Файл структурных факторов

Для структуры 3SRF был получен текстовый файл со структурными факторами (3srf-sf.cif – текстовый файл, 3srf\_sf.xlsx – таблица Excel).

Общее число рефлексов совпадает с числом наблюдаемых рефлексов (\_reflns.number\_all и \_reflns.number\_obs соответственно) и составляет 107209, что и является количеством структурных факторов, перечисленных в файле.

Таблица структурных факторов файла имеет следующий формат:

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| wavelength\_id | crystal\_id | scale\_group\_code | index\_h | index\_k | index\_l | Status | F\_meas\_au | F\_meas\_sigma\_au | F\_calc | phase\_calc | fom |
| 1 | 1 | 1 | h | k | l | o/f | x | x | x | x | x |

Первые три значения касаются длины волны рентгеновского излучения, использованного в эксперименте по РСА, идентификатору кристалла и scale\_group\_code – они инвариантны для всего набора структурных факторов. Следующая тройка –” координаты” каждого рефлекса – числа h, k, l.

Поле Status обозначает использовался ли данный структурный фактор в оптимизации структуры (o - optimisation) или нет (f - free). Для данной структуры, 101863 структурных фактора были использованы для оптимизации модели и 5346 – для контроля (free).

Последующие поля представляют собой собственно значения структурных факторов (измеренные и посчитанные по модели) и фаз (посчитанные по модели).

Чтобы определить, какие структурные факторы точно пропущены (выпали из набора), нужно найти явно пропущенные тройки чисел (h,k, l). Явно пропущенные - это такие, что (1) их нет в файле; (2) хотя бы одна тройка (h',k', l') с h'>=h, k'>=k, l'>=l присутствует в файле. Используя данный метод, были выявлены следующие пропущенные структурные факторы:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| index\_h | index\_k | index\_l |
| -83 | 1 | 5 |
| -83 | 1 | 6 |
| -83 | 1 | 7 |
| -83 | 1 | 8 |
| -83 | 1 | 9 |
| -83 | 1 | 10 |
| -83 | 1 | 11 |
| -83 | 1 | 12 |
| -83 | 1 | 13 |
| -83 | 1 | 14 |