

3次元原子密度表示プログラム VESTA (泉富士夫氏) を使って、フーリエ合成結果を表示する。  
 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 でフーリエ合成した後、原子密度を VESTA の **\*\*\*.3ed** ファイル形式で書き出す。この3ed形式ファイルをVESTAで読み込めば、3次元表示が出来る。

```

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          !VESTA用には SYFR.3ed が出力ファイル
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)
TMATC-Mn 285K                                         !72字以内の出力ファイルに付ける説明文
Input XFILE (1/0)=1                                   !必ず1と入れる
Input XFILE file name=TMn285sgl-2.xra                 !基本データファイル名(必須)
read XFILE TITLE=
TMATC-Mn (285K) 1995.1 BY N.Koshiji axial change 2010-3-28
Lattice const. = 15.62000 9.04600 24.67100 90.00000 89.94100 90.00000
Input RDFILE (0/1/2)=1                                !反射データ読み込み機番
read RD-FILE TITLE=
1.00000-2 0.71069 TMATC-Mn 285K single domain 2010-5-08 1.327 0.213
read RD number= 3664
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=
60 60 0 TMATC-Mn (T=285) phase III axial change 0
Calc. F(hkl) 0=NO, 1=STANDARD, 2=EXTENDED
Input Structure Factor to calculate (2/1/0)=0         !反射データがFcalを含め時や、対称心が無い時はF(hkl)を計算させること
MEM-file output 0=No, 1=Yes(Fo), 2=(Fc), 3=(Fo-Fc), 4=(Fc-Fo): Which=?0 !MEMファイルは作成しない
h= k= l= Fo= Ac= Bc= Fc= Fd= RLV= sigF=
0 0 2 5.11 6.44 0.00 6.44 -1.33 0.04053 0.16
0 0 4 -220.73 -233.39 0.00 -233.39 12.66 0.08107 1.35
0 0 8 148.11 156.03 0.00 156.03 -7.92 0.16213 0.94
0 0 12 -65.07 -66.63 0.00 -66.63 1.56 0.24320 0.95
0 1 1 7.99 10.73 0.00 10.73 -2.73 0.05887 0.06
0 1 2 -2.12 -9.32 0.00 -9.32 7.20 0.06854 0.11
0 1 3 -5.69 -2.36 0.00 -2.36 -3.33 0.08217 0.08
0 1 4 85.46 70.06 0.00 70.06 15.39 0.09812 0.41
0 1 5 -12.70 -8.75 0.00 -8.75 -3.95 0.11543 0.11
0 1 6 -3.58 -6.01 0.00 -6.01 2.43 0.13357 0.27
Number of reflections= 3664
Sum of Fo= 71547.78 Sum of Fc= 72178.19
R= 0.07684 Scale= 1.00881
type of SYFR 0=NO, 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)=1          !Fobsの合成を行う
Input Scale factor for Fo (as 1.0)=1.0              !D合成以外は1でよい
IOP 0=standard(as IFRA); 12=Fc-Fc synthesis
Fo 1=cent, 2=non-cent; DF 3=cent, 4=non-cent
Fc 8=cent, 9=non-cent; 10=Fc**2
IODR1(cut axis), IODR2(down axis), IODR3(right axis)
Please set IODRn as 1,2,3 when VESTA.3ed out file!
    
```

Input IOP, IODR1, IODR2, IODR3 (as 0, 1, 2, 3) =0, 1, 2, 3 !SYFR. 3edタイプのファイル出力のデ  
 フォルト値

Input SCLF, SFP (AS 1.0, 0) =1.0, 0 !デフォルト値

VD= 3485.974 F000= 0.000

Input F(0 0 0)=1432 !入力ファイルで未定の際は手に入れ  
 る

VD, F000= 3485.974 1432.000

\*\*\* NO. of STORED REFLECTIONS= 7145

\*\*\* RANGE of HZ, HX, HY <= 20 11 34

file out 0=No, 8=SYFRDAT, 16=VESTA3ed style ?=16 !VESTA用出力は16(負の密度は0に置換す  
 る)または12(負の密度をそのまま出力)

NSPACE, INEG, ITPO, NSHIFT, IPRT are 0 0 16 0 1

Input Number of Maximum Division (100)=100 !単位胞分割最大数

file name for output Fourier syn. is SYFR.3ed

Input step, start, end points for cut-plane, vertical and horizontal axes!

Note: in case of VESTA.3ed putput, devide unit cell with integer pixels !  
 eg. 4, 0, 100, 1, 0, 100, 2, 0, 100 if 25\*100\*50 pixels

Range of calcu. as 1, 20, 25, 1, 0, 25, 1, 5, 15 ?=4, 0, 100, 2, 0, 100, 1, 0, 100 !この例ではx軸は  
 0, 4, 8, ..., 100の25分割で、y軸は0, 2, 4, ..., 100の50分割、z軸は1, 2, 3, ..., 100の100分割である。各軸の分割  
 数は整数となるように、単位胞分割最大数(1個)とステップ間隔と決めること。

MAXD	X*D	X*0	X*E	Y*D	Y*0	Y*E	Z*D	Z*0	Z*E
100	4	0	100	2	0	100	1	0	100

Fourier synthesis

TMATC-Mn 285K

Z= 0/100

Maximum= 4.018 AT 74 55 Minimum= -0.716 at 4 61

Z= 4/100

Maximum= 9.871 AT 70 41 Minimum= -1.311 at 78 37

(中略)

Z=100/100

Maximum= 4.018 AT 24 95 Minimum= -0.716 at 4 61

Total charge in this range is 54811.10

PEAK MAX= 27.5599 at 40 24 38 PEAK min= -3.3055 at 60 86 62

Input Number of Maximum Division (100)=0 !ファイルを重ね書きしないように0  
 を入れて終了すること

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

C:¥usr¥axis>