

Short Communications

Contributions intended for publication under this heading should be expressly so marked; they should not exceed about 1000 words; they should be forwarded in the usual way to the appropriate Co-editor; they will be published as speedily as possible. Publication will be quicker if the contributions are without illustrations.

Acta Cryst. (1968). B24, 880

Refinement of the crystal and molecular structure of *meso*- α,α' -dimethylglutaric acid: Corrigenda.

By EZIO MARTUSCELLI, ETTORE BENEDETTI, PAOLO GANIS and CARLO PEDONE, *Sez. VII, Centro Nazionale di Chimica delle Macromolecole, Istituto Chimico, Università di Napoli, Via Mezzocannone 4, Napoli, Italy*

(Received 14 February 1968)

Corrections to *Acta Cryst.* (1967), 23, 747.

The following corrections should be made in the paper with the above title (Martuscelli, Benedetti & Pedone, 1967). In Table 1, column three, the y/b coordinate of atom C(1) should read 0.2965 instead of 0.2695, and the coordinates of the O(3) and the O(4) atoms should be interchanged.

In Table 4 the intramolecular distance C(2)–O(1) should read C(1)–O(1).

Reference

MARTUSCELLI, E., BENEDETTI, E., GANIS, P. & PEDONE, C. (1967). *Acta Cryst.* 23, 747.

Acta Cryst. (1968). B24, 880

Konvergenz-Kriterien beim 'Least-squares'-Verfahren. Von HAJO ONKEN, *Lehrstuhl für Kristallographie der Universität des Saarlandes, 66 Saarbrücken 15, Deutschland*

(Eingegangen am 31. Oktober 1967 und wiedereingereicht am 19. Januar 1968)

During least-squares refinement it is useful to leave the decision for termination of iteration to the computer. From a number of usable criteria selected two (the weighted R_2 and the vector of parameter shifts e) should indicate this properly as a consequence of the least-squares procedure. The diagnosis based hereon is unequivocal, only if the significance of e is tested with the standard deviation vector s . Data on refinement of coefficients of the scattering factor curve of K^+ are given as an example.

Das Ende einer Strukturverfeinerung nach der Methode der 'Kleinsten Quadrate' wird gewöhnlich daran erkannt, dass keine oder nur geringe Änderungen in aufeinander folgenden Zyklen an den Parametern und dem R -Faktor erkennbar sind. Es wird dabei auch hier nach 'trial and error' in der Weise vorgegangen, indem man der Maschine ein oder mehrere Zyklen zu rechnen aufgibt und am Ergebnis schliesslich den eben oder schon früher aufgetretenen Fall der Konvergenz diagnostiziert. Vorteilhaft ist es jedoch, die Diagnose des Endpunktes der Verfeinerung der Maschine zu überlassen, die, nach geeigneten Kriterien urteilend, den Lauf durch Initiierung eines neuen Zyklus fortführt oder terminiert. In Tabelle 1 sind die Kriterien aufgeführt, die auf ihre Eignung für die Steuerung einer Iterationsserie untersucht wurden.

Am Ende der Verfeinerung sollte Kriterium R_2 (häufig wird auch nur der Zähler von R_2 , $\sum w\Delta^2$ betrachtet) in aufeinander folgenden Zyklen keine Änderung mehr aufweisen, während der Vektor e den Wert null ergeben sollte (Konvergenz-Bedingungen). Die Kriterien R , Δ' und V sind vom Verfahren unabhängig; sie werden aber häufig zur statistischen Bewertung einer Ausgleichsrechnung herangezogen.

Tabelle 1. *Konvergenz-Kriterien.*

(1) $R = \frac{h}{\sum} \Delta / \sum F_o $	Konventioneller R -Faktor
(2) $R_2 = \frac{h}{\sum} w\Delta^2 / \sum F_o^2$	Gewichteter R_2 -Faktor
(3) $\Delta' = \text{MAX}_{i=1}^h (\Delta_i)$	Maximalwert der Fehler
(4) $V = (1/h \sum \Delta^2)^{1/2}$	Varianz
(5) $ e = (\sum_{j=1}^n \epsilon_j^2)^{1/2}$	Lösungsvektor
(6) $ s = (\sum_{j=1}^n \sigma_j^2)^{1/2}$	Vektor der Standardabweichungen

h = Zahl der Beobachtungen
 n = Zahl der Parameter
 $\Delta = |F_o| - |F_c|$
 w = Gewicht der Beobachtungsgleichung
 ϵ_j = Parameteränderung
 σ_j = Standardabweichung des Parameters

Ein Beispiel, das typisch ist für eine grosse Anzahl ähnlicher Verfeinerungen (Onken & Fischer, 1968) sei hier