



Doctoral Thesis

## Ein neuer Ansatz zur Auswertung der Pattersonfunktion

**Author(s):**

Walpen, Peter

**Publication Date:**

1980

**Permanent Link:**

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-000214951> →

**Rights / License:**

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

Diss. Nr. 6712

EIN NEUER ANSATZ ZUR  
AUSWERTUNG DER PATTERSONFUNKTION

A B H A N D L U N G

zur Erlangung  
des Titels eines Doktors der Naturwissenschaften  
der

E I D G E N O E S S I S C H E N    T E C H N I S C H E N  
H O C H S C H U L E    Z U E R I C H

vorgelegt von

P E T E R   W A L P E N  
Dipl. Phys. ETH-Zürich  
geb. am 30. Oktober 1949  
von Binn (Kanton Wallis)

Angenommen auf Antrag von  
Prof. Dr. A. Niggli, Referent  
PD Dr. M. Fehlmann, 1. Korreferent  
Prof. Dr. J. D. Dunitz, 2. Korreferent

**Titel:** Ein neuer Ansatz zur Auswertung der Pattersonfunktion.

**Referent:** Prof. Dr. A. Niggli

**1. Korreferent:** PD Dr. M. Fehlmann

**2. Korreferent:** Prof. Dr. J. D. Dunitz

### Zusammenfassung

Die Pattersonfunktion enthält die gesamte Information der Intensitätsmessung für eine Strukturbestimmung, und sie bot daher immer wieder Anreiz zur Verbesserung der Auswertungsmethoden. Ausgangspunkt für die vorliegende Arbeit sind Faltungsgleichungen, die sich wie folgt begründen lassen: Beschreibt man die  $n_a$  Atome einer Struktur mit den Koordinaten  $\underline{x}_i$  und der Elektronenzahl  $h_i$ ,  $i=1, \dots, n_a$ , enthält die Pattersonfunktion die  $n_a^2$  Peaks mit den Vektoren  $(\underline{x}_i - \underline{x}_j)$  und den Höhen  $h_i \cdot h_j$ ,  $i, j=1, \dots, n_a$ . Die  $n_a$  Pattersonpeaks  $(\underline{x}_i - \underline{x}_k)$ ,  $i=1, \dots, n_a$ ,  $k=\text{konstant}$ , sind ein um den Vektor  $\underline{x}_k$  verschobenes Strukturbild mit  $h_k$ -facher Elektronenzahl. Die Strukturbestimmung besteht in der richtigen Auswahl von  $n_a$  Vektoren, die demselben Strukturbild angehören. Der Unterschied zu einer beliebigen Auswahl wirkt sich aus, wenn man jeden Vektor von jedem subtrahiert  $(\underline{x}_i - \underline{x}_k) - (\underline{x}_j - \underline{x}_k) = (\underline{x}_i - \underline{x}_j)$  und gleichzeitig die Höhen multipliziert  $h_i h_k \cdot h_j h_k = h_i h_j \cdot h_k h_k$ ,  $i, j=1, \dots, n_a$ ,  $k=\text{konstant}$ . Man erhält damit genau alle Pattersonpeaks mit  $h_k h_k$ -facher Höhe. Findet man also drei Pattersonpeaks, deren Vektoren und Höhen diese beiden Gleichungen erfüllen, kann dies bedeuten, dass zwei Peaks demselben Strukturbild angehören. Die beiden Gleichungen, die zusammengefasst Faltungsgleichung genannt werden, können allerdings auch zufälligerweise erfüllt sein.

Vektoren und Höhen der Pattersonpeaks lassen sich nur ungenau bestimmen, hauptsächlich weil die Peakdichte gross ist, und die Peaks überlappen. Deshalb sind auch die Faltungs-

gleichungen der Pattersonpeaks nur ungenau und mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit  $w_r$  erfüllt. Mit der Berücksichtigung der Fehler wächst auch die Wahrscheinlichkeit  $w_z$  für zufällige Faltungsgleichungen. Die Lösbarkeit der Strukturen ist nur für bestimmte Wahrscheinlichkeitswerte  $w_r$  und  $w_z$  vorhanden. Die Variablen, die die Struktur oder die Fehlerverteilung der Pattersonpeaks beschreiben, beeinflussen die beiden Wahrscheinlichkeiten  $w_r$  und  $w_z$  und damit die Lösbarkeit. Dieser Einfluss lässt sich mit einem vorgeschlagenen Modell berechnen, und man besitzt damit die notwendigen Kriterien, um die beeinflussbaren Variablen einer konkreten Struktur anpassen zu können. Diese Anpassungsmöglichkeit ist entscheidend für eine allgemeinere Anwendbarkeit der Methode. So versagten die bisherigen Auswertungsmethoden vor allem deshalb bei grösseren Strukturen, weil sie eine wichtige Variable nicht variieren können.

Mit einem vorläufigen Computerprogramm konnten mehrere Strukturen gelöst werden.

Titel: Ein neuer Ansatz zur Auswertung der Pattersonfunktion.

Referent: Prof. Dr. A. Niggli

1. Korreferent: PD Dr. M. Fehlmann

2. Korreferent: Prof. Dr. J. D. Dunitz

### Abstract

A new method for the interpretation of the Patterson function is presented. The Patterson function may be described as a superposition of several structure images which are shifted against one another. In order to find an isolated structure image, we are using so-called 'convolution equations' which must be satisfied by two Patterson peaks of one structure image with a third peak. The Patterson peaks cannot be determined exactly, therefore the convolution equations are only satisfied with a certain probability  $w_r$ . They may also be satisfied accidentally by three Patterson peaks with a probability  $w_z$ . Based on the model presented in this thesis the probabilities  $w_r$  and  $w_z$ , as well as the limit of solubility, can be calculated. In these calculations, the variable parameters may be chosen such as to give an optimal value for the solubility of the structure. A trial computer program has been developed and successfully tried out on several structures.