

value of δr_j is δr , the quantity which it is required to estimate. Hence $R = 1/(d^*\delta r)^2 2\pi^2$ or $Rd^{*2} = \text{constant} = 1/2\pi^2\delta r^2$.

Example of pseudo-halving

For the trigonal crystals of $\beta\text{-Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ reflexions with l odd are weak, and the ratio R (mean intensity of reflexions with l even divided by mean intensity of reflexions with l odd) was found to vary with d^* as follows:

d^* (\AA^{-1})	R	Rd^{*2}
0.26–0.39	3.0	3.2
0.39–0.52	7.3	1.5
0.52–0.65	10.1	3.4
0.65–0.78	6.6	3.4
0.78–0.91	6.8	4.8
0.91–1.04	4.8	4.5
1.04–1.17	5.1	6.2

R is thus seen to follow very approximately the expected law, Rd^{*2} having the value of about 5. This gives 0.1 \AA for the r.m.s. displacement from the pseudo-structure. This conclusion can be checked in the following way.

Quantitative check

Booth (1945) has shown that there is a relationship between the reliability index $R_2 = \Sigma(|F_o| - |F_c|)^2 / \Sigma F_o^2$ and the r.m.s. error of the atomic coordinates.

Compare two structures: (a) the real structure of $\beta\text{-Ca}_3(\text{PO}_4)_2$, and (b) a hypothetical structure so constructed as to give perfect agreement with those observed reflexions which have l even and to give

zero amplitude for all reflexions with l odd. Then the observed amplitudes of $\beta\text{-Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ can be inserted into the above expression for R_2 as F_o and the same amplitudes for reflexions with l even also serve as F_c . When l is odd F_c will be zero. This gives

$$R_2 = \frac{\sum_{l \text{ even}} (|F_o| - |F_c|)^2 + \sum_{l \text{ odd}} (|F_o| - |F_c|)^2}{\sum_{\text{all } l} F_o^2} = \frac{\sum_{\text{odd } l} F_o^2}{\sum_{\text{all } l} F_o^2} = 0.17.$$

Booth's table gives for this value of R_2 the r.m.s. displacement of 0.09 \AA , which will be that error which, when applied to all coordinates in the pseudo-structure, will produce an R_2 value of 0.17.

Conclusion

The agreement obtained is better than would be expected considering the variations in Rd^{*2} actually found. 0.1 \AA is quite a large r.m.s. displacement and a trial of the method on a structure with perhaps 0.01 \AA displacements would afford a more critical test. The method, or its variants to suit special cases, is, however, considered as a possible supplement to Booth's methods of estimating residual displacements.

The work described forms part of a thesis approved by the University of London for the Ph.D. degree.

Reference

BOOTH, A. D. (1945), *Phil. Mag.* (7), **36**, 609.

Short Communications

Contributions intended for publication under this heading should be expressly so marked; they should not exceed about 500 words; they should be forwarded in the usual way to the appropriate Co-editor; they will be published as speedily as possible; and proofs will not generally be submitted to authors. Publication will be quicker if the contributions are without illustrations.

Acta Cryst. (1953). **6**, 215

Morphologie und Struktur des Reddingits, $\text{P}_2\text{O}_5 \cdot 3\text{FeO} \cdot 3\text{H}_2\text{O}$. Von P. EVERSHEIM und W. KLEBER, Abteilung für Kristallstrukturlehre am Mineralogisch-Petrographischen Institut der Universität, Bonn, Deutschland

(Eingegangen am 28. Oktober 1952)

Für die Untersuchung standen einige gut ausgebildete Reddingitkristalle von Hagendorf (Pfälzer Wald) zur Verfügung. Morphologisches Achsenverhältnis:

$$a/b = 0,864 \pm 0,001, \quad c/b = 0,945 \pm 0,001; \\ (0,863:1:0,942 \text{ nach Steinmetz (1926) und Steinmetz \& Laubmann (1920)}).$$

Die morphologische Diskussion des Formsystems lieferte folgende Rangordnung:

(010), (001), (100), (101), (111), (120), (212), (221), (012), (113), (322), (211), (011), (112), (301), (223), (121), (232), (201), (102), (103), (332).

Nach Donnay & Harker (1937) wurde auf Grund des morphologischen Aspektes die Raumgruppe $Pcmb-D_{2h}^{11}$ ermittelt (vergl. auch Kleber (im Druck); Fig. 1).

Die Strukturbestimmung wurde mit Hilfe von Drehkristall- und Weissenberg-Aufnahmen durchgeführt (Co $K\alpha$, Cu $K\alpha$). Gitterkonstanten:

$a_0 = 8,73 \pm 0,02$, $b_0 = 10,152 \pm 0,008$, $c_0 = 9,57 \pm 0,02$ kX.;
 $a_0 : b_0 : c_0 = 0,860 : 1 : 0,942$; $Z = 4$.

Projektionen der Reddingit-Struktur sind in Fig. 2 und 3 wiedergegeben. Die berechneten Intensitäten befinden sich in guter Übereinstimmung mit den Beobachtungen.

