

- PAULING, L. (1949). *Proc. Roy. Soc. A*, **196**, 343.
 PAULING, L. (1951). *Acta Cryst.* **4**, 138.
 PHILLIPS, H. W. L. (1943). *J. Inst. Met.* **69**, 275.
 PRATT, J. N. & RAYNOR, G. V. (1951). *Proc. Roy. Soc. A*, **205**, 103.
 RAYNOR, G. V. & HUME-ROTHERY, W. (1943). *J. Inst. Met.* **69**, 415.
 RAYNOR, G. V. & WAKEMAN, D. W. (1947). *Proc. Roy. Soc. A*, **190**, 82.
 RAYNOR, G. V. & WALDRON, D. M. B. (1948). *Proc. Roy. Soc. A*, **194**, 362.
 ROBINSON, K. (1952). *Acta Cryst.* **5**, 397.
 VIERVOLL, H. & ÖGRIM, O. (1949). *Acta Cryst.* **2**, 277.
 WILSON, A. J. C. (1949). *Acta Cryst.* **2**, 318.

Acta Cryst. (1953). **6**, 293

Détermination des Oscillations d'Agitation Thermique des Atomes Engagés dans un Cristal: Cas de la Structure Type Fluorine

PAR D. CRIBIER*

Laboratoire de Physique Théorique du Collège de France, Paris, France

(Reçu le 1 juillet 1952)

The frequency and form of thermal vibrations are determined by the Fourier matrix. If the crystalline motif is composed of g atoms, this is a Hermitian matrix of order $(3g \times 3g)$ containing (for an asymmetrical crystal) $3g(3g+1)/2$ elements. Just as the crystal symmetry reduces the number of coefficients of elasticity, so it reduces the number of independent elements of the Fourier matrix and permits the algebraic nature of these elements to be determined.

In this paper the symmetry operations are applied to determine the number of independent elements in the Fourier matrix of the structure of fluorite, CaF_2 , and to determine the nature of the atomic oscillations when these oscillations are controlled by vectors parallel to the symmetry axes.

The oscillations controlled by wave vectors parallel to the tetrad or triad axes are transverse degenerate or rectilinear longitudinal. The oscillations of the calcium atoms controlled by a wave vector parallel to the diad axes are rectilinear, longitudinal or transverse. Three of the oscillations of a fluorine atom controlled by a wave vector parallel to the diad axes are rectilinear longitudinal; the six other oscillations are elliptical, the plane of vibration being defined by the diad axis parallel to the wave vector and the perpendicular tetrad axis.

1. Symbolisme et définition

La position d'un atome m, j situé dans le motif cristallin m en position j est définie par la somme des 3 vecteurs:

$$\mathbf{m} + \mathbf{j} + \mathbf{u}_j^m.$$

Si les vecteurs \mathbf{l}_i sont les périodes du milieu cristallin, ($i = 1, 2, 3$):

$$\mathbf{m} = \sum_i m_i \mathbf{l}_i \quad (m_i = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots).$$

\mathbf{m} va de l'origine du réseau, (nœud 0, 0, 0) au nœud (m_1, m_2, m_3) contenu dans le motif cristallin m .

$$\mathbf{j} = \sum_i j_i \mathbf{l}_i \quad |j_i| \leq 1.$$

\mathbf{j} va du nœud (m_1, m_2, m_3) à la position moyenne de l'atome j dans le motif cristallin.

\mathbf{u}_j^m est le vecteur élongation qui va de la position moyenne de l'atome m, j à sa position instantanée.

Faisant usage d'axes de coordonnées rectangulaires Ox_α , ($\alpha = 1, 2, 3$), V_α sera la projection orthogonale

du vecteur \mathbf{V} sur l'axe Ox_α ; μ_j est la masse de l'atome j ; on notera \bar{X} la grandeur complexe conjuguée de la grandeur X .

Les forces de rappel interatomiques sont déduites de la fonction énergie potentielle du cristal en supposant valable la loi de Hooke pour les déplacements des atomes dus à l'agitation thermique. La force de rappel globale \mathbf{F}_j^m appliquée à l'atome m, j a pour composantes:

$$F_{j\alpha}^m = \sum_{p\beta} c_{jk}^{m-p} \cdot w_k^p.$$

Les indices j et k courent de 1 à g , s'il y a g atomes par motif cristallin.

Les indices m et p courent de 1 à n , s'il y a n motifs cristallins dans le cristal.

Les coefficients c_{jk}^{m-p} sont les composantes constantes d'un tenseur C_{jk}^{m-p} du 2ème ordre dans l'espace à trois dimensions, covariant et symétrique en α et β :

$$C_{jk}^{m-p} = C_{kj}^{p-m}.$$

Les tenseurs C_{jj}^0 sont tels que:

* Stagiaire de recherches au C.N.R.S.

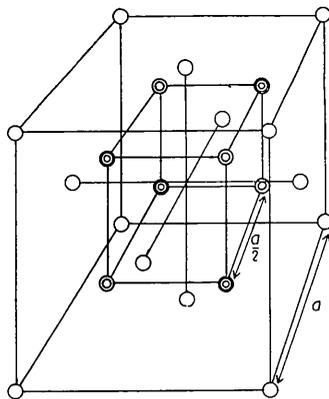
$$\sum_{pk} c_{jk}^{m-p} = 0.$$

Les ondes d'agitation thermique; la matrice de Fourier

L'oscillation globale (d'agitation thermique) accomplie par un atome m, j est décomposable en oscillations harmoniques a_j^m formant des ondes planes (Born, 1923):

$$a_j^m = \zeta_\alpha^j / \sqrt{\mu_j} \times \exp \{2i\pi[\nu t - \mathbf{A}(\mathbf{m} + \mathbf{j})]\}; \quad (1)$$

$$\zeta_\alpha^j = \varrho_\alpha^j \exp \{2i\pi\varphi_\alpha^j\}.$$



- Atome calcium $j=1$
- ⊙ Atome fluor $j=3$
- ⊗ Atome fluor $j=2$

Fig. 1.

\mathbf{A} est le vecteur d'onde, perpendiculaire au plan d'onde.

$$|\mathbf{A}| = 1/\lambda \quad (\lambda \text{ longueur d'onde}).$$

ζ^j est le vecteur propre de l'oscillation des atomes en position j . Les phases $2\pi\varphi_\alpha^j$ tiennent compte du fait que la propagation de l'onde n'est pas uniforme à travers le motif cristallin.

