Acta Cryst. (1948). **1**, 338

Zahlentheoretische Zusammenhänge zwischen Gitterstrukturen und quadratischen Formen von Debye-Scherrer-(Hull)-Diagrammen kubischer Symmetrie.

Von F. Ebert. *Reichswerke A.-G. für Erzbergbau und Eisenhütten Watenstedt-Salzgitter, Materialprüfanstalt Watenstedt, (20b) Drütte I über Braunschweig, Deutschland**

(*Eingegangen* 4 *Oktober* 1948)

In der quadratischen Form für kubische Symmetrie

$$\sin^2 \vartheta = (h^2+k^2+l^2)\,\lambda^2/4a^2$$

sind die Miller'schen Indizes *hkl* stets ganze Zahlen, die die gesamte Zahlenfolge von $-\infty$ bis $+\infty$ durchlaufen können, während die Summe je dreier ganzzahliger Quadratzahlen einschliesslich 0 $(h^2+k^2+l^2=\Sigma h_\nu^2)$ sich nicht in eine lückenlose Zahlenfolge zusammenfassen lässt. Es ist bekannt, dass $h^2+k^2+l^2=7$ oder 15, 23, 28, 31, 39, 47, 55, 60, 63, 71, 79, 87, 92, 95, 103, 111, 112, 119, 124...240...368...448...496...960...u.s.w. unmöglich sind.

Diese Tatsache lässt sich durch folgende Kongruenzen ausdrücken:

7 (mod 8) ≡ 7, 15, 23, 31, 39, 47, 55, 63, 71, 79, 87, 95, 103, 111, 119, ...
28 (mod 32) ≡ 28, 60, 92, 124, ...
112 (mod 128) ≡ 112, 240, 368, 496, ...
448 (mod 512) ≡ 448, 960, ... u.s.w.
Allgemein: $4^n.7 \pmod{4^n.8}$ $n=0, 1, 2, 3, \ldots$

Der mathematische Beweis dieser Tatsache findet sich z.B. bei Landau (1909, S. 545).

Ordnet man die Gesamtheit aller *möglichen* Σh_ν^2-Werte sowohl nach der Zahlenfolge, als auch gleichzeitig nach einem Modulo 8-Schema, so erhält man die Übersicht in Tabelle 1.

Wenn man die oben besonders herausgestellten *hkl*-Werte von 0 (mod 8), 3 (mod 8) und 4 (mod 8) betrachtet, so erkennt man die Netzebenenfolge des kubisch-flächenzentrierten Gitters für die bisher das Kriterium galt, dass entweder nur gradzahlige, oder nur ungradzahlige, niemals aber gemischte Indizestripel auftreten dürfen. Aus Gründen der Übersichtlichkeit und um die zahlentheoretischen Zusammenhänge bei den nachfolgenden Beispielen zu unterstreichen, mögen anstelle der Ziffern einfache Zeichen als Abkürzungen gesetzt sein. Der dadurch erzielte Vorteil wird offensichtlich bei den nachfolgenden Vergleichen der Strukturfaktoren der einzelnen Gittertypen (Tabelle 2).

Dieses Schema lässt sich allgemein anwenden und man kann dadurch für die verschiedenen kubischen Gittertypen in der vorstehenden abgekürzten Schreibweise sofort ins Auge springende Merkmale erkennen (Tabelle 3)

Weitere Beispiele wurden bereits seit 1932 in der vom Verfasser geleiteten Röntgenabteilung der Technischen Hochschule, Breslau, insbesondere von Frl. Dr. L. Staub, bearbeitet und gesammelt. Auch bei komplizierten Gittern (z.B. Spinellen, Granaten u.s.w.) wurden ähnliche einfache Schemata gefunden. Beachtenswert ist dabei, dass innerhalb der gleichen Kongruenz (z.B. 0 (mod 8) bei β-Wolfram) auch alternierende Werte × . × . × gefunden wurden, sodass es vollauf genügt, beim Modulo 8-Schema zu bleiben ohne auf ein Modulo 16- oder 32-Schema überzugehen.

Sämtliche Unterlagen sind durch die Kriegsereignisse verloren gegangen und es ist dem Verfasser nicht möglich, über andere Gittertypen, als die hier beschriebenen aus dem Gedächtnis zu berichten.

Die vorliegende Veröffentlichung erfüllt aber ihren Zweck, wenn es gelingt, Mathematiker, insbesondere Zahlentheoretiker, mit der aufgezeigten Anwendungsmöglichkeit der Zahlentheorie hinsichtlich des theoretischen Ausbaus der geschilderten Zusammenhänge zu befreunden.

Schrifttum

Landau, E. (1909). *Handbuch der Lehre von der Verteilung der Primzahlen.* Leipzig und Berlin: Teubner.

* Früher Breslau.

Tabelle 1.

Kongruenz	$h^2+k^2+l^2$	*hkl*
0 (mod 8) ≡	0, 8, 16, 24, 32, ...	(000), (220), (400), (422), (440) ...
1 (mod 8) ≡	1, 9, 17, 25, 33, ...	
2 (mod 8) ≡	2, 10, 18, 26, 34, ...	
3 (mod 8) ≡	3, 11, 19, 27, 35, ...	(111), (311), (331), (333), (511), (531) ...
4 (mod 8) ≡	4, 12, 20, —, 36, ...	(200), (222), (420), —, (600), (442) ...
5 (mod 8) ≡	5, 13, 21, 29, 37, ...	
6 (mod 8) ≡	6, 14, 22, 30, 38, ...	
7 (mod 8) ≡	—, —, —, —, —, ...	

