

## UNICSIVの使用方法(1) : 準備編

河野, 重昭  
KIS株式会社熊本情報処理センター

原野, 一誠  
熊本大学薬学部

<https://doi.org/10.15017/1470250>

---

出版情報 : 九州大学大型計算機センター広報. 27 (3), pp.134-169, 1994-06-15. 九州大学大型計算機センター  
バージョン :  
権利関係 :



## UNICSIVの用法(1) —準備編—

河野重昭<sup>\*</sup>、原野一誠<sup>\*\*</sup>

### 目次

1. はじめに	135 ページ
2. 準備	135 ページ
3. データ処理	136 ページ
3. 1. RGKDR (反射データの処理)	136 ページ
3. 2. TRSF (反射データの処理)	141 ページ
3. 3. FILE80 (結晶データ用データセットの作成)	144 ページ
3. 4. SC80 (相対尺度の決定)	160 ページ
3. 5. ADC80 (吸収の補正)	163 ページ
3. 6. ABSC80 (吸収の補正)	166 ページ
4. おわりに	168 ページ
参考文献	169 ページ

---

平成6年 4月15日受理

\* **KIS**熊本情報処理センター

\*\* 熊本大学薬学部

## 1. はじめに

1966年度文部省科学研究費補助金、総合研究班「複雑な結晶構造のX線解析」の一環として、全国の大学・研究所で開発されたプログラムが集められ、それを整備した結晶構造解析用ユニバーサル・プログラム・システム (Universal Crystallographic Computation Program System) を「UNICS」[1,2]と呼んでいる。これは、21個のプログラムより形成されていて、全部 FORTRAN で書かれている。

その後、計算機の大型化・高速化や結晶解析方法の改良・進歩を取り入れて、1973年に理化学研究所結晶物理研究室(桜井敏雄副主任研究員)と富士通との共同開発により作成されたプログラム・システムを「UNICS II」[3,4,5]と呼んでいる。これは、22個のプログラムと1個のサブルーチンより形成されている。

さらに、1978年に理化学研究所結晶物理研究室(桜井敏雄主任研究員)により、一貫自動方式を目指して開発されたプログラム・システムを「UNICS III」[6,7,8,9]と呼んでいる。これは、24個のプログラムと1個のサブルーチンより形成されている。

以上の他に、筆者がUNICS IIのプログラムを、UNICS III用書き直したプログラム「BP80」、世界的に有名なプログラム「NEW MULTAN」を、UNICS III用書き直した4個のプログラム「NORM80」「NEWMULT」「EXFFT」「SRCH80」、そして筆者が独自に開発した11個のプログラム「SYNDR」「RGKDR」「TRSF」「RMAP80」「RMINH80」「PART80」「MAP80」「RTEST80」「PLOTDW」「PLOTPT」「STR80」を加えて、1983年に「UNICS III」[10]として、筆者が九州大学大型計算機センターに登録し、広く西日本地区の研究者に利用された。

ところが、ここ10年の間に九州大学大型計算機がFORTRAN 77 EXにレベルアップし、FORTRAN GE、HEで書かれた「UNICS III」を書き換えることが必要となり、昨年度書き換えを終了し、「UNICS IV」として再登録をした。その際、「UNICS」と「UNICS II」の大部分のプログラムを廃止した。

10年間ばらばらの「使用説明書」を使用してきた利用者へ、まとまった「使用説明書」として提供するために、「UNICS IVの使用法」を「準備編」「構造決定編」「精密化編」「作図編」の4回にわたり、広報に発表することとした。

今回は、「準備編」として、X線全自動回折計の出力反射データ(MT)を入力し、消滅則のチェック、実験条件の違いや吸収の補正、相対尺度によるスケールリングなどの補正をし、「UNICS IV」のための結晶データ用・データセットを作成するところまでを説明する。

以下、MSP上での使用法について述べる。ただし、課題番号を「A70123B」とする。

## 2. 準備

はじめに、次のデータセットを確保する。

```

ALLOC DA(RD.DATA) SP(10 10) T NE CA REL
ALLOC DA(RD1.DATA) SP(10 10) T NE CA REL
ALLOC DA(XTAL.DATA) SP(10 10) T NE CA REL
ALLOC DA(XTALO.DATA) SP(10 10) T NE CA REL
ALLOC DA(PO.DATA) SP(10 10) T NE CA REL DI(5)
ALLOC DA(JCL.CNTL) SP(5 5) T NE CA REL DI(5)
ALLOC DA(JOB.CLIST) SP(10 10) T NE CA REL DI(5)

```

RD. DATAは反射データ用、XTAL. DATAは結晶データ用、PO. DATAは各プログラムに必要な入力データ用、JCL. CNTLは各プログラム用ジョブストリーム、JOB. CLISTは各プログラム用コマンド・プロシジャである。  
次に、自分のデータセットにコピーする。

```
COPY 'LIB.UNICS.CNTL' JCL.CNTL
COPY 'LIB.UNICS.CLIST' JOB.CLIST
COPY 'LIB.UNICS.DATA' PO.DATA
```

### 3. データ処理

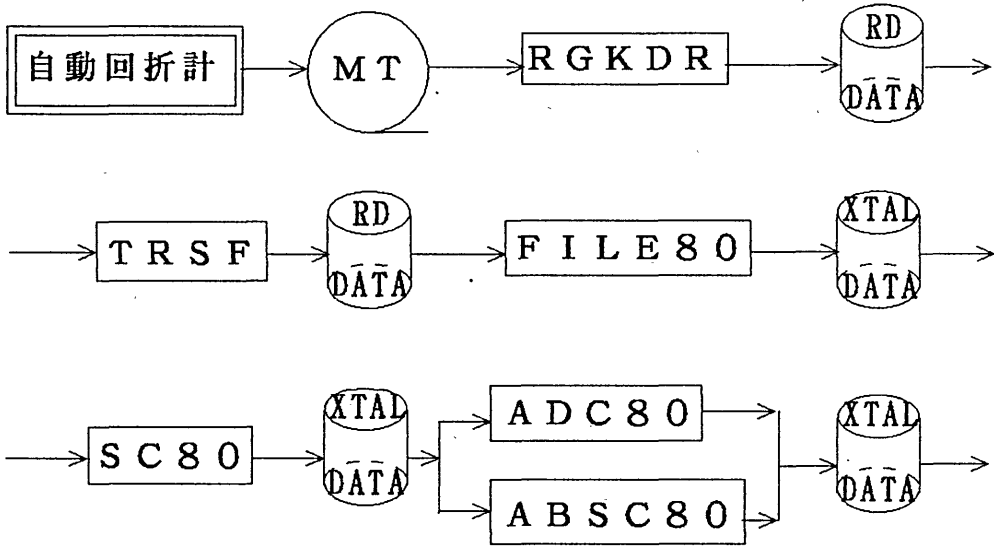


図1. データ処理のフロー・チャート

#### 3. 1. RGKDR

理学電気製自動回折計 (例. AFC-5) より出力された反射データ (MT) を処理して、反射データ用データセット (RD. DATA) へ出力するプログラムである。

##### 3. 1. 1. プログラム用データ

PO. DATA (RGKDR) をEDITし、修正して使用する。

No.	コード	内 容
1	なし	Title Data(18A4)
2	なし	Input Output Control Data
3	なし	格子定数
4	なし	並べ替え
5	なし	コントロール1
6	なし	消滅則1
7	なし	消滅則2

No.	コード	内 容
8	なし	軸変換
9	なし	コントロール2
10	なし	実験条件の違いの補正
11	なし	Decay Curve の補正1
12	なし	Decay Curve の補正2
13	なし	吸収の補正
14	なし	反射データ
15	なし	Job Control Data(I5)

## No.1 Title Data(18A4)

語	記号	欄	内 容
1	TITLE	1~72	任意の英数字。(計算には関係ない)

## No.2 Input Output Control Data(3I5)

語	記号	欄	内 容
1	IRDI	5	反射データの読み込み 0 = MTより読み込む 1 = データセットより読み込む
2	IRDO	10	反射データの出力 0 = UNICSの標準形式で出力(3I5,F8.2,32X,F8.2) 1 = UNICSの簡易形式で出力(5I3,11F5.2) 3 = UNICSⅢの標準形式で出力(3I5,F10.2,20X,F10.2) 4 = UNICSⅢの簡易形式で出力(4(3I3,F6.2,F5.2))
3	ISEND	11~15	Sequence Number の終わりの番号

## No.3 格子定数(6F10.5)

語	記号	欄	内 容
1	A	1~10	a (Å)
2	B	11~20	b
3	C	21~30	c
4	ALPHA	31~40	$\alpha$ (degree)
5	BETHA	41~50	$\beta$
6	GAMMA	51~60	$\gamma$

## No.4 並べ替え(I5,7I2)

語	記号	欄	内 容
1	ISORT	5	0 = ソートのやり直しをしない 1 = ソートのやり直しをする
2	J1	7	1番目にソートする指数(h,k,l)
3	J2	9	2番目にソートする指数(h,k,l)
4	J3	11	3番目にソートする指数(h,k,l)
5	INOC(1)	13	INO = 2 (Q $\cdot$ $\sigma$ (F) $\geq$ F $\geq$ 0) のデータの処理 0 = なにもしない 1 = F=0.0 とする 2 = 読み飛ばす

語	記号	欄	内 容
6	INOC(2)	15	INO = 3 ( $B_1 \geq mB_2$ or $B_2 \geq mB_1$ ) のデータの処理 0 = なにもしない 1 = $F=0.0$ とする 2 = 読み飛ばす
7	INOC(3)	17	INO = 4 (CHI-90 setting) のデータの処理 0 = なにもしない 1 = $F=0.0$ とする 2 = 読み飛ばす
8	INOC(4)	19	INO = 15 (異常終了情報) のデータの処理 0 = 反射データの読み込みを終了する 1 = 反射データの読み込みを続ける

No.5 コントロール1 (3I5,A2,F10.5)