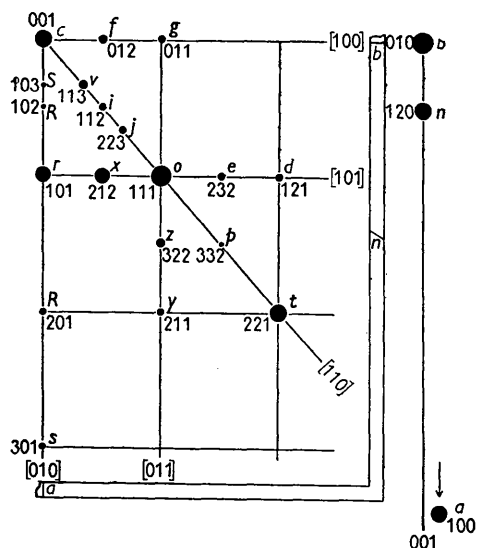


Fig. 1. Morphologischer Aspekt.

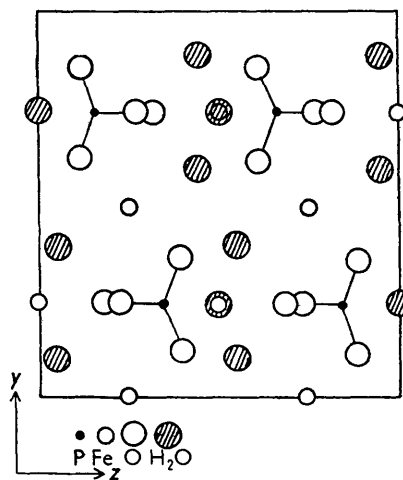


Fig. 2. Projektion der Struktur auf $(y z)$.

Auslöschungen: (hkl) in allen Ordnungen vorhanden, $(0kl)$ nur mit $l = 2n$ vorhanden, $(h0l)$ in allen Ordnungen vorhanden, $(hk0)$ nur mit $k = 2n$ vorhanden. Raumgruppe: $Pcmb-D_{2h}^{11}$. Damit wird die morphologische Raumgruppenbestimmung bestätigt.

Die Struktur wurde nach 'trial-and-error' mit Berechnung der Intensitäten durchgeführt. Es wurde vorausgesetzt, dass die $[PO_4]$ -Tetraeder als Inseln vorliegen.

Punktlagen:

4 Fe_I in (d) : $x, \frac{1}{4}, z$; $\bar{x}, \frac{3}{4}, \bar{z}$; $\bar{x}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2} + z$; $x, \frac{3}{4}, \frac{1}{2} - z$;
mit $x_{FeI} = 0,22$; $z_{FeI} = 0,5$.

8 Fe_{II} in $2.(c)$: $x, 0, z$; $\bar{x}, 0, \bar{z}$; $x, \frac{1}{2}, z$; $\bar{x}, \frac{1}{2}, \bar{z}$;
mit $x_{FeII} = 0,025$ bzw. $0,525$;
 $z_{FeII} = 0,2325$.

8 P in $2.(d)$ mit $x_P = 0,18$ bzw. $0,68$;
 $z_P = 0,16$.

8 O_I in $2.(d)$ mit $x_{OI} = 0,057$ bzw. $0,557$;
 $z_{OI} = 0,32$.

8 O_{II} in $2.(d)$ mit $x_{OII} = 0,34$ bzw. $0,84$;
 $z_{OII} = 0,275$.

16 O_{III} in $2.(e)$:

$\pm \{x, y, z$; $x, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - z$; $x, \frac{1}{2} - y, z$; $x, \bar{y}, \frac{1}{2} - z\}$;
mit $x_{OIII} = 0,2$; bzw. $0,7$;
 $y_{OIII} = 0,125$;
 $z_{OIII} = 0,115$.

8 H_2O_I in (e) mit $x_{H_2O_I} = 0,17$;
 $y_{H_2O_I} = 0,1$;
 $z_{H_2O_I} = 0,45$.

4 H_2O_{II} in (d) mit $x_{H_2O_{II}} = 0,5$;
 $z_{H_2O_{II}} = 0,5$.

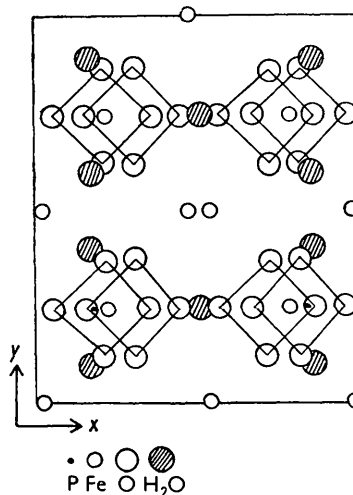


Fig. 3. Projektion der Struktur auf $(x y)$.

Wegen des Intensitätsvergleichs und einer vergleichenden Diskussion von Morphologie und Struktur des Reddingits sei auf die ausführliche Veröffentlichung an anderer Stelle verwiesen.

Bei den röntgenographischen Untersuchungen wurden Apparaturen benutzt, die die Deutsche Forschungsgemeinschaft zur Verfügung stellte. Hierfür sei bestens gedankt.

Literatur

- DONNAY, J. D. H. & HARKER, D. (1937). *Amer. Min.* **22**, 446.
KLEBER, W. (Im Druck). *Fortschr. Min.*
STEINMETZ, H. (1926). *Z. Krystallogr.* **64**, 408.
STEINMETZ, H. & LAUBMANN, H. (1920). *Z. Krystallogr.* **55**, 523.