En appliquant le principe de d'Alembert aux oscillations harmoniques (1), nous trouvons:

$$\omega^2 \zeta_\alpha^j + \sum_{k\beta} \gamma_{\alpha\beta}^{jk} \zeta_\beta^k = 0; \quad \omega = 2\pi\nu; \quad \alpha = 1, 2, 3; \quad j = 1, 2, \dots, g, \quad (2)$$

soit $3g$ équations linéaires où les ζ_α^j sont les inconnues et dans lesquelles $\gamma_{\alpha\beta}^{jk}$ est ainsi défini:

$$\sqrt{(\mu_j \mu_k)} \gamma_{\alpha\beta}^{jk} = \exp [2i\pi\mathbf{A}(\mathbf{j} - \mathbf{k})] \sum_b c_{jk}^b \cdot \exp [2i\pi\mathbf{A}\mathbf{b}], \quad \mathbf{b} = \mathbf{m} - \mathbf{p}. \quad (3)$$

Les coefficients $\gamma_{\alpha\beta}^{jk}$ sont déterminés par la structure du milieu cristallin et le vecteur d'onde. On peut les envisager comme éléments d'une matrice hermitienne d'ordre $(3g \times 3g)$, la matrice de Fourier (Born, 1942; Laval, 1952, p. 273). Elle se décompose en g^2 matrices γ^{jk} d'ordre (3×3) . Les coefficients $\gamma_{\alpha\beta}^{jk}$ sont symétriques en α et β , comme les coefficients $c_{\alpha\beta}^b$ et dans un changement d'axes se transforment aussi comme

les composantes d'un tenseur deux fois covariant. Toutes ces propriétés restent valables quels que soient les axes choisis pour calculer la matrice γ .

Dans le symbolisme matriciel le système d'équations (2) s'écrit:

$$(\gamma + I\omega^2)\zeta = 0,$$

où I est la matrice unité et ζ une matrice à une colonne formée par les éléments ζ_α^j ; le système détermine des grandeurs ζ_α^j non toutes nulles si le déterminant

$$|\gamma + I\omega^2| = 0. \quad (4)$$

L'équation (4) est l'équation caractéristique de la matrice de Fourier, donc de degré $3g$; elle admet $3g$ racines: ω_α^2 , ($\alpha = 1, 2, 3, \dots, 3g$) toutes réelles et positives, qui sont les carrés des pulsations des oscillations dirigées par le vecteur \mathbf{A} . Les ω_α^2 sont les valeurs caractéristiques de la matrice γ ; les ζ en sont les vecteurs propres correspondants décomposables en g vecteurs propres, ζ^j , des oscillations atomiques. Seuls sont déterminés les rapports $\varrho_\alpha^j / \varrho_\beta^k$ et les différences $\varphi_\alpha^j - \varphi_\beta^k$.

Nous utiliserons aussi la matrice Γ d'éléments

$$\Gamma_{\alpha\beta}^{jk} = \sqrt{(\mu_j \mu_k)} \gamma_{\alpha\beta}^{jk}.$$

2. Application des opérations de symétrie du milieu cristallin

(A) Les éléments indépendants de la matrice de Fourier Γ

Soit un opérateur de symétrie S qui amène les atomes m_j et pk en positions m'_j et p'_k ; on sait d'après Begbie & Born (1947) que si $(\mathbf{b}' + \mathbf{j}' - \mathbf{k}') = S(\mathbf{b} + \mathbf{j} - \mathbf{k})$ alors

$$c_{j'k'}^{b'} = (SC_{jk}^b \tilde{S})_{\alpha\beta},$$

où \tilde{S} est la matrice transposée de S , d'où:

$$\Gamma_{\alpha\beta}^{j'k'} = \sum_b (SC_{jk}^b \tilde{S})_{\alpha\beta} \cdot \exp \{2i\pi\mathbf{A}[S(\mathbf{b} + \mathbf{j} - \mathbf{k})]\}. \quad (5)$$

Cette relation peut lier simplement $\Gamma_{\alpha\beta}^{j'k'}$ à $\Gamma_{\alpha\beta}^{jk}$. On le verra sur des exemples.

Exemples

(1) Pour une inversion centrée sur l'origine des coordonnées

$$c_{j'k'}^{b'} = (SC_{jk}^b \tilde{S})_{\alpha\beta} = c_{jk}^b,$$

donc $(\mathbf{b}' + \mathbf{j}' - \mathbf{k}') = S(\mathbf{b} + \mathbf{j} - \mathbf{k}) = -(\mathbf{b} + \mathbf{j} - \mathbf{k})$,

$$\Gamma^{j'k'} = \bar{\Gamma}^{jk} \quad (6)$$

quels que soient les axes de coordonnées.

(2) Pour une rotation de $2\pi/3$ radians autour de l'axe $x_1 = x_2 = x_3$

$$S = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \tilde{S} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Posons pour abrégé :

$$c_{\alpha\beta}^b = c_{\alpha\beta}, \quad c_{\alpha\beta}^{b'} = c_{\alpha\beta}'.$$

Nous avons :

$$(SC_{jk}^b \tilde{S}) = \begin{bmatrix} c_{22} & c_{23} & c_{21} \\ c_{32} & c_{33} & c_{31} \\ c_{12} & c_{13} & c_{11} \end{bmatrix} = C_{j'k'}^b = \begin{bmatrix} c'_{11} & c'_{12} & c'_{13} \\ c'_{21} & c'_{22} & c'_{23} \\ c'_{31} & c'_{32} & c'_{33} \end{bmatrix}.$$

Par conséquent $c_{\alpha\beta}' = c_{\alpha'\beta'}$ si α' et β' se déduisent de α et β par permutation circulaire : $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 1$.

De même $(\mathbf{b} + \mathbf{j}' - \mathbf{k}') = S(\mathbf{b} + \mathbf{j} - \mathbf{k})$ a pour composantes

$$x_{\alpha'} = x_{\alpha}.$$

Posons : $2\pi\mathbf{A} = \sigma\mathbf{q}$; $\sigma = 2\pi|\mathbf{A}|$; q_1, q_2, q_3 , sont les cosinus directeurs de \mathbf{A} ; alors

$$\Gamma_{\alpha\beta}^{j'k'} = \sum_b c_{\alpha'\beta'}^b \exp [i\sigma(q_1x_2 + q_2x_3 + q_3x_1)]$$

mais

$$\Gamma_{\alpha\beta}^{jk} = \sum_b c_{\alpha\beta}^b \exp [i\sigma(q_1x_1 + q_2x_2 + q_3x_3)]$$

et l'on voit en comparant ces deux formules que $\Gamma_{\alpha'\beta'}^{j'k'}$ se déduit de $\Gamma_{\alpha\beta}^{jk}$ en permutant $q_1 \rightarrow q_2 \rightarrow q_3 \rightarrow q_1$, si α' et β' sont déduits de α et β par la permutation $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 1$.

