

鉱物の結晶解析計算システム (II)

金沢康夫* 月村勝宏* 堀内弘之**

KANAZAWA, Y., TSUKIMURA, K. and HORIUCHI, H. (1958) A crystallographic computation program system for minerals (II). *Bull. Geol. Surv. Japan*, vol. 36 (8), p. 463-478.

1. はじめに

鉱物の結晶解析計算システムと題するこのシリーズではX線結晶構造解析で使用する計算プログラムの処理内容についての紹介を行う。プログラムはとくに工業技術院筑波研究センターの情報計算センター (RIPS) で使用可能となったものを中心に解説する。今回は結晶構造解析の概要とX線回折データの収集・整理について述べた(金沢・月村・堀内, 1981)。今回は結晶構造因子の位相決定と構造の精密化について述べる。

2. 結晶構造因子の位相角決定と構造の精密化

結晶構造因子は結晶構造とそれによるX線反射強度データを結び役をもつ。この関係を第1図に示す。結晶構造因子 $F(\mathbf{h})$ と結晶内電子密度分布 $\rho(\mathbf{r})$, すなわち結晶構造は数学的にフーリエ変換の関係にあり, 互いに一方から他方へと計算できるようになっている。これを式で表わせば, $\rho(\mathbf{r}) \rightarrow F(\mathbf{h})$ は

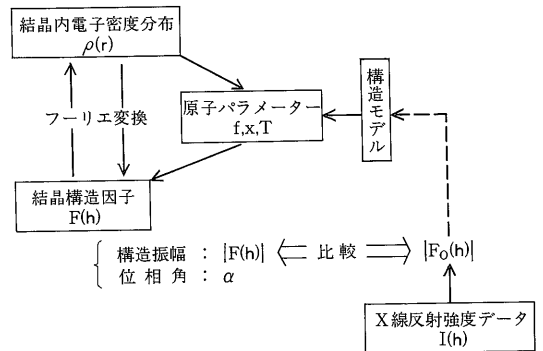
$$F(\mathbf{h}) = \int_{\text{単位格子}} \rho(\mathbf{r}) \exp(2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.1)$$

$F(\mathbf{h}) \rightarrow \rho(\mathbf{r})$ は

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{h}} F(\mathbf{h}) \exp(-2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{r}) \quad (2.2)$$

となる。ここで \mathbf{h} は逆格子ベクトルあるいは反射の指数, \mathbf{r} は実格子ベクトル, V は単位格子の体積, $d\mathbf{r}$ は体積要素である。

最初に (2.1) 式を用いて, 結晶構造から結晶構造因子を計算する過程を示す。(2.1) 式は単位格子内の積分の形であるがこのままの式では計算できない。そこで単位格子中の原子ごとの電子密度分布についての和をとることを考えて, (2.1) 式で $\mathbf{r} = \mathbf{x} + \mathbf{r}'$ (\mathbf{x} は原子の中心位置座標) という置きかえを行えば,



第1図 結晶構造, 結晶構造因子およびX線反射強度データの関係

$$F(\mathbf{h}) = \sum_{\text{単位格子}} \left\{ \int \rho(\mathbf{r}') \exp(2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right\} \times \exp(2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{x}_n) \quad (2.3)$$

と N 個の原子についての和の形に変形できる。ここで,

$$f_n(\mathbf{h}) = \int \rho_n(\mathbf{r}) \exp(2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.4)$$

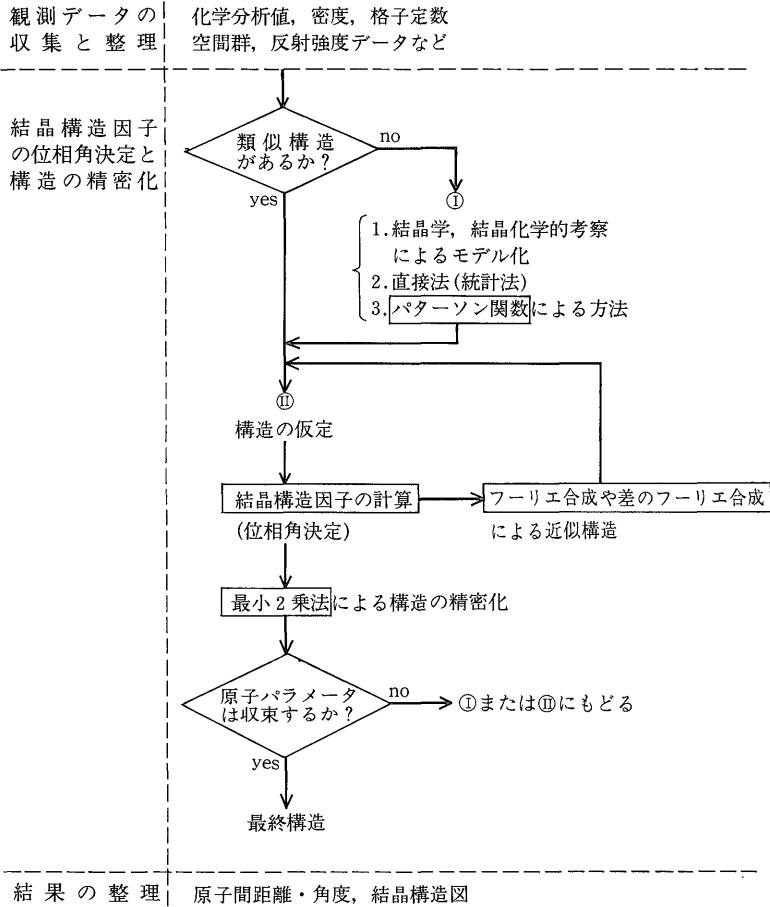
を原子種 n についての原子散乱因子と呼び, すでに多くの原子についての計算値が *International tables for X-ray crystallography*, vol. IV (1974) に与えられているので, これを用いれば (2.3) 式が計算可能となる。さらに原子の熱振動を考慮に入れると, (2.3) 式は

$$F(\mathbf{h}) = \sum_{n=1}^N f_n(\mathbf{h}) \exp(2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{x}_n) \cdot T_n \quad (2.5)$$

となる。ここで T_n が原子の熱振動に関係する係数である。 \mathbf{x}_n, T_n を原子パラメータと呼ぶことにすれば結晶構造は原子パラメータで代表できるし, $F(\mathbf{h})$ は原子パラメータの関数として扱うことができる。

次にX線反射強度データから結晶構造モデルを求める過程について述べる。結晶構造因子は一般に複素数量であり, $F(\mathbf{h}) = |F(\mathbf{h})| e^{i\alpha}$ (α は位相角) の形に書くことが

* 鉱床部 ** 東京大学理学部鉱物学教室



第2図 結晶構造解析の作業過程 今回は四角わくで囲んだ計算について述べる。

できる。第1図に示したようにX線反射強度データ $I(\mathbf{h})$ からは $|F(\mathbf{h})|$ が得られるだけで位相角 α についての情報を欠いている。したがってなんらかの方法で位相角を決定しないことには結晶構造に到達することはできない。この位相角決定が構造解析の主要部で、いくつかの方法が考え出されている。これを第2図で説明する。もし構造の手がかりがない場合(第2図の①のケース)には直接法(統計法)あるいはパターソン関数による方法などが試みられる。また、もし解析対象となっている結晶に対してすでに類似構造が知られている場合(第2図の②のケース)には、その類似構造の原子パラメータを初期値としてフーリエ合成などで全原子を探し出し、そのあと最小2乗法により構造の精密化を行えばよい。そして鉱物結晶は②のケースに該当することがはなはだ多い。というのは、鉱物の場合、今やまったく知られていない新構造というものめったに出現しないからである。“新鉱物”として毎年多数発見される鉱物は、

ほかの既知鉱物と1)同型である、2)超構造の関係にある、という場合が少なくない。1)の時にはすぐ最小2乗法による構造の精密化にとりかかればよい。2)の時には、基本構造の上に立って種々の構造モデルを立てるやり方や変型パターソン関数を使う方法などが知られている。

