

number of least-squares variables to be reduced by direct substitution, without recourse to undetermined multipliers. Neither of these two methods is in fact quite as simple as the application of constraints in the Busing–Levy procedure, where the constraints are applied to the lattice parameters directly through (for example) the simple omission of rows and columns from the normal equations matrix.

Our procedure for refining lattice and orientation parameters has some advantages and some disadvantages (Busing & Levy, 1967*c*) relative to the Busing–Levy procedure. In our procedure the observational equations are linear in the parameters, and the refinement should converge in one cycle, while the Busing–Levy procedure may require two or three cycles. (However, if in our treatment constraints are to be applied, either one must have fairly good preliminary values of the parameters or else one must solve the normal equations with constraints in successive approximations.) The coefficients in our observations are simply the integer Miller indices, while in the procedure suggested by Busing & Levy the needed coefficients are to be obtained by numerical differentiation.

On the other side, in our procedure the observations h_i, k_j, l_j are subject in some degree to correlated errors because in general all of them for a given reflection depend on the same three or four measured angles. (Even the angles themselves may be subject to correlated errors, depending on diffractometer geometry and measurement procedure.) However, in the absence of constraints the observational equations in the D_{ik} , and the normal equations resulting from them, divide into three independent sets, the first determining D_{11}, D_{12}, D_{13} from the h_i , the second D_{21}, D_{22}, D_{23} from the k_j , the third D_{31}, D_{32}, D_{33} from the l_j . Within a given set the observations are completely uncorrelated and the least-

squares treatment is completely valid. Such correlation of errors as may affect the least-squares refinement in cases other than triclinic arises only through the equations of constraint, which prevent the equations from dividing into independent sets. While the possible effects of correlated errors must be borne in mind in the use of our procedure, we believe that in nearly all cases the loss of accuracy in the refined parameters will be small.

A possible disadvantage of our procedure, relative to that of Busing & Levy, is that all three (or four) angles must be measured for each reflection. Partial information (e.g. Busing & Levy's Type 1 and Type 6 observations) cannot be used as the basis of refinement in our method. Whether this is a severe disadvantage will depend on the particular experimental procedures employed in the laboratory.

We are pleased to thank Drs W. A. Busing and H. A. Levy for valuable discussion and criticisms. One of us (D. P. S.) wishes to thank Dr E. F. Bertaut for the hospitality of his laboratory in Grenoble, where most of this work was done.

References

- BUSING, W. R. & LEVY, H. A. (1967*a*). *Acta Cryst.* **22**, 457.
 BUSING, W. R. & LEVY, H. A. (1967*b*). Document ORNL-4054, UC-4-Chemistry. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.
 BUSING, W. R. & LEVY, H. A. (1967*c*). Private communication.
International Tables for X-ray Crystallography (1959). Vol. II, p. 63. Birmingham: Kynoch Press.
 WHITTAKER, E. & ROBINSON, G. (1944). *The Calculus of Observations*, pp. 252–254. 4th ed. London: Blackie & Sons.

Acta Cryst. (1970). **A26**, 101

Etude de la Symétrie de Quelques Configurations Magnétiques par la Méthode de Bertaut

PAR J. SIVARDIÈRE

Centre d'Etudes Nucléaires, Cédex n° 85, Grenoble, France

(Reçu le 5 août 1969)

The representation method of Bertaut is applied to the analysis of spin structures in the following ionic compounds: α -Fe₂O₃ and Cr₂O₃, UX₂ (X=O, S, Se, Te), FeSb₂O₄, MnWO₄ and hexagonal HoMnO₃.

Nous décrivons dans cette note quelques configurations magnétiques par la méthode de Bertaut (Bertaut, 1968). Soit G_e le groupe d'espace d'un cristal dans la phase ordonnée magnétiquement; si l'énergie est d'ordre 2, la structure peut se décrire à l'aide des fonctions de base d'une représentation irréductible Γ_{kj} de G_e ex-

traitées de l'espace des coordonnées des moments magnétiques de la maille. Nous étudions successivement les structures magnétiques des composés: α -Fe₂O₃ (Dzialoshinsky, 1958) et Cr₂O₃ (Corliss & Hastings, 1964); UX₂ (Przystawa, 1967, 1968) (X=O, S, Se, Te); CrCl₂ (Wollan, Koehler & Wilkinson, 1959); FeSb₂O₄

(Gonzalo, Cox & Shirane, 1966); MnWO₄ (Dachs, Stoll & Weitzel, 1967) et HoMnO₃ hexagonal (Koehler, Yakel, Wollan & Cable, 1964).

