## **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 | Плохое | Неразличимы даже молекулы |
| 0–10 | 3 Å | 100% | 0 | 0 | Плохое | Различимы отдельные молекулы, но не атомы |
| 0–20 | 1.5 Å | 100% | 0 | 0 | Среднее | Можно сделать относительно точные предположения о положении 1,2,8 атомов |
| 0-25 | 1.2 Å | 100% | 0 | 0 | Хорошее | На восстановленной функции максимум от атома 3 не отличим от шума |
| 0-30 | 1 Å | 100% | 0 | 0 | Отличное |  |
| 0-35 | 0.86 Å | 100% | 0 | 0 | Отличное |  |
| 0-40 | 0.75 Å | 100% | 0 | 0 | Отличное |  |
| 0-30 | 1 Å | 100% | 10 | 0 | Отличное |  |
| 0-30 | 1 Å | 100% | 20 | 0 | Отличное |  |
| 0-30 | 1 Å | 100% | 30 | 0 | Хорошее | На восстановленной функции максимум от атома 3 не отличим от шума |
| 0-30 | 1 Å | 100% | 40 | 0 | Среднее | Можно сделать относительно точные предположения о положении всех атомов, кроме 3его |
| 0-30 | 1 Å | 100% | 50 | 0 | Среднее | -//- |
| 0-30 | 1 Å | 100% | 0 | 10 | Отличное |  |
| 0-30 | 1 Å | 100% | 0 | 20 | Хорошее | На восстановленной функции максимумы от атомов 3,5 не отличимы от шума |
| 0-30 | 1 Å | 100% | 0 | 30 | Среднее | Практически невозможно угадать положение 3 атома |
| 0-30 | 1 Å | 100% | 0 | 40 | Cреднее |  |
| 0-30 | 1 Å | 100% | 0 | 50 | Плохое | Невозможно понять, где какие атомы |
| Неполный набор гармоник | | | | | | |
| 1–30 | 1 Å | 97% | 0 | 0 | Отличное |  |
| 2-30 | 1 Å | 93% | 0 | 0 | Хорошее | На восстановленной функции максимум от атома 3 едва ли отличим от шума |
| 0-14,17-30 | 1,5 Å | 94% | 0 | 0 | Хорошее | -//- |
| 0-14,17-30,40 | 1,5 Å | 97% | 0 | 0 | Хорошее | Функция имеет абсолютно такой же вид, как при отсутствии 45 гармоники |