というわけで、今回は②のケースでよく知られている計算プログラム①結晶構造因子の計算、②フーリエ合成(パターソン関数を含む)、③最小2乗法による構造の精密化を紹介する。①と②についてはFORTRANプログラムRSSFR-5(桜井, 1967)、①と③についてはRFINE 2(FINGER, 1969の改訂版)がそれぞれすでにRIPSで使用可能となっている。

3. 結晶構造因子の計算

結晶構造因子の計算はRSSFR-5とRFINE 2の両者のプログラムで実行可能であるが、前節(2.4)式の熱振動 T に対する表式が異なっている。まず、RSSFR-5 プ

プログラムでは原子は調和振動していると仮定して、

$$T = \exp(-\mathbf{h}^t \mathbf{B} \mathbf{h}) \quad (3.1)$$

とおく。B を異方性温度因子と呼び、3 × 3 の対称マトリックスである。もし原子が等方的に振動しているのであれば

$$T = \exp(-B \sin^2 \theta / \lambda^2) \quad (3.2)$$

と書き、B を等方性温度因子と呼んでいる。なお、θ はブラッグ角、λ はX線の波長でTが方向に依存しないことを表わしている。(3.1) 式を(2.4) 式に代入し、かつベクトルの成分表示で書き直すと結晶構造因子は

$$F(h_1, h_2, h_3) = \sum_{n=1}^N f_n(h_1, h_2, h_3) \times \exp\left(2\pi i \sum_{j=1}^3 h_j x_n^j - \sum_{j,k=1}^3 h_j h_k b_n^{jk}\right) \quad (3.3)$$

となる。ここで $\mathbf{h} = (h_1, h_2, h_3)$ 、 b^{jk} は異方性温度因子である。通常の解析ではこの式で充分であるが、熱振動が大きくなり調和振動の近似では精度が悪い場合には非調和熱振動の項を追加する必要が生じてくる。このためにRFINE 2 プログラムでは非調和項を含めた次式を採用している。

$$F(h_1, h_2, h_3) = \sum_{n=1}^N f_n(h_1, h_2, h_3) \exp\left(2\pi i \sum_{j=1}^3 h_j x_n^j - \sum_{j,k=1}^3 h_j h_k b_n^{jk} - i \sum_{j,k,l=1}^3 h_j h_k h_l c_n^{jkl} + \sum_{j,k,l,m=1}^3 h_j h_k h_l h_m d_n^{jklm}\right) \quad (3.4)$$

ここで、 c^{jkl} 、 d^{jklm} を3次、4次のキュムラント成分と呼んでいる。原子 n が一般位置にある場合には x_n^j 、 b_n^{jk} 、 c_n^{jkl} 、 d_n^{jklm} はそれぞれ3、6、10、15個の独立成分をもつ。

以上の式に対称操作を考慮すれば最終的な計算式が得られる。これを(3.3) 式についてのみ示すと、

$$F(h_1, h_2, h_3) = \sum_{n=1}^N a_n f_n \sum_{s=1}^S \exp\left\{2\pi i \left(\sum_{j=1}^3 h_{js} x_n^j + t_{js}\right) - \sum_{j,k=1}^3 h_{js} h_{ks} b_n^{jk}\right\} \quad (3.5)$$

となる。ここで a_n は位置の多重度、 h_{js} などは対称操作で変換された値、 t_{js} は並進成分である。(3.4) 式も同様に扱うことができる。

なお、原子散乱因子 f は異常分散効果を考慮すれば、

$$f = f_0 + f' + if'' \quad (3.6)$$

という f' と f'' の補正項を加えた式になる。さらにRFINE 2 ではこれに席占有率というパラメータを掛けて、一つの原子位置を2種の異なる原子が占有している構造を扱えるようにしてある。また F は実数項と虚数項

に分けて

$$F(\mathbf{h}) = A(\mathbf{h}) + iB(\mathbf{h}) \quad (3.6)$$

の形で最終的に整理される。

4. フーリエ合成

結晶構造因子 $F(\mathbf{h})$ が得られれば、電子密度分布 $\rho(\mathbf{r})$ は(2.2) 式により求めることができる。構造解析では \mathbf{r} についての任意セクションの $\rho(\mathbf{r})$ 図を作ることをフーリエ合成と呼んでいる。

第2図において構造を仮定したあとで観測したX線強度により適合するように原子パラメータを修正したり、初期の仮定では省かれていた軽い原子を探し出したりするにはフーリエ合成による方法が有効である。この時、(2.2) 式の $F(\mathbf{h})$ に $|F_0(\mathbf{h})|e^{i\alpha_0}$ を代入して $\rho(\mathbf{r})$ を計算すればよい。ここで $|F_0(\mathbf{h})|$ は実験値、 α_0 は仮定構造から計算した構造因子の位相角である。つまり実験値の $|F_0|$ に位相角を構造モデルから借りてフーリエ合成を行う方法である。

フーリエ合成は $\rho(\mathbf{r})$ を求める目的だけの使用に限らず、パターン関数や差のフーリエ合成などの他の解析手法としての使い方がある。いずれの場合でも(2.2) 式の $F(\mathbf{h})$ に相当する量のみが入れ変わるだけで計算式は同じである。パータソン関数の時には $|F(\mathbf{h})|^2$ 、差のフーリエ合成の時には $\{F_0(\mathbf{h}) - F_c(\mathbf{h})\}$ を用いる。実際の計算プログラムでは(2.2) 式を三角関数を使って展開していき、計算時間やメモリーを節約するテクニックが用いられている。

ところで上記の式は三斜晶系 $P1$ を想定して導いた式であり、対称性が高くなるともう一つ計算のステップがふえてくる。というのは、逆空間内の限られた領域にある独立反射だけの合成では正しい結果が得られず、一度三斜晶系にまで反射領域を拡張して、そこで(2.2) 式を用いる必要がある。対称操作による逆空間への構造因子の拡張方法は次のとおりである。実格子空間に対称操作 $\mathbf{x}' = \mathbf{R}\mathbf{x} + \mathbf{t}$ があると、これに対応して逆格子空間では

$$F(\mathbf{h}) = F(\mathbf{R}\mathbf{h}) \exp(-2\pi i \mathbf{h}\mathbf{t}) \quad (4.1)$$

の関係がある。この関係式を用いればすべての空間群に対して同じ formalism でプログラムが書ける。

以上の準備ができれば、 $\rho(\mathbf{r})$ を求めるのには単に作図したい面の \mathbf{r} を順次指定して、計算値を該当する座標に記入すればよい。RSSFR-5 プログラムでは単位格子を座標分割して、その分割交点の座標 \mathbf{r} に対する電子密度値を計算するようになっていいる。そして各結晶軸に対するセクションの電子密度図を得ることができる。

5. 最小2乗法による構造の精密化

最小2乗法は観測値の集合に対してもっともよく合うモデルまたはモデルのパラメータを求める方法で、従来からよく使用されている。構造解析の場合、観測値はX線回折強度データ、求めたいパラメータは前節で述べた結晶構造因子の中に出てくる原子の座標値、温度因子等の値である。最小2乗法を適用する条件としておよそ正しい結晶構造のモデルが求められていなければならない。そうでないと、パラメータが収れんしなかったり、偽の構造にたどり着いたりすることになる。

さて、構造解析で最小にしたい量は

$$r1 = \sum_{\mathbf{h}} \omega_{\mathbf{h}} (|F_0(\mathbf{h})| - K|F_c(\mathbf{h})|)^2 \quad (5.1)$$

あるいは

$$r2 = \sum_{\mathbf{h}} \omega_{\mathbf{h}} (|F_0(\mathbf{h})|^2 - K|F_c(\mathbf{h})|^2)^2 \quad (5.2)$$