Pour chaque composé, nous indiquons le groupe d'espace G_e , le site occupé par les atomes magnétiques; les modes magnétiques compatibles avec la symétrie de G_e sont classés suivant les représentations Γ_{kj} de G_e ; \mathbf{k} désigne le vecteur d'onde de la structure, il est nul si les mailles chimique et magnétique sont identiques. La classification des modes magnétiques s'effectue par la méthode de l'opérateur de projection; pour chaque représentation Γ_{kj} de G_e , de dimension d_{kj} , on détermine les quantités:

$$A_{kj,i}^{mn} = \sum_{\alpha} \Gamma_{kj}^{mn}(\alpha | \tau_{\alpha}) (\alpha | \tau_{\alpha}) S_{1i}$$

m et n sont les indices de lignes et de colonnes des matrices Γ_{kj} , ils varient de 1 à d_{kj} ; $i = x, y, z$; l'opération de rotation α décrit le groupe ponctuel G , τ_{α} est la translation non entière associée à la rotation α ; quand α décrit G , l'atome $(\alpha | \tau_{\alpha})$ (1) décrit les positions équivalentes du site (c'est bien l'opération $(\alpha | \tau_{\alpha})$ du groupe d'espace et non l'opération ponctuelle α , qui agit sur le moment magnétique S_i : si \mathbf{k} n'est pas nul, le moment magnétique n'est pas invariant par translation, il se transforme au contraire comme une onde de Bloch); les quantités A_{mn} constituent une matrice de dimension d_{kj} dont les vecteurs colonnes sont des vecteurs de base de la représentation Γ_{kj} , et décrivent des structures magnétiques compatibles avec la structure cristalline (deux vecteurs de base de Γ_{kj} et $\Gamma_{k'j'}$ peuvent coexister et être couplés par un hamiltonien

d'ordre 2 seulement si Γ_{kj} et $\Gamma_{k'j'}$ sont conjuguées). La méthode de l'opérateur de projection exige la connaissance des matrices $\Gamma_{kj}(\alpha | \tau_{\alpha})$ et non seulement de leurs traces; si $\mathbf{k} = 0$, on utilise les représentations de G .

Composés de type corindon: α -Fe₂O₃ et Cr₂O₃

Le groupe d'espace est $R\bar{3}c$, les atomes Fe ou Cr sont en position 4(c): $x, x, x; \bar{x}, \bar{x}, \bar{x}; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + x; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} - x$. $\mathbf{k} = 0$, on utilise donc les représentations de la classe $\bar{3}m$; les notations F, G, C, A désignent les arrangements de moments $(++++), (+-+-), (++--), (+---)$.

Dans le Tableau 1, on indique les modes électriques (\vec{E}) et magnétiques (\vec{M}); les modes relatifs aux représentations à 2 dimensions E_g et E_u sont perpendiculaires à l'axe 3_z. Ce Tableau interprète les résultats suivants [on peut l'utiliser aussi pour étudier les propriétés de FeCO₃, MnCO₃ (Alikhanov, 1959), CoF₃, FeF₃, CrF₃, MoF₃ (Wollan *et al.* 1958, 1959)]:

- Cr₂O₃ est strictement antiferromagnétique (groupe magnétique $\bar{3}m'$) et magnétoélectrique.
- α -Fe₂O₃(I) est strictement antiferromagnétique mais n'est pas magnétoélectrique.
- α -Fe₂O₃(II) ($T > 250^\circ\text{K}$) admet un faible ferromagnétisme associé au mode A (le groupe magnétique $2/m$ correspondant n'est pas magnétoélectrique).

Nous avons indiqué dans le Tableau 1 les propriétés de transformation des composantes σ_{ij} du tenseur des contraintes, qui permettent d'étudier les couplages piézomagnétiques.