語	記号	欄	内 容
1	IEXT	5	0 = 消滅則のチェックをしない 1 = 消滅則により観測されない反射データを除く
2	IRAU	10	0 = 特定グループのチェックをしない 1 = 特定グループの反射データを除く
3	IAXE	15	0 = 軸変換をしない 1 = 軸変換をする
4	XRAY	16~17	CU = X線にCu K $\alpha$ を使用 MO = X線にMo K $\alpha$ を使用
5	TTMAX	18~27	$\theta_{max} = 2\theta > \theta_{max}$ の反射データを除く

No.6 消滅則1 (26I2)

語	記号	欄	内 容
1	INON(1)	2	1 = (H>0,K>0,L>0) の反射データを除く
2	INON(2)	4	1 = (H<0,K>0,L>0) の反射データを除く
3	INON(3)	6	1 = (H>0,K<0,L>0) の反射データを除く
4	INON(4)	8	1 = (H>0,K>0,L<0) の反射データを除く
5	INON(5)	10	1 = (H<0,K<0,L>0) の反射データを除く
6	INON(6)	12	1 = (H<0,K>0,L<0) の反射データを除く
7	INON(7)	14	1 = (H>0,K<0,L<0) の反射データを除く
8	INON(8)	16	1 = (H<0,K<0,L<0) の反射データを除く
9	INON(9)	18	1 = (H=0,K>0,L>0) の反射データを除く
10	INON(10)	20	1 = (H=0,K<0,L>0) の反射データを除く
11	INON(11)	22	1 = (H=0,K>0,L<0) の反射データを除く
12	INON(12)	24	1 = (H=0,K<0,L<0) の反射データを除く
13	INON(13)	26	1 = (H>0,K=0,L>0) の反射データを除く
14	INON(14)	28	1 = (H<0,K=0,L>0) の反射データを除く
15	INON(15)	30	1 = (H>0,K=0,L<0) の反射データを除く
16	INON(16)	32	1 = (H<0,K=0,L<0) の反射データを除く
17	INON(17)	34	1 = (H>0,K>0,L=0) の反射データを除く
18	INON(18)	36	1 = (H<0,K>0,L=0) の反射データを除く
19	INON(19)	38	1 = (H>0,K<0,L=0) の反射データを除く
20	INON(20)	40	1 = (H<0,K<0,L=0) の反射データを除く
21	INON(21)	42	1 = (H=0,K=0,L>0) の反射データを除く
22	INON(22)	44	1 = (H=0,K=0,L<0) の反射データを除く
23	INON(23)	46	1 = (H=0,K>0,L=0) の反射データを除く

語	記号	欄	内 容
24	INON(24)	48	1 = (H=0, K<0, L=0) の反射データを除く
25	INON(25)	50	1 = (H>0, K=0, L=0) の反射データを除く
26	INON(26)	52	1 = (H<0, K=0, L=0) の反射データを除く

[注] これは、IRAU=1 のときに使用する。除かないところはblankでよい。

### No.7 消滅則2 (2712)

語	記号	欄	内 容
1	ISYS(1)	2	N = (HKL) の消滅則 H+K=N・n をチェックする
2	ISYS(2)	4	N = (HKL) の消滅則 H+L=N・n をチェックする
3	ISYS(3)	6	N = (HKL) の消滅則 K+L=N・n をチェックする
4	ISYS(4)	8	N = (HKL) の消滅則 H+K=N・n, H+L=N・n', K+L=N・n" をチェックする
5	ISYS(5)	10	N = (HKL) の消滅則 H+K+L=N・n をチェックする
6	ISYS(6)	12	N = (HKL) の消滅則 -H+K+L=N・n をチェックする
7	ISYS(7)	14	N = (HHL) の消滅則 H=N・n をチェックする
8	ISYS(8)	16	N = (HHL) の消滅則 L=N・n をチェックする
9	ISYS(9)	18	N = (HHL) の消滅則 H+L=N・n をチェックする
10	ISYS(10)	20	N = (HHL) の消滅則 2H+L=N・n をチェックする
11	ISYS(11)	22	N = (OKL) の消滅則 K=N・n をチェックする
12	ISYS(12)	24	N = (OKL) の消滅則 L=N・n をチェックする
13	ISYS(13)	26	N = (OKL) の消滅則 K+L=N・n をチェックする
14	ISYS(14)	28	N = (HOL) の消滅則 H=N・n をチェックする
15	ISYS(15)	30	N = (HOL) の消滅則 L=N・n をチェックする
16	ISYS(16)	32	N = (HOL) の消滅則 H+L=N・n をチェックする
17	ISYS(17)	34	N = (HKO) の消滅則 H=N・n をチェックする
18	ISYS(18)	36	N = (HKO) の消滅則 K=N・n をチェックする
19	ISYS(19)	38	N = (HKO) の消滅則 H+K=N・n をチェックする
20	ISYS(20)	40	N = (HHO) の消滅則 H=N・n をチェックする
21	ISYS(21)	42	N = (HOO) の消滅則 H=N・n をチェックする
22	ISYS(22)	44	N = (OKO) の消滅則 K=N・n をチェックする
23	ISYS(23)	46	N = (OOL) の消滅則 L=N・n をチェックする
24	ISYS(24)	48	N = (HLL) の消滅則 H=N・n をチェックする
25	ISYS(25)	50	N = (HLL) の消滅則 L=N・n をチェックする
26	ISYS(26)	52	N = (HLL) の消滅則 H+L=N・n をチェックする
27	ISYS(27)	54	N = (HLL) の消滅則 H+2L=N・n をチェックする

[注] これは、IEXT≠0 のときに使用する。消滅則のないところはblankでよい。

### No.8 軸変換(9F8.5)

語	記号	欄	内 容
1	S(1,1)	1~8	S <sub>11</sub> [軸変換式] (a, b, c) → (A, B, C) A = S <sub>11</sub> a + S <sub>12</sub> b + S <sub>13</sub> c B = S <sub>21</sub> a + S <sub>22</sub> b + S <sub>23</sub> c C = S <sub>31</sub> a + S <sub>32</sub> b + S <sub>33</sub> c
2	S(1,2)	9~16	
3	S(1,3)	17~24	
4	S(2,1)	25~32	S <sub>21</sub> [指数変換式] (h, k, l) → (H, K, L) H = S <sub>11</sub> h + S <sub>12</sub> k + S <sub>13</sub> l K = S <sub>21</sub> h + S <sub>22</sub> k + S <sub>23</sub> l L = S <sub>31</sub> h + S <sub>32</sub> k + S <sub>33</sub> l
5	S(2,2)	33~40	
6	S(2,3)	41~48	
7	S(3,1)	49~56	S <sub>31</sub>
8	S(3,2)	57~64	S <sub>32</sub>
9	S(3,3)	65~72	S <sub>33</sub>

[注] これは、IAXE=1 のときに使用する。

No.9 コントロール2 (3I5)

語	記号	欄	内 容
1	IS	5	0 = 実験条件の違いの補正をしない n = 実験条件の違いの補正をする (n ≤ 20)
2	IDC	10	0 = Decay Curve の補正をしない 1 = Decay Curve の補正をする
3	IAC	15	0 = 吸収の補正をしない 1 = 吸収の補正をする

No.10 実験条件の違いの補正 (F10.5, 2I5)

語	記号	欄	内 容
1	SCALE(1)	1~10	IMIN(1) ≤ ISEQ ≤ IMAX(1) の反射データ F を SCALE(1) 倍する SCALE(1) 倍する反射データの ISEQ の最小値 SCALE(1) 倍する反射データの ISEQ の最大値
2	IMIN(1)	11~15	
3	IMAX(1)	16~20	
⋮	⋮	⋮	
n+1	SCALE(n)		IMIN(n) ≤ ISEQ ≤ IMAX(n) の反射データ F を SCALE(n) 倍する SCALE(n) 倍する反射データの ISEQ の最小値 SCALE(n) 倍する反射データの ISEQ の最大値
n+2	IMIN(n)		
n+3	IMAX(n)		

[注] これは、IS ≠ 0 のときに使用する。

No.11 Decay Curve の補正1 (2I5)

語	記号	欄	内 容
1	NDCT	5	n = Decay Curve 上の Data Points の数 (≤ 80) m = 標準反射を含む Data Points 間の反射データ数
2	NDCINT	10	

[注] これは、IDC ≠ 0 のときに使用する。

No.12 Decay Curve の補正2 (10F5.3)

語	記号	欄	内 容
1	DCT(1)	1~ 5	1番目の Decay Curve の値 (Fを1/DCT(1)倍する)
⋮	⋮		
n	DCT(n)		n番目の Decay Curve の値 (Fを1/DCT(n)倍する)

[注] これは、IDC ≠ 0 のときに使用する。

No.13 吸収の補正(10F5.3)

語	記号	欄	内 容
1	ACT(1)	1~ 5	$\theta = 0^\circ$ に対する吸収の補正值(反射強度をACT(1)倍する)
2	ACT(2)	6~10	
3	ACT(3)	11~15	
⋮	⋮		
20	ACT(20)		$\theta = 95^\circ$ に対する吸収の補正值(反射強度をACT(20)倍する)

[注] これは、IAC ≠ 0 のときに使用する。

No.14 反射データ (I5, I2, 3I3, F8.3, F6.3)

語	記号	欄	内 容
1	ISEQ(1)	1~ 5	測定番号
2	INO(1)	7	反射データの種別
3	IH(1)	8~10	h
4	IK(1)	11~13	k
5	IL(1)	14~16	l
6	FOBS(1)	17~24	Fobs
7	SIGF(1)	25~30	Fobs の標準偏差