ここで、 $|F_0(\mathbf{h})|$ は回折強度データより得られた観測結晶構造因子であり、 $F_c(\mathbf{h})$ は構造モデルのパラメータを使って計算した構造因子、また $\omega_{\mathbf{h}}$ は \mathbf{h} に依存する重み、 \mathbf{k} は尺度因子で本来は F_0 に掛けるべきであるが計算上 F_c に掛けてある。r1 と r2 の違いは前者の観測値が構造因子であるという立場、後者が回折強度データであるという立場に基づいている。

r1 の場合をとって最小2乗法について簡単に説明する。今、 $F_c(x_1, x_2, \dots, x_p, \dots) = K|F_c(\mathbf{h})|$, $F_0 = |F_0(\mathbf{h})|$ とかくことにする。ここで $x_1, x_2, \dots, x_p, \dots$ は求めるべきパラメータである。そうすると観測方程式としては

$$F_c(x_1, x_2, \dots, x_p, \dots) = F_0 \quad (5.3)$$

の形の式が反射数だけできる。 F_c は x に対して線型ではないので、線型近似を何回も繰り返して逐次的に解を求める。近似値あるいは出発値を x' とし、変化量を ξ とすれば、 $x = x' + \xi$ となる。 F_c を ξ で展開し、1次の項のみをとれば

$$F_c(x_1, x_2, \dots, x_p, \dots) = F_c(x'_1, x'_2, \dots, x'_p, \dots) + \frac{\partial F_c}{\partial x_1} \xi_1 + \frac{\partial F_c}{\partial x_2} \xi_2 + \dots + \frac{\partial F_c}{\partial x_p} \xi_p + \dots \quad (5.4)$$

となる。(5.3) と (5.4) を使えば

$$\frac{\partial F_c}{\partial x_1} \xi_1 + \frac{\partial F_c}{\partial x_2} \xi_2 + \dots + \frac{\partial F_c}{\partial x_p} \xi_p + \dots = F_0 - F_c(x'_1, x'_2, \dots, x'_p, \dots) \quad (5.5)$$

という ξ についての多数の連立一次方程式ができるので、これを通常の手続きで正規方程式を作り、解けばよい。解 ξ が得られれば $x' + \xi$ を次の初期値におきかえて、また最小2乗法を繰り返せばよい。これを普通、数サイクル続ける。(5.5) 式に表われる一般項の偏微分係

数 $\partial F_c / \partial x_p$ は (3.6) 式を用いれば

$$\frac{\partial F_c}{\partial x_p} = \frac{\partial K|F_c(\mathbf{h})|}{\partial x_p} = \frac{K}{\{A(\mathbf{h})^2 + B(\mathbf{h})^2\}^{1/2}} \times \left\{ A(\mathbf{h}) \frac{\partial A(\mathbf{h})}{\partial x_p} + B(\mathbf{h}) \frac{\partial B(\mathbf{h})}{\partial x_p} \right\} \quad (5.6)$$

となるが、各パラメータに関する $\partial A / \partial x_p$, $\partial B / \partial x_p$ の値は構造因子の計算過程であらかじめ求めておくことができる。

RFINE 2 で精密化できるパラメータは 1) 尺度因子、2) 席占有度、3) 座標値、4) 温度因子、5) 3次キュムラント、6) 4次キュムラント、それに後述する7) 消衰因子の7種類である。もしこれらのパラメータの間に独立・従属の関係があれば、RFINE 2 では入力データでこの関係を与えることができるようにプログラムがくまれている。

さて、最小2乗法で得られたパラメータが妥当であるかどうかを評価する指標として信頼性因子 (R-factor) というものがある。通常 R 因子としては

$$R = \frac{\sum ||F_0(\mathbf{h})| - K|F_c(\mathbf{h})||}{\sum |F_0(\mathbf{h})|} \quad (5.7)$$

を用いる。しかし、統計学的には (5.1) と (5.2) の r1 と r2 に対して次の重みつき R 因子を用いるほうが望ましい、

$$R1 = \left\{ \frac{\sum_{\mathbf{h}} \omega_{\mathbf{h}} (|F_0(\mathbf{h})| - K|F_c(\mathbf{h})|)^2}{\sum_{\mathbf{h}} \omega_{\mathbf{h}} |F_0(\mathbf{h})|^2} \right\}^{1/2} \quad (5.8)$$

$$R2 = \left\{ \frac{\sum_{\mathbf{h}} \omega_{\mathbf{h}} (|F_0(\mathbf{h})|^2 - K|F_c(\mathbf{h})|^2)^2}{\sum_{\mathbf{h}} \omega_{\mathbf{h}} |F_0(\mathbf{h})|^4} \right\}^{1/2} \quad (5.9)$$

そして、これらの R 因子が 30% 以下になれば本質的に正しい構造であると考えられている。最近では R 因子が 1-2% あるいはそれ以下の精密構造解析の例も報告されており、原子の結合電子雲の形についての議論もされるようになってきている。

最後に消衰効果の補正について少し述べておく。運動学的理論により得られた反射強度と構造因子を Q_c, F_c とし、これに消衰のための係数 y (消衰因子) を掛けると、実際に期待される反射強度 Q_c^* と構造因子 F_c^* は

$$\left. \begin{aligned} Q_c^* &= y Q_c \\ F_c^* &= y^{1/2} F_c \end{aligned} \right\} \quad (5.10)$$

となる。消衰因子の導き方については省略するが、RFINE 2 プログラムでは COPPENS and HAMILTON (1970) の表式を用いている。それによると

$$y = (1 - g r F_c^3)^{-1/2} \quad (5.11)$$

$$\left\{ \begin{aligned} r &= -2 \left(\frac{1 + \cos^4 2\theta}{1 + \cos^2 2\theta} \right) \left(\frac{T}{\sin 2\theta} \right) \left(\frac{\lambda^3}{V^2} \right) \left(\frac{e^4}{m^2 c^4} \right) \\ g &= \begin{cases} g \text{ (等方性温度因子)} \\ (\mathbf{D}'\mathbf{ZD})^{1/2} \text{ (Type 1 の異方性温度因子)} \\ (\mathbf{N}'\mathbf{WN})^{-1/2} / \lambda \text{ (Type 2 の異方性温度因子)} \end{cases} \end{aligned} \right.$$

ここで θ はブラッグ角, T は有効平均通過距離, λ は波長, V は単位格子体積, e, m, c は通常の意味どおりである。また, g は消衰因子で異方性には2つのタイプの両極端がある。タイプIはモザイク・ブロックの角度広がり有利の場合, タイプIIはモザイク粒子の大きさが有利の場合である。それぞれ **Z** と **W** が異方性消衰因子となる。

D と **N** の意味は **D** が入射・反射の両線に直角な方向ベクトル, **N** が入射線と **D** に直角なベクトルを示す。

COPPENS と HAMILTON の表示は ZACHARIASEN (1967) の近似に基づくものであるが, 後に BECKER and COPPENS (1974) によりこの方法は消衰効果の小さいところ ($\mu > 0.8$) で成り立つことが指摘されている。

6. プログラム使用法

6.1 RSSFR-5: 一般フーリエ合成(および構造因子)

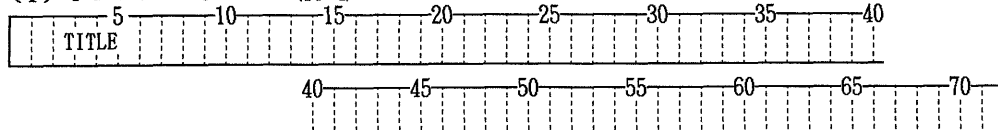
(原作 桜井敏雄, 1967)

6.1.1 内容

すべての空間群に対して等方性または非等方性温度因

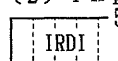
6.1.2 入力データ

(1) Title Card (18A4)



TITLE 任意の英数字, 出力の標題やメモに使用する。

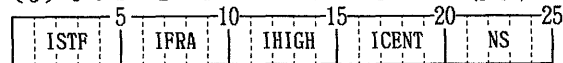
(2) Input Control Card (15)



IRDI = 0 : 反射データを簡易形式で読む。

= 2 : 反射データを標準形式〔9〕で読む。

(3) Job Selection Card (515)