Si l'opération de symétrie considérée amène des atomes j en position j , il suffit de calculer :

$$\left. \begin{array}{l} \Gamma_{11}^{jk} \text{ d'où l'on déduit } \Gamma_{22}^{jk} \text{ et } \Gamma_{33}^{jk}, \\ \Gamma_{23}^{jk} \text{ d'où l'on déduit } \Gamma_{31}^{jk} = \Gamma_{13}^{jk} \text{ et } \Gamma_{12}^{jk} = \Gamma_{21}^{jk}. \end{array} \right\} (7)$$

On peut ainsi déterminer le nombre des éléments indépendants de la matrice de Fourier attachée au vecteur d'onde \mathbf{A} en position quelconque par rapport au milieu cristallin.

(B) Recherche de la forme réduite de la matrice Γ_n associée au vecteur d'onde \mathbf{A} parallèle à un axe de symétrie d'ordre n

Nous choisissons pour calculer la matrice de Fourier attachée à un vecteur d'onde \mathbf{A} en direction d'un axe de symétrie, des axes de coordonnées rectangulaires particuliers. Ox_1 est choisi en direction de l'axe de symétrie parallèle au vecteur d'onde \mathbf{A} , alors :

$$\Gamma_{\alpha\beta}^{jk} = \sum_b c_{\alpha\beta}^b \exp [i\sigma x_1]. \quad (8)$$

Les axes Ox_2 et Ox_3 sont pris, si possible, perpendiculaires à des plans de symétrie.

Considérons les opérateurs de symétrie qui amènent des atomes j en position j et qui, de plus, conservent la direction Ox_1 , portant le vecteur d'onde \mathbf{A} , c'est-à-dire tels que

$$S(\mathbf{b} + \mathbf{j} - \mathbf{k}) = \pm x_1.$$

Nous pouvons établir à l'aide des formules (5) et (8) des égalités de ce type :

$$\begin{aligned} \Gamma_{n\alpha\beta}^{jk} &= -\Gamma_{n\alpha\beta}^{jk} \text{ d'où l'on tire } \Gamma_{n\alpha\beta}^{jk} = 0, \\ \Gamma_{n\alpha\beta}^{jk} &= -\overline{\Gamma_{n\alpha\beta}^{jk}} \text{ d'où l'on déduit que } \Gamma_{n\alpha\beta}^{jk} \text{ est} \\ &\hspace{15em} \text{imaginaire pur,} \\ \Gamma_{n\alpha\beta}^{jk} &= \overline{\Gamma_{n\alpha\beta}^{jk}} \text{ d'où l'on déduit que } \Gamma_{n\alpha\beta}^{jk} \text{ est réel,} \\ \Gamma_{n\alpha\beta}^{jk} &= \begin{cases} \pm \Gamma_{n\gamma\delta}^{jk} \\ \pm \overline{\Gamma_{n\gamma\delta}^{jk}} \end{cases}. \end{aligned}$$

Nous dénombrons ainsi les $\Gamma_{n\alpha\beta}^{jk}$ non nuls et distincts; nous déterminons donc une forme réduite de la matrice de Fourier Γ_n ce qui permet de décomposer l'équation caractéristique de Fourier $|\gamma_n + I\omega^2| = 0$ en équations de degré moindre, de déterminer ses dégénérescences et de réduire le système d'équations linéaires $(\gamma_n + I\omega^2)\zeta = 0$ d'ordre $3g$ en systèmes d'ordre inférieur.

Nous appliquerons maintenant les résultats obtenus à une structure cristalline du type de la fluorine (CaF_2), groupe de recouvrement $O_h^5 - F_{m3m}$.

Le motif cristallin adopté est composé de trois atomes alignés sur l'axe ternaire, l'atome calcium étant central; sa position est indexée $j = 1$; les positions des atomes fluor sont indexées l'une $j = 2$, l'autre $j = 3$.

3. La matrice de Fourier d'une structure type Fluorine

Nous prenons comme axes de coordonnées les axes quaternaires du cristal. Calculons la matrice de Fourier attachée à un vecteur d'onde quelconque. L'atome calcium porte un centre de symétrie; l'inversion amène les atomes $j = 2$ en position $j = 3$ et les atomes $j = 3$ en position $j = 2$. L'axe ternaire est en direction $x_1 = x_2 = x_3$: la rotation de $2\pi/3$ autour de cet axe amène des atomes j en position j . Nous pouvons appliquer les formules (6) et (7); il reste à calculer seulement

$$\Gamma_{11}^{11}, \Gamma_{23}^{11}, \Gamma_{11}^{12}, \Gamma_{23}^{12}, \Gamma_{11}^{22}, \Gamma_{23}^{22}, \Gamma_{11}^{23}, \Gamma_{23}^{23}.$$

Nous avons pris en compte les 1ers, 2èmes, 3èmes et 4èmes voisins de chaque atome $j = 1, 2, 3$. Les α_i, β_i, \dots , sont les composantes indépendantes des tenseurs C_{jk}^b relatifs à ces voisins. Le Tableau 1 les classe.

Nous posons : $\sigma_i = a\sigma q_i/4$, a étant la longueur de l'arête de la maille cubique.