[注] これは、IRDI=1 のときに使用する。

### No.15 Job Control Data(I5)

語	記号	欄	内 容
1	JOB	5	0 = JOBを終わる 1 = JOBを繰り返す

### 3. 1. 2. 処理プログラム

JCL, CNTL (RGKDR) をEDITし、次のように修正し、SUBMITする。  
600行~ 800行は「MTLIST」でMTの属性などを調査した上で、適当に修正する。  
その他、特に注意するところには、下線が引いてある。

```
00100 //A70123B1 JOB CLASS=N,REGION=2048K
00200 // EXEC GO,PROG=RGKDR,LOADDS='QS.LIBLM.LOAD'
00300 //GO.SYSGO DD DSN=PO.DATA(RGKDR),DISP=SHR
00400 //GO.FT01F001 DD UNIT=WORK,SPACE=(TRK,(10,10))
00500 //GO.FT02F001 DD UNIT=WORK,SPACE=(TRK,(10,10))
00600 //GO.FT03F001 DD DSN=AFCDMT,VOL=SER=000000,
00700 // LABEL=(1,SL,,IN),DISP=OLD,UNIT=OPNMTA,
00800 // DCB=(LRECL=128,RECFM=FB,BLKSIZE=280)
00900 //GO.FT07F001 DD DSN=A70123.RD.DATA,DISP=SHR
01100 //
```

### 3. 2. TRSF

反射データ用データセット (RD. DATA) から反射データを入力し、消滅則のチェック、軸変換、並べ替えなどの処理をし、他の反射データ用データセット (RD1. DATA) に出力するプログラムである。理学電気製自動回折計から出力された反射データ (MT) を読み込むことも可能である。

#### 3. 2. 1. プログラム用データ

PO. DATA (TRSF) をEDITし、修正して使用する。

No.	コード	内 容
1	なし	Title Data(18A4)
2	なし	Input Output Control Data

No.	コード	内 容
3	なし	消滅則 1
4	なし	消滅則 2
5	なし	軸変換え 並べ替え
6	なし	
7	なし	

No.1 Title Data(18A4)・・・RGKDRの「No.1 Title Data(18A4)」と同じ

No.2 Input Output Control Data(8I5)

語	記号	欄	内 容
1	IRDI	5	反射データの読み込み 0 = UNICSの標準形式で読み込む 1 = UNICSの簡易形式で読み込む 2 = UNICSⅢの標準形式で読み込む 3 = UNICSⅢの簡易形式で読み込む 4 = 理学電気製自動回折計の出力MTより読み込む
2	IRDO	10	反射データの出力 0 = UNICSの標準形式で出力(3I5,F8.2,32X,F8.2) 1 = UNICSの簡易形式で出力(5I3,11F5.2) 2 = UNICSⅢの標準形式で出力(3I5,F10.2,20X,F10.2) 3 = UNICSⅢの簡易形式で出力(4(3I3,F6.2,F5.2))
3	IEXT	11~15	0 = 消滅則のチェックをしない 1 = 消滅則により観測されない反射データを除く
4	IRAU	16~20	0 = 特定グループの反射データのチェックをしない 1 = 特定グループの反射データを除く
5	IAXE	21~25	0 = 軸変換をしない 1 = 軸変換をする
6	IFILE	26~30	0 = 反射データを機番5より読み込む n = 反射データを機番nより読み込む
7	ICUT	31~35	0 = なにもしない 1 = Fobs<CUT*SIGF の反射データを除く 2 = Fobs<CUT*SIGF の反射データ Fobs=0.0 とおく
8	ISORT	36~40	0 = 並べ替えをしない 1 = 並べ替えをする

No.3 消滅則 1 (26I2)・・・RGKDRの「No.6 消滅則 1 (26I2)」と同じ

[注] これは、IRAU=1 のときに使用する。消滅則のないところはblankでよい。

No.4 消滅則 2 (27I2)・・・RGKDRの「No.7 消滅則 2 (27I2)」と同じ

[注] これは、IEXT≠0 のときに使用する。消滅則のないところはblankでよい。

No.5 軸変換(9F8.5)・・・RGKDRの「No.8 軸変換(9F8.5)」と同じ

[注] これは、IAXE=1 のときに使用する。

No.6 並べ替え(F5.2,3I2)

語	記号	欄	内 容
1	CUT	1~ 5	Fobs<CUT*SIGF の CUT
2	J1	7	1 番目にソートする指数 (h=1, k=2, l=3)
3	J2	9	2 番目にソートする指数
4	J3	11	3 番目にソートする指数

[注] これは、ICUT=1 または ISORT=1 のときに使用する。

## No.7 反射データ

### (1) UNICSV の標準形式(3I5, F8.2, 32X, F8.2)

語	記号	欄	内 容
1	IH(1)	1~ 5	h (h=1000 が終わり)
2	IK(1)	6~10	k
3	IL(1)	11~15	l
4	FOBS(1)	16~23	Fobs
5	SIGF(1)	55~62	Fobs の標準偏差

[注] これは、IRDI=0 のときに使用する。

### (2) UNICSV の簡易形式(5I3, 11F5.2)

語	記号	欄	内 容
1	IHD(1)	1~ 3	h (h=100 が終わり)
2	IKD(1)	4~ 6	k
3	ILD(1)	7~ 9	l
4	INDEX	12	変化する指数 (h=1, K=2, L=3)
5	INC	13~15	変化する数値
6	FD(1)	16~20	Fobs
⋮	⋮	⋮	⋮
16	FD(11)	66~70	Fobs

[注] これは、IRDI=1 のときに使用する。

### (3) UNICSV III の標準形式(3I5, F10.2, 20X, F10.2)

語	記号	欄	内 容
1	IH(1)	1~ 5	h (h=1000 が終わり)
2	IK(1)	6~10	k
3	IL(1)	11~15	l
4	FOBS(1)	16~25	Fobs
5	SIGF(1)	46~55	Fobs の標準偏差

[注] これは、IRDI=2 のときに使用する。

### (4) UNICSV III の簡易形式(4(3I3, F6.2, F5.2))

語	記号	欄	内 容
1	IHD(1)	1~ 3	h (h=100 が終わり)
2	IKD(1)	4~ 6	k
3	ILD(1)	7~ 9	l
4	FD(1)	10~15	Fobs
5	SFD(1)	16~20	Fobs の標準偏差

語	記号	欄	内 容
16	IRB(4)	61~63	h
17	IRB(4)	64~66	k
18	ILD(4)	67~69	l
19	FD(4)	70~75	Fobs
20	SFD(4)	76~80	Fobs の標準偏差

[注] これは、IRDI=3 のときに使用する。

### 3. 2. 2. 処理プログラム

JCL. CNTL (TRSF) をEDITし、次のように修正し、SUBMITする。

特に注意を要するところには、下線が引いてある。なお、このプログラムはMTも使用可能であるので、バッチジョブにしてある。

```
00100 //A70123B2 JOB CLASS=A,REGION=2048K
00200 // EXEC GO,PROG=TRSF,LOADDS='QS.LIBLM.LOAD'
00300 //GO.SYSGO DD DSN=PO.DATA(TRSF),DISP=SHR
00400 //GO.FT01F001 DD UNIT=WORK,SPACE=(TRK,(10,10))
00500 //GO.FT02F001 DD UNIT=WORK,SPACE=(TRK,(10,10))
00600 //GO.FT05F001 DD DSN=A70123.RD.DATA,DISP=SHR
00900 //GO.FT07F001 DD DSN=A70123.RD1.DATA,DISP=SHR
01100 //
```

### 3. 3. FILE80

反射データ用データセット (RD. DATA) から反射データを入力し、結晶データ用データセット (XTAL. DATA) を作成するプログラムである。また、結晶データ用データセットの原子パラメータや反射データの一部を修正することもできる。

#### 3. 3. 1. プログラム用データ

PO. DATA (FILE80) をEDITし、修正して使用する。

No.	コード	内 容
1	なし	Title Data(18A4)
2	I	Input Output Control Data
3		[基本データ]
	L	格子定数
	L1	格子定数の標準偏差 1
	L2	格子定数の標準偏差 2
	SG	空間群を入力して対称操作などを作成する
	AN	原子名を入力して原子散乱因子、原子番号などを作成する
	AC	原子数
	S	対称操作
	F	原子散乱因子と異常分散項
	F1	原子散乱因子
	F2	異常分散項
	A	原子パラメータ (原子の座標、温度因子)
	R	反射データ

No.	コード	内 容
	X	結晶の名前など (任意のメモ)
4	AZ AW AR BR	【原子のデータ】 原子番号 原子半径 結合半径
5	80-60 60-80 HENKA EDIT	【データセット全体の修正】 UNICSⅢ用データセットをUNICS用データセットに変換 UNICS用データセットをUNICSⅢ用データセットに変換 格子変換によるデータセットの書き換え 2つのデータセットを結合する
6	AADD AGNRT ATOM AORDE AELIM ASEL A-	【原子パラメータの修正】 書き換えまたは追加 対称操作で増やす 原子名や原子散乱因子表の番号を変更する 順番を並べ替える 削除 選択 前に実行した原子パラメータに戻す
7	TRANS ELIM REP HKL SEL WL SCALE DIVID	【反射データの修正】 指定した組について転写 削除 置き換え 探す、削除、置き換え 選択 X線の波長 尺度因子 組を分ける
8	PRINT PUNCH TFTBL	【印刷、出力】 基本データを印刷する 基本データを機番7に出力する 反射データの分布表を印刷する

No.1 Title Data(18A4)・・・RGKDRの「No.1 Title Data(18A4)」と同じ

No.2 Input Output Control Data(A1,1X,I3,3I5,15X,I5)

語	記号	欄	内 容	標準値
1	ユ-ト	1	英字 I	
2	NMTI	5	基本データの読み込み 0 = 機番1より読み込む -1 = 読み込みをしない	1
3	NMTO	10	基本データの出力 0 = 機番1に出力する -1 = 出力しない	1
4	IAPO	15	修正後の原子パラメータの印刷 -1 = 印刷しない 0 = 1行に3個の原子パラメータを印刷 (非等方性温度因子を含まない) 1 = 1行に1個の原子パラメータを印刷	0

