## ****Таблица 1. Восстановление функции по коэффициентам ряда Фурье.****

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Набор гармоник | Разрешение  (Å) | Полнота данных  (%) | Шум амплитуды (% от величины F) | Шум фазы  (% от величины phi) | Качество восстановления  (отличное, хорошее, среднее, плохое) | Комментарии |
| Полный набор гармоник | | | | | | |
| 0–1 | 30 Å | 100% | 0 | 0 | Очень плохое | Даже размер молекулы нельзя распознать |
| 0–3 | 10 Å | 100% | 0 | 0 | Очень плохое | Можно распознать только примерно пики, соответствующие молекулам (и то если знать, что их две, а не три) |
| 0–10 | 3 Å | 100% | 0 | 0 | Плохое | Можно угадать примерно размер молекул, но не разобрать пики, соответствующие атомам |
| 0-20 | 1.5 Å | 100% | 0 | 0 | Среднее | Максимумы, соответствующие некоторым атомам распознать можно, но водороды не видно, а азот затерялся между двух кислородов. |
| 0-24 | 1.25 Å | 100% | 0 | 0 | Хорошее | Водород можно перепутать с шумом, но в целом все пики видны хорошо. |
| 0-28 | 1.1 Å | 100% | 0 | 0 | Отличное | При таком разрешении даже водород с шумом уже сложно перепутать. |
| 0-28 | 1.1 Å | 100% | 15 | 0 | Почти хорошее | Если знать, сколько всего атомов, то можно даже распознать, где водороды. |
| 0-28 | 1.1 Å | 100% | 0 | 15 | Среднее | Водороды сливаютс с шумом. |
| 0-28 | 1.1 Å | 100% | 30 | 0 | Среднее | Водороды не распознать. |
| 0-28 | 1.1 Å | 100% | 0 | 30 | Среднее | Водороды не распознать, шум большой. |
| Неполный набор гармоник | | | | | | |
| 2–28 | 1.2 Å | 93% | 0 | 0 | Почти хорошее | Можно распознать даже водороды, но видна большая синусоида из-за отсутствия первых двух гармоник. |
| 0-7,11-28 | 1.2 Å | 86% | 0 | 0 | Среднее | Водороды распознать нельзя. |
| 0-7,11-28, 38 | 0.8 Å | 63% | 0 | 0 | Среднее | Такая же картина, как в предыдущем случае. |
| 0-7,11-28, 34-39 | 0.8 Å | 76% | 0 | 0 | Среднее | Такая же картина, как в предыдущем случае. |