Tabelle 2.

0 (mod 8) ≡	0, 8, 16, 24, 32...	abgekürzt:	× × × × ×...
1 (mod 8) ≡	1, 9, 17, 25, 33...		× × × × ×...
2 (mod 8) ≡	2, 10, 18, 26, 34...		× × × × ×...
3 (mod 8) ≡	3, 11, 19, 27, 35...		× × × × ×...
4 (mod 8) ≡	4, 12, 20, —, 36...		× × × — ×...
5 (mod 8) ≡	5, 13, 21, 29, 37...		× × × × ×...
6 (mod 8) ≡	6, 14, 22, 30, 38...		× × × × ×...
7 (mod 8) ≡	—, —, —, —, —...		— — — — —...

Zeichenerklärungen:

× = möglicher $(h^2+k^2+l^2)$-Wert
— = unmöglicher $(h^2+k^2+l^2)$-Wert.

Tabelle 3.

	A 1-Typ (Kupfer)	A 2-Typ (α-Wolfram)	A 4-Typ (Diamant)	A 15-Typ (β-Wolfram)
0 (mod 8)	× × × × ×	× × × × ×	× × × × ×	× . × . ×
1 (mod 8)	. . . . .	. . . . .	. . . . .	. . . . .
2 (mod 8)	. . . . .	× × × × ×	. . . . .	. . . . .
3 (mod 8)	× × × × ×	. . . . .	× × × × ×	. . . . .
4 (mod 8)	× × × – ×	× × × – ×	. . . – .	× × × – ×
5 (mod 8)	. . . . .	. . . . .	. . . . .	× × × × ×
6 (mod 8)	. . . . .	× × × × ×	. . . . .	× × × × ×
7 (mod 8)	– – – – –	– – – – –	– – – – –	– – – – –

Zeichenerklärungen:

bei × : $S=F_A$

. : $S=0$

– = unmöglicher Σh_ν^2-Wert.

	B 1-Typ (Kochsalz)	B 2-Typ (Caesiumchlorid)	B 3-Typ (Zinkblende)
0 (mod 8)	× × × × ×	× × × × ×	× × × × ×
1 (mod 8)	. . . . .	O O O O O	. . . . .
2 (mod 8)	. . . . .	× × × × ×	. . . . .
3 (mod 8)	O O O O O	O O O O O	× × × × ×
4 (mod 8)	× × × – ×	× × × – ×	O O O – O
5 (mod 8)	. . . . .	O O O O O	. . . . .
6 (mod 8)	. . . . .	× × × × ×	. . . . .
7 (mod 8)	– – – – –	– – – – –	– – – – –

Zeichenerklärungen:

bei × : $S=F_A+F_B$

O : $S=F_A-F_B$

. : $S=0$.

	C 1-Typ (Flussspat)	C 3-Typ (Cuprit)
0 (mod 8)	× × × × ×	× × × × ×
1 (mod 8)	. . . . .	. . . . .
2 (mod 8)	. . . . .	v v v v v
3 (mod 8)	v v v v v	+ + + + +
4 (mod 8)	O O O – O	O O O – O
5 (mod 8)	. . . . .	. . . . .
6 (mod 8)	. . . . .	v v v v v
7 (mod 8)	– – – – –	– – – – –

Zeichenerklärungen:

bei × : $S=F_A+2F_B$

O : $S=F_A-2F_B$

v : $S=F_A$

+ : $S=2F_B$

. : $S=0$.

Acta Cryst. (1948). **1**, 339

The measurement of small differences between lattice spacings of two solid solutions.

By E. G. Steward,
Research Laboratories of the General Electric Company Limited, Wembley, England

(*Received* 6 *November* 1948)

Sometimes it is important to measure very small differences in lattice spacings between two solid solutions, for example in determining the difference in composition between two close members of a series. Usually Debye-Scherrer photographs are taken of the two solid solutions (A and B), and the differences in spacings deduced from the line shifts.

The sensitivity of this method has, of course, a limit—and this limit is dependent on many factors, among the most important of which is the overall accuracy of the measurements made on the films. To increase the sensitivity, a method is suggested here for reducing the number of these measurements.

In this method, both diffraction patterns are obtained on one film and the slight displacement between pairs of reflexions at high angles becomes manifest as a line-broadening effect. This is measurable with a microphotometer in the usual way and can easily be converted into a lattice-spacing difference.

In practice, photographs are taken of solid solution A, solid solution B, and of a mixture containing equal amounts of A and B. Microphotometer traces of, for example, the α_1, α_2 doublet of the highest Bragg angle recorded in the composition range under examination are obtained for each film. These give, in the first two cases, the 'control' line breadths under the given experimental conditions; from these and the third microphotometer trace, the broadening due to the difference in lattice spacing can be determined.

Fig. 1 illustrates a simple example of the method in which A and B are of the same crystal size. Only one diffraction pattern and trace of these is shown therefore, together with the pattern and trace obtained from the mixture $A+B$. The lattice-spacing difference between the doublets in the example given is 0·0003 A.