

*Acta Cryst.* (1957). **10**, 86

**New atomic form factors for beryllium and boron.** By JAMES A. IBERS, *Shell Development Company, Emeryville, California, U.S.A.*

(Received 24 September 1956)

Improved calculations of atomic fields for several atoms have recently become available: Kibartas, Kavetskis & Iutsis (1955) have carried out a three-configuration Hartree-Fock self-consistent field calculation for beryllium; Glembotskii, Kibartas & Iutsis (1955) have carried out a similar two-configuration calculation for boron. The multiple-configuration method considers the interaction of various configurations of the atom and is an extension of the usual Hartree-Fock single-configuration approximation. In essence, by this technique, account is taken of electron correlation, the effects of which are neglected in the more approximate single-configuration method. For the following reasons it is of interest to obtain the atomic form factors from these new field approximations. The results for beryllium may be compared with the calculations of Berghuis *et al.* (1955) for beryllium, which were based on the single-configuration approximation. The effect of electron correlation on the atomic form factor of a light atom may thus be assessed. This is important since the most recent form-factor calculations for other light atoms (Hoerni & Ibers, 1954; Berghuis *et al.*, 1955) are based on single-configuration field approximations. The results for boron are of interest, for no other form-factor calculations for boron based on the Hartree-Fock approximation are available.

The atomic form factors for beryllium and boron are given in Table 1. They were obtained by integration of

viously (Hoerni & Ibers, 1954). For these particular calculations the following intervals in  $r$  (in atomic units) were employed:

$$0.000 (0.005) 0.300; 0.300 (0.050) 4.000; \\ 4.000 (0.500) 9.000.$$

When necessary, interpolation of the radial distribution functions was done graphically. The computations were carried out on the Shell Development Company Datatron.

The results for beryllium are in excellent agreement with the form factors obtained by Berghuis *et al.* (1955) from the single-configuration approximation to the atomic field. The maximum deviation of 0.013 electrons in the form factors is probably not significant in view of differences in the calculational techniques employed, and particularly in view of the errors inherent in the interpolation of the radial distribution functions. (The third decimal place in the form factors in Table 1 is not significant, and is given only as an aid to interpolation.) Thus for beryllium, and presumably for other light atoms, electron correlation does not affect the form factors to an extent which can be detected experimentally.

The results for boron are in good agreement with the  $\bar{f}$  values derived by McWeeny (1951) from variational wave functions. The maximum deviation is about 0.05 electrons. The results in Table 1 for boron, since they are derived from less approximate atomic fields, are in principle superior to those of McWeeny. However, the differences are probably not detectable experimentally.

Table 1. *Atomic form factors for beryllium and boron*  
(Values in electrons)

$\sin \theta/\lambda$	$f_{\text{Be}}$	$f_{\text{B}}$	$\sin \theta/\lambda$	$f_{\text{Be}}$	$f_{\text{B}}$
0.00	4.000	5.000	0.50	1.367	1.534
0.05	3.706	4.726	0.60	1.201	1.406
0.10	3.067	4.066	0.70	1.031	1.276
0.15	2.469	3.325	0.80	0.878	1.147
0.20	2.067	2.711	0.90	0.738	1.016
0.25	1.838	2.276	1.00	0.620	0.895
0.30	1.705	1.993	1.10	0.519	0.783
0.35	1.613	1.813	1.20	0.432	0.682
0.40	1.531	1.692	1.30	0.365	0.596

the radial distribution functions given by Iutsis and his coworkers. The details and methods used in carrying out such numerical integrations have been described pre-

#### References

- BERGHUIS, J., HAANAPPEL, IJ. M., POTTERS, M., LOOPSTRA, B. O., MACGILLAVRY, C. H. & VEENENDAAL, A. L. (1955). *Acta Cryst.* **8**, 478.  
GLEMBOTSKII, I. I., KIBARTAS, V. V. & IUTSIS, A. P. (1955). *J. Exper. Theoret. Phys. USSR*, **29**, 617. (*Soviet Physics JETP*, (1956). **2**, 476.)  
HOERNI, J. A. & IBERS, J. A. (1954). *Acta Cryst.* **7**, 744.  
KIBARTAS, V. V., KAVETSKIS, V. I. & IUTSIS, A. P. (1955). *J. Exper. Theoret. Phys. USSR*, **29**, 623. (*Soviet Physics JETP*, (1956). **2**, 481.)  
MCWEENY, R. (1951). *Acta Cryst.* **4**, 513.