語	記号	欄	内 容	標準値
			(非等方性温度因子を含む)	
5	IRDO	20	修正後の反射データの印刷 -1 = 印刷しない 0 = 各プロットの1, 41, 80番目のみを印刷 1 = 各プロットの全部印刷	0
6	ICDIP	40	0 = 入力した原子散乱因子、原子番号等を印刷しない 1 = 入力した原子散乱因子、原子番号等を印刷する	0

No.3 基本データ

(1) 格子定数(A1, 1X, F8.5, 2F10.5, 3F10.3)

語	記号	欄	内 容			
1	ユ-ト	1	英字L			
			①	②	③	④
2	AD(1)	3~10	a (Å)	a (Å)	a <sup>x</sup> (Å <sup>-1</sup> )	a <sup>x</sup> (Å <sup>-1</sup> )
3	AD(2)	11~20	b	b	b <sup>x</sup>	b <sup>x</sup>
4	AD(3)	21~30	c	c	c <sup>x</sup>	c <sup>x</sup>
5	AD(4)	31~40	cos α	α (degree)	cos α <sup>x</sup>	α <sup>x</sup> (degree)
6	AD(5)	41~50	cos β	β	cos β <sup>x</sup>	β <sup>x</sup>
7	AD(6)	51~60	cos γ	γ	cos γ <sup>x</sup>	γ <sup>x</sup>

[注] ①、②、③、④のどれか1つを使用する。

(2) 格子定数の標準偏差1 (2A1, F8.5, 2F10.5, 4F10.3)

語	記号	欄	内 容
1,2	ユ-ト	1~ 2	英数字 L 1
3	SIGA	3~10	σ (a) (Å)
4	SIGB	11~20	σ (b)
5	SIGC	21~30	σ (c)
6	SIGCA	31~40	σ (α)
7	SIGCB	41~50	σ (β)
8	SIGCC	51~60	σ (γ)
9	SIGV	61~70	σ (V)

[注] L 1、L 2のどれか1つを使用する。

(3) 格子定数の標準偏差2 (2A1, F8.5, 2F10.5, 4F10.3)

語	記号	欄	内 容
1,2	ユ-ト	1~ 2	英数字 L 2
3	SIGA	3~10	σ (a) (Å)
4	SIGB	11~20	σ (b)
5	SIGC	21~30	σ (c)
6	SIGCA	31~40	σ (cos α)
7	SIGCB	41~50	σ (cos β)
8	SIGCC	51~60	σ (cos γ)
9	SIGV	61~70	σ (V)

[注] L 1、L 2のどれか1つを使用する。

## (4) 空間群を入力して対称操作などを作成する(2A1,8X,2A4)

語	記号	欄	内 容
1,2	ユ-ト	1~2	英字 S G
3 4	SG(1) SG(2)	11~14 15~18	入力する空間群名 (入力可能な空間群) P1, P1-, P21, P21/C, P21/A, P21/N, C2/C, P212121, PBCA, PNA21, PNMA, PBCN

[注] 入力可能でない空間群の場合は「(7)対称操作」を使用する。

## (5) 原子名を入力して原子散乱因子、原子番号などを作成する(2A1,3X,15,9(1X,A4))

語	記号	欄	内 容
1,2	ユ-ト	1~2	英字 A N
3	JA	10	原子の種類の数 (JA ≤ 9)
4 5 ⋮ 12	NAM(1) NAM(2) ⋮ NAM(9)	12~15 17~20 ⋮ 52~55	原子名 (JA個入力) (入力可能な原子名) H, B, C, N, O, AL, P, S, CL, FE, CO, NI, CU, ZN, BR, CD, I, PT, AU, HG, PB, NA+, CL-, K+

[注] 入力可能でない原子の場合は「(8)原子散乱因子と異常分散項」と「No.4 原子のデータ」を使用する。

## (6) 原子数(2A1,I3,10I5)

語	記号	欄	内 容
1,2	ユ-ト	1~2	英字 A C
3	JZ	5	一般等価点の数
4	JA	10	原子の種類の数
5 6 ⋮ 13	JAN(1) JAN(2) ⋮ JAN(9)	11~15 16~20 ⋮ 51~55	第1の種類 of 原子の数 (JA個入力) 第2の種類 of 原子の数 第3の種類 of 原子の数

## (7) 対称操作

## a. 対称操作1 (A1,1X,I3,I5,4X,A1,5X,4A4)

語	記号	欄	内 容
1	ユ-ト	1	英字 S
2 3 4	NS ICENT LAT(1)	5 10 15	対称操作の数 (≤24) 0 = 原点に対称点がない 1 = 原点に対称点がある P = 単純格子 I = 体心格子 F = 面心格子 A = A面底心格子 B = B面底心格子 C = C面底心格子 R = 菱面格子を六方格子にとる 0 = 菱面格子を六方格子にとる (観測上)

語	記号	欄	内 容
5	SPG	21~36	空間群の記号 (計算には関係ない)

b. 対称操作2 (72A1)

例. P 2<sub>1</sub>/c

語	記号	欄	内 容
		1~72	X, Y, Z, -X, 1/2+Y, 1/2-Z,

[注] 途中で空白があってもよいが、最後の「,」は忘れないように。

(8) 原子散乱因子と異常分散項

a. 原子散乱因子1 (A1, 1X, I3, 2I5)

語	記号	欄	内 容
1	ユ-ト	1	英字 F
2	NFX	5	原子散乱因子の種類の数
3	NFI	10	最初から NFI個の値は保存され、その後につけ加える
4	NFE	15	(NFI+NFX)個の後の NFE個を、 NFX個の後ににつけ加える

b. 原子散乱因子2 (8F9.3)

語	記号	欄	内 容
1	FX(1)	1~ 9	$\sin \theta / \lambda = 0.00$ に対する散乱因子Fの値
2	FX(2)	10~18	$\sin \theta / \lambda = 0.05$ に対する散乱因子Fの値
	⋮		
9	FX(9)	64~72	$\sin \theta / \lambda = 0.35$ に対する散乱因子Fの値

[注] これを4行、FX(32)=1.55 まで用意すること。

c. 原子散乱因子3 (2F10.3, 1X, A4, 1X, A4)

語	記号	欄	内 容
1	DFX	1~10	$\Delta f'$ の値
2	DFDPX	11~20	$\Delta f''$ の値
3	DFNAME	21~25	原子の種類の名 (FNAMEとなる)
4	WVNAME	27~30	X線の波長 (計算には使用しない)

(9) 原子散乱因子

a. 原子散乱因子1 (A1, 1X, I3, 2I5)

語	記号	欄	内 容
1	ユ-ト	1	英数字 F 1
2	NFX	5	原子散乱因子の種類の数
3	NFI	10	最初から NFI個の値は保存され、その後につけ加える
4	NFE	15	(NFI+NFX)個の後の NFE個を、 NFX個の後ににつけ加える

b. 原子散乱因子2 (8F9.3)

語	記号	欄	内 容
1	FX(1)	1～ 9	$\sin \theta / \lambda = 0.00$ に対する散乱因子Fの値
2	FX(2)	10～18	$\sin \theta / \lambda = 0.05$ に対する散乱因子Fの値
⋮	⋮	⋮	⋮
9	FX(9)	64～72	$\sin \theta / \lambda = 0.35$ に対する散乱因子Fの値

[注] これを4行、FX(32)=1.55 まで用意すること。

(10) 異常分散項(2A1,3X,I5,2F10.3,1X,A4,1X,A4)

語	記号	欄	内 容
1,2	ユート	1～ 2	英数字 F 2
3	NFXP	10	原子の種類 の 順番 (NFXP番目となる)
4	DFX	11～20	$\Delta f'$ の値
5	DFDPX	21～30	$\Delta f''$ の値
6	DFNAME	31～35	原子の種類 の 名 (FNAMEとなる)
7	WVNAME	37～40	X線の波長 (計算には使用しない)

(11) 原子パラメータ (原子の座標、温度因子)

a. 原子パラメータ 1 (A1,19X,13A4)

語	記号	欄	内 容
1	ユート	1	英字 A
2	TITLEA	21～72	任意の英数字 (メモ、計算には関係ない)

b. 原子パラメータ 2 (2A4,I2,3F10.5,F5.2,F10.5,3F8.5)

語	記号	欄	内 容
1	ATOM	1～ 4	原子を表す任意の英数字 (例. C )
2	ATOM1	5～ 8	原子を表す任意の英数字 (例. 1 1 2 )
3	ISF	10	原子散乱因子表の順番
4	XYZ(1)	11～20	原子の x 座標
5	XYZ(2)	21～30	原子の y 座標
6	XYZ(3)	31～40	原子の z 座標
7	BISO	41～45	等方性温度因子
8	AI	46～55	原子の多重度 (ブランクの場合は1.0)
9	SXYZ(1)	56～63	x座標の標準偏差
10	SXYZ(2)	64～71	y座標の標準偏差
11	SXYZ(3)	72～79	z座標の標準偏差

c. 原子パラメータ 3 (2A4,2X,6F10.7)

語	記号	欄	内 容
1	BTOM	1～ 4	ATOM を記入
2	CTOM	5～ 8	ATOM1を記入
3	BETA(1)	11～20	$B_{11}$
4	BETA(2)	21～30	$B_{22}$
5	BETA(3)	31～40	$B_{33}$
6	BETA(4)	41～50	$B_{12}$
7	BETA(5)	51～60	$B_{13}$
8	BETA(6)	61～70	$B_{23}$

(12) 反射データ

a. 反射データ 1 (A1,1X,I3,3I5,5A4,8A4)

