

単結晶強度データリスト作成プログラム LISTHKL

LISTHKL : List h, k, l, F_0 and σF_0 tables

山川 純次 (Junji Yamakawa)*
河原 昭 (Akira Kawahara)*

LISTHKL, a Fortran 77 program listing up the data for deposit is submission to Acta Crystallographica has been written. The program requires a computer set with a printer utilizing the LIPS3 page description language.

Keywords: LISTHKL, Acta Crystallographica, reflection data

I. プログラムの概要

LISTHKL は Fortran 77 でコーディングされた、単結晶構造解析で使用する強度データのリストを出力するプログラムである。このリストの形式は結晶学の専門誌 Acta Crystallographica の投稿規定にあわせてあり、決定した結晶構造を投稿する際に使用することができる。このプログラムは 386SX 以上の CPU と 2MB 以上の保護モードメモリを搭載し、MS-DOS Ver. 3.3 以上が稼働しているコンピュータと、LIPS3 ページ記述言語が搭載されているプリンタが必要である。

II. プログラムの使用方法

LISTHKL はコンピュータに関する最低限の知識さえあれば簡単に使用することができるように設計した。結晶構造解析に UNICS(桜井敏雄, 1971) を使用しているサイトなら特に簡単に使用する事ができる。

LISTHKL は強度データを収めたファイルを動作指定ファイルの内容に従って加工してリストを出力する。強度データファイルは 'fort.2'、動作指定ファイルは 'TITLE.HKL' と名付けなければならない。

リストの各ページの上部に 2 行分のコメントを出力することができるので、出力したい内容を動作指定ファイルに記述する。なにも出力したくない場合でも空白行を記述しなければならない。

出力したい強度データのファイル形式としてバイナリ形式とテキスト形式の双方を取り扱うことが可能である

が、どちらのタイプかは動作指定ファイルで指定しなければならない。

したがって動作指定ファイル 'TITLE.HKL' は次の行で構成される。

第 1,2 行	タイトル (A)
第 3 行	強度ファイルの形式 (I)
	(0:バイナリ, 1:テキスト)

強度データは 1 行当たり 1 反射データで収められていなくてはならない。強度データのファイル形式にテキストを指定した場合、強度データはフォーマット '3I8,2F16.8' あるいはコンマ区切りで収められていなくてはならない。

強度リストは一度 'OUTPUT.HKL' というファイルに出力されるので、これを LIPS3 プリンタに転送すればハードコピーが得られる。強度データは h, k, l, F_0 および σF_0 が一頁あたり 75 行、2 カラムで計 150 反射つつ、ページ上部に二行のコメントとページ番号を伴って出力される。付録に LISTHKL のソースコードと出力例を示す。なお、著者に連絡していただければ、プログラムの概要で述べた条件を満たすコンピュータで実行可能な EXE ファイルとソースコード無償で提供する。ただし実行やソースコードの利用に伴って発生するいかなる責任も著者は負わない。

付録 A. LISTHKL のソースコード

```

*****
* LISTHKL.F : Program for arranging H, K, L, Fo, and Sigf
*             for Acte Cryst. publication.
*             1989.11.6 by JyAM
*             $Revision$
*****
program listhkl
  INTEGER MAXP, LPP, FLINE, BIDX, CBRK, PNUM, I, J, K
  INTEGER IH(160), IK(160), IL(160)
  REAL F(160), H(160), L(160), Fo(160), Sigf(160)
  CHARACTER*70 TITLE1, TITLE2
  CHARACTER ESC, LF, TITLEZ
  DATA LP, /'0.033', /
  DATA LPP, /'0.014', /
  DATA MAXP, /'20', /
  DATA FLINE, /'75', /
  DATA LPP, /'FLINE*2', /
  OPEN (UNIT=05, FILE='TITLE.HKL')
  OPEN (UNIT=06, FILE='OUTPUT.HKL')
  call l3saj
  READ (UNIT=05, FMT='(A)') TITLE1
  READ (UNIT=05, FMT='(A)') TITLE2
  read (unit=05, fmt='(f)') ftype
  Do 10 I=1, MAXP
    PNUM = I
    if (ftype .eq. 0) then ! File type is BINARY.
      DO 20 J=1, LPP
        CBRK = J
        READ (UNIT=02) IH(J), IK(J), IL(J), FOBS(J), SIGMA(J)
        IF (IH(J).EQ.1000) GOTO 30
        CONTINUE
      20
    else ! File type is TEXT.
      DO 21 J=1, LPP
        CBRK = J
        READ (UNIT=02, FMT=5000) IH(J), IK(J), IL(J), FOBS(J), SIGMA(J)
        format(3I8, 2F16, 8)
        IF (IH(J).EQ.1000) GOTO 30
        CONTINUE
      21
    endif
  IF (PNUM.EQ.1) THEN
    WRITE (UNIT=06, FMT=6030) TITLE1, PNUM, TITLE2
  ELSE
    FORMAT (1H, //, 1H, 1X, A68, '{, 13, }', /, 2X, A68, /)
    WRITE (UNIT=06, FMT=6035) LF, TITLE1, PNUM, TITLE2
    FORMAT (A1, //, 1H, 1X, A68, '{, 13, }', /, 2X, A68, /)
  ENDIF
  WRITE (UNIT=06, FMT=6020)
  WRITE (1H, 6X, H, 11X, K, 11X, L, 11X, F(8), 11X, SIGMA, 11X)
  DO 40 J=1, FLINE
    K = J+FLINE
    WRITE (UNIT=06, FMT=6000) IH(J), IK(J), IL(J), FOBS(J), SIGMA(J)
    FORMAT (1H, 1X, 3I5, 2F9.2, 6X, 1X, 3I5, 2F9.2)
    CONTINUE
  40
  DO 50 J=1, LPP
    IH(J) = 0
    IK(J) = 0
    IL(J) = 0
    FOBS(J) = 0.0
    SIGMA(J) = 0.0
  50
  CONTINUE
  10
  CONTINUE
  30
  CONTINUE
  WRITE (UNIT=06, FMT=6035) LF, TITLE1, PNUM, TITLE2
  DO 60 J=1, FLINE
    BIDX = J

