

Acta Cryst. (1962). **15**, 617

Nouvelle approximation du facteur de diffusion atomique. Par M. GÉRARD BASSI, *Laboratoire de Diffraction neutronique, Centre d'Etudes Nucléaires de Grenoble (Isère), France*

(Reçu le 3 février 1962)

Introduction

Vand, Eiland & Pepinsky (1957) ont proposé la formule suivante

$$f(x) = A \exp(-ax^2) + B \exp(-bx^2) + C \quad (1)$$

où

$$x = \sin \theta / \lambda \quad (2)$$

et les A, a, B, b, C étaient des coefficients numériques calculés par une méthode de moindres carrés. Ces coefficients sont publiés pour la radiation Cu $K\alpha$ seulement. Citons également l'approximation polynômiale de Freeman & Smith (1958) où

$$f(x) = \sum_0^6 a_i x^i. \quad (3)$$

Cette approximation nécessite sept valeurs numériques de a_0 à a_6 , calculés par moindres carrés.

Fonction d'approximation

La fonction choisie est la suivante

$$f(x) = Z - (x^2/P_4(x)) \quad (4)$$

où

$$P_4(x) = \sum_0^4 a_i x^i. \quad (5)$$

Les coefficients a_i nécessaires au calcul de $P_4(x)$ peuvent être calculés par moindres carrés comme dans les cas précédents, ou, bien plus simplement, en faisant passer la courbe $P_4(x)$ par cinq points judicieusement choisis.

Dans la majorité des cas, il suffit de faire passer $P_4(x)$ par les points $x = 0,1; 0,2; 0,3; 0,5; 0,7$. Les valeurs numériques prises par $P(x)$ sont telles que $f(x)$ concorde alors parfaitement avec celles données par les tables pour $0 \leq x \leq 0,7$. Le calcul des a_i s'effectue de la façon suivante $P_4(x)$ (5) s'écrit aussi sous la forme

$$P_4(x) = b_0 + b_1(x-x_0) + b_2(x-x_0)(x-x_1) + b_3(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2) + b_4(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3) \quad (6)$$

On vérifie immédiatement qu'un tel polynôme $P_4(x)$ passe effectivement par les points $x_0, x_1, x_2, x_3, \dots$. En écrivant que $P_4(x)$ passe par un cinquième point x_4 , l'écriture sous la forme (6) présente le grand avantage de permettre le calcul de b_4 , c'est-à-dire des b_i de proche en proche. Cette méthode est bien plus rapide que celle qui consisterait à calculer les a_i par une quelconque méthode matricielle.

Tableau 1. *Comparaison entre les valeurs tabulées et calculées pour le chrome trivalent*

sin θ/λ	Cr ³⁺	
	$f_{\text{tab.}}$	$f_{\text{calc.}}$
0,05	20,76	20,76
0,10	20,07	20,07
0,15	19,02	19,02
0,20	17,72	17,72
0,25	16,30	16,30
0,30	14,87	14,87
0,35	13,50	13,51
0,40	12,26	12,26
0,45	11,16	11,17
0,50	10,22	10,22
0,60	8,77	8,76
0,70	7,78	7,78

Tableau 2. *Comparaison entre les valeurs tabulées et calculées pour le tungstène*

sin θ/λ	W	
	$f_{\text{tab.}}$	$f_{\text{calc.}}$
0,04	73,04	72,88
0,10	69,07	69,07
0,14	66,04	66,09
0,20	61,58	61,58
0,24	58,72	58,67
0,30	54,59	54,53
0,34	51,97	51,94
0,40	48,27	48,29
0,50	42,83	42,83
0,60	38,12	38,10
0,70	34,06	34,06

Tableau 3. *Comparaison des méthodes pour le facteur de diffusion du carbone**

sin θ/λ	Double gaussienne			Polynôme du 6ème degré		$f = Z - (x^2/P(x))$	
	$f_{\text{tab.}}$	$f_{\text{calc.}}$	$\Delta f/f$	$f_{\text{calc.}}$	$\Delta f/f$	$f_{\text{calc.}}$	$\Delta f/f$
0	6,000	6,000	0,0%	5,996	0,1%	6,000	0,0%
0,05	5,764	5,781	0,3	5,776	0,2	5,764	0,0
0,10	5,141	5,188	0,9	5,131	0,2	5,147	0,0
0,15	4,362	4,403	0,9	4,355	0,2	4,362	0,0
0,20	3,612	3,618	0,0	3,619	0,2	3,611	0,0
0,25	3,003	2,969	1,1	3,006	0,1	2,998	0,0
0,30	2,538	2,501	1,5	2,539	0,0	2,538	0,0
0,35	2,212	2,196	0,7	2,208	0,2	2,211	0,0
0,40	1,983	2,002	1,0	1,981	0,1	1,983	0,0
0,50	1,707	1,762	3,2	1,711	0,2	1,707	0,0
0,60	1,548	1,574	1,7	1,548	0,0	1,549	0,0
0,70	1,423	1,384	2,7	1,427	0,3	1,423	0,0

* Valeurs de Berghuis *et al.* (1955).

