

# Chapter 6.1.7.9

## SHELXL-97

### Manual References

Sheldrick, G. M. (2008). *Acta Cryst.* A64, 112-122.

George W. Sheldrick  
Dept. of Structural Chemistry  
Tammannstraße 4  
37077 Göttingen, Germany  
email: [gsheldr@shelx.uni-ac.gwdg.de](mailto:gsheldr@shelx.uni-ac.gwdg.de)

- Allen, F. H. & Rogers, D. (1969). *Acta Cryst.* **B25**, 1326 -1330.
- Arnberg, L., Hovmöller, S. & Westman, S.(1979). *Acta Cryst.* **A35**, 497 - 499
- Armstrong, D. R., Herbst-Irmer, R., Kuhn, A., Moncrieff, D., Paver, M. A., Russell, C. A., Stalke, D., Steiner, A. & Wright, D. S. (1993). *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **32**, 1774 - 1776.
- Bernardinelli, G. & Flack, H. D. (1985). *Acta Cryst.* **A41**, 500 - 511.
- Blessing, R. (1995). *Acta Cryst.* **A51**, 33-38.
- Brünger, A. T. (1992). *Nature (London)*, **355**, 472 -.475.
- Brünger, A. T. Kuriyan, J. & Karplus, M. (1987). *Science*, **235**, 458 - 460.
- Buerger, M. J. (1959). *Vector Space*, Chapter 11. Wiley, New York.
- Clarage, J. B. & Phillips, G. N. (1994). *Acta Cryst.* **D50**, 24 - 36.
- Cruickshank, D. W. J. (1996). CCP4 Meeting, Chester.
- DeLaMatter, D., McCullough, J. J. & Calvo, C. (1973). *J. Phys. Chem.* **77**, 1146 - 1148.
- Didisheim, J. J. & Schwarzenbach, D. (1987). *Acta Cryst.* **A43**, 226 - 232.
- Domenicano, A. (1992). *Accurate Molecular Structures*, edited by. A. Domenicano & I. Hargittai, Chapter 18. Oxford University Press: Oxford, UK.
- Driessen, H., Haneef, M. I. J., Harris, G. W., Howlin, B., Khan, G. & Moss, D. S. (1989). *J. Appl. Cryst.* **22**, 510 - 516.
- Dunitz, J. D. & Seiler, P. (1973). *Acta Cryst.* **B29**, 589 - 595.
- Engh, R. A. & Huber, R. (1991). *Acta Cryst.* **A47**, 392 - 400.
- Flack, H. D. (1983). *Acta Cryst.* **A39**, 876 - 881.
- Flack, H. D. & Schwarzenbach, D. (1988). *Acta Cryst.* **A44**, 499 - 506.
- Frazão, C., Soares, C. M., Carrondo, M. A., Pohl, E., Dauter, Z., Wilson, K. S., Hervás, M., Navarro, J. A., De la Rosa, M. A. & Sheldrick, G. M. (1995). *Structure* **3**, 1159-1169.
- Fujinaga, M. & Read, R. J. (1987). *J. Appl. Cryst.* **20**, 517 - 521.
- Giacovazzo, C. ed. (1992). *Fundamentals in Crystallography*, I.U.Cr. & O.U.P.: Oxford, UK.
- Gros, P., van Gunsteren, W. F. & Hol, W. G. (1990). *Science*, **249**, 1149 - 1152.
- Hall, S. R., Allen, F. H. & Brown, I. D. (1991). *Acta Cryst.* **A47**, 655 - 685.
- Hendrickson, W. A. & Konnert, J. H. (1980). *Computing in Crystallography*, edited by R. Diamond, S. Ramaseshan & K. Venkatesan. pp. 13.01 - 13.25. I.U.Cr. and Indian Acad. Sci.: Bangalore, India.
- Hirshfeld, F. L. (1976). *Acta Cryst.* **A32**, 239 - 244.