Tableau 1

	1ers voisins	2èmes voisins	3èmes voisins	4èmes voisins
Calcium $j = 1$	α_1, β_1	$\alpha_2, \beta_2, \gamma_2$	$\alpha_3, \beta_3, \gamma_3, \delta_3$	α_4, β_4
Fluor $j = 2$	α_1, β_1	$\delta_2, \varepsilon_2, \eta_2$	$\varepsilon_3, \eta_3, \theta_3$	$\alpha_3, \beta_3, \gamma_3, \delta_3$
Fluor $j = 3$	α_1, β_1	$\delta_2, \varepsilon_2, \eta_2$	$\varepsilon_3, \eta_3, \theta_3$	$\alpha_3, \beta_3, \gamma_3, \delta_3$

$$\Gamma_{11}^{11} = -4[2(\alpha_1 + \alpha_3 + 2\beta_3) + \alpha_2(1 - \cos 2\sigma_2 \cos 2\sigma_3) + \beta_2(1 - \cos 2\sigma_3 \cos 2\sigma_1 + 1 - \cos 2\sigma_1 \cos 2\sigma_2) + \alpha_4 \sin^2 2\sigma_1 + \beta_4(\sin^2 2\sigma_2 + \sin^2 2\sigma_3)],$$

$$\Gamma_{23}^{11} = -4\gamma_2 \sin 2\sigma_2 \sin 2\sigma_3,$$

$$\Gamma_{11}^{22} = -2[2(\alpha_1 + \alpha_3 + 2\beta_3) + \delta_2 + 2\varepsilon_2 + 2\varepsilon_3(1 - \cos 2\sigma_2 \cos 2\sigma_3) + 2\eta_3(1 - \cos 2\sigma_3 \cos 2\sigma_1 + 1 - \cos 2\sigma_1 \cos 2\sigma_2)],$$

$$\Gamma_{23}^{22} = -4\theta_3 \sin 2\sigma_2 \sin 2\sigma_3,$$

$$\Gamma_{11}^{12} = 4[\alpha_1(\cos \sigma_1 \cos \sigma_2 \cos \sigma_3 + i \sin \sigma_1 \sin \sigma_2 \sin \sigma_3) + \alpha_3(\cos 3\sigma_1 \cos \sigma_2 \cos \sigma_3 - i \sin 3\sigma_1 \sin \sigma_2 \sin \sigma_3) + \beta_3(\cos 3\sigma_2 \cos \sigma_3 \cos \sigma_1 + \cos 3\sigma_3 \cos \sigma_1 \cos \sigma_2 - i \sin 3\sigma_2 \sin \sigma_3 \sin \sigma_1 - i \sin 3\sigma_3 \sin \sigma_1 \sin \sigma_2)],$$

$$\Gamma_{23}^{12} = -4[\beta_1(\cos \sigma_1 \sin \sigma_2 \sin \sigma_3 + i \sin \sigma_1 \cos \sigma_2 \cos \sigma_3) + \delta_3(\cos 3\sigma_1 \sin \sigma_2 \sin \sigma_3 - i \sin 3\sigma_1 \cos \sigma_2 \cos \sigma_3) + \gamma_3(\sin 3\sigma_2 \sin \sigma_3 \cos \sigma_1 + \sin 3\sigma_3 \sin \sigma_2 \cos \sigma_1 - i \cos 3\sigma_2 \cos \sigma_3 \sin \sigma_1 - i \cos 3\sigma_3 \cos \sigma_2 \sin \sigma_1)],$$

$$\Gamma_{11}^{23} = 2[\delta_2 \cos 2\sigma_1 + \varepsilon_2(\cos 2\sigma_2 + \cos 2\sigma_3)],$$

$$\Gamma_{23}^{23} = -2i\eta_2 \sin 2\sigma_1.$$

4. Les oscillations principales $|\mathbf{A}| = 0$

La matrice de Fourier associée au vecteur d'onde $|\mathbf{A}| = 0$ est réelle. Nous la désignerons par γ_0 . Les deux racines différentes de zéro de l'équation $|\gamma_0 + I\omega^2| = 0$ sont les carrés des pulsations des oscillations 'principales'. (Les réseaux d'atomes congruents oscillent sans se déformer les uns par rapport aux autres.)

Les éléments de la matrice Γ_0

La symétrie ternaire impose, cf. (7), (q_1, q_2, q_3 étant nuls):

$$\Gamma_{011}^{jk} = \Gamma_{022}^{jk} = \Gamma_{033}^{jk}; \Gamma_{023}^{jk} = \Gamma_{031}^{jk} = \Gamma_{012}^{jk}.$$

La rotation de π radians autour de l'axe quaternaire Ox_2 , impose:

$$\Gamma_{023}^{jk} = 0,$$

et, d'après (6),

$$\Gamma_0^{12} = \Gamma_0^{13}; \Gamma_0^{22} = \Gamma_0^{33}.$$

De plus, on démontre que pour toutes les structures cristallines,

$$\sum_j \Gamma_{0\alpha\beta}^{jk} = 0.$$

Les éléments non nuls et distincts de la matrice Γ_0 sont donc:

$$\Gamma_{011}^{12}, \Gamma_{011}^{23}.$$

$$\Gamma_0 = \begin{bmatrix} -2\Gamma_0^{12} & \Gamma_0^{12} & \Gamma_0^{12} \\ \Gamma_0^{12} & -\Gamma_0^{12} - \Gamma_0^{23} & \Gamma_0^{23} \\ \Gamma_0^{12} & \Gamma_0^{23} & -\Gamma_0^{12} - \Gamma_0^{23} \end{bmatrix}$$

$$\text{avec } \Gamma_0^{jk} = \begin{bmatrix} \Gamma_{011}^{jk} & 0 & 0 \\ 0 & \Gamma_{011}^{jk} & 0 \\ 0 & 0 & \Gamma_{011}^{jk} \end{bmatrix}$$

L'équation caractéristique

Pour simplifier le calcul du déterminant $|\gamma_0 + I\omega^2|$ nous effectuons la transformation:

$$|T_0(\gamma_0 + I\omega^2)T_0^{-1}|.$$

$$T_0 = T_0^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Il vient:

$$|\gamma_0 + I\omega^2| = \begin{vmatrix} D_0 & 0 & 0 \\ 0 & D_0 & 0 \\ 0 & 0 & D_0 \end{vmatrix} = |D_0|^3,$$

avec

$$|D_0| = \begin{vmatrix} x + \gamma_{011}^{11} & \gamma_{011}^{12} & \gamma_{011}^{12} \\ \gamma_{011}^{12} & x + \gamma_{011}^{22} & \gamma_{011}^{23} \\ \gamma_{011}^{12} & \gamma_{011}^{23} & x + \gamma_{011}^{22} \end{vmatrix}$$

et $x = \omega^2$.

