

『X線結晶構造解析入門』正誤表

□P30、表 2.2、脚注 a)

(誤) 単斜の場合は主軸を  $b$  に取り、 $c < a$  として  $\beta$  ができるだけ  $90^\circ$  に近い鈍角にする。斜方の場合は、 $c < a < b$  となるように軸を選ぶ。

(正) 単斜の場合は主軸を  $b$  に取り、 $a < c$  として  $\beta$  ができるだけ  $90^\circ$  に近い鈍角にする。斜方の場合は、 $a < b < c$  となるように軸を選ぶ。

□P63、式(3.20), (3.21)

(誤)

$$wR(F^2) = \sqrt{\frac{\sum_h w_h (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2}{\sum_h w_h |F_o|^2}} \quad (3.20)$$

$$R(F^2) = \sqrt{\frac{\sum_h (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2}{\sum_h |F_o|^2}} \quad (3.21)$$

(正)

$$wR(F^2) = \sqrt{\frac{\sum_h w_h (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2}{\sum_h w_h (|F_o|^2)^2}} \quad (3.20)$$

$$R(F^2) = \sqrt{\frac{\sum_h (|F_o|^2 - |F_c|^2)^2}{\sum_h (|F_o|^2)^2}} \quad (3.21)$$

(備考) それぞれの分母において、2乗の記号が抜けていた。

□P105、式(6.1)： 分母の 0.6023 を 0.6022 に修正。

□P180

(誤) 構造を解くための **HKL4** 形式ファイルの他に、**HKL5** 形式ファイルも出力される。そこで、**HKL4** 形式ファイルを使ってまず構造を解き、その後、**HKL5** 形式ファイルに切り換える。また **TWIN** や **BASF** コマンドを追加し、分域の寄与の比率まで含めて精密化する。

(正) 構造を解くための **HKLF4** 形式ファイルの他に、**HKLF5** 形式ファイルも出力される。そこで、**HKLF4** 形式ファイルを使ってまず構造を解き、その後、**HKLF5** 形式ファイルに切り換える。また **BASF** コマンドを追加し、分域の寄与の比率まで含めて精密化する。

□巻末、付表 IV、standard uncertainty の和訳： (誤) 標準不確定量、(正) 標準不確かさ