ISTF = 0 : 構造因子を計算しない。

= 1 : 構造因子を計算する。

IFRA = 0 : フーリエ合成を計算しない。

= 1 : フーリエ合成を計算する。

= 2 : パターソン合成を計算する。

= 3 : D合成を計算する。

ただし, IFRA ≠ 0 の時, (10) の IOP ≠ 0 ならばその指示に従う。

IHIGH = 0 or 1 : (10) (11) (12) の指示に従ってフーリエ合成等を行う。

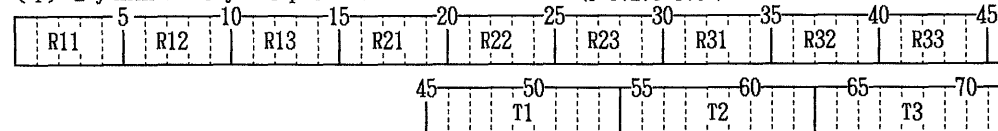
= 2 : 標準方式で計算をする。このときは, (10) は F (0,0,0) のみを入れ, (11) (12) はブランクでよい。

ICENT = 0 : 対称心なし。

= 1 : 対称心あり。

NS (4) の Symmetry の数。対称心のある場合は等価位置の半分, ないときは等価位置の数と等しい

(4) Symmetry Operation Card (9F5.2,3F9.6)



子を用いた構造因子およびフーリエ合成やパターンソン合成を行う。入力の反射データは独立な反射だけでよく, その順序も任意でさしつかえない。

フーリエ合成の結果はどれかの軸に対する切り口で表わされるため, 任意の軸に対する切り口を見たい場合軸の選び方を変える必要がある。結晶の **a, b, c** 軸を内部座標軸 **a', b', c'** (内部指数は h', k', l') のどれかに対応させ, **a'** 軸に対する切り口を, **c'** 軸を横に, **b'** 軸を縦にとつて印刷する。

$$\text{制限 } (|h'|_{\max} + 1)(|k'|_{\max} + 1)(|l'|_{\min} + 1) \leq 11,000$$

$$|h'| \leq 50, |k'| \leq 50, |l'| \leq 20$$

入力データの Range of calculation card の中で
 $NMAX - NMIN \leq 100$

ただし NMAX は N1MAX, N2MAX, N3MAX の中で最大, NMIN は N1MIN, N2MIN, N3MIN の中で最小のものである。

$$\frac{N3MAX - N3MIN}{N3D} \leq 26$$

R11, R12, . . . , T3は

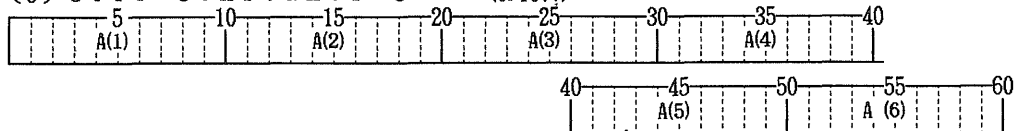
$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R11 & R12 & R13 \\ R21 & R22 & R23 \\ R31 & R32 & R33 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} T1 \\ T2 \\ T3 \end{pmatrix} \quad R = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad T = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

を示すRとTの成分。

の対称操作を含むこと。

全体でNS枚のカードからなる。

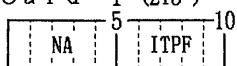
(5) Cell Constants Card (6F10,7)



A(1)~A(6) 格子定数: a ~ cos(γ), または, a* ~ cos(γ*)

(6) Atomic Parameter Cards (215 /A4, A2, I2, 4X, F6.3, 3F8.5, F6.3 /6F9.6)

Card 1 (215)

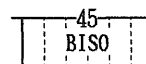
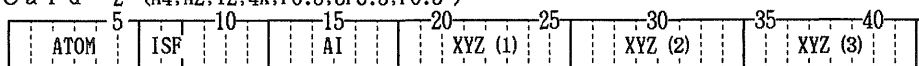


NA 原子数

ITPF = 0 : 等方性温度因子

= 1 : 非等方性温度因子

Card 2 (A4, A2, I2, 4X, F6.3, 3F8.5, F6.3)



ATOM 原子名

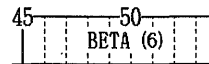
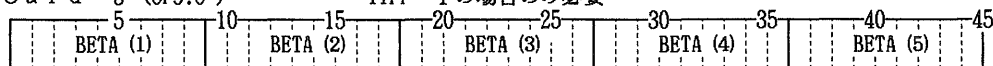
ISF 原子散乱因子表の指定番号 ([7] を見よ) .

AI 多重度. 例えば, 鏡面上なら×0.5, また 底心・体心格子なら×2, 面心格子なら×4 .

XYZ (1)~(3) 原子座標 x, y, z

BISO 等方性温度因子

Card 3 (6F9.6) ITPF=1 の場合のみ必要



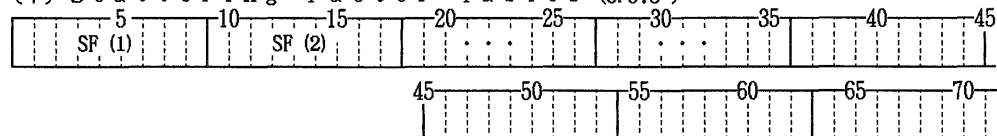
BETA(1)~(6) 非等方性温度因子, B11~B23

温度因子は次の式で定義される;

$$\exp \{ - (h^2 B11 + k^2 B22 + l^2 B33 + 2 h k B12 + 2 h l B13 + 2 k l B23) \}$$

ITPF=0 の場合はCard 1の次にCard 2をNA枚置く, また, ITPF=1 の場合は各原子ごとにCard 2, Card 3を重ねた組をNA組置く. この場合は非等方性温度因子としての計算が行われる. もしCard 3がブランクであれば, その原子だけはBISOに与えられた等方性温度因子を持つものとして計算される.

(7) Scattering Factor Tables (8F9.3)



SF(1) . . . 原子散乱因子の値

1 原子につき 4 枚組のカードが必要

1 枚目のカードは sin θ / λ = 0.00 ~ 0.35 (0.05の間隔) に対する値

2 枚目から 4 枚目のカードはそれぞれ 0.40 ~ 0.75, 0.80 ~ 1.15, 1.20 ~ 1.55 の値

(6) の ISF = i なら i 番目の組の原子散乱因子表が使用される.

(8) Scale Factor Card (F10.5,7A4)

5	10	15	20	25	30	35
SCALE			LAYER			

SCALE |Fo| の値にこのSCALE のかかったものが出力に得られる。
LAYER 任意の文字

(9) Reflection Data (3I5,4F8.2,F8.5,F8.2,2F4.1)

5	10	15	20	25	30	35
IH (1)	IH (2)	IH (3)	FO	AC	BC	
			40	45	50	55
			FC	RLV	SIGF	60
					65	70
					FMI	SG

IH(1)~(3) h, k, l

FO Fo
AC Ac
BC Bc
FC Fc
RLV $\sin \theta / \lambda$
SIGF $\sigma (Fo)$
FMI 多重度
SG 測定番号

反射データの最後はIH (1) = 1000とする。

(10) Fourier Control Card (4I5,15X,F10.5,F5.2)

IHIGH = 2 のとき, F000とSPCのみ有効

5	10	15	20	25	30	35
IOP	IODR1	IODR2	IODR3			
						35
						40
						F000
						45
						50
						SPC

IOP = 0 : {3} のIFRAの指示に従って計算を行う。0以外のときはIFRAの指定と無関係に以下の指定に従う。

- = 1 : Fo 合成
- = 2 : |Fo| × Ac / Fc, |Fo| × Bc / Fc 合成
- = 3 : D 合成 1, (Fo - Ac) 合成
- = 4 : D 合成 2, |Fo| × Ac / Fc - Ac, |Fo| × Bc / Fc - Bc 合成
- = 5 : Patterson 合成, |Fo|^2 合成
- = 6 : Sharpened Patterson 合成, (Fo × exp (SEP (sin θ / λ)^2))^2 合成
- = 7 : 任意の合成, この場合は, Dummy Subroutine MODFTの中味を適当に書いて用いる
- = 8 : Ac 合成
- = 9 : Ac, Bc 合成
- = 10 : |Fc|^2 合成
- = 11 : Fc 合成

IODR1 = 1 : a 軸に対する切り口 (a 軸 → a' 軸)
= 2 : b 軸に対する切り口 (b 軸 → a' 軸)
= 3 : c 軸に対する切り口 (c 軸 → a' 軸)