Effectuons une nouvelle transformation du déterminant $|D_0|$ au moyen de la matrice S_0 , à savoir:

$$|S_0 D_0 S_0^{-1}| = |D_0|,$$

avec

$$S_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

et développons $|S_0 D_0 S_0^{-1}|$. Nous obtenons l'équation caractéristique sous forme algébrique simple.

$$|\gamma_0 + Ix| = x^3 [x - \Gamma_{011}^{12}(1/\mu_2 + 2/\mu_1)]^3 \times [x - 1/\mu_2(\Gamma_{011}^{12} + 2\Gamma_{011}^{23})]^3 = 0. \quad (9)$$

Les vecteurs propres des oscillations principales

Le système d'équations linéaires d'ordre 9 $(\gamma_0 + I\omega^2)\zeta = 0$ qui détermine les vecteurs propres des oscillations est identique au système $[T_0(\gamma_0 + I\omega^2)T_0^{-1}]T_0\zeta = 0$ et se décompose donc en trois systèmes identiques entre eux, d'ordre 3.

$$D_0\zeta_\alpha = (S_0 D_0 S_0^{-1})S_0\zeta_\alpha = 0 \quad (\alpha = 1, 2, 3), \quad (10)$$

ζ_α étant la matrice à une colonne d'éléments: $\zeta_{\alpha 1}^1, \zeta_{\alpha 2}^2, \zeta_{\alpha 3}^3$.

A la racine

$$x = (1/\mu_2)(\Gamma_{011}^{12} + 2\Gamma_{011}^{23})$$

de l'équation (9) est associée la solution

$$\zeta_\alpha^1 = \zeta_\alpha^2 + \zeta_\alpha^3 = 0$$

du système (10). Le vecteur propre de l'oscillation du réseau $j = 2$ est opposé à celui de l'oscillation du réseau $j = 3$, sa direction étant arbitraire; le réseau calcium reste au repos. Cette vibration principale est

génératrice de la raie Raman $n = 322 \text{ cm.}^{-1}$ (Press, 1950).

A la racine $x = \Gamma_{011}^{12}(1/\mu_2 + 2/\mu_1)$ de l'équation (9) est associée la solution $\zeta_\alpha^2 = \zeta_\alpha^3$, $\zeta_\alpha^1 = -k^2 \zeta_\alpha^2$ du système (10). Le vecteur propre de l'oscillation du réseau des ions positifs étant opposé à celui de l'oscillation des réseaux des ions négatifs, cette vibration principale crée une polarisation périodiquement variable du milieu cristallin; la bande d'absorption dans l'infra-rouge à $51,5 \mu$ lui est attribuée (Parodi, 1938, p. 116).

5. Les oscillations dirigées par un vecteur d'onde parallèle à l'axe quaternaire

Les éléments de la matrice Γ_4 associée aux vecteurs d'onde parallèles à l'axe quaternaire

Nous utilisons les axes de coordonnées rectangulaires

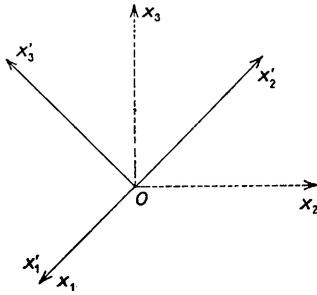


Fig. 2.

Ox'_α (Fig. 2) dont voici les cosinus directeurs rapportés aux axes quaternaires:

	Ox_1	Ox_2	Ox_3
Ox'_1	1	0	0
Ox'_2	0	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$
Ox'_3	0	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$

Ox'_1 est l'axe quaternaire qui porte A,
 Ox'_2 est un axe binaire,
 Ox'_3 est un axe binaire.

La rotation de π radians autour de l'axe quaternaire Ox'_1 impose:

$$\Gamma_{412}^{jk} = \Gamma_{413}^{jk} = 0.$$

Le mirage dans le plan $x'_2 = 0$ impose:

$$\Gamma_{423}^{jk} = 0.$$

La rotation de $\pi/4$ radians autour de l'axe Ox'_1 , suivie d'une inversion de centre O impose:

$$\Gamma_{422}^{jk} = \overline{\Gamma_{433}^{jk}}, \quad \Gamma_{411}^{jk} \text{ réel.}$$

D'après (6), $\Gamma_4^{12} = \overline{\Gamma_4^{13}}$, $\Gamma_4^{22} = \Gamma_4^{33}$, (les matrices Γ^{ij} étant réelles).

Les éléments non nuls et distincts de la matrice Γ_4 sont donc:

$\Gamma_{4\alpha\alpha}^{11}, \Gamma_{4\alpha\alpha}^{22}$ ($\alpha = 1, 2$), $\Gamma_{411}^{12}, \Gamma_{411}^{23}$; soit 6 éléments réels.
 $\Gamma_{422}^{12}, \Gamma_{422}^{23}$; soit 2 éléments complexes.

L'équation caractéristique

Pour obtenir l'équation caractéristique $|\gamma_4 + I\omega^2| = 0$ sous forme algébrique on développera le déterminant suivant:

$$|T_0(\gamma_4 + I\omega^2)T_0^{-1}| = \begin{vmatrix} D_1^4 & 0 & 0 \\ 0 & D_2^4 & 0 \\ 0 & 0 & \overline{D_2^4} \end{vmatrix} = |D_1^4| \cdot |D_2^4|^2,$$

avec

$$|D_\alpha^4| = \begin{vmatrix} x + \gamma_{4\alpha\alpha}^{11} & \gamma_{4\alpha\alpha}^{12} & \overline{\gamma_{4\alpha\alpha}^{12}} \\ \overline{\gamma_{4\alpha\alpha}^{12}} & x + \gamma_{4\alpha\alpha}^{22} & \gamma_{4\alpha\alpha}^{23} \\ \gamma_{4\alpha\alpha}^{12} & \overline{\gamma_{4\alpha\alpha}^{23}} & x + \gamma_{4\alpha\alpha}^{22} \end{vmatrix}$$

et $x = \omega^2$.

