

analyser channel range coincides with the useful range of white radiation.

The success of the technique depends on the linearity of response to quanta of different energies which the proportional counter main gas constituent possesses. Curran *et al.* (1949) have shown that for argon up to an energy of 40 keV. linearity is preserved to within < 0·01%. The wavelength distribution of white radiation and absorption characteristics of the counter must be accurately known and maintained, the former demanding good X-ray tube stability such as is achieved in the system developed by Stone (1955); this maintains output constant to within 0·3% over long intervals, which is adequate for the purpose in view.

The lattice parameter  $a$  for cubic crystals may be found from a set of functions of the form

$$a = \frac{1}{m} \sum_1^m n \lambda \frac{\sqrt{(h^2 + k^2 + l^2)}}{2 \sin \theta},$$

where  $m$  is the number of observations.

The error ( $\sigma_a$ ) associated with  $a$  has two main components due to wavelength and angular imprecision; thus

$$\sigma_a^2 = \sigma_\lambda^2 + \sigma_\theta^2.$$

Edmunds, Lipson & Steeple (1955) show that  $\sigma_\theta < \sigma_\lambda$ , so that  $\sigma_a \approx \sigma_\lambda$ .

If we have  $m$  Laue diffraction spots indexed, then the standard error of  $a$ , expressed as a percentage of the mean, is

$$\frac{100 \sigma_a}{\sqrt{m} a} = \frac{100 \sigma_\lambda}{\sqrt{m} \lambda} = \frac{0.05}{\sqrt{m}} = 0.005\%, \text{ for } m = 100.$$

Thus in a particular case  $a$  could be computed accurately to 1 part in  $10^4$ , roughly an order of magnitude worse than in a precision analysis. We could then proceed with a structure analysis and refinement, which in many instances would provide data from more complicated sets of planes which are extremely sensitive to small shifts in atomic parameters.

Mention might also be made of the possible use of this technique in elucidating the spurious pole figure maxima which occur in orientation studies in metals (Geisler, 1954). It is felt that such procedures will be of considerable use to metallurgical crystallographers.

My thanks are due to the International Wool Secretariat for a Research Fellowship, during the tenure of which this work was undertaken, and to Dr J. Sikorski and Mr H. J. Woods for stimulating discussion.

### References

- COCHRAN, W. (1950). *Acta Cryst.* **3**, 268.
- CURRAN, S. C., ANGUS J. & COCKROFT, A. L. (1949). *Phil. Mag.* **40**, 36.
- EDMUND, I. G., LIPSON, H. & STEEPLE, H. (1955). *X-ray Diffraction of Polycrystalline Materials*, chap. 15. London: Institute of Physics.
- GEISLER, A. H. (1954). *J. Appl. Phys.* **25**, 1245.
- HUTCHINSON, G. W. & SCARROTT, G. G. (1951). *Phil. Mag.* **42**, 792.
- LANG, A. R. (1952). *Proc. Phys. Soc. A*, **65**, 372.
- STONE, R. G. (1955). *J. Sci. Instrum.* **32**, 8.
- TITTERTON, E. W. (1953). *J. Brit. Inst. Rad. Engs.* **13**, 173.
- VALENTINE, J. M. (1952). *Proc. Roy. Soc. A*, **211**, 75.

*Acta Cryst.* (1956). **9**, 321

**On the use of central inclination Weissenberg photographs in studies of large unit cells.** By EDGAR L. EICHHORN,\* University of Amsterdam, The Netherlands, and KARST HOOGSTEEN,\* University of Groningen, The Netherlands

(Received 25 November 1955 and in revised form 16 January 1956)

The construction of most commercially available Weissenberg apparatus is unfortunately such that the reflections with low  $\theta$  values obtained from crystals with very short reciprocal spacings are intercepted by the beam stop, and cannot be measured. There exist round-about ways to remedy this situation, e.g. additional oscillation photographs, substitution of  $F_c$  for  $F_o$  in later stages of refinement, and, of course, the use radiation of longer wavelength. A more practical procedure would appear to be the following:

A situation is created where the circle of reflection is smaller and the Weissenberg spots are therefore recorded more spread out on the film. This may be achieved by skewing the camera so that the zero layer is photographed at non-orthogonal incidence of the X-ray beam.

The degree of non-orthogonality (i.e. the angle  $\mu$ ) will be dictated by the reduction of the circle of reflection that one wishes to achieve. The angle  $\mu$  can therefore be chosen at will, within the limits of the instrument.

The method is here applied to zero layers, since it is on such layers that reflections with lowest  $\theta$  values generally occur.

In practice the procedure adopted is simply this: The camera is skewed to the desired angle  $\mu$ , and the layer-line screen is aligned to bracket the direct beam in this chosen general inclination position; this will record the zero layer, and it can be shown that the reflections will appear on the film in expanded positions as though a wavelength  $\lambda/\cos \mu$  had been used. This 'long wavelength effect' is thus achieved without change of the target. On most modern Weissenberg cameras at  $40^\circ$  non-orthogonality can be obtained, i.e. an enlargement factor of about 1·3.

\* Present address: Gates and Crellin Laboratories, California Institute of Technology, Pasadena, California, U.S.A.