語	記号	欄	内 容
1	ユ-ト	1	英字R
2	IRDI	5	0 = 簡易形式で読み込む 1 = 標準形式で読み込む
3	JBLK	3~10	ファイルの  JBLK  番目のブロックの次にデータセットからのデータを読み込む 0 = データセットのデータのみを読み込む 1 = データセットのデータを読み込んだ後、ファイルからのデータを全部読み込む -1 = データセットのデータを読み込み、読み込みを終わる (  JBLK  番目まで読み込む)
4	JSET	15	0 = データセットから読み込んだデータは、ファイルの  JBLK  番と同じ組になる 1 = 別の組になる
5	IFILE	20	0 = 機番5よりデータセットのデータを読み込む n = 機番nよりデータセットのデータを読み込む
6	TITLER	21~40	任意の英数字 (メモ、計算には関係ない)
7	IFORM	41~72	IRDI=1 のとき、反射データの読み込みの FOR MATを (から) で指定する

b. 反射データ 2 (4(3I3,F6.2,F5.2))

語	記号	欄	内 容
1	IHD(1)	1~ 3	h (h=100 が終わり)
2	IKD(1)	4~ 6	k
3	ILD(1)	7~ 9	l
4	FD(1)	10~15	Fobs
5	SFD(1)	16~20	Fobs の標準偏差
	⋮		
16	IHD(4)	61~63	h
17	IKD(4)	64~66	k
18	ILD(4)	67~69	l
19	FD(4)	70~75	Fobs
20	SFD(4)	76~80	Fobs の標準偏差

[注] これは、IRDI=0 のときに使用する。

c. 反射データ 3 (3I5,F10.2,20X,F10.2)

語	記号	欄	内 容
1	IH(1)	1~ 5	h (h=1000 が終わり)
2	IK(2)	6~10	k
3	IL(3)	11~15	l
4	FOBS(1)	16~25	Fobs
5	SIGF(1)	46~55	Fobs の標準偏差

[注] これは、IRDI=1 のときに使用する。

## (13) 結晶の名前など (任意のメモ) (A1, 9X, 4A4)

語	記号	欄	内 容
1	コト`	1	英字 X
2	X(1)	11~14	結晶の名前など任意の英数字 (最大16文字、計算には使用されない)
3	X(2)	15~18	
4	X(3)	19~22	
5	X(4)	23~26	

## No.4 原子のデータ

## (1) 原子番号(2A1, 3X, 10I5)

語	記号	欄	内 容
1,2	コト`	1~ 2	英字 A Z
3	JA	10	読み込む原子番号の数 (≤9)
4	JAZ(1)	11~15	1番目の原子番号 (JA個準備する)
5	JAZ(2)	16~20	
	⋮		
9	JAZ(9)	51~55	9番目の原子番号

## (2) 原子量(2A1, 3X, I5, 9F5.0)

語	記号	欄	内 容
1,2	コト`	1~ 2	英字 A W
3	JA	10	読み込む原子量の数 (≤9)
4	ATW(1)	11~15	1番目の原子量 (JA個準備する)
5	ATW(2)	16~20	
	⋮		
9	ATW(9)	51~55	9番目の原子量

## (3) 原子半径(2A1, 3X, I5, 9F5.0)

語	記号	欄	内 容
1,2	コト`	1~ 2	英字 A R
3	JA	10	読み込む原子半径の数 (≤9)
4	ATR(1)	11~15	1番目の原子半径 (JA個準備する)
5	ATR(2)	16~20	
	⋮		
9	ATR(9)	51~55	9番目の原子半径

## (4) 結合半径(2A1, 3X, I5, 9F5.0)

語	記号	欄	内 容
1,2	コト`	1~ 2	英字 B R
3	JA	10	読み込む結合半径の数 (≤9)
4	BTR(1)	11~15	1番目の結合半径 (JA個準備する)
5	BTR(2)	16~20	
	⋮		
9	BTR(9)	51~55	9番目の結合半径

## No.5 データセット全体の修正

(1) UNICSⅢ用データセットをUNICS用データセットに変換(A1)

語	記号	欄	内 容
1	ユート	1	数字8

(2) UNICS用データセットをUNICSⅢ用データセットに変換(A1)

語	記号	欄	内 容
1	ユート	1	数字6

(3) 格子変換によるデータセットの書き換え(2A1,3X,9F5.0,4X,A1,4A4)

語	記号	欄	内 容
1,2	ユート	1~ 2	英字HE
3	Q(1,1)	6~10	$Q_{11}$ [軸変換式] $(a, b, c) \rightarrow (A, B, C)$
4	Q(1,2)	11~15	$Q_{12}$ $A = Q_{11}a + Q_{12}b + Q_{13}c$
5	Q(1,3)	16~20	$Q_{13}$ $B = Q_{21}a + Q_{22}b + Q_{23}c$
6	Q(2,1)	21~25	$Q_{21}$ $C = Q_{31}a + Q_{32}b + Q_{33}c$
7	Q(2,2)	26~30	$Q_{22}$
8	Q(2,3)	31~35	$Q_{23}$ [指数変換式] $(h, k, l) \rightarrow (H, K, L)$
9	Q(3,1)	36~40	$Q_{31}$ $H = Q_{11}h + Q_{12}k + Q_{13}l$
10	Q(3,2)	41~45	$Q_{32}$ $K = Q_{21}h + Q_{22}k + Q_{23}l$
11	Q(3,3)	46~50	$Q_{33}$ $L = Q_{31}h + Q_{32}k + Q_{33}l$
12	LAT(1)	55	格子変換後の格子型(P, I, F, A, B, C, R, O)
13	SPG	56~71	格子変換後の空間群(例 P21/C)

(4) 2つのデータセットを結合する(2A1,8X,4I5)

語	記号	欄	内 容
1,2	ユート	1~ 2	英字ED
3	NMTI2	15	結合する「結晶データ用データセット」を入力する機番 ブランク = 8 (1,2,3,4,5,6,7 は使用できない)
4	ICD2	20	0 = 結晶データを入力しない 1 = 結晶データを入力する
5	IAP2	25	0 = 原子パラメータを入力しない 1 = 原子パラメータを入力する
6	IRD2	30	0 = 反射データを入力しない 1 = 反射データを読み込み、現反射データと置き換える 2 = 反射データを読み込み、現反射データの後に、最終組と同じ組として追加する 3 = 反射データを読み込み、現反射データの後に、新しい組として追加する

No.6 原子パラメータの修正

(1) 書き換えまたは追加

a. 始め(2A1)

語	記号	欄	内 容
1,2	ユート	1~ 2	英字AA

b. 原子座標(2A4,I2,3F10.5,F5.2,F10.5,3F8.5)

語	記号	欄	内 容
1	ATOM	1～ 4	原子を表す任意の英数字 (例. C )
2	ATOM1	5～ 8	原子を表す任意の英数字 (例. 1 1 2 )
3	ISP	10	原子散乱因子表の順番
4	XYZ(1)	11～20	原子の x 座標
5	XYZ(2)	21～30	原子の y 座標
6	XYZ(3)	31～40	原子の z 座標
7	BISO	41～45	等方性温度因子
8	AI	46～55	原子の多重度 (ブランクの場合は1.0)
9	SXYZ(1)	56～63	x 座標の標準偏差
10	SXYZ(2)	64～71	y 座標の標準偏差
11	SXYZ(3)	72～79	z 座標の標準偏差

c. 非等方性温度因子(2A4, 2X, 6F10.7)

語	記号	欄	内 容
1	BTOM	1～ 4	ATOM を記入
2	CTOM	5～ 8	ATOM1 を記入
3	BETA(1)	11～20	B <sub>11</sub>
4	BETA(2)	21～30	B <sub>22</sub>
5	BETA(3)	31～40	B <sub>33</sub>
6	BETA(4)	41～50	B <sub>12</sub>
7	BETA(5)	51～60	B <sub>13</sub>
8	BETA(6)	61～70	B <sub>23</sub>

[注] 同じ原子名があれば、2つ目は「非等方性温度因子」と見なす

d. 終わり (I8)

語	記号	欄	内 容
1	IBK	8	ブランク

(2) 対称操作で増やす

a. 始め(2A1)

語	記号	欄	内 容
1,2	ゴト	1～ 2	英字 AG

b. 内容(3I5)・・・20行まで入力できる

語	記号	欄	内 容
1	KSO	5	KSO番目の対称操作を KAI番目から KAE番目の原子に適用する。 増えた原子は最後に追加される。
2	KAI	10	
3	KAE	15	

c. 終わり (I5)

語	記号	欄	内 容
1	IBK	5	ブランク

(3) 原子名や原子散乱因子表の番号を変更する

a. 始め(2A1)

語	記号	欄	内 容
1,2	ユト	1~ 2	英字 A T

b. 内容(4(2A4, 2A4, I2))・・・150個の原子まで変更できる

語	記号	欄	内 容
1,2	AO(1)	1~ 8	変更したい原子名
3,4	AN(1)	11~18	新しい原子名
5	ISPN(1)	19~20	新しい原子散乱因子表の順番
6,7	AO(2)	21~28	変更したい原子名
8,9	AN(2)	31~38	新しい原子名
10	ISPN(2)	39~40	新しい原子散乱因子表の順番
11,12	AO(3)	41~48	変更したい原子名
13,14	AN(3)	51~58	新しい原子名
15	ISPN(3)	59~60	新しい原子散乱因子表の順番
16,17	AO(4)	61~68	変更したい原子名
18,19	AN(4)	71~78	新しい原子名
20	ISPN(4)	79~80	新しい原子散乱因子表の順番

c. 終わり(2A4)

語	記号	欄	内 容
1,2	IBK	1~ 8	ブランク

(4) 順番を並べ替える

a. 始め(2A1)

語	記号	欄	内 容
1,2	ユト	1~ 2	英字 A O

b. 内容(14I5)・・・10行まで入力できる

語	記号	欄	内 容
1	KO(1)	5	1番目になる原子の番号
2	KO(2)	10	2番目になる原子の番号
	⋮		
14	KO(14)	70	14番目になる原子の番号

c. 終わり(I5)

語	記号	欄	内 容
1	IBK	5	ブランク

(5) 削除

a. 始め(2A1, 8X, I5)

