

The One-Dimensional Crystal. II. A Graphical Method for Computing Structure Factors

BY GABRIELLE H. DONNAY*

Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts, U.S.A.

(Received 20 May 1949)

The method described by Vand for computing structure factors is modified and extended to the case of non-centrosymmetric crystals. The calculation scheme is based on the one-dimensional representation of the crystal.

The following method for computing structure factors is a modification of the scheme described by Vand (1948). It is especially suited to the case of non-centrosymmetric crystals where the calculations involving the reduced trigonometric expression of F_{hkl} are particularly laborious.

It is known that

$$|F_{hkl}| = \sqrt{(A_{hkl}^2 + B_{hkl}^2)},$$

where

$$A_{hkl} = \sum_n f_n \cos 2\pi(hx_n + ky_n + lz_n) = |F_{hkl}| \cos \alpha,$$

$$B_{hkl} = \sum_n f_n \sin 2\pi(hx_n + ky_n + lz_n) = |F_{hkl}| \sin \alpha.$$

The quantities to be computed are either A and B , or F and α .

The arrangement of the data (Table 1) shows how use is made of the one-dimensional representation of the crystal (Donnay & Donnay, 1949), in which X and H take the place of xyz and hkl , respectively. Every one of the n atoms in the cell is listed, together with its running index n and its co-ordinate X . Each of the following columns corresponds to a reflection H and is headed by the appropriate value of $\sin \theta$. The value of X is set into the computing machine and multiplied by the

various H 's in quick succession. Only the first three decimals of each product are recorded, the angle HX thus being expressed in millicycles ($1^{\text{mc.}} = 1$ millicycle $= 2\pi/1000$ radians).

A simple computing device is shown in Fig. 1. Atomic scattering factors, f 's, are plotted against $\sin \theta$ for the elements occurring in the crystal structure. The scale of f is chosen in such a way that the highest atomic number needed is represented by a point falling on the ordinate axis 12 in. or less from the origin. $\sin \theta$ is read to 0.002 along the abscissa axis. A circle, 12 in. in radius, is engraved on transparent plastic ($\frac{1}{16}$ in. thick); it is graduated to $2^{\text{mc.}}$ at the periphery, but, within a radius of 2 in., only the radial lines $5^{\text{mc.}}$ apart extend to the center. The circle is placed over the plot of the f curves, so that its 0-500^{mc.} line is made to coincide with the abscissa axis and its center with the $\sin \theta$ value that corresponds to the reflection considered. A large transparent sheet (of 'Trace-o-Film', for instance), attached to a drafting machine or any other device that permits it to be moved parallel with itself, is in turn laid over the circle, with some central point (marked as origin) brought into coincidence with the center of the circle.

With a pair of dividers take the appropriate f_n value, which is read at the intersection of the $250^{\text{mc.}}$ radial

* Arthur D. Little, Fellow.

Table 1. List of $HX^{\text{mc.}}$ and calculation form

n	Atoms	X	$\sin \theta = 0.096$	$\sin \theta = 0.336$	$\sin \theta = 0.650$	$\sin \theta = 0.969$	$\sin \theta = 0.182$	$\sin \theta = 0.453$
			$H = 1,001,000$	$H = 1,001,003$	$H = 1,001,006$	$H = 1,001,009$	$H = 1,002,001$	$H = 1,002,004$
1	0.4Na + 0.6Ca	0.770,000,000	0	310	620	930	770	80
2	Si	0.624,192,192	384	257	129	2	201	73
3	Si	0.624,192,000	192	65	937	810	8	881
4	Si	0.623,999,808	808	680	552	424	432	304
5	Mg	0.255,066,633	700	465	230	995	21	787
6	Mg	0.255,066,434	500	266	31	796	822	587
7	Mg	0.255,866,934	801	566	330	95	923	687
8	O	0.624,071,142	213	85	958	830	908	781
9	O	0.624,070,929	0	872	744	617	695	567
10	O	0.623,857,929	787	659	530	402	269	140
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
n		
	Read from graph	$\left\{ \begin{array}{l} A \\ B \end{array} \right.$
	Read from graph	$\left\{ \begin{array}{l} F \\ \alpha \end{array} \right.$