```

```

K
IF ((IH(K).EQ.1000).OR.(CBRK.LE.80)) GOTO 70
IF (IH(J).EQ.1000) GOTO 90
WRITE (UNIT=06, FMT=6000)
  , IH(K), IK(K), IL(K), FOBS(K), SIGMA(K)
&
60 CONTINUE

```

```

70 CONTINUE
DO 80 J=BIDX, FLINE
IF (IH(J).EQ.1000) GOTO 90
WRITE (UNIT=06, FMT=6010) IH(J), IK(J), IL(J), FOBS(J), SIGMA(J)
FORMAT (1H, 1X, 3I5, 2F9.2)
80 CONTINUE
90 CONTINUE
call l3eoj(void)
CLOSE (UNIT=06)
CLOSE (UNIT=06)
END
*****
* LIPS3 Start a Job
*****
subroutine l3saj
character esc /'033' /
data

```

```

* Attention : The $ sign is a line continuing sign (VMS fortran feature).
write (unit=06, fmt=6000) esc ! Mode setup
6000 format (a1, 2I1, 240, 1J) ! Job Identfire
write (unit=06, fmt=6010) esc ! Software Reset
6010 format (LISTHKL, a1, y) ! Display a string
write (unit=06, fmt=6020) esc ! Select a charact set name
6020 format (a1, <, y) ! Select the line pitch to
6030 format (a1, p1, y, LISTHKL, a1, y) ! Up 6 lines to cancel
6040 format (a1, p2, ALP125, ROMA, a1, y) ! the control sequences
6050 format (a1, [4 L, y)
6060 format (a1, [6k, y)

```

```

return
end
*****
* LIPS3 End of Job
*****
subroutine l3eoj
character esc /'033' /
data
write (unit=06, fmt=6000) esc, esc
6000 format (a1, 'POJ', a1, y)
return
end

```

付録 B. LISTHKL の出力例

Structure of synthesized Na-Zn-monophosphate (1)
 J. Yamakawa, I. Watanabe and A. Kawahara