Nous pouvons à nouveau remplacer le déterminant $|D_1^4|$ par le déterminant $|S_0 D_1^4 S_0^{-1}|$ et l'équation caractéristique de Fourier associée au vecteur d'onde A parallèle à un axe quaternaire est ainsi décomposée en un produit de quatre équations: une équation de 1er degré, une équation du 2ème degré, et deux équations identiques du 3ème degré.

$$(x + \gamma_{411}^{22} - \gamma_{411}^{23})[(x + \gamma_{411}^{11})(x + \gamma_{411}^{22} + \gamma_{411}^{23}) - 2(\gamma_{411}^{12})^2][|D_2^4|]^2 = 0$$

Les vecteurs propres des oscillations

Le système d'équations linéaires d'ordre 9 $(\gamma_4 + I\omega^2)\zeta = 0$ qui détermine les vecteurs propres des oscillations dirigées par un vecteur d'onde parallèle à un axe quaternaire est identique au système $[T_0(\gamma_4 + I\omega^2)T_0^{-1}]T_0\zeta = 0$ et se décompose donc en trois systèmes d'ordre 3: $D_1^4\zeta_1 = 0$; $D_2^4\zeta_2 = 0$; $\overline{D_2^4}\zeta_3 = 0$. Si ω^2 est racine de $|D_1^4| = 0$, le système $D_1^4\zeta_1 = 0$ est régulier, les deux autres systèmes n'admettent que la solution nulle; ω est alors la pulsation d'oscillations rectilignes longitudinales. De même si ω^2 est racine de $|D_2^4| = 0$, ω est la pulsation d'oscillations transversales dégénérées.

Les oscillations rectilignes longitudinales

A la racine $x = \gamma_{411}^{23} - \gamma_{411}^{22}$ de l'équation $|D_1^4| = 0$ est associée la solution $\zeta_1^1 = \zeta_1^2 + \zeta_1^3 = 0$ du système $(S_0 D_1^4 S_0^{-1})S_0\zeta_1 = 0$. L'atome en position $j = 1$ reste au repos. Le vecteur propre de l'oscillation des atomes en position $j = 2$ est opposé à celui de l'oscillation des atomes en position $j = 3$.

A chacune des deux autres racines de $|D_1^4| = 0$, est associée une solution $\zeta_1^2 = \zeta_1^3$; $\zeta_1^1 = k\zeta_1^2$ du système $(S_0 D_1^4 S_0^{-1})S_0\zeta_1 = 0$. Les vecteurs propres des oscillations des atomes en position $j = 2$ et $j = 3$ sont égaux, proportionnels à celui de l'oscillation des atomes en position $j = 1$.

Les oscillations transversales

Elles sont dégénérées; pour les décrire, on peut choisir deux solutions orthogonales du système d'équations linéaires $D_2^4 \zeta_2 = 0$, $\bar{D}_2^3 \zeta_3 = 0$ système d'ordre 6, de rang 4.

6. Les oscillations dirigées par un vecteur d'onde parallèle à l'axe ternaire

Les éléments de la matrice Γ_3 associée aux vecteurs d'onde parallèles à l'axe ternaire

Nous utilisons les axes de coordonnées rectangulaires Ox_x''' (Fig. 3) dont voici les cosinus directeurs rapportés aux axes quaternaires:

	Ox_1	Ox_2	Ox_3
Ox_1'''	$1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$
Ox_2'''	0	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$
Ox_3'''	$-2/\sqrt{6}$	$1/\sqrt{6}$	$1/\sqrt{6}$

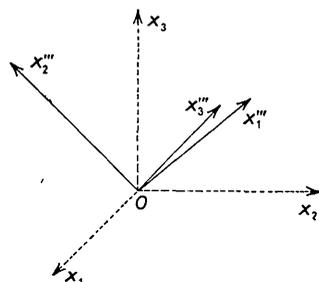


Fig. 3.

Ox_1''' est l'axe ternaire qui porte A,
 Ox_2''' est un axe binaire,
 Ox_3''' est un axe perpendiculaire aux deux premiers.

La rotation de $2\pi/3$ radians autour de l'axe Ox_1''' impose: $\Gamma_{3\alpha\beta}^{jk} = 0$ si $\alpha \neq \beta$ et $\Gamma_{322}^{jk} = \Gamma_{333}^{jk}$.

D'après (6)

$$\Gamma_3^{12} = \overline{\Gamma_3^{13}}; \Gamma_3^{22} = \Gamma_3^{33},$$

Les éléments non nuls et distincts de la matrice Γ_3 sont donc:

$$\Gamma_{311}^{11}, \Gamma_{322}^{11}, \Gamma_{311}^{22}, \Gamma_{322}^{22}; \text{ soit 4 éléments réels.}$$

$$\Gamma_{311}^{12}, \Gamma_{322}^{12}, \Gamma_{311}^{23}, \Gamma_{322}^{23}; \text{ soit 4 éléments complexes.}$$

L'équation caractéristique

Pour obtenir l'équation caractéristique $|\gamma_3 + I\omega^2| = 0$ sous forme algébrique on développera le déterminant suivant:

$$|T_0(\gamma_3 + I\omega^2)T_0^{-1}| = \begin{vmatrix} D_1^3 & 0 & 0 \\ 0 & D_2^3 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{D}_2^3 \end{vmatrix} = |D_1^3| \cdot |D_2^3|^2,$$

avec

$$|D_\alpha^3| = \begin{vmatrix} x + \gamma_{3\alpha\alpha}^{11} & \gamma_{3\alpha\alpha}^{12} & \overline{\gamma_{3\alpha\alpha}^{12}} \\ \overline{\gamma_{3\alpha\alpha}^{12}} & x + \gamma_{3\alpha\alpha}^{22} & \gamma_{3\alpha\alpha}^{23} \\ \gamma_{3\alpha\alpha}^{12} & \overline{\gamma_{3\alpha\alpha}^{23}} & x + \gamma_{3\alpha\alpha}^{33} \end{vmatrix}$$

et $x = \omega^2$.

L'équation caractéristique de Fourier associée à un vecteur d'onde A parallèle à un axe ternaire est ainsi décomposée en un produit de trois équations du 3ème degré, dont deux sont identiques.

Les vecteurs propres des oscillations

Les vecteurs propres des oscillations dirigées par un vecteur d'onde parallèle à un axe ternaire sont déterminés par le système d'ordre 9, $[T_0(\gamma_3 + I\omega^2)T_0^{-1}](T_0\zeta) = 0$ qui se décompose en trois systèmes du 3ème ordre.

$$D_\alpha^3 \zeta_\alpha = 0, \alpha = (1, 2, 3).$$

Aux racines de l'équation $|D_1^3| = 0$ sont associées des oscillations rectilignes longitudinales dont les solutions du système $D_1^3 \zeta_1 = 0$ sont les vecteurs propres.

Aux racines de l'équation $|D_2^3| = 0$ sont associées des oscillations transversales dégénérées; pour les décrire on peut choisir deux solutions orthogonales du système d'équations linéaires $D_2^3 \zeta_2 = 0$, $\bar{D}_2^3 \zeta_3 = 0$ système d'ordre 6, de rang 4.