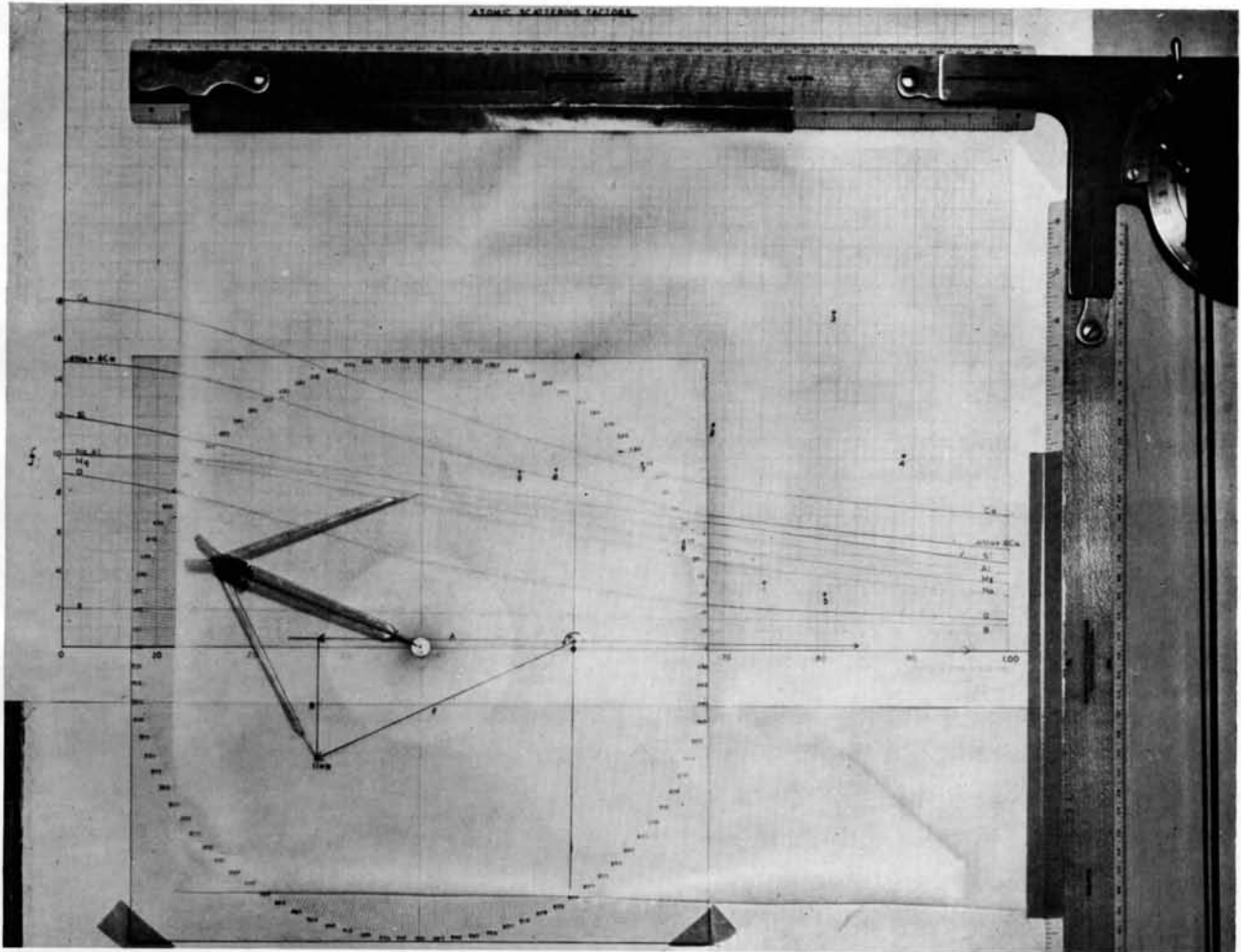


Fig. 1. Computing device in use. (Example shown: $n = 11$.)

line with the f_n curve, and lay it off on the radial line corresponding to the angle HX_n^{mc} obtained from Table 1. A punch mark is left and labelled n . The sheet is then moved so that the latter point falls on the center of the circle. This sequence of operations is repeated for every atomic contribution. The graphical vector addition is now completed. The abscissa and ordinate of the last point, referred to the origin of the sheet, are read on a scale identical to that used for the f axis. These values are A and B , respectively. Alternately one can read the distance F and the phase angle α .

