

Texturverteilung treten, wie sich zeigen lässt (Bunge, 1961a), nur Produkte von Kugelfunktionen mit gleichem unteren Index auf. Die Texturverteilungsfunktion kann also geschrieben werden

$$C(\eta, \eta) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=1}^M \sum_{r=1}^R C_l^{mr} k_l^m(\eta) k_l^r(\eta). \quad (1)$$

Die $k_l^m(\eta)$ und $k_l^r(\eta)$ sind Kugelflächenfunktionen der beiden Symmetrien.

Die symmetriemässig gleichwertigen Reflexe $\{h_1 h_2 h_3\}$ eines Kristalls liegen auf einer Kugel um den Ursprung des reziproken Raumes. Handelt es sich um ein polykristallines Material, ist die Belegungsichte auf dieser Kugel durch eine kontinuierliche Verteilungsfunktion gegeben. Sie lässt sich zerlegen in einen von der Kristallstruktur abhängigen Faktor $A(h_1 h_2 h_3)$ (proportional der Intensität I des Einkristalls) und eine von der Textur abhängige Funktion, die man aus der Funktion Gl. (1) erhält, wenn man darin die kontinuierlich variable Kristallrichtung η speziell als $\eta = \{h_1 h_2 h_3\}$ wählt. Die von den $\{h_1 h_2 h_3\}$ -Reflexen herrührende Intensitätsverteilung im reziproken Raum einer polykristallinen Probe \bar{I} , kann somit, im Gegensatz zur Intensität I des Einkristalls, geschrieben werden

$$\bar{I}_{\{h_1 h_2 h_3\}}(\eta) = A(h_1 h_2 h_3) C(h_1 h_2 h_3, \eta). \quad (2)$$

Einsetzen von Gl. (1) in (2) ergibt

$$\bar{I}_{\{h_1 h_2 h_3\}}(\eta) = A(h_1 h_2 h_3) \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{r=1}^R F_l^r(h_1 h_2 h_3) k_l^r(\eta) \quad (3)$$

mit

$$F_l^r = \sum_{m=1}^M C_l^{mr} k_l^m(h_1 h_2 h_3). \quad (4)$$

Die F_l^r können aus der gemessenen Funktion \bar{I} berechnet werden. Kennt man sie für eine hinreichende Anzahl verschiedener $\{h_1 h_2 h_3\}$ -Tripel, so kann man durch Auflösung der Gl. (4) die Koeffizienten C_l^{mr} berechnen. Damit ergeben sich dann ebenfalls nach Gl. (4) die F_l^r für andere Werte $\{h_1 h_2 h_3\}$, und nach Gl. (3) hat man damit die texturabhängige Verbreiterung für andere Reflexe. Durch den Reihenansatz Gl. (3) und die Beziehung zwischen den Koeffizienten Gl. (4) ist also der Zusammenhang zwischen der texturabhängigen Verbreiterung verschiedener Reflexe gegeben.

Acta Cryst. (1962). **15**, 613

The crystal structure of calcium thymidylate. A correction. By K. N. TRUEBLOOD, *University of California, Los Angeles 24, California, U.S.A.* and P. HORN and V. LUZZATI, *Centre de Recherches sur les Macromolécules, Strasbourg, France*

(Received 15 January 1962)

In the paper of the above title (Trueblood, Horn & Luzzati, 1961) a line has been omitted on p. 976, twelve lines up from the bottom of column 1. It should read:

'... a torsion angle, φ_{CN} , as the angle formed by the trace of the plane of the base with the projection of the $Cl'-O1'$ bond of the furanose ring when viewed along

Die obigen Beziehungen sind nicht mehr anwendbar, wenn symmetriemässig ungleichwertige Reflexe koinzidieren. In diesem Fall gilt

$$I_{\theta}(\eta) = \sum_i I_{\{h_1 h_2 h_3\}_i}(\eta) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{r=1}^R F_l^r(\theta) k_l^r(\eta) \quad (5)$$

mit

$$F_l^r = \sum_i A(h_1 h_2 h_3)_i F_l^r(h_1 h_2 h_3)_i. \quad (6)$$

Die $F_l^r(h_1 h_2 h_3)_i$ müssen für eine hinreichende Zahl von Wertepaaren l, r mit Hilfe von koinzidenzfreien Reflexen gemäss Gl. (4) berechnet werden.

Da man nur F_l^r -Werte für kleine l benötigt, braucht man zur Auftrennung von Koinzidenzen die Textur nicht vollständig zu kennen; es genügt, wenn man eine gewisse Anzahl ihrer Koeffizienten ermittelt. Bei völlig regelloser Kristallverteilung sind für $l > 0$ alle $C_l^{mr} = 0$. Das gleiche gilt nach Gl. (4) auch für die F_l^r . Dadurch sind für regellose Verteilung die Gl. (6) nicht auflösbar, die Koinzidenzen können also auf diese Weise nicht getrennt werden.

Durch Rotation um eine Achse während der Messung geht jede Textur in eine rotationssymmetrische Textur über. Da dann alle zu messenden und zu berechnenden Funktionen von einer Drehung um diese Achse herum unabhängig sind, reduziert sich dadurch sowohl der Mess- als auch der Rechenaufwand und beides kommt in eine auch sonst in der Kristallstrukturbestimmung übliche Grössenordnung. Allerdings wird durch eine solche Drehung die Intensität der Reflexe gegenüber dem Untergrund herabgedrückt, was eine Reduzierung der möglichen Information bedingt.

Wir sehen in der hier geschilderten Methode eine Möglichkeit, Strukturbestimmungen auch an »schlechten Kristallen« oder texturierten Pulverpräparaten durchzuführen.

Frau Prof. Dr. Boll-Dornberger bin ich für zahlreiche wertvolle Diskussionen sehr zu Dank verpflichtet.

Literatur

- BUNGE, H. J. (1961a). *Mber. dtsh. Akad. Wiss.* **3**, 97.
 BUNGE, H. J. (1961b). *Mber. dtsh. Akad. Wiss.* **3**, 285.
 LAPORTE, O. (1948). *Z. Naturforsch.* **3a**, 447.
 MEYER, B. (1954). *Canad. J. Math.* **6**, 135.

the $Cl'-N$ bond. This angle ...'. The italicized phrase was omitted in the original.

Reference

- TRUEBLOOD, K. N., HORN, P. & LUZZATI, V. (1961). *Acta Cryst.* **14**, 965.