語	記号	欄	内 容
1,2	ユト	1~ 2	英字 A E
3	IA	15	0 = 削除する原子パラメータを原子の番号で指定する 1 = 削除する原子パラメータを原子名で指定する

b-1. IA = 0 の場合(14I5)・・・10行まで入力できる

語	記号	欄	内 容
1	KA(1)	5	1 番目に削除する原子の番号
2	KA(2)	10	2 番目に削除する原子の番号
	⋮		
14	KA(14)	70	1 4 番目に削除する原子の番号

[注] KA(1)=1,KA(2)=-5 とすると、1～5 番目の原子が削除される。

b-2. IA = 1 の場合(8(2A4))・・・19行まで入力できる

語	記号	欄	内 容
1	AE(1)	1～8	1 番目に削除する原子名
2	AE(2)	9～16	2 番目に削除する原子名
	⋮		
8	AE(8)	57～64	8 番目に削除する原子名

c. 終わり(2A4)

語	記号	欄	内 容
1	IBK	1～8	ブランク

(6) 選択

a. 始め(2A1)

語	記号	欄	内 容
1,2	ユト	1～2	英字 A S

b. 内容(14I5)・・・10行まで入力できる

語	記号	欄	内 容
1	KS(1)	5	1 番目に選択する原子の番号
2	KS(2)	10	2 番目に選択する原子の番号
	⋮		
14	KS(14)	70	1 4 番目に選択する原子の番号

[注] KS(1)=1,KS(2)=-5 とすると、1～5 番目の原子が選択される。

c. 終わり(I5)

語	記号	欄	内 容
1	IBK	5	ブランク

(7) 前に実行した原子パラメータに戻す

語	記号	欄	内 容
1,2	ユト	1～2	英数字 A -

No.7 反射データの修正

(1) 指定した組について転写(2A1,3X,4I5)

語	記号	欄	内 容	標準値
1,2	ユト	1~ 2	英字TR	
3 4	NSTI NSTE	10 15	現反射データのNSTI番目からNSTE番目までの組を転写する。	1 NSET
5	JCB	20	0 = 現反射データの組どおりに転写する 1 = 現反射データの組の区別をなくし、全部を1組として転写する	0
6	INIT	25	0 = 転写用反射データの最初から出力する 1 = 転写用反射データの最終組に出力する 2 = 転写用反射データの後に、新しい組として出力する	0

(2) 削除

a. 始め(2A1)

語	記号	欄	内 容
1,2	ユト	1~ 2	英字EL

b. 内容(16I4)・・・49行まで入力できる

語	記号	欄	内 容
1	NBK	1~ 4	ブロック番号
2	NJ(1)	5~ 8	1番目に削除する反射データの番号
3	NJ(2)	9~12	2番目に削除する反射データの番号
⋮	⋮	⋮	⋮
17	NJ(15)	61~64	15番目に削除する反射データの番号

[注] NJ(n+1)に負の数を入れると、NJ(n)番からNJ(n+1)番までの反射データを削除する。

c. 終わり(15)

語	記号	欄	内 容
1	NBK	5	ブランク

(3) 置き換え

a. 始め(2A1)

語	記号	欄	内 容
1,2	ユト	1~ 2	英字RE

b. 内容(6I5,2F10.5)・・・49行まで入力できる

語	記号	欄	内 容
1	LBK	1~ 5	ブロックの番号
2	LNO	6~10	置き換える反射データの番号
3	J	11~15	J
4	H	16~20	h
5	K	21~25	k
6	L	26~30	l
7	FO	31~40	Fobs

語	記号	欄	内 容
8	SIGF	41～50	$\sigma$ (Fobs)

## c. 終わり(15)

語	記号	欄	内 容
1	LBK	5	ブランク

## (4) 探す、削除、置き換え

## a. 始め(2A1)

語	記号	欄	内 容
1,2	ユ-ト	1～ 2	英字HE

## b. 内容(3I5,2F10.5,I5)・・・49行まで入力できる

語	記号	欄	内 容
1	KH	5	h
2	KK	10	k
3	KL	15	l
4	FO	16～25	Fobs
5	SFO	26～35	$\sigma$ (Fobs)
6	IDEL	36～40	-1 = 搜した (h,k,l) の反射データを削除する 0 = 搜した (h,k,l) の反射データを印刷をし、 削除しない 1 = 搜した (h,k,l) の反射データのFobsと $\sigma$ (Fobs)を置き換える

## c. 終わり(15)

語	記号	欄	内 容
1	KH	1～ 5	1000 = 反射データの終わり

## (5) 選択(2A1,8X,2F10.5,6I5)

語	記号	欄	内 容
1,2	ユ-ト	1～ 2	英字SE
3	TMIN	11～20	$\theta$ または $\text{SIN } \theta / \lambda$ の最小値 $\theta$ または $\text{SIN } \theta / \lambda$ の最大値 TMIN から TMAX の間にある反射データを選択 する。TMAX=0.0 のときは、この選択をしない。 波長の標準値 $M_0=0.71073 \text{ \AA}$
4	TMAX	21～30	
5	JS	35	1 = h による選択をする 0 = h による選択をしない
6	JHS	36～40	JS=1 のとき、h=JHS の反射データを選択
7	KS	45	1 = k による選択をする 0 = k による選択をしない
8	JKS	46～50	KS=1 のとき、k=JKS の反射データを選択
9	LS	55	1 = l による選択をする 0 = l による選択をしない

語	記号	欄	内 容
10	JLS	56~60	LS=1 のとき、1=JLS の反射データを選択

(6) X線の波長(2A1,8X,F10.5)・・・波長を変更したいときに使用する

語	記号	欄	内 容
1,2	WLT	1~ 2	英字WL
3	WL	11~20	波長 (Å)

(7) 尺度因子(2A1,3X,13F5.2)

語	記号	欄	内 容
1,2	SC	1~ 2	英字SC
3	SCL(1)	6~10	1 番目の尺度因子 (NSET個準備する)
4	SCL(2)	11~15	2 番目の尺度因子
⋮	⋮	⋮	⋮
15	SCL(13)	66~70	1 3 番目の尺度因子

(8) 組を分ける(2A1,3X,2I5)

語	記号	欄	内 容
1,2	DI	1~ 2	英字DI
3	KBL	10	KBLブロックのKSE番目までの反射データと(KSE+1)番目から後の反射データを分けて別の組にする。
4	KSE	15	

No.8 印刷、出力

(1) 基本データを印刷する(2A1,3X,5I5)

語	記号	欄	内 容
1,2	PR	1~ 2	英字PR
3	ICDP	10	-1 = 結晶データの印刷をしない 0 = 結晶データの印刷をする
4	IAPP	15	-1 = 原子パラメータの印刷をしない 0 = 原子パラメータの印刷をする (X,Y,Z,B,ISF,AIを印刷) 1 = 原子パラメータの印刷をする (X,Y,Z,B,ISF,AI,Bij,σ(X,Y,Z)の印刷)
5	IRDP	20	-1 = 反射データの印刷をしない 0 = 反射データの印刷をする (指定ブロックの1,41,80番目を印刷) 1 = 反射データの印刷をする (指定ブロックの全部を印刷)
6	JBLPI	25	JBLPI番からJBLPE番までのブロックにある反射データの印刷をする。 JBLPIがブランクの場合は全ブロックの印刷をする。 JBLPEがブランクの場合はJBLPI番のブロックの印刷をする
7	JBLPE	30	

(2) 基本データを機番7に出力する(2A1,3X,5I5)

語	記号	欄	内 容
1,2	コード	1～ 2	英字PU
3	ICDP	10	-1 = 結晶データの出力をしない 0 = 結晶データの出力をする
4	IAPP	15	-1 = 原子パラメータの出力をしない 0 = 原子パラメータの出力をする
5	IRDP	20	-1 = 反射データの出力をしない 0 = 反射データの出力をする (指定ブロックの全部を簡易形式で出力)
6 7	JBLPI JBLPE	25 30	JBLPI番からJBLPE番までのブロックにある反射データの出力をする。 JBLPIがブランクの場合は全ブロックの出力をする。 JBLPEがブランクの場合はJBLPI番のブロックの出力をする

## (3) 反射データの分布表を印刷する(2A1)

語	記号	欄	内 容
1,2	コード	1～ 2	英字TF

## 3. 3. 2. 処理プログラム

JOB. CLIST (FILE80) をEDITし、次のように修正し、EXECする。  
特に注意を要するところには、下線が引いてある。

```

00100 PROC 0
00200 CONTROL NOFLUSH PROMPT
00300 ERROR DO
00400 WRITE *** ABNORMAL END ***
00500 FREE F(FT01F001)
00600 FREE F(FT02F001)
00700 FREE F(FT03F001)
00800 FREE F(FT04F001)
00900 FREE F(FT05F001)
01000 EXIT
01100 END
01200 ALLOC F(FT01F001) DA(XTAL.DATA) REU
01300 ALLOC F(FT02F001) DA(RD.DATA) REU
01400 ALLOC F(FT03F001) UNIT(WORK) SP(10 10) T
01500 ALLOC F(FT04F001) UNIT(WORK) SP(10 10) T
01600 ALLOC F(FT05F001) DA(PO.DATA(FILE80)) REU
01700 ALLOC F(FT06F001) DA(*) REU
01800 WRITE *** FILE80 START ***
01900 CALL 'QS.LIBLM.LOAD(FILE80)'
02000 WRITE *** FILE80 NORMAL END ***
02100 FREE F(FT01F001)

```

02200 FREE F(FT02F001)  
 02300 FREE F(FT03F001)  
 02400 FREE F(FT04F001)  
 02500 FREE F(FT05F001)  
 02600 EXIT  
 02700 END

### 3. 4. SC80

幾組かの異なった反射データがあるとき、相対尺度を与え、統一的な反射データを作成する。ただし、異なった組の間に共通の指数 (hk1) の反射データがなければならない。全空間群に適用可能で、フリーデルの法則が成立しないときでも使用できる。