IODR2 = 1 : a 軸を縦に印刷 (a 軸 → b' 軸)
= 2 : b 軸を縦に印刷 (b 軸 → b' 軸)
= 3 : c 軸を縦に印刷 (c 軸 → b' 軸)

IODR3 = 1 : a 軸を横に印刷 (a 軸 → c' 軸)
= 2 : b 軸を横に印刷 (b 軸 → c' 軸)
= 3 : c 軸を横に印刷 (c 軸 → c' 軸)

F000 F (000) の値。

SPC IHIGH = 2 のときは大体 1 Å が SPC cm になるような分割数となる (ブランクなら 5 cm)。

(11) Fourier Scale Factor Card (F10.6,F10.3,F10.6)

5	10	15	20	25	30
SCALE	VD			SFP	

SCALE 尺度因子 k

VD 単位格子体積

フーリエ合成の係数には, mk / VD がかかる。ここで m は multiplicity で自動的に計算される。

SFP Sharpened Patterson の係数 (IOP = 6 のときのみ有効)

(12) Print Control Card (215)

NSPACE	5	INEG	10
--------	---	------	----

NSPACE 印刷結果の行間隔
INEG = 0 : すべての結果を印刷する。 = 1 : 合成結果負の部分にすべて0が入る。

(13) Range of Calculation Card (1015)

NMAXD	5	N1D	10	N1MIN	15	N1MAX	20	N2D	25	N2MIN	30	N2MAX	35	N3D	40		
														N3MIN	45	N2MAX	50

IHIGH = 2ならNMAXD は自動的に100 に指定され, N1MIN, N1MAX (a軸), N2MIN, N2MAX (b軸), N3MIN, N3MAX (c軸) だけを指定すればよい。
IHIGH = 0または1なら下のようになる。
NMAXD 格子の分割数の最大値
N1D a' 軸に沿っての分割間隔, 単位1/NMAXD
N1MIN a' 軸の計算開始点, 単位1/NMAXD
N1MAX a' 軸の計算終了点, 単位1/NMAXD
N2D . . . 以下同様にb' 軸, c' 軸について, 示す。
このカードは何枚でも重ねて用いることができる。

(14) End of Calculation Card (blank card)

blank

ブランク カード

(15) End of Job Card (15)

JOB	5
-----	---

JOB = 0 : 計算終了
= 1 : (1) にもどる
= 2 : (10) にもどる

6.1.3 入力データの例

(左端の番号は6.1.2入力データの番号を表わす)

	1	2	3	4	5	6	7
[1]	KAMIOKITE	TEST DATA	HEXAGONAL	FO-SYNTHESIS			JULY/1984
[2]	2						
[3]	0	3	0	0	12		
[4]	1.00	0.0	0.0	0.0	1.00	0.0	0.0
[4]	0.0	-1.00	0.0	1.00	-1.00	0.0	0.0
[4]	-1.00	1.00	0.0	-1.00	0.0	0.0	0.0
[4]	0.0	-1.00	0.0	-1.00	0.0	0.0	0.0
[4]	1.00	0.0	0.0	1.00	-1.00	0.0	0.0
[4]	-1.00	1.00	0.0	0.0	1.00	0.0	0.0
[4]	-1.00	0.0	0.0	0.0	-1.00	0.0	0.0
[4]	0.0	1.00	0.0	-1.00	1.00	0.0	0.0
[4]	1.00	-1.00	0.0	1.00	0.0	0.0	0.0
[4]	0.0	1.00	0.0	1.00	0.0	0.0	0.0
[4]	-1.00	0.0	0.0	-1.00	1.00	0.0	0.0
[4]	1.00	-1.00	0.0	0.0	-1.00	0.0	0.0
[9]	1	0	0	24.60	19.79	-0.37	19.79
[9]	2	0	0	105.88	-101.63	-3.52	101.69
[9]	3	0	0	6.93	5.67	1.69	5.91
[9]	4	0	0	72.12	-71.09	-3.17	71.16
[9]	2	0	21	45.33	-44.49	-13.59	46.52
[9]	3	0	21	18.90	-18.76	-1.55	18.82
[9]	2	1	21	14.91	-12.66	7.77	14.86
[9]	0	0	22	28.84	-27.41	2.56	27.53
[9]	1	0	22	17.93	-16.78	-5.38	17.62
[9]	1000	0	0	0.0	0.0	0.0	0.0
[10]	2	3	1	2		484.0	5.00
[11]	10.000000		291.182	0.0			
[12]	1	0					
[13]	100	2	0	100	4	0	100
[14]	0						
[15]	0						

6.1.4 コントロールカードの例 (RIPS 用)

```

(1) // 1 JOB 5
(2) /*JOBPARM L=50
(3) // EXEC PGM=FR5,REGION=3000K
(4) //STEPLIB DD DSN=GO364.MINCS.LOAD(FR5),DISP=SHR
(5) //GO.FT05F001 DD DSN= 2,DISP=SHR
(6) /*
(7) //GO.FT06F001 DD SYSOUT=A
(8) //
    
```

下線部 1 : 登録番号

” 2 : 入力データファイルのデータセット名

6.2 RFINE 2 : 結晶構造因子の計算と最小 2 乗法による結晶構造の精密化 (原作 FINGER, 1969, 改訂 1972)

6.2.1 内容

結晶構造因子の計算と完全マトリックス最小 2 乗法を用いた結晶構造の精密化を行う。各精密化の段階をモニターできるように原子間距離・角度と熱振動楕円体の計算を行える。

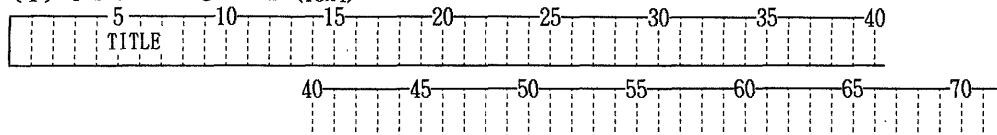
パラメータにある制限をつけたい場合、例えばパラメータを固定させたり、他のパラメータの従属変数にした時、ユーザーはなんら特別なサブルーチンを組みこまなくても処理できるようになっている。すなわちユーザーは入力データで特殊位置にある原子の温度因子と座標

値および席占有度、多重度に束縛条件をつけることができる。

制限	原子数	60以下
	元素の種類	20以下
	精密化するパラメータ	200以下

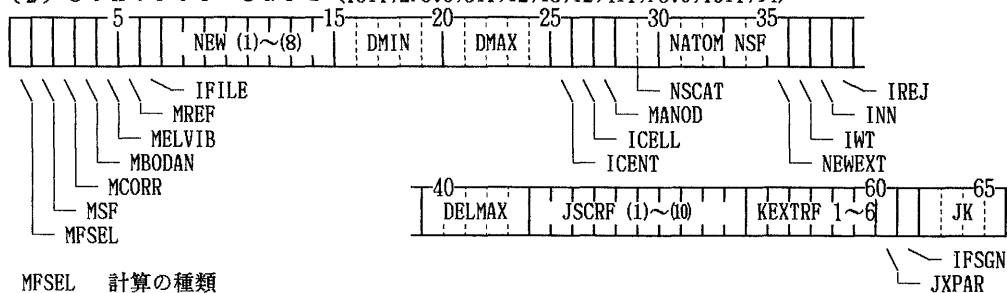
6.2.2 入力データ

(1) Title Card (18A4)



TITLE 任意の英数字, 出力の標題やメモに使用する。

(2) Control Card (15I1,2F5.0,3I1,I2,I3,I2,4I1,F5.0,18I1,14)