Tableau 1. Structures magnétiques de α -Fe₂O₃ et Cr₂O₃

	\vec{E}	$\vec{M}(\bar{3}m)$	Groupe magnétique	$\vec{M}(\bar{3}m')$	$\vec{M}(\bar{3}'m)$	Exemples	$\vec{\sigma}$
A_{1g}	G_z	C_z	$\bar{3}m$	G_z	A_z		$\sigma_{xx} + \sigma_{yy}; \sigma_{zz}$
A_{2g}	A_z	F_z	$\bar{3}m'$	A_z	G_z		
A_{1u}	C_z	G_z	$\bar{3}'m'$	C_z	F_z	Cr ₂ O ₃	
A_{2u}	F_z	A_z	$\bar{3}'m$	F_z	C_z	α -Fe ₂ O ₃ (I)	
E_g	$G_{\perp}C_{\perp}$	$F_{\perp}A_{\perp}$		$G_{\perp}C_{\perp}$	$F_{\perp}A_{\perp}$	α -Fe ₂ O ₃ (II)	$\sigma_{xx} - \sigma_{yy} \quad \sigma_{yz}$ $-2\sigma_{xy} \quad -\sigma_{zx}$
E_u	$F_{\perp}A_{\perp}$	$G_{\perp}C_{\perp}$		$F_{\perp}A_{\perp}$	$G_{\perp}C_{\perp}$		

Tableau 2. Structures magnétiques des composés UX₂

$P \frac{4}{n} mm$	M	Groupe magnétique	Exemples
$A_{1g}, \mathbf{k} = 000$	F_z	$P \frac{4}{n} mm$	
$A_{1u}, \mathbf{k} = 000$	A_z	$P \frac{4}{n} m'm'$	AI: UOTe, UB ₁₂
$A_{1g}, \mathbf{k} = 00\frac{1}{2}$	F_z	$P_{2c} \frac{4}{n} mm$	AIII: UP ₂ , UA _{s2} , USB ₂
$A_{1u}, \mathbf{k} = 00\frac{1}{2}$	A_z	$P_{2c} \frac{4}{n} m'm'$	AII: UOS, UOSe

Dans les solutions solides $(1-x)\text{Cr}_2\text{O}_3 \cdot x\text{Fe}_2\text{O}_3$, les moments magnétiques sont ordonnés suivant des structures hélicoïdales ou cycloïdales, le vecteur de propagation \mathbf{k} est parallèle à l'axe ternaire (Cox, Takei & Shirane, 1963); la symétrie de telles configurations peut être étudiée par la méthode de Bertaut (Bertaut, 1969). Nous nous bornerons aux remarques suivantes, relatives au cas où x est petit (hélice):

(1) Les vecteurs $\mathbf{k}=[0\ 0\ l]$ et $-\mathbf{k}$ se déduisent l'un de l'autre par l'opération d'inversion, donc le groupe ponctuel $G_{\mathbf{k}}$ est le groupe 32; par suite de cette réduction de symétrie, les sous-réseaux 1,3 et 2,4 ne sont plus équivalents. Effectivement le déphasage entre les moments de ces sous-réseaux n'est pas déterminé par la symétrie, mais par les seules interactions magnétiques.

(2) La structure hélicoïdale admet une composante G_z ($\mathbf{k}=0$) et une composante tournante perpendiculaire ($\mathbf{k}\neq 0$); ces deux composantes ne sont pas couplées par un hamiltonien d'ordre 2 puisqu'elles se transforment dans des représentations différentes, on vérifie qu'elles sont perpendiculaires.

Composés d'uranium du type UX_2

Le groupe d'espace est P_4^2mm , les atomes U sont en position $2(c)$: $0,0,\bar{z}$; $\frac{1}{2},\frac{1}{2},z$. F et A désignent les configurations $(++)$ et $(+-)$. Dans le Tableau 2, on indique les modes obtenus pour $\mathbf{k}=[0\ 0\ 0]$ et $[0\ 0\ \frac{1}{2}]$; les représentations Γ_{kj} correspondantes sont réelles de dimension 1 (le vecteur $\mathbf{k}=[0\ 0\ \frac{1}{2}]$ est en effet perpendiculaire aux translations non entières de P_4^2mm) (Sivardièrre, 1969), on peut donc décrire la structure par un groupe magnétique sans réduction de symétrie.

