

Tabelle 2. Verhalten der Konvergenz-Kriterien (Beispiel: Koeffizienten der Formfaktorkurve von K^+).

Zyklus	R	R_2	A'	V	$ e $	$ s $
1	1,78	2,01	16,16	12,36	17,87	28,7
2	0,58	0,61	7,05	4,29	27,39	6,85
3	0,13	0,13	2,17	1,109	1,39	— *
4	0,02	0,01	0,42	0,171	2,61	1,60
5	0,0115	0,008	0,667	0,129	1,600	1,80
6	0,0125	0,00783	0,814	0,156	0,2940	1,72
7	0,0128	0,00782	0,845	0,163	0,1085	1,79
8	0,0129	0,00782	0,854	0,164	0,0206	1,72
9	0,0129	0,00782	0,855	0,165	0,0062	1,74
10	0,0129	0,00782	0,856	0,165	0,0019	1,89
11	0,0129	0,00782	0,856	0,165	0,00010	1,84
12	0,0129	0,00782	0,856	0,165	0,00003	1,69
13	0,0129	0,00782	0,856	0,165	0,00010	1,64
14	0,0129	0,00782	0,856	0,165	0,00010	1,75
15	0,0129	0,00782	0,856	0,165	0,00010	1,74

* $\sum_{j=1}^n \epsilon_j \cdot v_j > \sum_{i=1}^h w \Delta i^2$ für diesen Zyklus, daher s nicht reell.

dargestellt. Verfeinert wurden aus den Angaben der *International Tables for X-ray Crystallography* (1962) die Koeffizienten der Formfaktor-Kurve für das K^+ Ion. Die Kurve wird repräsentiert durch

$$f(x) = \exp\left(\sum_{j=0}^6 a_j x^j\right), \quad x = \sin \theta / \lambda. \quad (1)$$

Tabelle 2 zeigt die Werte der Kriterien für eine Folge von Zyklen. In den Spalten zeigen kursiv gedruckte Zahlenwerte an, dass hier ein Minimum zum ersten Mal erreicht wurde.

Das Resultat der Tabelle 2 zeigt, dass die beiden heranzuziehenden Kriterien verschieden schnell (R_2 im 7. Zyklus, $|e|$ im 12.) das Minimum erreichen. Die bei $|e|$ auftretenden Oszillationen sind wohl der limitierten Stellengenauigkeit des Rechners zuzuschreiben.

Dass R_2 ein Minimum erreicht, ist klar eine Folge der Forderung des Verfahrens, denn der Zähler von R_2 wird minimiert. Der Vektor e , dessen Komponenten die Parameteränderungen sind, wird über den Zyklus hinaus, in dem R_2 ein Minimum erreicht, noch kleiner. Jedoch ist seine Grösse in Bezug auf die Grösse des Vektors der Standardabweichungen (s) von einem bestimmten Zyklus

an unsignifikant. Die Diskrepanz der Konvergenz-Diagnose durch beide Kriterien löst sich auf, wenn man zugibt, dass eine Änderung neben einer mehr als 10 mal grösseren Standardabweichung sicher unsignifikant ist.

Die Verwendung von e führt zur 'Über-Verfeinerung' (ab Zyklus 7 in diesem Beispiel), während der die Zyklen nicht mehr signifikant zur Verbesserung des Ergebnisses beitragen. Lediglich im Vergleich mit $|s|$ kann $|e|$ zur Steuerung der Iterationsterminierung herangezogen werden. Der so diagnostizierte Konvergenzpunkt fällt in der Regel mit dem durch R_2 diagnostizierten zusammen.

Die Berechnungen wurden mit einer IBM 7094 des Deutschen Rechenzentrums, Darmstadt, ausgeführt. Herrn Prof. Dr K. Fischer danke ich für die Diskussion der Arbeit, der Deutschen Forschungsgemeinschaft für finanzielle Unterstützung.

Literatur

- International Tables for X-ray Crystallography* (1962). Vol. III, p.202 ff. Birmingham: Kynoch Press.
ONKEN, H. & FISCHER, K. (1968). *Z. Kristallogr.* Im Druck.

Acta Cryst. (1968). B24, 881

The use of neutron anomalous scattering in crystal structure analysis. I. Non-centrosymmetric structures.

Erratum. By A. K. SINGH and S. RAMASESHAN, *National Aeronautical Laboratory, Bangalore-17, India*

(Received 13 March 1968)

The first term on the right hand side of equation (23) (Singh & Ramaseshan, 1968) is indeterminate for $b_1(r) = b_2(r)$ and therefore $\cos \theta$, cannot be determined in this case. Equation (24), which gives the value of $\cos \theta$ for the case $b_1(r) = b_2(r)$, is incorrect. Thus for the case $b_1(r) = b_2(r)$ and $b_1(i) \neq b_2(i)$, the contribution due to the anomalous scatterer can be determined unambiguously but the twofold

ambiguity in the determination of the phases remains unresolved. This error, however, does not affect the rest of the discussion.

Reference

- SINGH, A. K. & RAMASESHAN, S. (1968). *Acta Cryst.* B24, 35.