#### 3. 4. 1. プログラム用データ

PO. DATA (SC80) をEDITし、修正して使用する。

No.	コード	内 容
1	なし	Title Data(18A4)
2	I	Input Output Control Data
3	LG C1 C3 C4	[Control Data] Point Group Data Index Control Data Scale Factor Data Weight Control Data

No.1 Title Data(18A4)・・・RGKDRの「No.1 Title Data(18A4)」と同じ

No.2 Input Output Control Data(A1,1X,I3,I5,5X,I5)

語	記号	欄	内 容	標準値
1	ユート	1	英字 I	
2	NMTI	5	基本データの読み込み 0 = 機番1より読み込む -1 = 読み込みをしない	1
3	NMTO	10	基本データの出力 0 = 機番1に出力する -1 = 出力しない	1
4	IRDO	20	修正後の反射データの印刷 -1 = 印刷しない 0 = 各ブロックの1,41,80番目のみを印刷 1 = 各ブロック全部印刷する	0

No.3 Control Data

(1) Point Group Data(2A1,I3,I5)

語	記号	欄	内 容	標準値
1,2	ユート	1~2	英字 LG	
3	LG	5	晶系のコード	2

語	記号	欄	内 容	標準値
			1 = 三斜 2 = 単斜 { b が主軸 } 3 = 単斜 { c が主軸 } 4 = 斜方 5 = 正方 (4/m属) 6 = 正方 (4/mmm属) 7 = 三方 (、六方格子) 8 = 三方 ( m1、六方格子) 9 = 三方 ( 1m、六方格子) 10 = 三方 (、菱面体格子) 11 = 三方 ( m、菱面体格子) 12 = 六方 (6/m属) 13 = 六方 (6/mmm属) 14 = 立方 (m3属) 15 = 立方 (m3m属)	
4	LPG	10	点群のコード (次の表を参照) 通常はblankでよい	0

[LGとLPGの表]

LG	LPG = 1	LPG = 2	LPG = 3	LPG = 4
1	点群 1			
2	2	m		
3	2	m		
4	222	2mm( a極軸)	m2m( b極軸)	mm2( c極軸)
5	4			
6	422	4mm	2m	m2
7	3			
8	321	3m1		
9	312	31m		
10	(R) 3			
11	(R) 32	(R) 3m		
12	6			
13	622	6mm	m2	2m
14	23			
15	432	3m		

## (2) Index Control Data(2A1,2X,A1,2(4X,A1),I5,2F5.2,3I5)

語	記号	欄	内 容	標準値
1,2	ユ-ト	1~ 2	英字C 1	
3	J1	5	3番目に変わる指数 (H,K,L)	
4	J2	10	2番目に変わる指数 (H,K,L)	
5	J3	15	1番目に変わる指数 (H,K,L)	
6	NBRM	20	悪い反射データ数の上限	10

語	記号	欄	内 容	標準値
7	DFMAX	21~25	$\sigma(F)/\langle F \rangle > \text{DFMAX}$ の反射データを悪い反射とする	0.1
8	FLIM	26~30	$F_0 \leq \text{FLIM} \times \sigma(F_0)$ となる $F_0$ を無視する	2.5
9	K1	35	通常はブランクでよい。(1=h,2=k,3=l) ①LG=1,LPG=0 : K3で指定した指数が正になる ②LG=1 or 2,LPG=0 or 1 : K3を主軸方向にとる	
10	K2	40		
11	K3	45		

(3) Scale Factor Data(2A1,F8.5,I5,2F5.0)

語	記号	欄	内 容	標準値
1,2	ユート	1~ 2	英字C 3	
3	FSCALE	3~10	以下の $F_0$ をSCALE倍して読み込む。 「AS」を続けて使用するときは、入れなくてよい。	1.0
4	JSCL	11~15	JSCLセット (FSCALE倍したもの) のスケールが常に1.0 になるように相対尺度を定める。 $0 = \sum (\text{SCALE})^2 = \text{NSET}$ となるように相対尺度を定める	1
5	PLIM	16~20	相関のあるものの中の $\sigma(F)/F > \text{PLIM}$ の反射データのみを印刷する	0.05
6	GLIM	21~25	Bijvoet Pair を出すとき $\Delta I/I_{\text{mean}} > \text{GLIM}$ の反射データのみを印刷する	0.1

(4) Weight Control Data(2A1,F8.5,3F10.5)

語	記号	欄	内 容	標準値
1,2	ユート	1~ 2	英字C 4	
3	FWMIN	3~10	FWMIN< $F_0$ <FWMAX の反射データのみが、スケール リングの対象となる。	0.0 100000
4	FWMAX	11~20		
5	WGT(ISQ)	21~30	以下の反射データのウェイト。 セットごとに重みがつけられる。	1.0
6	WGTT(ISQ)	31~40	スケールの計算後 $ F_0 $ の平均値を求めるとき、 セットごとのウェイトWGTを再び用いて平均をとる。 そのとき $ F_0  < \text{FWMIN}$ または $ F_0  > \text{FWMAX}$ の反射データにはWGTTを用いる。	0.0

[注] このデータは組の数 (ISQ) だけ準備をする。(ISQ $\leq$ 10)

3. 4. 2. 処理プログラム

JOB. CLIST (SC80) をEDITし、次のように修正し、EXECする。

```
00100 PROC 0
00200 CONTROL NOFLUSH PROMPT
00300 ERROR DO
00400 WRITE *** ABNORMAL END ***
00500 FREE F(FT01F001)
00600 FREE F(FT05F001)
00700 FREE F(FT08F001)
00800 EXIT
```

```

00900 END
01000 ALLOC F(FT01F001) DA(XTAL.DATA) REU
01100 ALLOC F(FT05F001) DA(PO.DATA(SC80)) REU
01200 ALLOC F(FT06F001) DA(*) REU
01300 ALLOC F(FT08F001) UNIT(WORK) SP(10 10) T
01400 WRITE *** SC80 START ***
01500 CALL 'QS.LIBLM.LOAD(SC80)'
01600 WRITE *** SC80 NORMAL END ***
01700 FREE F(FT01F001)
01800 FREE F(FT05F001)
01900 FREE F(FT08F001)
02000 EXIT
02100 END

```

### 3. 5. ADC80

測定中に標準反射の変動があったとき、また吸収補正が必要になったときに用いる。  
 変動の補正には次式を用いる。

$$|F_c| = |F_0| \{1 + (a_1 + b_1 s^2)n + (a_2 + b_2 s^2)n^2 + (a_3 + b_3 s^2)n^3 + (a_4 + b_4 s^2)n^4\}$$

ここで  $s = \sin \theta / \lambda$  であり、 $n$  は測定された順番である。 $a_1$ 、 $b_1$  の係数は標準反射の変動からプログラムの内部で決められる。従って、標準反射はなるべく  $\theta$  の広い範囲のものを選ぶのが望ましい。 $\theta$  に関する部分は無視することもできる。用いる次数の標準は3次であるが、2次または4次を選ぶみともできる。

吸収補正は A.T.C. North, D.C. Philips & F.S. Mathews[11] の方式を用いている。

#### 3. 5. 1. プログラム用データ

PO. DATA (ADC80) を EDIT し、修正して使用する。

No.	コード	内 容
1	なし	Title Card(18A4)
2	I	Input Output Control Card
3	UB	UB Matrix
4	CF	[Fluctuation Correction Data]
	SH	A Control Data
	TM	Shell Data
5	WL	[Absorption Correction Data]
		Transmission Data
		Wave Length Data

No.1 Title Data(18A4)・・・RGKDRの「No.1 Title Data(18A4)」と同じ

No.2 Input Output Control Data(A1,1X,I3,I5,5X,2I5)

語	記号	欄	内 容	標準値
1	コード	1	英字 I	
2	NMTI	5	基本データの読み込み	1

語	記号	欄	内 容	標準値
			0 = 機番1より読み込む	
3	NMTO	10	基本データの出力 0 = 機番1に出力する -1 = 出力しない	2
4	IRDO	20	反射データの印刷 -1 = 印刷しない 0 = 各ブロックの1,41,80番目のみを印刷 1 = 各ブロック全部印刷する	0
5	ICDO	25	0 = 標準印刷 1 = 詳細印刷	0

No.3 UB Matrix(回折計セッティングパラメータ)(2A1,8X,3F10.6)

語	記号	欄	1行目の内容	2行目の内容	3行目の内容
1,2	ユト	1~2	英字UB	ブランク	ブランク
3	UB(i,1)	11~20	UB(1,1)	UB(2,1)	UB(3,1)
4	UB(i,2)	21~30	UB(1,2)	UB(2,2)	UB(3,2)
5	UB(i,3)	31~40	UB(1,3)	UB(2,3)	UB(3,3)

No.4 Fluctuation Correction Data

(1) A Control Data・・・変動補正をするときに準備する。

a.データ1 (2A1,3X,3I5,5X,2I5)

語	記号	欄	内 容	標準値
1,2	ユト	1~2	英字CF	
3	NRF	10	標準反射の数 (≤5)	3
4	JISU	15	補正式の次数 (2,3,4)	3
5	MSUM	20	各標準反射の測定値のMSUM個ずつの和を補正用のデータに用いる。	3
6	JTEST	30	0 = 標準 1 = 各標準反射について2次、3次、4次の補正計算をし、印刷する。ただし、変動補正は行わない。	0
7	JTHE	35	0 = 標準 -1 = 補正式の角度依存性を無視する	0

b.データ2 (4I5)・・・NRF個の標準反射の指数

語	記号	欄	内 容
1	IHR(1,J)	5	h
2	IHR(2,J)	10	k
3	IHR(3,J)	15	l
4	JCOR(J)	20	0 = 変動補正に用いる -1 = 変動補正に用いない

(2) Shell Data(2A1,8X,2F10.5,I5)・・・反射データをθ毎の殻に分け、各殻毎に別々の標準反射を用いて補正するとき用いる。最高10個まで準備できる。