7. Les oscillations dirigées par un vecteur d'onde parallèle à l'axe binaire

Les éléments de la matrice Γ_2 associée aux vecteurs d'onde parallèles à l'axe binaire

Nous utilisons les axes de coordonnées rectangulaires

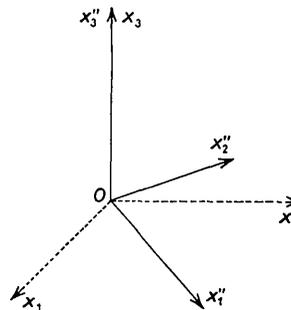


Fig. 4.

Ox_x'' (Fig. 4) dont voici les cosinus directeurs rapportés aux axes quaternaires:

	Ox_1	Ox_2	Ox_3
Ox_1''	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	0
Ox_2''	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	0
Ox_3''	0	0	1

Ox_1'' est l'axe binaire qui porte A,
 Ox_2'' est un axe binaire,
 Ox_3'' est un axe quaternaire.

Le mirage dans le plan $x_2'' = 0$ impose:

$$\Gamma_{212}^{jk} = \Gamma_{223}^{jk} = 0.$$

Le mirage dans le plan $x_1'' = 0$ impose que Γ_{213}^{jk} soit imaginaire pur et $\Gamma_{2\alpha\alpha}^{jk}$ réel, et, d'après (6)

$$\Gamma_2^{12} = \overline{\Gamma_2^{13}}, \quad \Gamma_2^{22} = \Gamma_2^{33}.$$

Les éléments non nuls et distincts de la matrice Γ_2 sont donc:

$\Gamma_{2\alpha\alpha}^{11}, \Gamma_{2\alpha\alpha}^{22}, \Gamma_{2\alpha\alpha}^{12}, \Gamma_{2\alpha\alpha}^{23}$, ($\alpha = 1, 2, 3$); soit 12 éléments réels.

$\Gamma_{213}^{12}, \Gamma_{213}^{23}$; soit 2 éléments imaginaires purs.

L'équation caractéristique

On obtiendra l'équation caractéristique $|\gamma_2 + I\omega^2| = 0$ sous forme algébrique en développant le déterminant suivant:

$$|\gamma_2 + I\omega^2|' = |T_1 S_1 T_0 (\gamma_2 + I\omega^2) T_0^{-1} S_1^{-1} T_1^{-1}|,$$

S_1 et T_1 étant des matrices orthogonales définies ci-dessous:

$$S_1 = \begin{bmatrix} S_0 & 0 & 0 \\ 0 & S_0 & 0 \\ 0 & 0 & S_0 \end{bmatrix}, \quad S_1^{-1} = \begin{bmatrix} S_0^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & S_0^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & S_0^{-1} \end{bmatrix},$$

$$T_1 = T_1^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ & & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & 1 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & & 1 & 0 & 0 \\ & & & & & & & 0 & 0 \\ & & & & & & & & 1 \end{bmatrix}.$$

$$|\gamma_2 + I\omega^2|' = \begin{vmatrix} D_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & D_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & D_3^2 \end{vmatrix} = |D_1^2| \cdot |D_2^2| \cdot |D_3^2|$$

avec, si nous posons $x = \omega^2$,

$$|D_1^2| = \begin{vmatrix} x + \gamma_{211}^{11} & \sqrt{2} \cdot \gamma_{213}^{12} & \sqrt{2} \cdot \gamma_{211}^{12} \\ -\sqrt{2} \cdot \gamma_{213}^{12} & x + \gamma_{233}^{22} - \gamma_{233}^{23} & \gamma_{213}^{23} \\ \sqrt{2} \cdot \gamma_{211}^{12} & -\gamma_{213}^{23} & x + \gamma_{211}^{22} + \gamma_{211}^{23} \end{vmatrix};$$

$$|D_3^2| = \begin{vmatrix} x + \gamma_{233}^{11} & \sqrt{2} \cdot \gamma_{213}^{12} & \sqrt{2} \cdot \gamma_{233}^{12} \\ -\sqrt{2} \cdot \gamma_{213}^{12} & x + \gamma_{211}^{22} - \gamma_{211}^{23} & \gamma_{213}^{23} \\ \sqrt{2} \cdot \gamma_{233}^{12} & -\gamma_{213}^{23} & x + \gamma_{233}^{22} + \gamma_{233}^{23} \end{vmatrix};$$

$$|D_2^2| = \begin{vmatrix} x + \gamma_{222}^{11} & 0 & \sqrt{2} \cdot \gamma_{222}^{12} \\ 0 & x + \gamma_{222}^{22} - \gamma_{222}^{23} & 0 \\ \sqrt{2} \cdot \gamma_{222}^{12} & 0 & x + \gamma_{222}^{22} + \gamma_{222}^{23} \end{vmatrix}.$$

L'équation caractéristique de Fourier associée à un vecteur d'onde \mathbf{A} parallèle à un axe binaire est ainsi décomposée en un produit de quatre équations: une équation du 1er degré, une équation du second degré, et deux équations du 3ème degré.

$$(x + \gamma_{222}^{22} - \gamma_{222}^{23}) [(x + \gamma_{222}^{11}) (x + \gamma_{222}^{22} + \gamma_{222}^{23}) - 2(\gamma_{222}^{12})^2] [|D_1^2|] [|D_3^2|] = 0.$$

Les vecteurs propres des oscillations

Les vecteurs propres des oscillations dirigées par un vecteur d'onde parallèle à un axe binaire sont déterminés par le système d'ordre 9

$$(\gamma_2 + I\omega^2)' \cdot (T_1 S_1 T_0 \zeta) = 0,$$

qui se décompose en trois systèmes du 3ème ordre,

$$D_{\alpha\zeta\alpha}^2 = 0 \quad (\alpha = 1, 2, 3),$$

dans lesquels ζ'_α sont les matrices à une colonne:

$$\zeta'_1 = \begin{bmatrix} \zeta_1^1 \\ 1/\sqrt{2}(\zeta_2^2 - \zeta_3^3) \\ 1/\sqrt{2}(\zeta_2^2 + \zeta_3^3) \end{bmatrix}, \quad \zeta'_2 = \begin{bmatrix} \zeta_2^1 \\ 1/\sqrt{2}(\zeta_2^2 - \zeta_3^3) \\ 1/\sqrt{2}(\zeta_2^2 + \zeta_3^3) \end{bmatrix},$$

$$\zeta'_3 = \begin{bmatrix} \zeta_3^1 \\ 1/\sqrt{2}(\zeta_2^2 - \zeta_3^3) \\ 1/\sqrt{2}(\zeta_2^2 + \zeta_3^3) \end{bmatrix}.$$

Aux racines de l'équation $|D_2^2| = 0$ sont associées des oscillations rectilignes suivant l'axe Ox_2'' , donc transversales, mais hormis ce caractère, en tous points analogues aux oscillations longitudinales dirigées par le vecteur d'onde parallèle à l'axe quaternaire.