Thus the method enables one to obtain A and B , or F and α , simultaneously and to use f_n values obtained

directly from the atomic-scattering curves. In the particularly tedious case of space group $R3m$, the calculation of one structure factor took less than one-fourth of the time required with the trigonometric expansion method. The error never exceeded 5 %.

I wish to express my thanks to Mr John Solo for his skilful engraving of the graduated circle.

References

- DONNAY, J. D. H. & DONNAY, G. H. (1949). *Acta Cryst.* **2**, 366.
 VAND, V. (1948). *J. Sci. Instrum.* **25**, 352.

Acta Cryst. (1949). **2**, 371

L'Interférence des Rayons X dans les Systèmes à Stratification Désordonnée

PAR J. MÉRING

Laboratoire Central des Services Chimiques de l'État, 12 Quai Henri IV, Paris 4, France

(Reçu le 1 mars 1949)

The scattering of X-rays by parallel layers in disordered stacking is calculated, taking account of the number of layers per stack. The result is a more general formula than that obtained by Hendricks & Teller for random stacks of an infinite numbers of layers. Systems with complete or partial randomness are discussed. The latter case comprises crystals with 'mistakes'. The influence of the nature of the mistakes (accidental shifts, or twinning along certain planes), is studied, as is also the influence of their distribution.

L'interférence des rayons X dans les structures partiellement désordonnées a fait l'objet de plusieurs études.

Dans le présent travail est traité le cas des systèmes formés par l'empilement irrégulier d'éléments structuraux quelconques.

Dans un empilement ordonné l'élément donné se reproduit par la répétition d'une translation unique y . Dans un empilement désordonné le passage du m -ème au $(m+1)$ -ème élément peut se faire au moyen de r translations différentes y_1, y_2, \dots, y_r intervenant avec les probabilités p_1, p_2, \dots, p_r . Dans le problème général ces translations sont des vecteurs de directions quelconques. De même la structure de l'élément répété peut ne pas être précisée. Dans la suite du texte les éléments empilés seront désignés sous le nom de *couches*, parce que le problème se pose généralement dans les systèmes stratifiés. Mais l'emploi de ce terme ne doit pas être compris dans le sens d'une restriction quant à la forme des éléments. La restriction véritable consistera à admettre que chaque élément ou couche ne comporte que deux voisins immédiats.

On admettra (à l'exception du § 3(c)) que les translations y_i se produisent avec les mêmes probabilités p_i dans chaque paire de couches successives. Cela revient à supposer qu'il n'y a d'interaction qu'entre les couches immédiatement voisines. Le problème est donc identique à celui traité dans le § 2 du mémoire de Hendricks &

Teller (1942). Le travail de ces auteurs consiste à calculer l'intensité produite par l'empilement d'un nombre *infini* de couches. Dans le présent travail est calculé l'effet résultant d'une multitude d'empilements indépendants, formés chacun d'un nombre *fini* M de couches. On supposera que ce nombre est le même dans tous les empilements et que les couches sont identiques. Les formules obtenues restent valables avec M très petit, leur application quantitative peut être envisagée dans le cas des substances colloïdales telles que les argiles, les hydroxydes, etc.

Le problème est limité à la structure de l'espace réciproque. Le passage aux données directes de l'expérience constitue, en effet, un problème séparé, dépendant des conditions expérimentales et de la texture de l'échantillon. Sa solution dans le cas des poudres peut exiger des intégrations numériques (Wilson, 1948; Brindley & Méring, 1948).

FORMULES GENERALES

Soit \mathbf{s} le vecteur de diffusion défini par

$$\mathbf{s} = \frac{1}{\lambda} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0),$$

où \mathbf{k}_0 et \mathbf{k} sont les vecteurs unités dans les directions de l'incidence et de la diffusion.