

— on adopte une valeur vraisemblable de B (entre 2,5 et 4,5, valeur moyenne pour les cristaux organiques).

— on cherche ensuite la valeur de C en égalant $C^2 \sum_H F_c(H)^2$

$$\text{à } \sum_H \left\{ \sum_{j=1}^N f_j^2(H) \exp[-2B(2 \sin \theta/\lambda)^2] \right\}$$

— Enfin on calcule la fonction différence $p_o(r) - p_c(r)$ sur toute l'étendue du pic central.

— On doit obtenir $\delta(0) = 0$ à l'origine; celle-ci est entourée, si B est trop faible, d'une auréole de densité positive, et si B est trop fort, d'une auréole de densité négative.

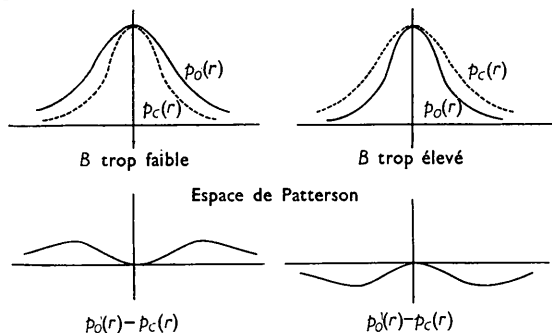


Fig. 1. Représentation théorique de la fonction $\delta(r)$ (le facteur d'échelle C étant convenablement déterminé) lorsque le facteur de température B est trop faible ou trop élevé.

Le signe de la densité dans cette auréole nous montre dans quel sens on doit rectifier la valeur de B et, par là même, la valeur de C . Trois ou quatre essais doivent permettre d'obtenir ces constantes avec une bonne précision.

Citons le cas du cyano 9-anthracène.

Nous avons retenu pour valable la courbe 2 qui correspond bien au facteur moyen d'agitation thermique ($B = 4,34$) trouvé par Clastre (1959).

Le calcul de $p_o(r) - p_c(r)$ doit être effectué par une calculatrice électronique. On peut également effectuer ce calcul à l'aide des 'Strips' de Beevers et Lipson. On

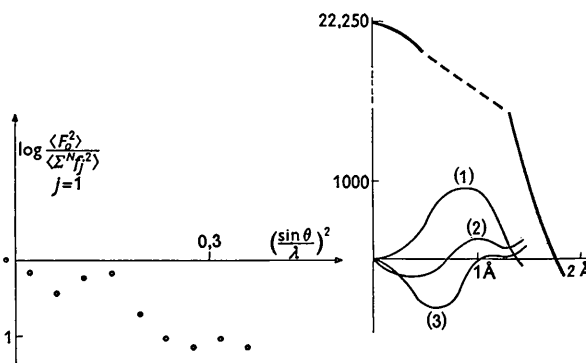


Fig. 2. Application à la structure du cyano 9-anthracène. A gauche, application de la méthode de Wilson, à droite; essai de 3 valeurs B avec la méthode proposée. la courbe qui débute à 22250 et s'arrête à l'abscisse 1,75 Å représente le profil du pic central de la fonction de Patterson.

Courbe 1, $B = 3,5$, erreur relative	} 9%	
Courbe 2, $B = 4,3$, sur le facteur		} 5%
Courbe 3, $B = 5$, d'échelle		

calcule alors la densité δ sur une droite centrale d'une projection bidimensionnelle de la fonction de Patterson. Cette droite est choisie de façon à éviter les pics les plus proches de l'origine.

Un autre avantage de cette méthode est de dégager complètement les pics de la fonction de Patterson proches de l'origine et habituellement noyés dans le pic central ou dans les auréoles d'interférence de ce pic.

Cette dernière application a été entrevue par d'autres auteurs (Cochran & Lipson, 1953) qui l'avaient déclarée inopérante parcequ'ils avaient calculé la fonction différence δ avant d'avoir déterminé d'une façon suffisamment précise les constantes C et B .

Bibliographie

- CLASTRE, J. (1959). *Acta Cryst.* **12**, 911.
 COCHRAN, W. & LIPSON, H. (1953). *The Crystalline State*, Vol. III. London: Bell.

Acta Cryst. (1961). **14**, 439

Precision measurement of lattice parameters of polycrystalline specimens: Erratum in the International Tables for X-ray Crystallography. By W. PARRISH and A. J. C. WILSON, *Philips Laboratories, Irvington-on-Hudson, N. Y., U.S.A., and University College, Cardiff, Wales*

(Received 3 January 1961 and in revised form 25 January 1961)

In Table 4.7.3, p. 221 of Vol. II of the *International Tables*, the entries in columns five and six for the angular variation of the flat-specimen error, first line (α constant), should be $\cot \theta$ (instead of $\cos \theta$) and $\cot^2 \theta$ (instead of

$\cos \theta \cot \theta$) respectively. The expressions given in the text on p. 222 and the graphs in Fig. 4.7.3(2) are correct.

The error arose in transcription, whereby the specimen-surface displacement error was repeated and the flat-specimen error was omitted.