MFSEL	計算の種類		
	= 0 : 構造因子のみ計算	= 1 : 最小2乗法による精密化	
MSF	構造因子の出力		
	= 0 : 出力しない	= 1 : プリントする	
	= 2 : プリントとFile 4 (フーリエ合成用) への出力		
	= 3 : File 4 へ出力	= 4 : 簡易Fo-Fc表のプリントのみ	
MCORR	相関マトリックス		
	= 0 : プリントしない	= 1 : プリントする	
MBODAN	原子間距離・角度		
	= 0 : 計算しない	= 1 : 距離のみ計算	
	= 2 : 距離・角度を計算		
MELVIB	熱振動楕円体		
	= 0 : 計算しない	= 1 : 計算する	
	= 2 : 計算して, 原子間距離の補正をする		
MREF	精密化の方法		
	= 0 : $\Delta(F)$ を最小にする	= 1 : $\Delta(F^2)$ を最小にする	
IFILE	未使用		
NEW (1)	$\neq 0$: 新しい格子定数を読む		
NEW (2)	$\neq 0$: 新しい原子間距離の制限値を読む		
NEW (3)	$\neq 0$: 新しい対称操作を読む		
NEW (4)	$\neq 0$: 新しい原子散乱因子を読む		
NEW (5)	$\neq 0$: 新しいスケール因子と原子パラメータを読む		
	= 1 : すべての原子を読む	= 2 : 選択された原子を読む	
NEW (6)	$\neq 0$: 温度因子タイプカードを読む		
NEW (7)	$\neq 0$: パラメータ選択カードとパラメータ依存カードを読む		
NEW (8)	$\neq 0$: 新しい構造因子 (強度データ) を読む		
	もし NEW (i) = 0 ならば, すでに記憶してある値が使用される		
DMIN	原子間距離の最小値		NEW (2) $\neq 0$ のとき有効
DMAX	原子間距離の最大値		NEW (3) $\neq 0$ のとき有効
ICENT	対称心の有無		NEW (3) $\neq 0$ のとき有効
	= 0 : 対称心あり	= 1 : 対称心なし	
ICELL	格子タイプ		NEW (3) $\neq 0$ のとき有効
	= 0 : 単純格子	= 1 : a 底心格子	
	= 2 : b 底心格子	= 3 : c 底心格子	
	= 4 : 体心格子	= 5 : 面心格子	
	= 6 : 菱面体格子		

MANOD	異常分散 = 0 : 使用しない = 1 : 使用する	NEW (4) ≠ 0 のとき有効
NSCAT	散乱因子の数 (≤20)	NEW (4) ≠ 0 のとき有効
NATOM	原子数 (非対称単位中, ≤60)	NEW (5) ≠ 0 のとき有効
NSF	スケール因子の数 (≤10)	NEW (5) ≠ 0 のとき有効
NEWEXT	消衰因子パラメータ = 0 : パラメータを読まない = 1 : 新しいパラメータを読む	NEW (5) ≠ 0 のとき有効
IWT	重み (w) のタイプ = 0 : σ (F_0) = 1 : σ (F_0^2) = 2 : ユニット = 3 : サブルーチンWEIGHTで計算 (IWT = 0, 1 のとき, $w = 1/\sigma^2$, IWT = 3 のとき, $w = 1/\text{Weight}^2$ となる)	NEW (8) ≠ 0 のとき有効
INN	未使用	
IREJ	リジェクション・パラメータ = 0, 5 : すべての反射データを含める = 1, 6 : 観測最小値以下の F_0 は除く = 2, 7 : 観測最小値以下の F_0 , または, $ F_0 - F_c > \text{DELMAX}$ の F_0 は除く = 3, 8 : $ F_0 - F_c > \text{DELMAX}$ の F_0 は除く = 4, 9 : サブルーチンREJECTを使用する (IREJ = 5 ~ 9 はNEW (8) = 0 のときでも有効)	NEW (8) ≠ 0 のとき有効
DELMAX	IREJで使用する $ F_0 - F_c $ に対する値	
JSCRF	(i) スケール因子精密化スイッチ = 0 : i 番目のスケール因子を精密化しない = 1 : 精密化する	NEW (7) ≠ 0 のとき有効
KEXTRF	(i) 消衰因子精密化スイッチ = 0 : i 番目の消衰因子を精密化しない = 1 : 精密化する	NEW (7) ≠ 0 のとき有効
JXPAR	特別パラメータ = 0 : なし = 1 : 読む	NEW (7) ≠ 0 のとき有効
IFSGN	方位決定パラメータ = 0 : 決定しない = 1 : 小さな重み r の方位に変える	NEW (7) ≠ 0 のとき有効
JK	構造因子出力の F_0 と F_c に掛ける定数 (JK = 0, または ブランクのとき, JK = 10 となる)	MSF = 1, 2, 4 のとき有効

(3) Cell Cards (6F8.0 / 6F8.0) NEW (1) ≠ 0 のとき必要

5	10	15	20	25	30	35	40
A (1)		A (2)		A (3)		A (4)	

A (1)~(6) 格子定数: a, b, c (Å), α , β , γ (°)

40	45
	A (6)

5	10	15	20	25	30	35	40
DA (1)		DA (2)		DA (3)		DA (4)	

DA(1)~(6) 格子定数エラー: d (a, b, c) (Å), d (α , β , γ) (°)

40	45
	DA (6)

(4) Symmetry Card (3 (3A3,1X) .I4)

NEW (3) ≠ 0 のとき必要

5	10	15	20	25	30
JTNS	IRMAT	IRMAT	JTNS	IRMAT	IRMAT
(1)	1,1	2,1	(2)	1,2	2,2
			(3)	1,3	2,3
					IEF

JTNS(1)~(3) x' , y' , z' の並進部

JTNSの値は (ブランク, 1/2, 1/3, 2/3, 1/4, 3/4, 1/6, 5/6) のいずれかである。

IRMAT (1,1) ~ (1,3) x' , y' , z' の回転部第1項

IRMAT (2,1) ~ (2,3) x' , y' , z' の回転部第2項

IRMATの値は (ブランク, x, -x, y, -y, z, -z) のいずれかである。

IEF END フラグ

= 0 : 次のSymmetry Card が続く = 1 : これが最後のカードである

ここで用いる対称操作の表現法はInternational tables for X-ray crystallography (vol I) と同じである。(x' y' z') = (x y z) の対称操作を必ず含むこと。

(5) Scattering Factor Cards (9F8.0,2A4) NEW (4) ≠ 0 のとき必要

5	10	15	20	25	30	35	40
A1		B1	A2	B2		A3	
40	45	50	55	60	65	70	75
	B3		A4	B4		C	identification
80							

A1, B1, ..., C 原子散乱因子の曲線を表す次式の係数

$$f(x) = \sum_{i=1}^4 A_i \cdot \exp(B_i \cdot x) + C, \quad x = \sin \theta / \lambda$$

係数はInternational tables for X-ray crystallography (vol IV), p.99-101, 148-151 にある.

(6) Scale Factor Card (9F8.0,2A4) NEW (5) ≠ 0 のとき必要

5	10	15	20	25	30	35	40
SCALE(1)		SCALE(2)				
40	45	50	55	60	65	70	75
							identification
80							

SCALE (1) ~ スケール因子 (通常 SCALE(1)のみ)

(7) Extinction Cards (6F12.6) NEW (5) ≠ 0 かつ NEWEXT ≠ 0 のとき必要

5	10	15	20	25	30	35
R11		R22		R33		
40	45	50	55	60	65	70
	R12		R13		R23	
80						

R11 r* (等方性), または, r* 11 (異方性)

R22 ~ R23 r* 22 ~ r* 23 (異方性)

(8) Atom Parameter Cards NEW (5) ≠ 0 のとき必要

もしNEW (5) = 1 ならば, 全原子 (各原子につき2枚のカード: Card 1, Card 2) を読む.
もしNEW (5) = 2 ならば, 原子番号をFORMAT (12) で読み, 2枚のカードを続ける. 原子番号がブランクで読み込み終了となる.

構造因子をキュムラントで展開して3次, 4次の項を使用するならば, Card 3 ~ 5 を加える.

Card 1 (2A3,3F6.4)

5	10	15	20
TAG	SITE	OCCUP	OCCA

TAG 原子名

SITE 位置の多重度 (分率)

OCCUP 位置の全占有度

OCCA OCCUP 中のA原子の占有度 (AとBの2種類の原子が位置を占有している時に用いる).

