemos que sí a esta pregunta (pulsando 'S') en la pantalla veremos primero dibujarse la mitad final de la gráfica que a continuación saldrá por Impresora y después la primera mitad que irá "pegada" a la anterior en el papel, quedando de esa forma **expandida a dos páginas**. Las características de esta nueva gráfica serán similares a las explicadas anteriormente para las otras gráficas normales.

Una vez realizada la impresión (si hemos pulsado 'S') o si hemos contestado negativamente (con 'N') el programa pasará a la siguiente fase.

**NOTA:** La rutina de localización de Picos no es perfecta y por tanto siempre se deberá tener en cuenta que la Tabla de Resultados es sólo una ayuda para la interpretación del Diagrama. No obstante, cuando esta rutina halle un Pico, la posición e intensidad que muestre la Tabla será totalmente correcta, teniendo en cuenta además que esta intensidad es exactamente el mismo valor que se obtuvo del Difractómetro sin alteración de ningún tipo (sin eliminación de fondo o similar).

- 2) Para la opción I (Medida Fina de Espaciado) saldrá impresa una **Tabla de Espaciados**, con una cabecera con datos como Sigla, etc., y una tabla con los siguientes datos:

- Tipo de Mineral
- Angulo ( $2\theta$ )
- Para las opciones 1 y 2 del Menú de Espaciados:

- \* d 0010
- \* d 001
- \* Intensidad
- \* Incremento  $2\theta$  (si lo hubiera)

- Para las opciones 3, 4 y 5:

- \* d 00n (n = 3, 4 ó 5)
- \* d 001
- \* Intensidad

- Para las opciones 6 y 7:

- \* Espaciado
- \* Intensidad.

- 3) Para la opción J (Medida de Parámetros  $b_0$ ) aparecerá impresa primero una gráfica similar a la que se obtiene en las opciones

de Barridos y en la página siguiente una Tabla que además del encabezamiento contendrá estos datos:

- Nombre del Mineral
- Angulo
- Intensidad
- d 060
- b<sub>0</sub>

- 4) Las opciones K (Medidas de Cristalinidad) y L (Medidas de Relaciones de Intensidades) no generan ninguna salida y los datos quedan almacenados en el disco para su posterior utilización con el programa de Tratamiento de Diagramas.
- 5) Las opciones que necesitan Calibrado, así como la propia opción M (Calibrado) generan como salida una línea impresa en la que se indica:
  - Si se ha Calibrado, el Angulo donde se calibró y la Intensidad que se midió en ese punto.
  - Si no se ha Calibrado, un mensaje indicativo de ese hecho.

Una vez realizadas todas las Salidas de Datos, aparecerá de nuevo un mensaje (en intermitente) que indicará que se espere un momento y unos segundos después el programa volverá a pedir la Sigla de la Muestra. Este momento será el más adecuado para cambiar la Muestra en el Difractómetro, aunque esta operación también puede realizarse mientras el programa se encuentra realizando la Salida de Resultados por Impresora (ya que de esta forma se podrá ganar algún tiempo). Hecha esta operación se procederá como se explicó anteriormente en el apartado Fin del Menú Principal (se escribe la nueva Sigla y se pulsa ENTER (←) o se pulsa una de las teclas 'F').

## RESUMEN DE LOS PASOS A SEGUIR

- 1) Encender el Difractómetro.
- 2) Encender la Impresora.
- 3) Encender el Ordenador y colocar los discos.
- 4) Select Alternate CPU (y/n)? 'n' y ENTER (←-↓).
- 5) Pasar las primeras pantallas informativas e introducir datos de registro.
- 6) Elegir las opciones deseadas en el Menú.
- 7) Introducir Sigla, ó F1 = Reiniciar el programa (sólo en casos excepcionales) ó F2 = Volver al Menú ó F3 = Finalizar\*.
- 8) Recogida de datos del Difractómetro (se puede parar pulsando F1).
- 9) Salida de resultados (en el caso de Barridos, aumentar o no la Sensibilidad del Diagrama y/o expandir gráfica).
- 10) Vuelta al punto 7.

(\* Al terminar, extraer los discos, apagar el Ordenador, la Impresora y el Difractómetro).

## ERRORES

En algunos casos pueden aparecer en la pantalla mensajes indicando que algo no va bien en el programa. Estos mensajes, que suelen ser autoexplicativos, nos indicarán cual es el problema y su posible solución (de forma más bien telegráfica).

Si conseguimos solucionar el problema, el programa continuará cuando pulsemos una tecla (preferiblemente ENTER (←)). Si no se ha solucionado volverá a aparecer el mensaje y el programa quedará parado de nuevo hasta que se actúe de forma correcta. En el peor de los casos, si no sabemos qué hacer, lo mejor es apuntar en un papel lo que ha ocurrido, apagar todas las máquinas y preguntar a los que estén a cargo del programa qué hay que hacer para solucionar ese problema.

EJEMPLO: Supongamos que nuestro disco para recogida de datos (el que se coloca en la unidad B:) no está Formateado. En ese caso, y cuando el programa fuera a grabar los datos que estuviera leyendo del Difractómetro en la pantalla aparecería un mensaje similar a este:

**¡HAY PROBLEMAS CON LA UNIDAD DE DISCO Y/O EL DISCO!  
COMPRUEBALO Y PULSA UNA TECLA PARA CONTINUAR**

(en este caso particular la única solución sería apagar todo, volver a encender para formatear el disco y empezar de nuevo).