Aux racines de l'équation $|D_1^2| = 0$ sont associées des oscillations rectilignes suivant l'axe Ox_1'' de l'atome indexé $j = 1$, les atomes indexés $j = 2$ et $j = 3$ accomplissant des oscillations elliptiques de sens opposés dans le plan $x_1'' Ox_3''$. De même aux racines de l'équation $|D_3^2| = 0$ sont associées des oscillations rectilignes suivant l'axe Ox_3'' de l'atome indexé $j = 1$, les atomes indexés $j = 2$ et $j = 3$ accomplissant des oscillations elliptiques de sens opposés dans le plan $x_1'' Ox_2''$.

8. Conclusion

Ces résultats relatifs à la forme des oscillations atomiques, complétés par le calcul numérique en première approximation de la dispersion des fréquences et de la variation des vecteurs propres en fonction du vecteur d'onde, préparent une étude expérimentale de la diffusion des rayons X par les ondes d'agitation thermique dans le cristal de fluorine.

Je remercie Monsieur J. Laval, Professeur au Collège de France, de m'avoir proposé ce sujet et d'avoir guidé mon travail.

Références

BORN, M. (1923). *Atomtheorie des Festen Zustandes*. Leipzig: Teubner.
 BORN, M. (1942). *Rep. Phys. Soc. Progr. Phys.* **9**, 294.

BEGBIE, G. H. & BORN, M. (1947). *Proc. Roy. Soc. A*, **188**, 186.
 LAVAL, J. (1952). *L'état solide*, p. 273. Rapports et Discussions, Congrès Solvay 1951. Bruxelles: Stoops.
 PARODI, M. (1938). Thèse, 116. Paris: Hermann.
 PRESS, D. C. (1950). *Proc. Indian Acad. Sci. A*, **31**, 56.

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**, 300

Crystal structure of *n*-aliphatic acid hydrazides. By L. H. JENSEN, *Department of Anatomy, School of Medicine, University of Washington, Seattle 5, Wash., U.S.A.* and E. C. LINGAFELTER, *Department of Chemistry and Chemical Engineering, University of Washington, Seattle 5, Wash., U.S.A.*

(Received 21 October 1952 and in revised form 10 November 1952)

In the course of investigating the structures of paraffin chain compounds, the *n*-aliphatic acid monosubstituted hydrazides have been studied.

Single crystals of hexanoic, heptanoic, octanoic, and nonanoic acid hydrazides were grown (these will be designated C₆, C₇, C₈ and C₉ hydrazides), and oscillation and Weissenberg photographs about the *a* and *b* axes were taken using Cu K α radiation. Preliminary dimensions of the monoclinic unit cells and densities are listed in Table 1.

The space group is either *Aa* or *A2/a*; with 8 mole-

cules in the unit cell, *A2/a* is probable. This was confirmed by applying to $\{h0l\}$ of C₇ hydrazide the modification of Wilson's ratio test suggested by Howells, Phillips & Rogers (1950). The distribution of intensities follows fairly well that to be expected from a centrosymmetric projection (Fig. 1).

Intensities were estimated by eye for $\{h0l\}$ of C₇ and

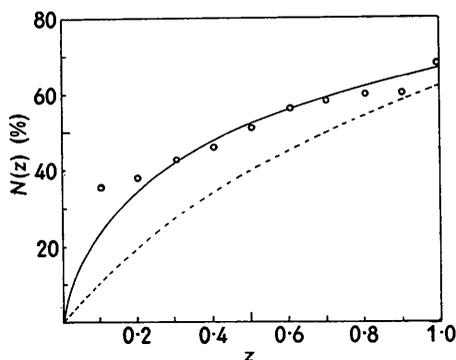


Fig. 1. Plot of $N(z)$ v. z for $\{h0l\}$ of heptanoic acid hydrazide. Solid line, centrosymmetric; broken line, non-centrosymmetric.

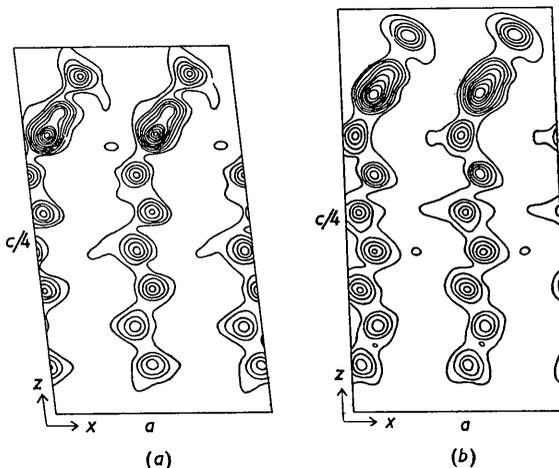


Fig. 2. Projection on (010) for (a) C₇ and (b) C₈ hydrazides. Contours at intervals of 1.5 e.Å⁻². Origin may be as shown or at $\frac{1}{2}$, 0. Correct choice will be indicated by F_{hkl} or F_{hk0} .

Table 1. *Dimensions of unit cells and densities*

	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	β	Density (g.cm. ⁻³)	
					Exp.	Calc.*
(C ₆)C ₅ H ₁₁ CONHNH ₂	7.49 Å	4.88 Å	43.47 Å	91° 16'	1.12	1.09
(C ₇)C ₆ H ₁₃ CONHNH ₂	7.44	4.88	48.60	96 14	1.09	1.09
(C ₈)C ₇ H ₁₅ CONHNH ₂	7.46	4.87	53.47	91 20	1.08	1.08
(C ₉)C ₈ H ₁₇ CONHNH ₂	7.44	4.87	58.73	95 4	1.07	1.08

* Assuming 8 molecules per unit cell.