

目 次

1 章 SHELX の概要

1.1 SHELX プログラムシステム

1.2 SHELXL の特徴

1.3 コマンドの一覧

1.4 ins ファイルの内容

1.5 コマンドの指定の仕方

演習問題

2 章 束縛を用いた精密化

2.1 水素原子の扱い

2.2 乱れた構造の束縛

2.3 乱れた分子構造モデルの組み立て

2.4 結晶溶媒の乱れ

2.5 無機化合物の乱れの解析

演習問題

3 章 トラブルシューティング

3.1 計算が中断する

3.2 反射データの扱い

3.3 水素原子の扱い

3.4 構造の乱れ

3.5 原子座標の移動やフラック変数など

3.6 距離の計算など

3.7 コマンドの使い分け

演習問題

4 章 コマンドの入力マニュアル

4.1 原子

4.2 ABIN, ACTA, AFIX, ANIS, ANSC, ANSR

4.3 BASF, BIND, BLOC, BOND, BUMP

4.4 CELL, CGLS, CHIV, CONF, CONN

4.5 DAMP, DANG, DEFS, DELU, DFIX, DISP

4.6 EADP, END, EQIV, EXTI, EXYZ

4.7 FEND, FLAT, FMAP, FRAG, FREE, FVAR

4.8 GRID, HFIX, HKLF, HTAB

- 4.9 ISOR, LATT, LAUE, LIST, L.S.
- 4.10 MERG, MORE, MOVE, MPLA, NCSY, NEUT
- 4.11 OMIT, PART, PLAN, PRIG
- 4.12 REM, RESI, RIGU, RTAB
- 4.13 SADI, SAME, SFAC, SHEL, SIMU, SIZE
- 4.14 SPEC, STIR, SUMP, SWAT, SYMM
- 4.15 TEMP, TITL, TWIN, TWST, UNIT
- 4.16 WGHT, WIGL, WPDB, XNPD, ZERR

演習問題

5 章 構造精密化の基礎

- 5.1 計算に使用する数値データ
- 5.2 X 線構造解析の基本式
- 5.3 構造の精密化
- 5.4 結晶構造の対称性
- 5.5 溶媒のランダムな乱れの補正
- 5.6 双晶の解析
- 5.7 絶対構造の判定
- 5.8 反射データに対するその他の補正

演習問題

6 章 lst ファイルの見方

- 6.1 印字出力の全体の流れ
- 6.2 解析途中のチェック項目

付録

- 付録 1 結晶溶媒の乱れの取り扱い例
- 付録 2 重水素を含む結晶、放射光あるいは中性子回折データの場合
- 付録 3 双晶操作の例
- 付録 4 残基名や番号の参照
- 付録 5 外部ファイルの参照
- 付録 6 FORTRAN の入出力形式
- 付録 7 PLATON/SQUEEZE の使い方
- 付録 8 *shelXle* の使い方

演習問題の解答

索引