Une théorie microscopique introduit des configurations de vecteurs de propagation $\mathbf{k}=[\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0]$ ou $[\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}]$. Ces vecteurs sont invariants dans le groupe ponctuel $\frac{4}{m}mm$, les représentations Γ_{kj} correspondantes ne sont pas réelles de dimension 1; pour décrire les structures par un groupe magnétique ($P4mm$ ou $P_{2c}4mm$), il faut supprimer les éléments ayant une translation non entière parallèle à \mathbf{k} : on retrouve le fait que les réseaux de Bravais $(0, 0, z)$ et $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{z})$ ne sont plus corrélés.

Structure magnétique de CrCl_2

Le groupe d'espace est $Pnmm$, les atomes Cr en position $2(a)$: $0, 0, 0$ et $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$. Le vecteur $\mathbf{k}=[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$ est invariant dans le groupe ponctuel. On détermine les représentations Γ_{kj} du groupe d'espace par la méthode d'identification d'Olbrychski (Olbrychski, 1963) (Tableau 3). Les matrices A_i satisfont les relations:

$$\begin{aligned} A_1^2 &= -A_2^2 = A_3^2 = I \\ A_1A_2 &= -A_2A_1 \\ A_1A_3 &= A_3A_1 \\ A_2A_3 &= A_3A_2 \end{aligned}$$

Tableau 3. Représentations du groupe $Pnmm$ pour $\mathbf{k}=[0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}]$

Élément de $Pnmm$	Matrice représentative
$(2_x \frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$A_1 = \begin{pmatrix} 01 \\ 10 \end{pmatrix}$
$(2_y \frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$A_2 = \begin{pmatrix} 01 \\ \bar{1}0 \end{pmatrix}$
$(\bar{1}\ 000)$	$A_3 = \pm \begin{pmatrix} 10 \\ 01 \end{pmatrix}$

Il existe deux représentations de dimension 1: l'une paire Γ_{kg} et l'autre impaire Γ_{ku} par rapport à l'inversion. $\bar{1}$ laisse le site $2(c)$ invariant, donc seule joue Γ_{kg} . Les modes magnétiques sont:

$$\begin{pmatrix} S_{1x} \\ S_{2x} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} S_{1y} \\ S_{2y} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} S_{2z} \\ S_{1z} \end{pmatrix}.$$

On observe expérimentalement $(S_1 - S_2)_{xy}$. Le groupe magnétique est $P\frac{2_z}{m}$

Structure magnétique de FeSb_4O_2

Le groupe d'espace est $P\frac{4_2}{m}bc$, les atomes de fer sont en position $4(d)$: $\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{4}$; $\frac{1}{2}\ 0\ \frac{3}{4}$; $0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{4}$; $0\ \frac{1}{2}\ \frac{3}{4}$. $\mathbf{k}=[0\ 0\ 0]$ on utilise donc les représentations de la classe $\frac{4}{m}mm$.

Les modes magnétiques sont classés dans le Tableau 4.

On vérifie ici la supériorité de la méthode de Bertaut sur la méthode des groupes magnétiques. Le diagramme de diffraction neutronique indique la présence de modes $A_xG_yC_z$ ou $A_xC_yG_z$. Le premier modèle, plus vraisemblable d'après des mesures d'effet Mössbauer (Varret, Imbert, Gerard & Hartmann-Boutron, 1968), est celui qui exige le mélange de deux représentations seulement E_u et B_{1g} , et par suite (semble-t-il) la réduction de symétrie la plus faible: la classe magnétique est orthorhombique (222 ou $2mm$) car on doit supprimer $\bar{1}$ (E_u est impaire et B_{1g} paire) et l'axe 4 (E_u est de dimension 2). Les groupes magnétiques cor-

Tableau 4. Structures magnétiques compatibles avec la symétrie de FeSb_4O_4

$\Gamma_j \left(\frac{4}{m}mm \right)$	A_{2g}	A_{2u}	B_{1g}	B_{1u}	E_g	E_u
Modes magnétiques	F_z	A_z	C_z	G_z	$\begin{pmatrix} F \\ C \end{pmatrix}_{xy}$	$\begin{pmatrix} G \\ A \end{pmatrix}_{xy}$

respondants sont isomorphes de $Pba2$, ou $Pmc2_1$, ou $P2_12_12$ (sous-groupes de $P\frac{4_2}{m}bc$ de classe $2mm$ ou 222).