Card 2 (2I2,9F8.5,12)

5	10	15	20	25	30	35	40
	XYZ(1)		XYZ(2)		XYZ(3)		BETA(1)
							BETA(2)
45	50	55	60	65	70	75	80
ISCAT (2)		BETA(3)		BETA(4)		BETA(5)	
ISCAT (1)						BETA(6)	IEF

ISCAT (1) A原子の散乱因子番号

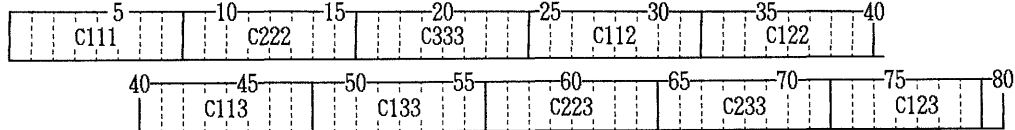
ISCAT (2) B原子の散乱因子番号 (ブランクならA原子のみの占有)

XYZ (1)~(3) 原子位置の座標, x y z

BETA(1)~(6) 温度因子 B11, B22, B33, B12, B13, B23 (等方性の場合, B11 (=B) のみ)

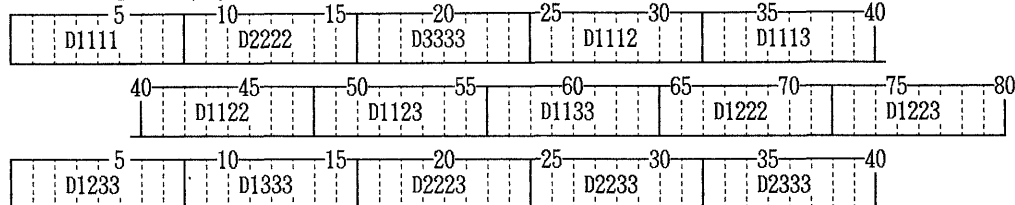
IEF ≠ 0 : 3次キュムラントを読む = 0 : 次の原子を読む

Card 3 (3次キュムラント・カード) (9F8.0,F7.0,I) IEF (Card 2) ≠ 0 のとき必要



C111~123 3次キュムラントの係数C111 ~C123

Card 4-5 (4次キュムラント・カード) (10F8.0/5F8.0) IEF (Card 3) ≠ 0 のとき必要

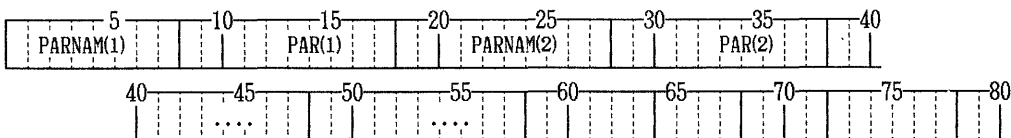


D1111 ~2333 4次キュムラントの係数D1111~D2333

(9) Special Parameter Cards (I4/4 (2A4,2X,F8.0,2X))

NEW (5) ≠ 0 かつ JXPARG ≠ 0 のとき必要

NPAR

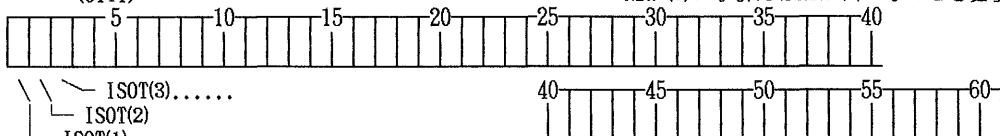


NPAR スペシャル・パラメータの個数
 PARNAM (i) パラメータの名前
 PAR (i) パラメータの値

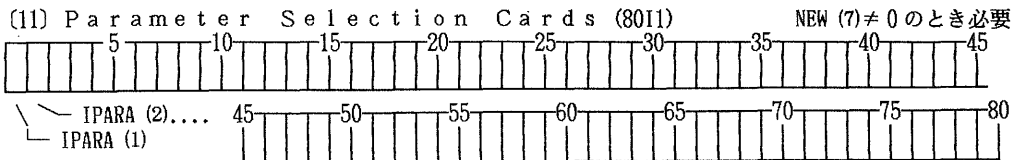
(10) Extinction and Temperature Factor Type Card

(6111)

NEW (5) ≠ 0 または NEW (6) ≠ 0 のとき必要



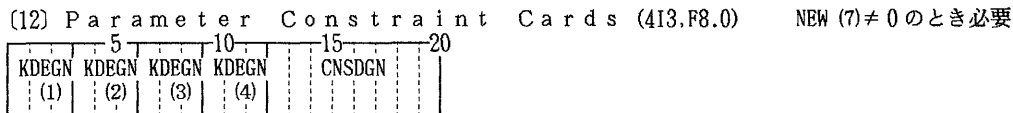
- ISOT(1) 消衰因子のタイプ
- = 0 : 等方性
 - = 1 : 異方性, タイプ I (mosaic spread)
 - = 2 : 異方性, タイプ II (domain size)
 - = 3 : 等方性をタイプ I に変える
 - = 4 : 等方性をタイプ II に変える
 - = 5 : タイプ I を等方性に変える
 - = 6 : タイプ II を等方性に変える
 - = 7 : タイプ I をタイプ II に変える
 - = 8 : タイプ II をタイプ I に変える
- ISOT(2)~ 温度因子のタイプ
- = 0 : 等方性
 - = 1 : 異方性
 - = 2 : 等方性を異方性に変える
 - = 3 : 異方性を等方性に変える
 - = 4 : 3次キュムラント
 - = 5 : 異方性を3次キュムラントに変える
 - = 6 : 3次キュムラントを異方性に変える
 - = 7 : 4次キュムラント
 - = 8 : 3次を4次に変える
 - = 9 : 4次を3次に変える



IPARA (i) = 0 : i 番目のパラメータを精密化しない
 = 1 : 精密化する

パラメータの順序は

- (a) 占有度: 単一原子の占有ならば OCCUP を精密化, 多重占有ならば OCCA (A 原子) を精密化する
- (b)~(d) x, y, z 座標
- (e) 温度因子: 等方性なら 1 個, 異方性なら 6 個
- (f) 3 次 (10 個), 4 次 (15 個) のキュムラント係数 (もし必要ならば入れる)



KDEGN (1) 従属原子の番号

KDEGN (2) 従属パラメータの番号

- = 1 : 占有度
- = 2 ~ 4 : x ~ z
- = 5 : B または B11
- = 6 ~ 10 : B22 ~ B23
- = 11 ~ 20 : 3 次キュムラント
- = 21 ~ 35 : 4 次キュムラント

KDEGN (3) 独立原子の番号

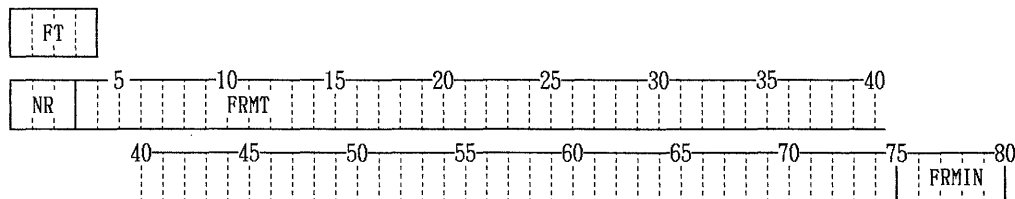
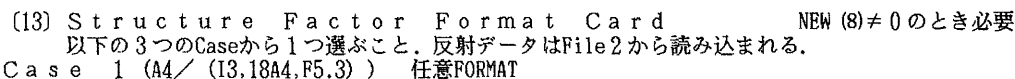
もし, KDEGN (3) がブランクか 0 ならば, KDEGN (1) ~ (2) のパラメータは CNSDGN の値にセットされる. この方法は占有度に初期値を与えるのに用いるとよい.

KDEGN (4) 独立パラメータの番号

このパラメータは, サブルーチン RESET が働いているならば, パラメータ・リストの従属パラメータに先行しなければならない.

CNSDGN 従属変数を作るために, 独立変数に掛ける定数

このカードはブランクカードで終了する.



