

Exzentrizität $w=1,8$ wurden aus (18b) die Werte $R=48,31 \text{ \AA}$ und $w=1,809$ erhalten. Dagegen besitzen die Gleichungen (18a) mit den aus dieser Streukurve berechneten Werten $A_i \text{ exp}$ keine widerspruchsfreien Lösungen. Die Untersuchung weiterer Streukurven brachte ähnliche Ergebnisse.

Durch das beschriebene Verfahren kann bei der Formbestimmung von Molekülen oder Molekülaggregaten der langwierige Vergleich der gemessenen Streukurve mit einer Vielzahl von berechneten Streukurven zunächst umgangen werden und braucht nur noch gezielt zur Kontrolle des Ergebnisses eingesetzt werden.

Herrn Professor Dr R.Hosemann, Berlin, danken wir für seine anregenden und kritischen Diskussionsbemerkungen.

Literatur

DAMASCHUN, G., KLEY, G., MÜLLER, J. J. & PÜRSCHEL, H.-V. (1968). *Acta biol. med. germ.* **20**, 409.
DAMASCHUN, G., MÜLLER, J. J. & PÜRSCHEL, H.-V. (1968). *Phys. Verh.* **19**, 155.

DAMASCHUN, G. & PÜRSCHEL, H.-V. (1968). *Acta biol. med. germ.* **21**, 401.
DAMASCHUN, G. & PÜRSCHEL, H.-V. (1969). *Mh. Chem.* **100**, 510.
DEBYE, P. & BUECHE, A. M. (1949). *J. Appl. Phys.* **20**, 518.
DEBYE, P., ANDERSON, H. R. & BRUMBERGER, H. (1957). *J. Appl. Phys.* **28**, 679.
GUINIER, A. & FOURNET, G. (1955). *Small-Angle Scattering of X-rays*. New York: John Wiley.
HOSEMANN, R. & BAGCHI, S. N. (1962). *Direct Analysis of Diffraction by Matter*. Amsterdam: North-Holland Publishing Co.
KIRSTE, R. & POROD, G. (1962). *Kolloid-Z. u. Z. Polymere* **184**, 1.
MALMON, A. G. (1957). *Acta Cryst.* **10**, 639.
MÉRING, J. & TCHOUBAR-VALLAT, D. (1965). *C. R. Acad. Sci. Paris.* **261**, 3096.
MITTELBACH, P. & POROD, G. (1962). *Acta Phys. austr.* **15**, 122.
MITTELBACH, P. & POROD, G. (1965). *Kolloid-Z. u. Z. Polymere* **202**, 40.
POROD, G. (1951). *Kolloid-Z. u. Z. Polymere* **124**, 83; **125**, 51.
SCHMIDT, P. W. (1959). *J. Appl. Phys.* **30**, 866.

Short Communications

Contributions intended for publication under this heading should be expressly so marked; they should not exceed about 1000 words; they should be forwarded in the usual way to the appropriate Co-editor; they will be published as speedily as possible. Publication will be quicker if the contributions are without illustrations.

Acta Cryst. (1969). **A25**, 710

Bemerkung zu Die Gitterkomplexe der Ebenengruppen (*Acta Cryst.* **A24, 57) (1968) und Kreispackungsbedingungen in der Ebene (*Acta Cryst.* **A24**, 67) (1968).** VON HANS BURZLAFF, WERNER FISCHER UND ERWIN HELLNER, *Mineralogisches Institut der Universität Marburg, 355 Marburg/Lahn, Deutschhausstr. 10, Deutschland*

(Eingegangen am 27. Mai 1969)

The authors' work on the lattice complexes of plane groups is related to the earlier publications of N. L. Smirnova and her co-workers.

In den genannten Arbeiten wurde von uns versucht, den Gitterkomplexbegriff an den wesentlich leichter zu überblickenden zweidimensionalen Phänomenen zu verdeutlichen und eine Basis für die Behandlung entsprechender dreidimensionaler Probleme zu schaffen. In diesem Zusammenhang kam es uns einerseits darauf an, eine beschreibende Symbolik für zweidimensionale Gitterkomplexe [basierend auf Hermann (1960)] zu entwickeln und die Beziehungen zwischen verschiedenen Punktlagen bzw. Gitterkomplexen beim Abbau einer Ebenengruppe zu einer ihrer Untergruppen aufzuzeigen (Burzlaff, Fischer & Hellner, 1968). Andererseits sollte an dem Problem der Kreispackungen in der Ebene veranschaulicht werden, wie durch konsequente Ausnutzung des Gitterkomplexbegriffs der Umfang einer entsprechenden Untersuchung wesentlich reduziert werden kann (Fischer, 1968). Die Gitterkomplexe der Ebenengruppen wurden als bekannt vorausgesetzt, da sie als Analoga der Gitterkomplexe entsprechender Raum-

