

Keve (1971), appliquée par Abrahams (1972). Sur la Fig. 1 sont reportées les valeurs de Δ_i/σ_i en fonction de $\xi_{1/2}(i/j)$, j étant le nombre de paramètres comparés (27 dans ce cas), i le numéro du paramètre après classement des Δ_i/σ_i par valeurs décroissantes; les valeurs de $\xi(i/j)$ ont été tabulées par Hamilton & Abrahams (1972). Théoriquement, les points doivent se placer autour de la droite de pente 1; nous voyons qu'effectivement les points se répartissent autour de cette droite ce qui dénote l'absence d'erreur systématique, ce qui n'est pas toujours le cas (Abrahams, 1972). Il est à remarquer le calcul de Δ/σ effectué à partir de résultats publiés est souvent imprécis; en effet, ces résultats sont généralement communiqués avec un chiffre pour l'écart type σ . Il en résulte des erreurs d'arrondis sans importance pour le paramètre mais parfois très importantes pour Δ ou pour σ . Par exemple, si Δ et σ sont très voisins de 1,50, Δ/σ peut selon le sens de l'arrondi prendre

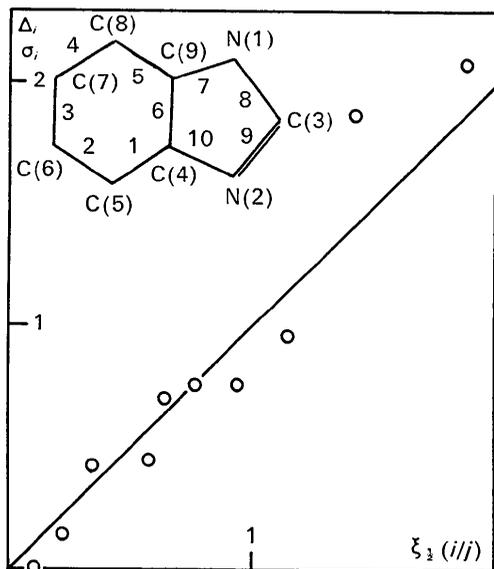


Fig. 2. Δ_i/σ_i en fonction de $\xi_{1/2}(i/j)$ pour les 10 longueurs de liaisons comparées. Les numéros des liaisons sont indiqués sur le dessin de la molécule.

les valeurs 0,5 1 ou 2. Il serait donc souhaitable de communiquer deux chiffres pour σ .

La même étude a été effectuée pour les 10 distances interatomiques faisant intervenir les atomes de C et N (Tableau 2 et Fig. 2). L'accord est bon, sauf pour les liaisons 1 et 8; de plus l'ensemble des points sauf les 2 représentant ces liaisons se répartit autour de la droite de pente 1. Il semble donc qu'il y ait erreur systématique pour ces 2 longueurs de liaisons: cela est normal car ces 2 liaisons sont presque parallèles au paramètre b de la maille pour lequel nous avons noté une différence impor-

Tableau 2. Comparaison des longueurs de liaisons obtenues (en Å)

Pour le numéro des liaisons voir Fig. 2.				
N°	Notre étude	D.S.V.	$\Delta/\sigma \times 10^3$	Δ/σ
1	1,389 (8)	1,389 (4)	0	0
2	1,401 (8)	1,386 (4)	15	2,08
3	1,407 (7)	1,401 (5)	6	0,70
4	1,369 (8)	1,378 (5)	9	0,96
5	1,400 (7)	1,401 (4)	1	0,14
6	1,398 (7)	1,392 (4)	6	0,75
7	1,376 (8)	1,372 (4)	4	0,44
8	1,361 (7)	1,346 (4)	15	1,87
9	1,315 (8)	1,311 (5)	4	0,42
10	1,390 (7)	1,395 (3)	5	0,75

Nous pouvons conclure de cette comparaison de résultats que les 2 études sont exemptes d'erreurs systématiques sur les mesures d'intensités et au cours des affinements. Par contre, la mesure d'un des paramètres paraît imprécise dans une ou l'autre étude (ou dans les 2). Il semble d'ailleurs que dans bien des cas les erreurs de mesure de paramètres de maille soient sous-estimées.

Références

- ABRAHAMS, S. C. (1972). *Acta Cryst.* B28, 2886-2887.
 ABRAHAMS, S. C. & KEVE, E. T. (1971). *Acta Cryst.* A27, 157-165.
 DIK-EDIXHOVEN, C. J., SCHENK, H. & VAN DER MEER, H. (1973). *Cryst. Struct. Commun.* 2, 23-24.
 HAMILTON, W. C. & ABRAHAMS, S. C., (1972). *Acta Cryst.* A28, 215-218.

Acta Cryst. (1974). B30, 1648

The crystal and molecular structure of (\pm)-14- β -androsta-4,8-diene-3,17-dione. Errata. By M. SAX, E. ABOLA, C. S. YOO and J. PLETCHER, *Biocrystallography Laboratory, VA Hospital, Pittsburgh, Pa. 15240, U.S.A. and Department of Crystallography, University of Pittsburgh, Pittsburgh, Pa. 15260, U.S.A.*

(Received 21 February 1974; accepted 21 February 1974)

Errors in the atomic parameters in Table 3 of Sax, Abola, Yoo & Pletcher [*Acta Cryst.* (1973). B29, 2247-2252] are corrected.

The following changes should be made in the parameters as listed in Table 3 of Sax, Abola, Yoo & Pletcher, (1973). C(2), $\beta_{11}=280$; C(12), $D1=1745$; C(13), $z=800$; C(15), $x=10121$, $y=2139$, $z=1748$; C(16), $\beta_{33}=89$; C(17), $D3=2689$; C(19), $D1=1800$; O(17), $x=6417$, $y=3130$, $z=2228$; H'(C2), $z=509$; H'(C12), $x=396$; H(C14), $y=165$, $z=16$.

We are grateful to Dr W. Duax for bringing to our attention the errors in C(15) and O(17).

Reference

- SAX, M., ABOLA, E., YOO, C. S. & PLETCHER, J. (1973). *Acta Cryst.* B29, 2247-2252.