

reaching 4.5% with the three extra parameters. Clearly the single parameter gave an enormous improvement, so let us simply test whether the introduction of two more parameters gives a significant improvement. The  $R$  index ratio is  $4.8/4.5 = 1.067$ , there are 1008 observations and 44 parameters in the better fitting model. We now calculate the percentage points of the appropriate distribution as described by Hamilton (1965), with the use of the approximation of Pawley (1970). At the 1% level we get 1.007, which shows the improvement to be highly significant. Strictly, the weighted sum of squares of the deviations should be used for this test but the simple ratio suffices at this level of significance. A completely unconstrained refinement for pyrene gave  $R = 3.4\%$ , (Hazell, Larsen & Lehmann, 1970).

The  $R$  indices for the refinements of naphthalene and anthracene (Lehmann & Pawley, 1970) are

Model:		Number of observations
T, L plus anisotropic deuterium contribution	Unconstrained	
Naphthalene-d <sub>8</sub>	3.3	330
Anthracene-d <sub>10</sub>	4.0 (9300)	951
	3.4 (6980)	

The values in parentheses are the weighted sums of squares of deviations.

The conclusion of this paper is simple: it is considered that the rigid body model is greatly improved by allowing an anisotropic internal mode contribution to the temperature factors of the hydrogen or deuterium atoms.

#### References

- CRUICKSHANK, D. W. J. (1956). *Acta Cryst.* **9**, 754.  
 HAMILTON, W. C. (1965). *Acta Cryst.* **18**, 502.  
 HAZELL, A. C., LARSEN, F. K. & LEHMAN, M. S. (1970) In preparation.  
 JOHNSON, C. K. (1970). *Thermal Neutron Diffraction*, ch. 9. Oxford Univ. Press.  
 LEHMANN, M. S. & PAWLEY, G. S. (1970). In preparation.  
 PAWLEY, G. S. (1966). *Acta Cryst.* **20**, 631.  
 PAWLEY, G. S. (1970). *Acta Cryst.* **A26**, 691.  
 PAWLEY, G. S. (1971). *Advances in Structure Research by Diffraction Methods*. Vol. 4. Edited by W. HOPPE and R. MASON. New York: Pergamon Press.  
 SCHOMAKER, V. & TRUEBLOOD, K. N. (1968). *Acta Cryst.* **B24**, 63.

*Acta Cryst.* (1971). **A27**, 81

**Absorptionsfaktor für ebene Pulverproben unter Berücksichtigung der Primärstrahldivergenz.** Von B. DIETRICH, *Fachbereich Experimentelle Physik der Friedrich-Schiller-Universität Jena, DDR, 69 Jena, Max-Wien-Platz 1, Deutsche Demokratische Republik*

(Eingegangen am 11. Mai 1970 und wiedereingereicht am 3. August 1970)

Following the calculations of Kunze an expression for the absorption factor of flat powder samples in Bragg-Brentano arrangement is given with regard to any intensity distribution in the primary beam. The primary beam is characterized by the 1st and the 2nd moment of the intensity distribution.

Für den Absorptionsfaktor an ebenen Pulverproben im symmetrischen Braggfall erhält man unter der Voraussetzung eines einfallenden Parallelstrahlbündels  $\sin \theta/2\mu$ . Für Intensitätsmessungen, die nicht genauer als 1% sein sollen, sind diese Voraussetzungen in den üblichen Diffraktometeranordnungen genügend gut erfüllt. Für genauere Intensitätsmessungen muss man neben anderen Faktoren den Einfluss der Intensitätsverteilung im Primärstrahl berücksichtigen. Dazu kann man der von Kunze (1964) durchgeführten Berechnung des Absorptionsfaktors folgen, wenn man zusätzlich im Primärstrahl eine beliebige Intensitätsverteilung  $i(\omega)$  zulässt und die Integration über den gesamten Divergenzbereich des Primärstrahls erstreckt.

Belässt man  $i(\omega)$  weiterhin unter dem Integralzeichen und führt diese Rechnung durch, erhält man im Ergebnis für den Absorptionsfaktor

$$\frac{\sin \theta}{2\mu} \cdot [1 + 3 \operatorname{ctg} \theta \cdot \Omega_1^2 + \frac{1}{2} (15 \operatorname{ctg}^2 \theta - 2 \operatorname{csc}^2 \theta) \Omega_2^2],$$

wobei  $\Omega_1$  bzw.  $\Omega_2^2$  das 1. bzw. 2. Moment der Intensitätsverteilung  $i(\omega)$  im Primärstrahl und  $\theta$  der Bragg'sche Winkel ist.

#### Literatur

- KUNZE, G. (1964). *Z. angew. Phys.* **18**, 28.