FT 'AAAA' と書く

NR カード 1 枚当りの反射数

FRMT 反射データの FORMAT

FRMIN FRMIN 以下の F_o は除く

Case 2 (A4) RFINE2 のオリジナル FORMAT

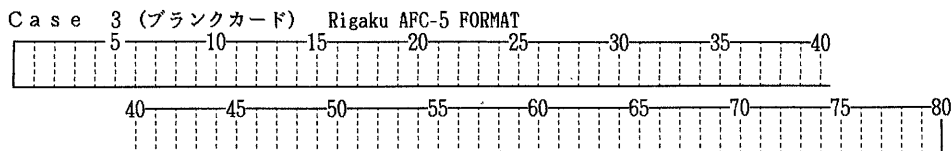


FT 'BBBB' と書く

反射データの構成は

FORMAT : (3I3, 3F9.5, 3I3, 4F7.4) 73 バイト

変数 : IH(1), IH(2), IH(3), FOBS, SIGMA, EXBETA, I, IEF, MREJ, TTH, OMEG, CHI, PHI



反射データの構成は
 FORMAT: (13,314,3F9.3,18,F8.2,13,19,216,217,14) 100 バイト
 変数: INO, H, H, L, F, SIGF, SUMT, IME, T2, IA, IPEAK, IB1, IB2, ITP, ITB, IRN

(14) Run Continuation Card (11) 全てのサイクルで必要

ICONT

ICONT = 0 : サイクル終了
 = 1 : (1) のTitle Cardへもどり、次のサイクルを開始する。

6.2.3 入力データの例

(左端の番号は 6.2.2 入力データの番号を表わす)

```

-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7-----8
(1) KAMIOKITE I. & A. TEMP. ANDMALAS DISP. F-CURVE FOR IONS 07/06/1984
(2) 100000 11111111 0.5 3.5101 3 7 102 0 1 00
(3) 5.7812 5.7812 10.060 90.0 90.0 120.0
(3) 0.0005 0.0005 0.001
(4) +X +Y +Z
(4) -Y +X -Y +Z
(4) +Y -X -X +Z
(4) -Y -X -X +Z
(4) +X +X -Y +Z
(4) +Y -X +Y +Z
(4) -X -Y -Y 1/2 +Z
(4) +Y +Y -X 1/2 +Z
(4) +X -Y +X 1/2 +Z
(4) +Y +X 1/2 +Z
(4) -X +Y -X 1/2 +Z
(4) +X -Y -Y 1/2 +Z 1
(5) 11.0424 4.65380 7.37400 0.30530 4.13460 12.0546 0.43990 31.2809 1.00970 FE
(5) 0.301 0.845
(5) 21.0907 0.01454 18.1505 1.02635 11.6028 9.16234 1.52507 24.9880 -14.369 MD
(5) -1.825 0.688
-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7-----8
(5) 3.7379 16.0647 2.7571 6.5161 1.7192 42.3139 1.5303 0.3226 0.2545 0
(5) 0.008 0.006
(6) 1.7
(8) FE1 2B.16667 1.0
(8) 1 0.33333 0.66667 0.9503 0.50 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
(8) FE2 2B.16667 1.0
(8) 1 0.33333 0.66667 0.5120 0.46 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
(8) MD 6C 0.5 1.0
(8) 2 0.1460 0.2920 0.25 0.23 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
(8) D1 2A.16667 1.0
(8) 3 0.0 0.0 0.3926 0.42 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
(8) D2 2B.16667 1.0
(8) 3 0.33333 0.66667 0.1482 0.54 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
(8) D3 6C 0.5 1.0
(8) 3 0.4870 0.9740 0.3647 0.56 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
(8) D4 6C 0.5 1.0
(8) 3 0.1662 0.3324 0.6346 0.50 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
(10) 00000000
(11) 00011000110100100011000110101101011
(12) 3 3 3 2 2.0
-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7-----8
(12) 6 3 6 2 2.0
(12) 7 3 7 2 2.0
(12)
(13)
    
```

```

(14) 1
(1) KAMIOKITE SCALE,XYZ,B CYCLE 2
(2) 100000 00000000
(14) 1
(1) KAMIOKITE SCALE,XYZ,B CYCLE 3
(2) 100000 00000000
(14) 1
(1) KAMIOKAITE SCALE,XYZ,B(11-23) CYCLE 1
(2) 100000 00000110
(10) 02222222
(11) 000110100000011010000100101110000110100000011010000101101100101101110
(12) 3 3 3 2 2.0
(12) 6 3 6 2 2.0
(12) 7 3 7 2 2.0
(12) 1 6 1 5 1.0
(12) 2 6 2 5 1.0
-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7-----8
(12) 3 6 3 5 1.0
(12) 3 10 3 5 1.0
(12) 4 6 4 5 1.0
(12) 5 6 5 5 1.0
(12) 6 6 6 5 1.0
(12) 6 10 6 5 1.0
(12) 7 6 7 5 1.0
(12) 7 10 7 5 1.0
(12) 1 8 1 5 0.5
(12) 2 8 2 5 0.5
(12) 4 8 4 5 0.5
(12) 5 8 5 5 0.5
(12) 0
(14) 1
(1) KAMIOKITE SCALE,XYZ,B(11-23) CYCLE 2
(2) 100000 00000000
(14) 1
(1) KAMIOKITE SCALE,XYZ,B(11-23) CYCLE 3
(2) 100000 00000000
(14) 1
-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7-----8
(1) KAMIOKITE SCALE,XYZ,B(11-23) CYCLE 4
(2) 110000 00000000
(14) 0
    
```

6.2.4 コントロールカードの例 (RIPS 用)

```

-----*-----1-----*-----2-----*-----3-----*-----4-----*-----5-----*-----6
[1] // 1 JOB S
[2] // EXEC PGM=RFINE,REGION=3000K
[3] //STEPLIB DD DSN=G0364.MINCS.LOAD(RFINE),DISP=SHR
[4] //GO.FT05F001 DD DSN= 2 ,DISP=SHR
[5] /*
[6] //GO.FT06F001 DD SYSOUT=A
[7] //GO.FT02F001 DD UNIT=USER,DSN= 3 ,DISP=OLD
[8] //GO.FT03F001 DD UNIT=USER,DSN= 4 ,DISP=OLD
[9] //GO.FT04F001 DD UNIT=USER,DSN= 5 ,DISP=OLD
[10] //GO.FT08F001 DD UNIT=USER,DSN= 6 ,DISP=OLD
[11] //
    
```

下線部 1 : 登録番号 である。

- ” 2 : 入力データファイルのデータセット名
- ” 3 : 反射強度データファイルのデータセット名
- ” 4 : フーリエ合成計算用データセット名
- ” 5 : 原子間距離・角度計算用データセット名
- ” 6 : 結晶構造図計算用データセット名

2, 3は入力ファイル用, 4, 5, 6は出力ファイル用

文 献

BECKER, P. J. and COPPENS, P. (1974) Extinction with the limit of validity of the Dawin transfer equations. I. General formalisms for primary and secondary extinction and their application to spherical crystals. *Acta*

- Cryst.*, vol. A30, p. 129-147.
- COPPENS, P. and HAMILTON, W. C. (1970) Anisotropic extinction corrections in the Zachariasen approximation. *Acta Cryst.*, vol. A26, p. 71-83.
- FINGER, L. W. (1969) Determination of cation distribution by least-squares refinement of single crystal X-ray data. *Carnegie Inst. Wash. Year Book*, vol. 67, p. 216-217.
- IBERS, J. A. and HAMILTON, W. E. ed. (1974) *International tables for X-ray crystallography*, Birmingham: Kynoch press, vol. IV, 366 p.
- 金沢康夫・月村勝宏・堀内弘之(1981) 鉱物の結晶解析計算システム(I). 地調月報, vol. 32, p. 551-561.
- 桜井敏雄(1967) RSSFR-5 一般フーリエ合成. 結晶解析ユニバーサルプログラムシステム(I), p. 45-52.
- ZACHARIASEN, W. H. (1967) A general theory of X-ray diffraction in crystals. *Acta Cryst.*, vol. 23, p. 558-564.

(受付: 1984年12月10日; 受理: 1985年3月29日)