(On arrive, en considérant le second modèle possible, aux mêmes groupes magnétiques orthorhombiques, bien qu'il faille mélanger les trois représentations B_{1u} , E_g , E_u .) En fait E_u est réductible pour 222 ou $2mm$: $E_u = 2A$; $B_{1g} = A'$; les éléments du groupe magnétique ont le même caractère dans A et A' , d'où le groupe magnétique trivial $Pb2_1m$ ($\sim Pmc2_1$).

Structure magnétique de $MnWO_4$

Le groupe d'espace est $P2/c$, les atomes de Mn sont en position $2(f)$: $\frac{1}{2}, y, \frac{1}{4}$ et $\frac{1}{2}, \bar{y}, \frac{3}{4}$; $\mathbf{k} = [\frac{1}{4} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$ (la possibilité de structures non hélicoïdales avec des vecteurs \mathbf{k} de coordonnées $\neq 0, \frac{1}{2}$ a été signalée par Alexander). Les vecteurs \mathbf{k} et $-\mathbf{k}$ forment une étoile, $G_{\mathbf{k}} = 2y/m_{xz}$; les représentations de $G_{\mathbf{k}}$ sont de dimension 1, donc toute représentation de $P2/c$ pour $\mathbf{k} = [\frac{1}{4} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$ est de dimension 2.

Pour déterminer les matrices d'une telle représentation, on peut utiliser une méthode d'identification. D'après la théorie de l'induction (Tableau 5) A_1 est diagonale, A_2 n'est pas diagonale, $A_3 = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$. Les matrices A_i doivent satisfaire les relations:

$$\begin{aligned} A_1^2 &= -A_2^2 = A_3^2 = -I \\ A_1 A_2 &= -A_2 A_1; A_1 A_3 = A_3 A_1; A_2 A_3 = -A_3 A_2. \end{aligned}$$

Tableau 5. Représentations du groupe $P2/c$ pour $\mathbf{k} = [\frac{1}{4} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$

Elément de $P\frac{2}{c}$	Matrice representative
$(m_{xy} 00\frac{1}{2})$	$A_1 = \pm \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$
$(\bar{1} 000)$	$A_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
$(\varepsilon 100)$	$A_3 = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$

Désignons par 3 et 4 les atomes se déduisant de 1 et 2 par la translation $(\varepsilon | 100)$. Nous obtenons les modes suivants par la méthode de l'opérateur de projection:

$$\begin{bmatrix} (S_1 - S_4) - i(S_2 + S_3) \\ -(S_1 + S_4) + i(S_2 - S_3) \end{bmatrix}_{xz} \quad \begin{bmatrix} (S_1 + S_4) + i(S_2 - S_3) \\ (S_1 - S_4) + i(S_2 + S_4) \end{bmatrix}_y.$$

Tableau 6. Structures magnétiques possibles de $HoMnO_3$ hexagonal

Γ_j	Mn	Ho ^I	Ho ^{II}
A_1	T_π		$A_2 P6cm$
A_2	$R_\pi F_z$	F_z	$F_z P6c'm'$
B_1	$R_\sigma A_z$	A_z	$G_z P6'c'm'$
B_2	T_σ		$C_z P6'c'm$
E_1	$F_{xy\sigma} N_\sigma$	F_{xy}	$F_{xy} A_{xy}$
E_2	$F_{xy\pi} N_\pi$	A_{xy}	$G_{xy} C_{xy}$

La structure magnétique proposée par Dachs et coll. est donc compatible avec la symétrie: si les composantes x et z de la structure satisfont le modèle 3, la composante y satisfait le modèle 4.

Structure magnétique de $HoMnO_3$ hexagonal

Le groupe d'espace est $P6cm$, les atomes Mn en position $6(c)$: $z=0$ (les atomes sont numérotés 1, 2, 3 dans le plan $z=0$; 4, 5, 6 dans le plan $z=\frac{1}{2}$); les atomes Ho^I et Ho^{II} en position $2(a)$: $(0, 0, z)$; $(0, 0, z+\frac{1}{2})$ et $4b$: $\frac{1}{2}, \frac{2}{3}, z$; $\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, z$; $\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z+\frac{1}{2}$; $\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, z+\frac{1}{2}$.