H	K	L	F (obs)	SigmaFo	H	K	L	F (obs)	SigmaFo
1	-3	-4	33.12	0.39	3	-1	-3	6.34	0.78
2	-3	-4	17.43	0.49	4	-1	-3	25.49	0.34
4	-3	-4	5.25	1.28	5	-1	-3	4.13	1.32
0	-2	-4	13.42	0.58	6	-1	-3	11.83	0.60
1	-2	-4	6.00	1.11	7	-1	-3	18.07	0.49
2	-2	-4	17.57	0.48	0	0	-3	5.90	0.85
3	-2	-4	12.13	0.60	1	0	-3	20.17	0.33
5	-2	-4	46.25	0.36	2	0	-3	9.92	0.50
0	-1	-4	19.02	0.47	3	0	-3	19.26	0.36
2	-1	-4	40.95	0.33	4	0	-3	35.76	0.31
3	-1	-4	11.11	0.63	5	0	-3	35.81	0.33
4	-1	-4	13.27	0.54	6	0	-3	21.07	0.43
6	-1	-4	36.74	0.38	7	0	-3	8.53	0.86
0	0	-4	8.12	0.80	0	1	-3	8.18	0.62
1	0	-4	16.36	0.44	1	1	-3	32.48	0.28
2	0	-4	16.45	0.44	2	1	-3	30.41	0.29
3	0	-4	40.88	0.32	3	1	-3	27.84	0.31
6	0	-4	5.55	1.27	4	1	-3	7.88	0.69
0	1	-4	18.37	0.44	5	1	-3	47.59	0.32
1	1	-4	4.90	1.20	6	1	-3	13.24	0.56
2	1	-4	21.87	0.38	7	1	-3	27.56	0.40
3	1	-4	27.12	0.36	0	2	-3	9.54	0.57
4	1	-4	27.11	0.38	1	2	-3	8.37	0.60
5	1	-4	17.83	0.48	2	2	-3	60.34	0.27
6	1	-4	13.09	0.60	3	2	-3	5.18	0.93
0	2	-4	52.16	0.31	4	2	-3	24.85	0.35
1	2	-4	13.36	0.51	6	2	-3	23.63	0.42
2	2	-4	22.05	0.40	0	3	-3	8.86	0.64
3	2	-4	11.70	0.58	1	3	-3	9.06	0.60
4	2	-4	12.74	0.55	2	3	-3	21.66	0.35
5	2	-4	14.59	0.57	4	3	-3	34.03	0.34
6	2	-4	21.96	0.45	5	3	-3	12.92	0.55
0	3	-4	13.37	0.54	6	3	-3	15.39	0.53
1	3	-4	45.46	0.32	1	4	-3	21.70	0.36
5	3	-4	30.16	0.40	4	4	-3	20.45	0.42
0	4	-4	5.06	1.27	5	4	-3	12.55	0.57
1	4	-4	7.87	0.82	6	4	-3	18.06	0.51
2	4	-4	24.64	0.40	1	5	-3	21.79	0.40
3	4	-4	7.52	0.91	2	5	-3	23.35	0.40
4	4	-4	29.66	0.40	3	5	-3	4.90	1.23
5	4	-4	24.76	0.45	4	5	-3	17.55	0.46
0	5	-4	9.60	0.74	5	5	-3	7.24	0.98
1	5	-4	9.60	0.72	0	6	-3	7.50	0.86
2	5	-4	7.66	0.91	1	6	-3	30.97	0.39
3	5	-4	6.34	1.04	3	6	-3	4.62	1.40
4	5	-4	16.57	0.54	0	7	-3	7.02	0.97
1	6	-4	22.43	0.47	2	7	-3	13.91	0.58
0	-1	-3	6.59	1.03	0	-6	-2	48.95	0.38
1	-1	-3	13.59	0.57	1	-6	-2	6.04	1.06
2	-1	-3	6.40	1.10	3	-6	-2	8.25	0.89
3	-1	-3	11.13	0.66	4	-6	-2	16.53	0.53
4	-1	-3	8.28	0.95	5	-6	-2	9.25	0.81
5	-1	-3	27.18	0.43	0	-5	-2	16.78	0.46
0	-4	-3	4.47	1.45	1	-5	-2	36.30	0.35
1	-4	-3	18.70	0.45	3	-5	-2	10.13	0.64
2	-4	-3	43.04	0.34	4	-5	-2	13.53	0.54
3	-4	-3	37.48	0.35	5	-5	-2	12.29	0.58
4	-4	-3	24.89	0.40	6	-5	-2	10.21	0.72
5	-4	-3	17.75	0.49	0	-4	-2	14.83	0.45
6	-4	-3	20.77	0.48	1	-4	-2	46.91	0.29
0	-3	-3	26.09	0.37	2	-4	-2	11.18	0.54
1	-3	-3	16.23	0.44	3	-4	-2	7.12	0.75
2	-3	-3	32.82	0.33	4	-4	-2	25.93	0.35
3	-3	-3	16.61	0.46	5	-4	-2	41.65	0.35
4	-3	-3	40.12	0.33	6	-4	-2	11.79	0.62
5	-3	-3	15.47	0.48	0	-3	-2	6.42	0.79
6	-3	-3	8.77	0.79	1	-3	-2	6.42	0.77
7	-3	-3	5.01	1.47	2	-3	-2	21.37	0.33
1	-2	-3	51.87	0.29	4	-3	-2	47.94	0.29
3	-2	-3	13.77	0.46	5	-3	-2	8.95	0.67
5	-2	-3	6.06	1.01	6	-3	-2	50.66	0.34
7	-2	-3	40.89	0.38	0	-2	-2	4.53	0.99
0	-1	-3	69.86	0.27	1	-2	-2	45.69	0.25
1	-1	-3	7.08	0.80	3	-2	-2	54.53	0.25
2	-1	-3	36.02	0.29	4	-2	-2	26.71	0.31