

フーリエ合成プログラム syfr によるprima用のmemファイル作成

2010-5-15 H. M.

最大エントロピー法プログラム PRIMA (泉富士夫氏) を使って、フーリエ合成結果を行うために必要な
***.memファイルを作成する。

そのため、最小二乗法計算の結果で出力されるFobs, Fcal データファイルを読み込み、syfr のメニュー
でMEMファイル作成を選択する。

あらかじめ、ピクセル分割数、空間群、全電子数などが記載されている memparam.txtを用意しておく。こ
れには

```
# NX NY NZ SPG ORG VOL
  58 128 88 14 1 A
# Total SA b+ (& b-) lambda
  236.0 0.0100
```

の4行からなるテキストファイル。もし、memparam.txtが用意されていないときは、適当な数字を書き出すの
で、後で、エディターで修正すること。

C:\usr\axs>SYFR10.exe

!プログラムの起動

<< SYFR V=2010 (2010/05/15) >>

NOTE 2 TMP. files are OPEN, No of ATOM.LE.200, NDR=24000

file out in text files SYFRDAT.x or SYFR.3ed

If crystal system is not ortho/mono/triclinic then read the document file!

You can read MEM parameters from memparam.txt

Input comment for this job (<72W)

taurine_RT : make a mem file

!適当なコメントを入れる

Input XFILE (1/0)=1

!必ず1と入れる

Input XFILE file name=tau-xra.txt

!基本データファイル名 (必須)

read XFILE TITLE=

Taurine NH₂CH₂CH₂SO₂OH at R.T. 96/04/28 standard sample for AFC5R

Lattice const. = 5.29740 11.67310 7.94950 90.00000 94.05300 90.00000

Input RDFILE (0/1/2)=1

!反射データ読み込み機番

read RD-FILE TITLE=

1.00000 6MO 0.71069AFC5R test 96/4/27 Taurine RT F>5sig 0.000 0.000

read RD number= 1286

Input APFILE (0/1/2/3)=1

!原子座標データ読み込み機番

read from IAPI

read AP-FILE TITLE=

7 7 0 Taurine RT FILES=TAU5.XF, TAU5.RF

Calc. F(hkl) 0=NO, 1=STANDARD, 2=EXTENDED

Input Structure Factor to calculate (2/1/0)=0

!対称心があつて読込反射データファ

イルにFcalがあれば、構造因子の計算は不要。さもなくば、1と返し、計算させること (対称心のない場合
は必須)

MEM-file output 0=No, 1=Yes (Fo), 2=(Fc), 3=(Fo-Fc), 4=(Fc-Fo): Which=?1 !MEMファイルの作成

Read MEM parameters from file 0:No, 1:Yes =?1

!ピクセル数や空間群などを読み込む

Input MEM-FILE NAME for output=tau-RT.mem

!memファイルの名前

h=	k=	l=	Fo=	Ac=	Bc=	Fc=	Fd=	RLV=	sigF=
0	0	-10	-6.06	-6.37	0.00	-6.37	0.31	0.63055	0.24
0	0	-6	52.15	49.59	0.00	49.59	2.56	0.37833	0.14
0	0	-4	-24.50	-23.90	0.00	-23.90	-0.60	0.25222	0.09
0	0	-2	-56.43	-55.59	0.00	-55.59	-0.84	0.12611	0.20
0	0	2	-56.42	-55.59	0.00	-55.59	-0.83	0.12611	0.20
0	0	4	-24.39	-23.90	0.00	-23.90	-0.49	0.25222	0.09
0	0	6	52.21	49.59	0.00	49.59	2.62	0.37833	0.14
0	0	10	-6.20	-6.37	0.00	-6.37	0.17	0.63055	0.25
0	1	-11	-3.78	-3.44	0.00	-3.44	-0.34	0.69492	0.21
0	1	-8	11.95	10.86	0.00	10.86	1.09	0.50625	0.16

Number of reflections= 1286

Sum of Fo= 14956.26 Sum of Fc= 14915.90

R= 0.05074 Scale= 0.99730

type of SYFR 0=N0, 1=Fo, 2=Fo*Fo, 3=(Fo-Fc)

To synthesis Fc, select SYFR=1 and IOP=9 later.

Input type of Fourier synthesis (3/2/1/0)=0

0=end of job, 1=Restart Input=0

!計算終了

!プログラム終了

C:\usr\axs>