*Acta Cryst.* (1956). 9, 322

**Les groupes de translation non primitifs et la méthode statistique.** Par E. F. BERTAUT, Laboratoire d'Électrostatique et de Physique du Métal, Institut Fourier, Grenoble, France

(Reçu le 12 janvier 1956)

Dans cette note on généralise l'emploi de la méthode statistique pour les groupes de translation non primitifs. Les notations sont celles du mémoire (Bertaut, 1955) que cette note complète. Le facteur de structure normalisé continue à être défini par

$$E(h) = \sum_{j=1}^t \varphi_j(h) \xi_j(h) \quad (1)$$

( $\xi$  partie trigonométrique;  $\varphi$  facteur atomique 'modifié';  $t$  nombre de positions indépendantes).

Nous discuterons d'abord les propriétés de  $\xi$ , ensuite celles de  $\varphi$ .

Soit  $T$  un groupe de translation non primitif ( $A, B, C, I, R, F$ ) d'ordre  $\tau$  ( $\tau = 2$  pour  $A, B, C, I$ ;  $\tau = 3$  pour  $R$ ;  $\tau = 4$  pour  $F$ ). Si  $n$  est l'ordre de symétrie (= nombre de points équivalents) dans le groupe primitif  $P$ , l'ordre de symétrie  $m$  dans le groupe correspondant  $T$  sera

$$m = \tau n. \quad (2)$$

Notons par  $\xi_T$  et  $\xi_P$  les parties trigonométriques correspondantes des facteurs de structure. Quand  $\xi_T \neq 0$ , on a

$$\xi_T = \tau \xi_P. \quad (3)$$

Rappelons que dans le groupe  $P$  on a pour une réflexion générale

$$\overline{\xi_P^2} = n, \quad (4)$$

et pour une réflexion spéciale de poids statistique  $p$

$$\overline{\xi_P^2} = pn. \quad (5)$$

De (3) et (4) on déduit que pour une réflexion générale

$$\overline{\xi_T^2} = \tau^2 n = \tau m. \quad (6)$$

L'ordre de translation  $\tau$  d'un groupe  $T$  agit donc exactement comme le poids statistique  $p$  dans un groupe  $P$  (c'est à dire le nombre de points équivalents est multiplié par un facteur  $\tau$ ).

Plus généralement on a pour une réflexion de poids  $p$

$$\overline{\xi_T^2} = \tau pm. \quad (7)$$

Pour les groupes  $P$  les produits  $\xi(h)\xi(h')$ , et les puissances  $\xi^2$ ,  $\xi^3$  et  $\xi^4$  ont été linéarisées sous la forme

$$\sum_s \xi(H_s) \quad (8)$$

dans des tables (Bertaut & Dulac, 1955). Pour les produits et puissances correspondantes des groupes  $T$  les formes linéaires (8) des tables restent valables à condition de les multiplier par  $\tau$  pour les produits et puissances d'ordre deux, par  $\tau^2$  pour les produits et puissances d'ordre trois etc.

$\varphi$  dans (1) est toujours défini de façon que  $E(h)$  soit normalisé ( $\overline{E(h)^2} = 1$ ), c'est à dire tel que

$$\varphi_j(h) = f_j(h)/\sqrt{\overline{F(h)^2}}. \quad (9)$$

On a donc dans un groupe de translation  $T$  pour une réflexion de poids statistique  $p$

$$\varphi_j(h) = f_j(h)/\sqrt{\left(\sum_{j=1}^t p \tau m_j f_j(h)^2\right)}. \quad (10)$$

Souvent il est possible de remplacer  $f_j(h)$  par le nombre  $Z_j$  d'électrons sur l'atome  $j$ .

Avec les modifications décrites ici, en particulier grâce aux formules (3), (7) et (10), il est aisément de transposer les résultats de la méthode de détermination de signes et d'approche directe (Bertaut, 1955) pour les groupes de translation non primitifs.

### Références

- BERTAUT, E. F. (1955). *Acta Cryst.* 8, 823.  
 BERTAUT, E. F. & DULAC, J. (1955). *Tables de Linéarisation des Produits et Puissances des Facteurs de Structure*. Grenoble: Laboratoire d'Électrostatique et de Physique du Métal.

*Acta Cryst.* (1956). 9, 322

**Tables de linéarisation des produits et puissances des facteurs de structure.** Par E. F. BERTAUT et J. DULAC, Laboratoire d'Électrostatique et de Physique du Métal, Institut Fourier, Grenoble, France

(Reçu le 15 janvier 1956)

Des tables de linéarisation des produits et puissances des facteurs de structure présentent un intérêt à la fois théorique et pratique.

Interêt théorique: — Soit un ensemble de  $q$  objets  $e_j$  ( $j = 1, \dots, q$ ). Si l'on a

$$e_j e_k = \sum_{l=1}^n g_{jkl} e_l \quad (l = 1, \dots, n) \quad (1)$$

où les  $g_{jkl}$  sont des nombres réels ou complexes, on dit que les  $e_j$  constituent la base d'une algèbre (Bhagavantam & Venkatarayudu, 1951).