Sin embargo, hay otro tipo de errores que, en principio, no están previstos por el programa. En estos casos en la pantalla aparecerán unos mensajes de este tipo:

**¡SE HA PRODUCIDO UN ERROR NO PREVISTO!  
AVISA A LOS RESPONSABLES DEL PROGRAMA**

y debajo se verá un pequeño mensaje en inglés (que es el tipo de error que se ha producido). En este momento el programa habrá quedado definitivamente parado y lo único que se debe hacer es anotar lo que ha sucedido (incluido el pequeño mensaje en inglés), apagar todas las máquinas y avisar a los responsables del programa, como se indica en los mensajes anteriores.

Antes de comenzar debes comprobar:

1º) QUE EL DIFRACTOMETRO ESTA LISTO PARA FUNCIONAR

2º) QUE LA IMPRESORA ESTE TAMBIEN LISTA PARA IMPRIMIR

Cuando sea así, pulsa una tecla para continuar

Pantalla 1

PROGRAMA DE ACCESO

Por favor, coloca tu disco de datos en la unidad B:

...Y pulsa cualquier tecla cuando estés listo

Pantalla 2

## MENU PRINCIPAL

- A - BARRIDO GENERAL RAPIDO ENTRE 2· Y 64· (Tiempo aprox. 10 min)
- B - BARRIDO GENERAL INTERMEDIO ENTRE 2· Y 64· (Tiempo aprox. 20 min)
- C - BARRIDO GENERAL SUPERRAPIDO ENTRE 2· Y 64· (Tiempo aprox. 5 min)
- D - BARRIDO GENERAL LENTO ENTRE 2· Y 64· (Tiempo aprox. 50 min)
  
- E - BARRIDO RAPIDO DE ZONAS CONCRETAS
- F - BARRIDO INTERMEDIO DE ZONAS CONCRETAS
- G - BARRIDO SUPERRAPIDO DE ZONAS CONCRETAS
- H - BARRIDO LENTO DE ZONAS CONCRETAS
  
- I - MEDIDA FINA DE ESPACIADO
- J - MEDIDA DE PARAMETROS Bo
- K - MEDIDAS DE CRISTALINIDAD
- L - MEDIDAS DE RELACIONES DE INTENSIDADES
- M - CALIBRADO

PARA ELEGIR UNA OPCION PULSA LA LETRA CORRESPONDIENTE

PARA TERMINAR PULSA "ENTER" (↵)

Pantalla 3

BARRIDOS DE ZONAS CONCRETAS

Indica el ángulo de inicio: 10

Indica el ángulo final: 30

Para acabar pulsa <ESC>

Pantalla 4

CALIBRADO

¿Qué pico deseas utilizar para calibrar?

1. - CUARZO (4. 26 A)
2. - CUARZO (3. 33 A)
3. - CUARZO (1. 54 A)
4. - Si Elemental (28. 5·)
5. - Si Elemental (47. 5·)
6. - Si Elemental (56. 1·)

7. - NO CALIBRAR

ELIGE TU OPCION:

Pantalla 5

ESPACIADO

1. - ESPACIADO BASAL DE LA MOSCOVITA (00, 10)
2. - ESPACIADO BASAL DE LA PARAGONITA (00, 10)
3. - ESPACIADO BASAL DE LA CLORITA (00, 3)
4. - ESPACIADO BASAL DE LA CLORITA (00, 4)
5. - ESPACIADO BASAL DE LA CLORITA (00, 5)
6. - ESPACIADO BASAL DE LA CALCITA (10, -1, 4)
7. - ESPACIADO BASAL DE LA DOLOMITA (10, -1, 4)

PARA ELEGIR UNA OPCION PULSA EL NUMERO CORRESPONDIENTE

PARA TERMINAR PULSA "ENTER" (↵)

Pantalla 6

MEDIDA DE PARAMETROS Bo

1. - Bo MOSCOVITA
2. - Bo FILOSILICATOS TRIOCTAEDRICOS
3. - Bo PARAGONITA

PARA ELEGIR UNA OPCION PULSA EL NUMERO CORRESPONDIENTE

PARA TERMINAR PULSA "ENTER" (↵)

Pantalla 7

MEDIDAS DE CRISTALINIDAD

1. - MOSCOVITA A 10 A
2. - MOSCOVITA Y PARAGONITA A 5 A - 003 CLORITA
3. - MOSCOVITA A 2 A
4. - 004 CLORITA

PARA ELEGIR UNA OPCION PULSA EL NUMERO CORRESPONDIENTE

PARA TERMINAR PULSA "ENTER" (↵)

Pantalla 8

MEDIDAS DE RELACIONES DE INTENSIDADES

1. - REFLEXIONES BASALES DE LA MICA BLANCA
2. - REFLEXIONES BASALES DE LA CLORITA
3. - RELACION 3.33/4.26 DEL Q

PARA ELEGIR UNA OPCION PULSA EL NUMERO CORRESPONDIENTE

PARA TERMINAR PULSA "ENTER" (↵)

Pantalla 9

SELECCIONAR UN OPCIÓN DE MENÚ

OPCIÓN 1: [DESCRIPCIÓN]

OPCIÓN 2: [DESCRIPCIÓN]

OPCIÓN 3: [DESCRIPCIÓN]

Sigla de la muestra:

OPCIÓN 4: [DESCRIPCIÓN]

OPCIÓN 5: [DESCRIPCIÓN]

F1 = REINICIAR EL PROGRAMA    F2 = VOLVER AL MENU    F3 = FINALIZAR

Pantalla 10