

*Acta Cryst.* (1953). **6**, 107

**Bemerkungen zum Problem der Tensorsymmetrien.** VON HANS WONDRATSCHEK, *Mineralogisches Institut der Universität Bonn, Deutschland*

(Eingegangen am 20. Oktober 1952)

Die Arbeiten von Fumi (1952), die sich mit der Berechnung der Tensorsymmetrien in den einzelnen Kristallklassen befassen, können in einigen Punkten ergänzt werden. Hier werden nur diese Erweiterungen angegeben, zwei ausführlichere Mitteilungen erscheinen in den Monatsheften des *Neuen Jahrbuchs für Mineralogie, Geologie und Paläontologie*.

1. Auch die Bedingungen der Klassen  $D_3 = 32$  und  $D_{3d} = \bar{3}m$  des rhomboedrischen Systems kann man durch Einführung des rhomboedrischen orthogonalen Achsenkreuzes vollständig berechnen, wenn man bei geeigneter Aufstellung von der Matrix

$$Y' = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

ausgeht. Aus dieser Matrix lassen sich die Bedingungen für Tensoren beliebiger Stufe (*order*) und beliebigen Verhaltens (*polar* oder *axial*) in der gleichen einfachen Weise ablesen, wie Fumi das für die übrigen Klassen des rhomboedrischen Systems angibt.

2. Man kann für totalunsymmetrische Tensoren beliebigen Verhaltens und beliebiger Stufe in allen Klassen

die Zahl der nichtverschwindenden und die der linear unabhängigen Tensorkomponenten angeben. Diese Zahlen sind tabelliert in einer der angekündigten Arbeiten.

3. Die Symmetrien der Tensoren beliebiger Stufe  $\leq 6$ , beliebigen Verhaltens und beliebiger physikalischer Eigensymmetrien gewinnt man für die Klassen des rhomboedrischen und hexagonalen Systems leicht durch Spezialisierung der Bedingungen, die die dreizählige Drehachse 3 einem totalunsymmetrischen Tensor der Stufe 6 auferlegt. Diese Bedingungen werden demnächst, s. o., mitgeteilt. Die Spezialisierung erfolgt nach dem von Fumi 'Direct-Inspection Method' genannten Verfahren.

4. Die Fälle der Kugel- und Zylindersymmetrie für Tensoren bis zur sechsten Stufe einschliesslich erhält man leicht aus den Ergebnissen von (3). Damit besitzt man z. B. die Symmetriebedingungen isotroper Medien.

Herrn Prof. Dr W. Kleber und Herrn Prof. Dr E. Peschl danke ich für wertvolle Anregungen und Diskussionen.

#### Literatur

FUMI, F. G. (1952). *Acta Cryst.* **5**, 691; dort weitere Angaben.

*Acta Cryst.* (1953). **6**, 107

**A correction and note on the structure of  $\text{TiBe}_{12}$ .** By RICHARD F. RAEUCHLE, *Naval Research Laboratory, Washington 25, D. C., U. S. A.* and R. E. RUNDLE, *Institute for Atomic Research and Department of Chemistry, Iowa State College, Ames, Iowa, U. S. A.*

(Received 29 October 1952)

Cochran & Dyer (1952) in their paper on generalized crystal-structure projection, point out that the equation

$$\int_0^1 \rho(x, y, z) \sin 2\pi l_1 z dz \\ = \frac{1}{V} \sum_{-\infty}^{+\infty} \sum_{-\infty}^{+\infty} F(hkl_1) \sin 2\pi(hx - ky)$$

given by Raeuchle & Rundle (1952, p. 89) is incorrect. We take this occasion to acknowledge that errors in signs have occurred somewhere between the manuscript and the published article and that the equation should read:

$$\int_0^1 \rho(x, y, z) \sin 2\pi l_1 z dz \\ = - \frac{1}{V} \sum_{-\infty}^{+\infty} \sum_{-\infty}^{+\infty} F(hkl_1) \sin 2\pi(hx + ky).$$

Furthermore, this equation, and the immediately preceding one, apply only when  $F(hkl)$  is real, as required for our application, and these equations apply only when that condition is fulfilled. It is to be noted that the above equation is the imaginary part of the equation for

$$\int_0^1 \rho(x, y, z) \exp [2\pi i l_1 z] dz$$

and was not used in determining the structure of  $\text{TiBe}_{12}$ , and is, indeed, zero for our structure.

Opportunity is taken at this time to point out that the statement, also found in Raeuchle & Rundle (1952), that the sum of the peak heights in the generalized projection of the  $(hkl)$  data must have a zero sum, is not correct since absolute intensities were not used. A further calculation indicates that the proposed structure still gives the best fit between observed and calculated intensities that can be obtained at present, but that other interpretations are not ruled out entirely.

#### References

- COCHRAN, W. & DYER, H. B. (1952). *Acta Cryst.* **5**, 634.  
 RAEUCHLE, R. F. & RUNDLE, R. E. (1952). *Acta Cryst.* **5**, 85.