R et T désignent des modes triangulaires radiaux ou tangentiels, N le mode de Nedlin (1965) ($S_{1x} + S_{2u} + S_{3y}$), (l'indice est σ ou π suivant que $\vec{S}_4 = \pm \vec{S}_1$). Les modes magnétiques sont rassemblés dans le Tableau 6.

On observe expérimentalement R_σ ($YMnO_3$, $HoMnO_3$ à $4,2^\circ K$) ou $R_\sigma T_\sigma$ ($HoMnO_3$ à $77^\circ K$, $ScMnO_3$, $ErMnO_3$, $TmMnO_3$, $LuMnO_3$). Dans le premier cas, la symétrie est $P6'cm'$; dans le second cas, Pm . Aucun ferromagnétisme n'est compatible avec les modes R_σ ou T_σ , comme l'a déjà remarqué Nedlin (Nedlin, 1965).

Dans $HoMnO_3$ (Koehler *et al.*, 1964) on observe vers $50^\circ K$ une transition brutale $T_\sigma \rightarrow R_\sigma$, nécessairement du premier ordre d'après la théorie de Landau. A basse température, un ferromagnétisme apparaît dans $HoMnO_3$ (Veyret, 1965), vraisemblablement dû à l'holmium (il en est de même dans $ErMnO_3$ et $YbMnO_3$, non dans $YMnO_3$ et $LuMnO_3$). Le Tableau 6 ne fournit aucune explication simple de ce ferromagnétisme; en particulier son apparition n'est pas liée à la rotation $T_\sigma \rightarrow R_\sigma$ [le mécanisme est donc différent de celui observé dans $TbFeO_3$, $HoFeO_3$ ou $YbFeO_3$ pérovskites (Peyrard & Sivardière, 1969)], ni à une impureté de Mn_3O_4 ferrimagnétique ($T_c = 42^\circ K$) (Bertaut, Mercier & Pauthenet, 1964, 1965). Il faut donc conclure à une réduction de symétrie.

Conclusion

Les exemples de structures magnétiques examinés ci-dessus montrent l'intérêt de la méthode macroscopique de Bertaut; si le groupe d'espace du composé étudié est connu dans l'état ordonné (compte tenu de la déformation qui accompagne parfois la transition magnétique), cette méthode permet une énumération systématique et exhaustive des structures magnétiques pos-

sibles pour un vecteur de propagation donné (fourni par l'expérience de diffraction neutronique).

On peut ainsi réexaminer toutes les structures magnétiques connues: ou bien une structure magnétique est compatible avec la structure cristallographique, ou bien elle est à éliminer.

Notons enfin qu'indépendamment de cet aspect géométrique, la méthode de Bertaut permet d'étudier les couplages physiques responsables de l'établissement des structures magnétiques non colinéaires, de préciser les couplages possibles entre sous-réseaux magnétiques. Elle souligne le lien entre les structures magnétiques et cristallographiques; elle est particulièrement intéressante dans les cas de transitions magnétiques successives (mais contrairement à la théorie de Landau, elle ne fournit aucun renseignement sur la nature des transitions magnétiques).

Considérons par exemple les fluorures KFeF_3 , KCoF_3 , KNiF_3 (Scatturin, Corliss, Elliott & Hastings, 1961) de structure pérovskite idéale; dans la phase antiferromagnétique (mode G , $\mathbf{k} = [\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$) ils restent cubiques, il ne peut exister de faible ferromagnétisme f . Au contraire KMnF_3 (Heeger, Beckman & Portis, 1961), de même structure à haute température, est orthorhombique ($Pbnm$) dans la phase ordonnée, il peut donc exister un faible ferromagnétisme (on observe successivement les modes G_y et $G_z f_x$). RbFeF_3 (Testardi, Levinstein & Guggenheim, 1967) est cubique dans la phase paramagnétique; à 102°K , il devient quadratique et strictement antiferromagnétique (la structure est vraisemblablement G_z); à 87°K , il devient faiblement ferromagnétique, et on observe effectivement une déformation orthorhombique; enfin à 45°K , l'aimantation change de direction, et la symétrie devient monoclinique.