- Hirshfeld, F.L. & Rabinovich, D. (1973). *Acta Cryst.* **A29**, 510 - 513.
- Hoenle, W. & von Schnering, H. G. (1988). *Z. Krist.* **184**, 301 - 305.
- Irmer, E. (1990). Ph.D. Thesis, University of Göttingen. Germany.
- Jameson, G. B., Schneider, R., Dubler, E. & Oswald, H. R. (1982). *Acta Cryst.* **B38**, 3016 - 3020.
- Jones, P. G. (1988). *J. Organomet. Chem.* **345**, 405.
- Kilimann, U., Noltemeyer, M., Schäfer, M., Herbst-Irmer, R., Schmidt, H. G. & Edelmann F. T. (1994). *J. Organomet. Chem.* **469**, C27 - C30.
- Kleywegt, G. J. (1996). *Acta Cryst.* **D52**, 842 - 857.
- Kleywegt, G. J. & Jones, T. A. (1996). *Structure* **4**, 1395-1400.
- Lamzin, V. & Wilson, K. S. (1993). *Acta Cryst.* **D49**, 129 - 147.
- Langridge, R., Marvin, D. A., Seeds, W. E., Wilson, H. R., Hooper, C. W., Wilkins, M. H. F. & Hamilton, L. D. (1960). *J. Mol. Biol.* **2**, 38 - 64.
- Larson, A. C. (1970). *Crystallographic Computing*, edited by F. R. Ahmed, S. R. Hall & C. P. Huber, pp. 291 - 294. Copenhagen, Munksgaard.
- Laskowski, R. A., MacArthur, M. W., Moss, D. S. & Thornton J. M. (1993). *J. Appl. Cryst.* **26**, 283 - 291.
- LePage, Y. (1982). *J. Appl. Cryst.* **15**, 255 - 259.
- Luzzati, P. V. (1952). *Acta Cryst.* **5**, 802-810.
- Marquardt, D. W. (1963). *J. Soc. Ind. Appl. Math.* **11**, 431-441.
- Maetzke T. & Seebach, D. (1989). *Helv. Chim. Acta* **72**, 624 - 630.
- McMahon, B. (1993). *Acta Cryst.* **C49**, 418-423.
- Parkin, S., Moezzi, B. & Hope, H. (1995). *J. Appl. Cryst.* **28**, 53-56.
- Pathe, E. & Gelato, L. M. (1984). *Acta Cryst.* **A40**, 169 - 183.
- Peterson, S. W., Gebert, E., Reis Jr., A. H., Druyan, M. E. & Peppard, D. F (1977). *J. Phys. Chem.* **81**, 466 - 471.
- Pratt, C. S., Coyle, B. A. & Ibers J. A. (1971). *J. Chem. Soc.* 2146 - 2151.
- Richardson, J.W. & Jacobson, R.A. (1987). *Patterson and Pattersons*, edited by J. P. Glusker, B. K. Patterson & M. Rossi, 310 - 317. I.U.Cr. and O.U.P.: Oxford.
- Roesky, H. W., Gries, T., Schimkowiak, J. & Jones, P. G. (1986). *Angew. Chem. Int. Edn.* **25**, 84 - 85.
- Rollett, J. S. (1970). *Crystallographic Computing*, edited by F. R. Ahmed, S. R. Hall & C. P. Huber, pp. 167 - 181. Copenhagen, Munksgaard.

Sheldrick, G.M. (1990). *Acta Cryst.* **A46**, 467 - 473.

Sheldrick, G.M. (1992). *Crystallographic Computing*, edited by D. Moras, A. D. Podjarny & J. C. Thierry, pp. 145 - 157. I.U.Cr. and O.U.P.: Oxford, UK.

Sheldrick, G. M., Dauter, Z., Wilson, K. S., Hope, H. & Sieker, L. C. (1993). *Acta Cryst.* **D49**, 18 - 23.

Sheldrick, G. M. & and R. O. Gould, R. O. (1995). *Acta Cryst.* **B51**, 423-431.

Stenkamp, R. E., Sieker, L. C. & Jensen, L. H. (1990). *Proteins, Struct. Funct. Genet.* **8**, 352 - 364.

Taylor, R. & Kennard, O. (1982). *J. Mol. Struct.* **78**, 1 -28.

Tronrud D. E. (1992). *Acta Cryst.* **A48**, 912 - 916.

Trueblood, K. N. & Dunitz, J. D. (1983). *Acta Cryst.* **B39**, 120 - 133.

Walker, N. & Stuart, D. (1983). *Acta Cryst.* **A39**, 158 - 166.

Watkin, D. (1994). *Acta Cryst.* **A50**, 411 - 437.

Wilson, A. J. C. (1976). *Acta Cryst.*, **A32**, 994 - 996.