

authentic sample examined in a parallel analysis.

*Fraction III* contained small amounts of three unidentified components with chromatographic mobilities in the regions of raffinose and stachyose. By development of the chromatograms with *p*-anisidine HCl the components had a pink colour. The total acid hydrolysis resulted in the liberation of galactose, glucose, and ribose.

*Acknowledgements.* The author is indebted to Mrs. Gry Sletten and Miss Jorunn Bysveen for their skilful technical assistance.

1. Sömme, R. *Acta Chem. Scand.* **24** (1970) 72.
2. Anderson, E. *Ind. Eng. Chem.* **41** (1949) 2887.
3. French, D. *Advan. Carbohydr. Chem.* **9** (1954) 149.
4. Courtois, J. E. *Bull. Soc. Bot. France* **115** (1968) 309.
5. Briens, M. *Compt. Rend. D* **264** (1969) 447.

Received January 26, 1971.

## Kristallographische Computer-Programme für die CDC-3300

M. DRÄGER und G. GATTOW

*Institut für Anorganische Chemie und Kernchemie, Johannes Gutenberg-Universität, D-65 Mainz, Deutschland*

Kürzlich wurde in dieser Zeitschrift eine Serie von kristallographischen Computer-Programmen in Mass Storage FORTRAN für eine CDC-3300-Anlage beschrieben.<sup>1</sup> Wir stellten einen entsprechenden Programmeyclus zusammen<sup>2</sup> und möchten diesen hier kurz vorstellen.

Alle Programme wurden für den MS-FORTRAN-Compiler und das Betriebssystem MASTER einer CDC-3300-Rechenanlage geschrieben. Die übersetzten Programme befinden sich auf Plattenfiles, von denen sie zur Benutzung einzeln oder im Job-Sequence-Verfahren in den Kernspei-

cher abgerufen werden können; variable Unterprogramme können in FORTRAN beigefügt werden. Die Daten-Ein- und Ausgabe kann wahlweise BCD über Lochkarten oder binär über Magnetband oder Plattenfile erfolgen. Im einzelnen bestehen die folgenden Programme.

**POWDER.** Dieses Programm dient zur Indizierung von Pulveraufnahmen aus vorgegebenen Gitterkonstanten und zu deren Verfeinerung und stammt in seinen Grundzügen von Lindqvist und Wengelin.<sup>3</sup> Wir führten die Möglichkeit zur Standardisierung mittels der Werte eines inneren Standards und die Berechnung von Indizierungshilfen nach dem Verfahren von Hesse<sup>4</sup> und Lipson<sup>5</sup> ein.

**CORIN.** Dieses Programm dient zur Korrektur der Daten eines Äquinklinationstechnik benutzenden automatischen Diffraktometers und stammt von H. Paulus, Darmstadt. Durchgeführt werden können Untergrundkorrektur, Kontrolle berechnete-gemessene Diffraktometereinstellung, Lorentz-Polarisationskorrektur, zweidimensionale Absorptionskorrektur nach dem Verfahren von Busing und Levy<sup>6</sup> und Gewichtssetzung.

**ORABS.** Dieses Programm dient zur dreidimensionalen Absorptionskorrektur nach dem Verfahren von Busing und Levy<sup>6</sup> und wurde unter Benutzung einer von Schultze-Rhonhof, Bonn, bearbeiteten Fassung des Absorptionsprogramms von Wehe, Busing und Levy<sup>7</sup> und in Anlehnung an die Programmführung in CORIN neu geschrieben.

**LSQIMZ.** Dieses Programm dient einerseits zur statistischen Erfassung des reziproken Gitters<sup>8</sup> und andererseits zur Datenvorbereitung für Patterson-Synthesen, Strukturfaktorenberechnungen und "least squares"-Verfeinerungen.

**FSY.** Dieses Programm zur Berechnung von Patterson-Synthesen, Fourier-Synthesen und Differenz-Fourier-Synthesen stammt von Schultze-Rhonhof.<sup>9</sup> Gegenüber der Originalfassung, die für jede Raumgruppe austauschbare Teile der Summierungsfolgen im Hauptprogramm vorsah, wurden diese Teile fest eingebaut. Die Fourier-Summation erfolgt nach einer Faktorisierung der allgemeinen Elektronendichte-Summationsformel in einem austauschbaren Unterprogramm, von dem 67 Fassungen für alle Raumgruppen bestehen.