gruppen von hemimorphen Kristallklassen (P_1 , P_2 , Pm , Pc , Cm , Pmm_2 , Pma_2 , Pba_2 , Cmm_2 , P_4 , $P4mm$, $P4bm$, P_3 , $P3m_1$, $P31m$, P_6 und $P6mm$) implizit in den *Internationalen Tabellen zur Bestimmung von Kristallstrukturen* (1935) enthalten sind.

Nach Erscheinen unserer Arbeiten wurden wir darauf aufmerksam gemacht, dass eine Tabelle der zweidimensionalen Gitterkomplexe entsprechend unserer Tabelle 1 (Burzlaff, Fischer & Hellner, 1968) jedoch ohne beschreibende Symbolik der Gitterkomplexe bereits von Smirnova & Poteshnova (1966) gegeben wurde. Ausserdem enthalten die Publikationen von Smirnova und Mitarbeiterinnen eine bemerkenswerte Anwendung der zweidimensionalen Gitterkomplexe: Alle Gitterkomplexe bzw. Punktlagen nichtkubischer Raumgruppen lassen sich in eine Folge ebener Netze zerlegen (vgl. auch Sinogowitz, 1939) wie für das hexagonale und das tetragonale System gezeigt wird (Smirnova & Volodina, 1964; Smirnova & Grekova, 1965; Smirnova &

Meshueva, 1966). Diese Netze stehen in einem einfachen Zusammenhang mit den ebenen Gitterkomplexen (Smirnova & Poteshnova, 1966). Nichtkubische Kristallstrukturen können durch die Angabe der auftretenden Netze, ihrer Abfolge und Besetzung beschrieben werden (Smirnova, 1967). Wegen dieser wichtigen Anwendungsmöglichkeit möchten wir unsere Literaturzitate durch den Hinweis auf die Arbeiten von Smirnova und Mitarbeiterinnen ergänzen.

Literatur

BURZLAFF, H., FISCHER, W. & HELLNER, E. (1968). *Acta Cryst.* A24, 57.

FISCHER, W. (1968). *Acta Cryst.* A24, 67.

Acta Cryst. (1969). A25, 711

The incoherent X-ray scattering factor of bromine. By R. E. BURGE and J. W. SMART, *Department of Physics, University of London, Queen Elizabeth College, Campden Hill Road, London W. 8, England*

(Received 16 January 1969)

A calculation of the incoherent scattering by bromine has been made by use of the Waller-Hartree formulation including electron exchange and Hartree-Fock-Slater wave functions.

To interpret some results on X-ray solution scattering obtained in this laboratory the incoherent X-ray scattering factor I_{inc} of Br was needed. Following the work of Freeman (see Freeman & Watson, 1962 for references) which shows the great importance of exchange terms in the calculation of I_{inc} , values of I_{inc} were desired based on the Waller-Hartree (1929) formulation. Values of I_{inc} for Br on this basis are not available in the literature; values for all the other halides are available.

The method used for the calculation of the spatially averaged function I_{inc} for an aspherical charge distribution was given by Freeman (1959*a, b*) and in his notation I_{inc} for Br is given by