*Acta Cryst.* (1957). **10**, 86

**Der strukturelle Zusammenhang zwischen  $\gamma$ - und  $\epsilon$ -Phase im System Kupfer-Zinn.** Von H. KNÖDLER, *Institut für Metallforschung, Saarbrücken 15, Saarland, Deutschland*

(Eingegangen am 24. Oktober 1956)

Vorangegangene Untersuchungen (Hendus & Knödler, 1956) haben gezeigt, dass die kubisch raumzentrierte  $\gamma$ -Hochtemperaturphase im System Kupfer-Zinn geordnet ist und bei der Zusammensetzung  $\text{Cu}_3\text{Sn}$  die Überstruktur des  $\text{Fe}_3\text{Al}$ -Gitters besitzt. Die Gitterkon-

stante wurde für  $\text{Cu}_3\text{Sn}$  bei  $700^\circ\text{C}$ . zu  $a_\gamma = 2a_0^* = 6,116_8 \text{ \AA}$  bestimmt.

\*  $a_0$  = Gitterkonstante des kubisch raumzentrierten Gitters bei statistischer Atomverteilung.

Wird nun eine  $\text{Cu}_3\text{Sn}$ -Probe aus dem  $\gamma$ -Gebiet, z. B. aus  $700^\circ\text{C}$ ., abgeschreckt, so erhält man ein geordnetes  $\varepsilon$ -Gitter hexagonal dichtester Kugelpackung (hier im folgenden mit  $\varepsilon'$  bezeichnet), das sich orthorhombisch mit den Gittervektoren

$$\mathbf{a}_1 \text{ rh.} = \frac{1}{4}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)_{\text{hex.}}, \quad \mathbf{a}_2 \text{ rh.} = \frac{1}{2}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)_{\text{hex.}}, \quad \mathbf{a}_3 \text{ rh.} = \mathbf{a}_3 \text{ hex.}$$

und der Atomanordnung

$$\begin{aligned} 6 \text{ Cu: } & 0, \frac{1}{2}, 0; \frac{1}{3}, 0, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, 0; \frac{5}{6}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{3}{4}, 0; \frac{5}{6}, \frac{3}{4}, \frac{1}{2}; \\ 2 \text{ Sn: } & 0, 0, 0; \frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \end{aligned}$$

beschreiben lässt.

Die Auswertung der Debye-Scherrer-Diagramme, aufgenommen mit  $\text{Cu } K\alpha$ - und  $\text{Co } K\alpha$ -Strahlung, ergab die Werte

$$\begin{aligned} a_1 \text{ rh.} &= \frac{1}{4} \sqrt{3} a_1 \text{ hex.} = 4,772 \text{ \AA}, \\ a_2 \text{ rh.} &= \frac{1}{2} a_1 \text{ hex.} = 5,514 \text{ \AA}, \\ a_3 \text{ rh.} &= a_3 \text{ hex.} = 4,335 \text{ \AA}. \end{aligned}$$

Dabei sind die Grössen  $\mathbf{a}_i \text{ hex.}$  die Gittervektoren der  $\varepsilon'$ -Überstrukturzelle in hexagonaler Beschreibung; sie hängen mit den Grössen  $\mathbf{a}_{i0}$  des ungeordneten hexagonalen Gitters zusammen vermittelt

$$\mathbf{a}_1 \text{ hex.} = 4\mathbf{a}_{10}, \quad \mathbf{a}_2 \text{ hex.} = 4\mathbf{a}_{20}, \quad \mathbf{a}_3 \text{ hex.} = \mathbf{a}_{30}$$

mit

$$a_{10} = a_{20} = 2,757 \text{ \AA}, \quad a_{30} = 4,335 \text{ \AA}.$$

Das auf diese Weise gefundene  $\varepsilon'$ -Gitter lässt sich durch eine martensitische Transformation aus dem  $\gamma$ -Gitter herleiten, wobei die Gittergeraden

$$\left. \begin{array}{l} [111]\gamma \\ [\bar{1}\bar{1}1]\gamma \\ \frac{1}{2}[1\bar{1}0]\gamma \end{array} \right\} \text{ durch affine Verzerrung } \left\{ \begin{array}{l} [100]_{\varepsilon'} \text{ hex.} \\ [010]_{\varepsilon'} \text{ hex.} \\ [001]_{\varepsilon'} \text{ hex.} \end{array} \right. \\ \text{übergehen in}$$

der Winkel von  $109,5^\circ$  zwischen  $[111]\gamma$  und  $[\bar{1}\bar{1}1]\gamma$  auf  $120^\circ$  zwischen  $\mathbf{a}_1 \text{ hex.}$  und  $\mathbf{a}_2 \text{ hex.}$  im  $\varepsilon'$ -Gitter vergrössert wird und die Atome der Ebene  $(2\bar{2}0)\gamma$  in Richtung  $[\bar{1}\bar{1}0]\gamma$  um  $\frac{1}{6}a_1 \text{ rh.}$  in die  $\mathbf{a}_3$ -Halblage der hexagonal dichtesten Kugelpackung gleiten.