**MSFOUR.** Dieses Programm zum Aufsuchen der Maxima und Minima einer dreidimensionalen Fourier-Synthese stammt in seiner Grundform ebenfalls von Schultze-

Rhonhof. Wir fügten eine dreidimensionale Interpolationsroutine nach dem Verfahren von Dawson<sup>10</sup> bei.

LSQ2 und LSQ2AN. Diese Programme dienen zur Strukturfaktorenberechnung und "least squares"-Verfeinerung und besitzen die Möglichkeit zur Rechnung mit den Basisparametern einer starren Atomgruppe, die nach einem "full matrix"-Verfahren verfeinert werden. Die Programmgrundform stammt von Scheringer.<sup>11</sup> Das schnellere Programm LSQ2 gestattet nur die Benutzung von isotropen Temperaturfaktoren und erfordert für jede Raumgruppe ein spezielles Unterprogramm. LSQ2AN ist allgemein geschrieben und ermöglicht die Benutzung anisotroper Temperaturfaktoren. Dispersionskorrektur und Gewichtsanalysen werden durchgeführt.

ORFFE. Dieses Programm basiert auf dem bekanntesten Programm von Busing, Martin und Levy<sup>12</sup> und dient zur weiteren Auswertung von Lageparametern und thermischen Parametern und von deren Fehlergrenzen. In Anlehnung an ein Programm von C.-I. Brändén, Uppsala, fügten wir eine "least squares"-Ebenen-Routine ein.

Listen der einzelnen Programme können von uns angefordert werden.

1. Dahl, T., Gram, F., Groth, P., Klewe, B. und Römning, C. *Acta Chem. Scand.* **24** (1970) 2232.
2. Dräger, M. *Dissertation*, Mainz 1970.
3. Lindqvist, O. und Wengelin, F. *Arkiv Kemi* **28** (1967) 179.
4. Hesse, R. *Acta Cryst.* **1** (1948) 200.
5. Lipson, H. *Acta Cryst.* **2** (1949) 43.
6. Busing, W. R. und Levy, H. A. *Acta Cryst.* **10** (1957) 180.
7. Wehe, D. J., Busing, W. R. und Levy, H. A. *IUCr World List of Crystallographic Computer Programs*, 1962, Nr. 362.
8. Rogers, D. *Computing Methods in Crystallography*, Pergamon, Oxford 1965, S. 117.
9. Schultze-Rhonhof, E. *IUCr World List of Crystallographic Computer Programs*, 1966, Nr. 5063.
10. Dawson, B. *Acta Cryst.* **14** (1961) 999.
11. Scheringer, C. *Acta Cryst.* **16** (1963) 546.
12. Busing, W. R., Martin, K. O. und Levy, H. A. *ORNL-TM-306*.

Eingegangen am 12. Dezember 1970.

## Integrated Solutions for a Generalized System of First-order Reactions

WILLIAM H. SACHS

*Department of Organic Chemistry, University of Umeå, S-901 87 Umeå, Sweden*

Integrated solutions to rate equations are those generally used in some form to extract information from a series of measurements in terms of a kinetic model. Obtaining this information is by no means a trivial problem, since it has in practice been difficult to develop reliable statistical and numerical procedures which are capable of analyzing the complex equations that often arise. For first-order systems where the uncertainty in the measurement of the dependent variable exceeds one part promille, it has not been possible to proceed beyond an equation containing three coefficients and two exponential terms.<sup>1</sup>

$$y_i = c_1 \exp(\lambda_1 t_i) + c_2 \exp(\lambda_2 t_i) + c_3 \quad (1)$$

Thus integrated algebraic solutions to rate equations for complex kinetic systems would appear to be of little else than academic interest. The concentrations of the components of a system, however, are rarely measured directly. Instead, some quantity is observed that is generally a linear transformation of these concentrations,<sup>2</sup> and the expressions for the time dependence of the concentrations in the kinetic system may reduce to much simpler equations involving a set of observables (e.g. NMR studies of H-D exchange at CH<sub>n</sub> under irreversible conditions<sup>3</sup>). The opposite may of course also occur. Thus if one desires to know whether a given kinetic model and experimental method of measurement will produce one or more equations which are feasible to treat numerically, explicitly integrated solutions to the rate equations of the model are desirable. Explicit expressions are also useful if one wishes to simulate the time dependence of the system for a hypothetical set of parameters.

Matrix methods have been found useful for integrating the differential equations for first-order kinetic systems,<sup>2,4</sup> however, the algebraic effort required with this process may be enormous for fairly com-