語	記号	欄	内 容
1,2	ユト	1~2	英字SH
3	THWA	11~20	$2\theta_{\min}$ $2\theta_{\max}$
4	NRFS	21~30	
5		35	この殻の補正に使用する標準反射の番号

## No.5 Absorption Correction Data

(1) Transmission Data・・・吸収補正用反射データの透過率の相対値を15組まで準備できる。

## a. Angle Range Data(2A1, 8X, 2F10.3, I5)

語	記号	欄	内 容	標準値
1,2	ユト	1~2	英字TM	
3	PHI1	11~20	$\phi_1$ ( $\phi_1$ から $\phi_2$ きざみで、NTD個の透過率データを②のデータで準備する。)	30
4	PHI2	21~30		13
5	NTD	31~35	NTD ( $\leq 40$ )	

## b. Transmission Factor Data(7F10.3)

語	記号	欄	内 容
1	RLVT	1~10	$2\theta$ (2行目からはブランク)
2	T(1)	11~20	$\phi_1$ の TRF (NTD個準備する)
3	T(2)	21~30	
...	...	...	$\phi_1 + \phi_2$ の TRF
7	T(6)	61~70	

## (2) Wave Length Data(2A1, 8X, F10.5)

語	記号	欄	内 容	標準値
1,2	ユト	1~2	英字WL	
3	WAL	11~20	X線の波長 (Å) 0 = 1.5405	.71073

## 3. 5. 2. 処理プログラム

JOB, CLIST (ADC80) をEDITし、次のように修正し、EXECする。

特に注意を要するところには、下線が引いてある。

```

00100 PROC 0
00200 CONTROL NOFLUSH PROMPT
00300 ERROR DO
00400 WRITE *** ABNORMAL END ***
00500 FREE F(FT01F001)
00600 FREE F(FT02F001)
00700 FREE F(FT03F001)
00800 FREE F(FT04F001)
00900 FREE F(FT05F001)
01000 FREE F(FT08F001)
01100 EXIT

```

```

01200 END
01300 ALLOC F(FT01F001) DA(XTAL.DATA) REU
01400 ALLOC F(FT02F001) DA(XTALO.DATA) REU
01500 ALLOC F(FT03F001) UNIT(WORK) SP(10 10) T
01600 ALLOC F(FT04F001) UNIT(WORK) SP(10 10) T
01700 ALLOC F(FT05F001) DA(PO.DATA(ADC80)) REU
01800 ALLOC F(FT06F001) DA(*) REU
01900 ALLOC F(FT08F001) UNIT(WORK) SP(10 10) T
02000 WRITE *** ADC80 START ***
02100 CALL 'QS.LIBLM.LOAD(ADC80)'
02200 WRITE *** ADC80 NORMAL END ***
02100 FREE F(FT01F001)
02200 FREE F(FT02F001)
02300 FREE F(FT03F001)
02400 FREE F(FT04F001)
02500 FREE F(FT05F001)
02600 FREE F(FT08F001)
02700 EXIT
02800 END
    
```

### 3. 6. ABSC80

結晶の寸法と線吸収係数を用いて吸収補正を行う。計算方式は Busing & Levy のガウス数値積分法[12]であり、透過率の計算は Burnham の吸収補正サブルーチン ABSRP1, ABSRP2[13] を用いている。

#### 3. 6. 1. プログラム用データ

PO. DATA (ABSC80) をEDITし、修正して使用する。

No.	コード	内 容
1	なし	Title Data(18A4)
2	I	Input Output Control Data
3	UB	UB matrix
4	EQ	Equiinclination Condition
5	AB	Absorption Correction Data

No.1 Title Data(18A4)・・・RGKDRの「No.1 Title Data(18A4)」と同じ

No.2 Input Output Control Data(A1,1X,I3,I5,5X,2I5)

語	記号	欄	内 容	標準値
1	コト	1	英字 I	
2	NMTI	5	基本データの読み込み 0 = 機番1より読み込む	1
3	NMTO	10	基本データの出力	2

語	記号	欄	内 容	標準値
			0 = 機番 1 に出力する -1 = 出力しない	
4	IRDO	20	修正後の反射データの印刷 -1 = 印刷しない 0 = 各ブロックの 1, 41, 80 番目のみを印刷 1 = 各ブロック全部印刷する	0
5	ICDO	25	0 = 標準印刷 1 = 各反射データの補正值等の印刷	0

## No.3 UB matrix(回折計セッティングパラメータ)(2A1,8X,3F10.6)

語	記号	欄	1行目の内容	2行目の内容	3行目の内容
1,2	ユ-ト	1~2	英字 UB	ブランク	ブランク
3	UB(i,1)	11~20	UB(1,1)	UB(2,1)	UB(3,1)
4	UB(i,2)	21~30	UB(1,2)	UB(2,2)	UB(3,2)
5	UB(i,3)	31~40	UB(1,3)	UB(2,3)	UB(3,3)

## No.4 Equiinclination Condition(2A1,I3,4I5)・・・等傾角回折計の場合

語	記号	欄	内 容
1,2	ユ-ト	1~2	英字 E Q
3	IU	5	結晶回転軸 u
4	IV	10	結晶回転軸 v
5	IW	15	結晶回転軸 w
6	MODE	20	0 = 等傾角法 ( $ \mu  = \nu$ ) 1 = off等傾角法 (0層以外 $\sin \mu  - \sin\nu = .01$ )
7	IUPS	25	0 = $\gamma > 0$ の測定 1 = $\gamma < 0$ の測定

## No.5 Absorption Correction Data

## (1) データ 1 (2A1,I3,I5,F10.3,2F10.5)

語	記号	欄	内 容
1,2	ユ-ト	1~2	英字 A B
3	NP	5	結晶面の数 ( $NP \leq 25$ )
4	IDEV	10	0 = 結晶を 64 分割 ( $4 \times 4 \times 4$ ) 1 = 結晶を 216 分割 ( $6 \times 6 \times 6$ ) 2 = 結晶を 512 分割 ( $8 \times 8 \times 8$ )
5	ABSCO	11~20	線吸収係数 ( $\text{mm}^{-1}$ )
6	WL	21~30	X線の波長 ( $\text{\AA}$ ) ブランク = 1.54050
7	EPS	31~40	計算誤差の許容相対精度 ブランク = 0.001

## (2) データ 2 (3I5,F10.3)

語	記号	欄	内 容
1	JP	5	面の指数 h
2	KP	10	面の指数 k
3	LP	15	面の指数 l
4	D	16~25	結晶内の任意の原点から面までの距離 (D>0,mm)

### 3. 6. 2. 処理プログラム

JOB. CLIST (ABSC80) をEDITし、次のように修正し、EXECする。  
特に注意を要するところには、下線が引いてある。

```

00100 PROC 0
00200 CONTROL NOFLUSH PROMPT
00300 ERROR DO
00400 WRITE *** ABNORMAL END ***
00500 FREE F(FT01F001)
00600 FREE F(FT02F001)
00700 FREE F(FT05F001)
00800 EXIT
00900 END
01000 ALLOC F(FT01F001) DA(XTAL.DATA) REU
01100 ALLOC F(FT02F001) DA(XTALO.DATA) REU
01200 ALLOC F(FT05F001) DA(PO.DATA(SC80)) REU
01300 ALLOC F(FT06F001) DA(*) REU
01400 WRITE *** ABSC80 START ***
01500 CALL 'QS.LIBLM.LOAD(ABSC80)'
01600 WRITE *** ABSC80 NORMAL END ***
01700 FREE F(FT01F001)
01800 FREE F(FT02F001)
01900 FREE F(FT05F001)
02000 EXIT
02100 END

```

### 4. おわりに

今後、3回にわたり「UNICSIV」の使用法（構造決定編、精密化編、作図編）について、説明する予定である。

「UNICSIV」の開発にあたり、色々便宜を与えてくださった九州大学大型計算機センターライブラリ室の方々、熊本大学薬学部および情報処理センターの方々に感謝する。

なお、今後「UNICSIV」を使用した場合は、この広報を参考文献に明記していただきたい。

## [参考文献]

1. 渡辺得之助、桜井敏雄他 結晶解析ユニバーサル・プログラム・システム (Ⅰ)、日本結晶学会、1967.
2. 桜井敏雄 結晶解析ユニバーサル・プログラム・システム (Ⅱ)、日本結晶学会、1968.
3. 河野重昭 UNICSⅡの使用法について、九州大学大型計算機センター広報、Vol.13, No.1, 1980, P.39-50.
4. 桜井、岩崎、渡辺、小林、坂東、中道 結晶構造解析ユニバーサルプログラムシステム (第4報) UNICSⅡシステム、理研報告、50, 1974, 75-91.
5. 桜井敏雄他 FACOM 230M-V/VI/VII UNICSⅡ解説書、富士通(株)、1973.
6. 桜井敏雄、小林公子 結晶構造解析ユニバーサルプログラムシステム (第5報) UNICSⅢシステム、理研報告、55, 1974, 75-91.
7. 桜井敏雄、小林公子 UNICSⅢシステム使用法 (Ⅰ)、理化学研究所、1978.
8. 桜井敏雄、小林公子 UNICSⅢシステム使用法 (Ⅱ)、理化学研究所、1979.
9. 桜井敏雄、小林公子 UNICSⅢシステム使用法 (Ⅲ)、理化学研究所、1980.
10. 河野重昭 UNICSⅢの使用法について、九州大学大型計算機センター広報、Vol.16, No.2, 1983, P.113-154.
11. A.T.C.North, D.C.Phillips & F.S.Mathews Acta Cryst., A24, 1968, 351-359.
12. W.R.Busing & H.A.Levy Acta Cryst., 10, 1957, 180-182.
13. C.W.Burnham An IBM 709/7090 Computer program for Computing transmission factors for crystal of essentially arbitrary shape, Geophysical Laboratory, Carnegie Institution of Washington, Washington, D.C. 1963.