$$\begin{aligned}
 I_{inc} = & 35 - \{2f_{1s}^2(0) + 2f_{2s}^2(0) + 2f_{3s}^2(0) + 2f_{4s}^2(0) \\
 & + 6f_{2p}^2(0) + 6f_{3p}^2(0) + 5f_{4p}^2(0) + 10f_{3d}^2(0) \\
 & + 12f_{2p}^2(2) + 12f_{3p}^2(2) + 41/5f_{4p}^2(2) + 100/7f_{3d}^2(2) \\
 & + 1260/49f_{3d}^2(4) \\
 & + 4[f_{1s2s}^2(0) + f_{1s3s}^2(0) + f_{1s4s}^2(0) + f_{2s3s}^2(0) + f_{2s4s}^2(0) + f_{3s4s}^2(0)] \\
 & + 12[f_{1s2p}^2(1) + f_{1s2p}^2(1) + f_{3s2p}^2(1) + f_{4s2p}^2(1) + f_{1s3p}^2(1) \\
 & + f_{2s3p}^2(1) + f_{3s3p}^2(1) + f_{4s3p}^2(1)] + 10[f_{1s4p}^2(1) + f_{2s4p}^2(1) \\
 & + f_{3s4p}^2(1) + f_{4s4p}^2(1)] + 12f_{2p3p}^2(0) + 24f_{2p3p}^2(2) + 10f_{2p4p}^2(0) \\
 & + 10f_{3p4p}^2(0) + 20f_{2p4p}^2(2) + 20f_{3p4p}^2(2) \\
 & + 20[f_{1s3d}^2(2) + f_{2s3d}^2(2) + f_{3s3d}^2(2) + f_{4s3d}^2(2)] \\
 & + 24f_{2p3d}^2(1) + 24f_{3p3d}^2(1) + 36f_{2p3d}^2(3) + 36f_{3p3d}^2(3) \\
 & + 20f_{4p3d}^2(1) + 30f_{4p3d}^2(3)\} .
 \end{aligned}$$

Each of the f terms involves an integration of a product of radial wave functions and a spherical Bessel function. In the present work Hartree-Fock-Slater wave functions were used (Herman & Skillman, 1963). The wave functions were available as numerical data and were interpolated to a suitable mesh for computing by the fitting of series of overlapping polynomials of order between 10 and 15. Check calculations were made for $Z=6, 7, 13, 14$ and were identical with published results (see *International Tables for X-ray Crystallography*, 1962) within 1% for all values of $\sin \theta/\lambda$ provided the same wave functions were used.

HERMANN, C. (1960). *Z. Kristallogr.* 113, 142.

Internationale Tabellen zur Bestimmung von Kristallstrukturen (1935). 1. Auflage, Band I. Berlin: Gebr. Bornträger.

SINOLOWITZ, U. (1939). *Z. Kristallogr.* 100, 461 (Diss.).

SMIRNOVA, N. L. (1967). *Vestnik Moskov. Univ. Ser. Geol.* No. 2.

SMIRNOVA, N. L. & GREKOVA, S. N. (1965). *Vestnik Moskov. Univ., Ser. Geol.* No. 6.

SMIRNOVA, N. L. & MESHUEVA, L. S. (1966). *Strukt. Khim.* 7, No. 4.

SMIRNOVA, N. L. & POTESHNOVA, L. I. (1966). *Vestnik Moskov. Univ., Ser. Geol.* No. 6.

SMIRNOVA, N. L. & VOLODINA, R. E. (1964). *Vestnik Moskov. Univ., Ser. Geol.* No. 6.

The results of the calculations are shown in Table 1. In practice the values would be multiplied by the Breit-Dirac factor.

Table 1. *Incoherent X-ray scattering factor for Br (electron units)*

$\sin \theta/\lambda$	I_{inc}	$\sin \theta/\lambda$	I_{inc}
0.00 Å ⁻¹	0	0.50 Å ⁻¹	14.340
0.01	0.003	0.60	16.241
0.02	0.135	0.70	17.969
0.03	0.299	0.80	19.533
0.04	0.520	0.90	20.938
0.05	0.791	1.00	22.193
0.07	1.451	1.20	24.290
0.10	2.612	1.40	25.916
0.15	4.619	1.60	27.191
0.20	6.481	1.80	28.223
0.30	9.676	2.00	29.082
0.40	12.216		

Note added in proof: - Some calculations of I_{inc} , using Clementi wave functions, which the present results for Br in good agreement, have been found for Z from 1 to 36 (cf. Tavard, Nicolas & Roualt, 1967).

We are indebted to the University of London Computer Unit for the use of the Atlas Computer.

References

FREEMAN, A. J. (1959*a*). *Phys. Rev.* 113, 169.

FREEMAN, A. J. (1959*b*). *Acta Cryst.* 12, 274.

FREEMAN, A. J. & WATSON, R. E. (1962). *Acta Cryst.* 15, 682.

HERMAN, F. & SKILLMAN, S. (1963). *Atomic Structure Calculations*. Englewood Cliffs: Prentice Hall.

International Tables for X-ray Crystallography (1962). Vol. III. p. 247. Birmingham: Kynoch Press.

TAVARD, C., NICOLAS, D. & ROUALT, M. (1967). *J. Chim. Phys.* 64, 540.

WALLER, I. & HARTREE, D. R. (1929). *Proc. Roy. Soc. A* 124, 119.