Resultats

L'approximation obtenue par cette méthode se révèle excellente à l'usage pour un intervalle (0; 0,7). Si l'on agrandit l'intervalle en faisant toujours passer la courbe par cinq points (polynôme $P(x)$ du quatrième degré), la précision diminue mais reste assez longtemps acceptable.

Par exemple, dans le cas du tungstène, une approximation des valeurs de Eichhorn (1958) dans l'intervalle (0; 1,8), en faisant passer la courbe par les points 0,1 — 0,3 — 0,6 — 1,2 — 1,8 entraîne une erreur $\Delta f/f$ qui n'excède jamais 1,8%.

L'intervalle utile dans les calculs courants étant (0; 0,7) les résultats sont évidemment bien meilleurs (cf. Tableaux 1 et 2).

On trouvera une comparaison entre les méthodes de Vand, Eiland & Pepinsky (1951), de Freeman & Smith (1958) et la méthode proposée dans le Tableau 3.

Sur la machine Gamma E. T. Bull dont nous disposons,

le calcul de f est à peu près deux fois plus rapide que celui de l'approximation en double exponentielle.

L'auteur remercie pour ses conseils, M. E. F. Bertaut, conseiller scientifique du Laboratoire de Diffraction Neutronique au Centre d'Etudes Nucléaires de Grenoble.

Références

- BERGHUIS, J., HAANAPPEL, IJ. M., POTTERS, M., LOOPSTRA, B. O., MACGILLAVRY, C. H. & VEENENDAAL, A. L. (1955). *Acta Cryst.* **8**, 478.
 EICHORN, EDGAR L. (1958). *Acta Cryst.* **11**, 824.
 FREEMAN, H. C. & SMITH, J. E. W. L. (1958). *Acta Cryst.* **11**, 819.
 VAND, V., EILAND, P. F. & PEPINSKY, R. (1957). *Acta Cryst.* **10**, 303.
 WATSON, R. E. & FREEMAN, A. J. (1961). *Acta Cryst.* **14**, 27.

Acta Cryst. (1962). **15**, 618

Unit cell and space group of alpha- and beta-parachloral. By MARÍA J. DE ABELEDO, MARÍA R. DE BENYACAR, ERNESTO E. GALLONI, *Comisión Nacional de Energía Atómica, Buenos Aires, Argentina*

(Received 26 October 1961 and in revised form 10 February 1962)

The following first results on the crystallography of α and β parachloral have been obtained on material furnished by Dr Máximo Barón, of Atanor's (S.A.M.) Scientific Department, who prepared the compounds in connection with his studies on cyclic polymers of aldehydes. Both α and β parachloral have formula $(CCl_2CHO)_n$. Their molecular structure was studied by Novak & Whalley (1958).

α -Parachloral crystallizes from ethanol as transparent prismatic crystals with two different habits: (1) elongated parallel to b axis; (2) elongated parallel to [101].

From rotating crystal and Weissenberg photographs, taken with Co $K\alpha$ radiation, the following results were obtained:

System: Orthorhombic

$$a_0 = 10.55, b_0 = 15.40, c_0 = 9.34 \text{ \AA}.$$

The morphology, studied on several stereograms, showed the point group to be mmm .

The conditions for the presence of reflections are:

$$\begin{aligned} hkl & \text{ no conditions} \\ h0l & \text{ no conditions} \\ hk0 & h = 2n \\ 0kl & k + l = 2n \end{aligned}$$

which leads to space group $Pnma$.

The observed density, obtained by the flotation method in aqueous solutions of potassium iodomercurate, is $1.89 \pm 0.01 \text{ g.cm.}^{-3}$. There are four molecules in the unit cell. The calculated density is 1.93 g.cm.^{-3} .

β -Parachloral crystallizes from ethanol as six or eight-sided acicular crystals, elongated parallel to b axis. Most stereograms show a binary symmetry axis. The predominant forms are {100}, {101}, {001}, {101}.

Strange extinctions obtained from a Weissenberg photograph were accounted for assuming a twinning on [100]. On several stereograms twinning on [101] was observed.

From rotating crystal and Weissenberg photographs, taken with Co $K\alpha$ radiation, the following results were obtained:

System: Monoclinic

$$a_0 = 20.20, b_0 = 5.91, c_0 = 13.04 \text{ \AA}, \beta = 100^\circ.$$

The conditions for the presence of reflections are:

$$\begin{aligned} hkl & \text{ no conditions} \\ h0l & h = 2n \\ 0k0 & k = 2n \end{aligned}$$

which leads to space group $P2_1/a$.

The observed density, obtained by the flotation method in aqueous solutions of potassium iodomercurate is $1.92 \pm 0.02 \text{ g.cm.}^{-3}$. There are four molecules in the unit cell. The calculated density is 1.92 g.cm.^{-3} .

Reference

- NOVAK, A. & WHALLEY, E. (1958). *Canad. J. Chem.* **36**, 1116-20.