Je remercie Monsieur le Professeur E. F. Bertaut de ses conseils.

Acta Cryst. (1970). A26, 105

Some Molecular Compton Profiles

BY M. CORNILLE, M. ROUX AND B. TSAPLINE

Centre de Mécanique Ondulatoire Appliquée, 23, rue du Maroc, Paris 19ème, France

(Received 11 November 1968 and in revised form 26 June 1969)

Several calculations of atomic Compton profiles have shown that this physical property is very sensitive to the choice of the wave functions used to characterize the scattering system when calculating its kinetic energy as well as the mean values of its momentum and radius of charge distribution. The same method related to Dumond theory was applied to the case of molecules isoelectronic with neon and argon atoms. The results obtained give useful information about the charge distribution in the scattering system.

Introduction

Many authors (Bonham, 1965, 1967; Tavard & Roux, 1965; Kilby, 1965; Cornille, 1967; Bartell & Gavin,

1964; Bonham & Cox, 1967) have shown how useful the scattering effects are for studying physical properties such as total and kinetic energies of scattering systems which are special cases of $\langle r^n \rangle$ and $\langle p^n \rangle$

References

- ALIKHANOV, R. A. (1959). *J. Phys.* **36**, 1690.
 BERTAUT, E. F., MERCIER, M. & PAUTHENET, R. (1964). *Proc. Int. Conf. Magnetism*, Nottingham. p. 275.
 BERTAUT, E. F., MERCIER, M. & PAUTHENET, R. (1965). *Phys. Letters*, **19**, 13.
 BERTAUT, E. F. (1968). *Acta Cryst.* A**24**, 217.
 BERTAUT, E. F. (1969). *C. R. Acad. Sci. Paris, série B*, **268**, 625.
 CORLISS, L. M. & HASTINGS, J. M. (1964). *J. Phys. Radium*, **25**, 557.
 COX, D. E., TAKEI, W. J. & SHIRANE, G. (1963). *J. Phys. Chem. Soc.* **24**, 405.
 DACHS, H., STOLL, E. & WEITZEL, H. (1967). *Z. Kristallogr.* **125**, 120.
 DZIALOSHINSKY, I. E. (1968). *J. Phys. Chem. Soc.* **4**, 241.
 GONZALO, J. A., COX, D. E. & SHIRANE, C. (1966). *Phys. Rev.* **147**, 415.
 HEEGER, A. J., BECKMAN, O. & PORTIS, A. M. (1961). *Phys. Rev.* **123**, 1652.
 KOEHLER, W. C., YAKEL, H. L., WOLLAN, E. O. & CABLE, J. W. (1964). *Phys. Letters*, **9**, 93.
 NEDLIN, G. M. (1965). *Sov. Phys. Solid State*, **7**, 592.
 OLBRYCHSKI, K. (1963). *Phys. Stat. Sol.* **3**, 1868.
 PEYRARD, J. & SIVARDIERE, J. (1969). *Solid State Comm.*, **7**, 605.
 PRZYSTAWA, J. (1967). *Phys. Stat. Sol.* **20**, 451.
 PRZYSTAWA, J. (1968). *Phys. Stat. Sol.* **30** K, 115.
 SCATTURIN, V., CORLISS, L., ELLIOTT, N. & HASTINGS, J. (1961). *Acta Cryst.* **14**, 19.
 SIVARDIERE, J. (1969). *Acta Cryst.* A**25**, 658.
 TESTARDI, L. R., LEVINSTEIN, H. J. & GUGGENHEIM, H. J. (1967). *Phys. Rev. Letters*, **19**, 503.
 VARRET, F., IMBERT, P., GERARD, A. & HARTMANN-BOU-TRON, F. (1968). *Solid State Comm.* **6**, 889.
 VEYRET, C. (1965). Thèse 3e Cycle, Grenoble.
 WOLLAN, E. O., CHILD, H. R., KOEHLER, W. C. & WILKINSON, M. K. (1958). *Phys. Rev.* **112**, 1132.
 WOLLAN, E. O., KOEHLER, W. C. & WILKINSON, M. K. (1959). *Phys. Rev.* **113**, 497.