Die Werte  $a_{i0}$  der Abschreckstruktur stimmen gut überein mit den von Westgren & Phragmén (1928) und

Jones & Evans (1927) bestimmten Gitterkonstanten der als ungeordnet angesehenen  $\varepsilon$ -Phase. Nach Bernal (1928) und Carlsson & Hägg (1932) ist das im  $\varepsilon$ -Gebiet stabile Gitter geordnet und hat eine achtfach verlängerte  $a_1 \text{ rh.}$ -Achse. Schubert, Kiefer, Wilkens & Hauffler (1955) fanden eine zehnfache  $a_1 \text{ rh.}$ -Periode; sie sind der Ansicht, dass es sich dabei um 'Verwerfungsüberstrukturen' handelt, die aus rhombischen  $\varepsilon$ -Zellen der hier beschriebenen Atomanordnung, als 'Unterstrukturzellen', aufgebaut sind.

Bei der Zusammensetzung  $\text{Cu}_3\text{Sn}$  besteht demnach zwischen der  $\gamma$ - und der stabilen  $\varepsilon$ -Phase innerhalb verwerfungsfreier Volumelemente eine ähnliche Strukturbeziehung wie zwischen der  $\gamma$ - und ihrer Abschreckphase  $\varepsilon'$ . Im Röntgendiagramm ist dieser Zusammenhang durch die zusätzlichen Linien der 'Verwerfungsüberstruktur' verdeckt.

Deutlicher wird anscheinend eine solche spezielle Polymorphie zwischen der  $\gamma$ - und der  $\delta$ -Phase. Proben mit 20,5 At. % Sn, sehr streng aus  $700$  und  $500^\circ\text{C}$ . auf  $-183^\circ\text{C}$ . abgeschreckt, ergaben dieselben Interferenzen wie die stabile  $\delta$ -Phase; nur wenig verschieden davon ist das Interferenzbild einer aus  $700^\circ\text{C}$ . abgeschreckten Probe mit 22,0 At. % Sn, dagegen traten nach Abschrecken dieser Legierung aus  $600^\circ\text{C}$ . die Linien der  $\zeta$ -Abschreckphase auf, was beweist, dass die Abkühlung schnell genug vor sich ging, um Diffusion der Atome zu vermeiden.

Über den Zusammenhang der Kristallstrukturen im  $\beta$ - und  $\gamma$ -Hochtemperaturgebiet mit denen der Abschreckphasen und der bei niedrigeren Temperaturen im selben Konzentrationsgebiet stabilen Phasen wird später ausführlich berichtet werden.

## Referenzen

- BERNAL, J. D. (1928). *Nature, Lond.* **122**, 54.  
 CARLSSON, O. & HÄGG, G. (1932). *Z. Kristallogr.* **83**, 308.  
 HENDUS, H. & KNÖDLER, H. (1956). *Acta Cryst.* **9**, 1036.  
 JONES, W. M. & EVANS, E. J. (1927). *Phil. Mag.* (7), **4**, 1302.  
 SCHUBERT, K., KIEFER, B., WILKINS, M. & HAUFFLER, R. (1955). *Z. Metallk.* **46**, 692.  
 WESTGREN, A. & PHRAGMÉN, G. (1928). *Z. anorg. Chem.* **175**, 80.

## Notes and News

*Announcements and other items of crystallographic interest will be published under this heading at the discretion of the Editorial Board. Copy should be sent direct to the British Co-editor (R. C. Evans, Crystallographic Laboratory, Cavendish Laboratory, Cambridge, England).*

### A. S. T. M. X-ray Powder Data File

As a result of a request from the X-ray Analysis Group of the [British] Institute of Physics, two booklets of comments on the well known A. S. T. M. file of X-ray powder data for identification have been compiled. The first (39 pp., February 1956) is concerned with the first five sets of the file, the second (7 pp., December 1956)

mainly with the sixth set. Crystallographers interested in identification problems may obtain copies on request from the compilers, J. W. Hughes, Isabel E. Lewis and A. J. C. Wilson, Viriamu Jones Laboratory, University College, Cardiff, Great Britain.

It is intended to publish further comments at regular intervals. Users of the card file are invited to communicate with the compilers about future lists.