

qualitative agreement with those observed in 35 out of the 40 $0kl$ reflections used; four of the remaining five were at high θ values and therefore sensitive to slight variations of the positional parameters.

The intensities of the $0kl$ Weissenberg reflections were estimated visually by the method of de Lange, Robertson & Woodward (1939). The intensity strips were calibrated against each other and were found to have a relative precision of one exposure interval or better. The structure was refined by the method of least squares (Hughes, 1941). The weighting factors were $W = 1/(\sigma_F \cdot F^2)$, where σ_F

was the standard deviation (in intensity strip units) of the measurements of each reflection. The atomic scattering factors for Zn were taken from Berghuis, Haanappel, Potters, Loopstra, MacGillavry & Veenendaal (1955). No scattering factors of comparable precision were available for Sr, but the values given by Berghuis for Zn correspond closely to the arithmetic mean of the Thomas-Fermi and Pauling-Sherman values. Such an average was therefore used for f_{Sr} . A plot of $\log F_o/F_c$ versus $\sin^2 \theta$ indicated after the first cycle anisotropy in the temperature factor, probably due to absorption. This term was therefore split into two directional parts, the parameters of which are B_y and B_z given in Table 1.

Table 2. Observed and calculated structure factors

hkl	F_o	F_c	wt.	hkl	F_o	F_c	wt.
000	—	—	—	051	63	83	28
002	15	5	66	053	76	68	23
004	68	-59	13	055	176	-170	6
006	109	92	5	057	7	16	1
008	84	-105	14				
011	27	25	12	060	137	-170	7
013	106	-91	13	062	26	-28	16
015	155	-139	25	064	20	18	91
017	24	-26	45	066	35	-34	28
019	11	-10	113				
020	8	16	95	071	40	66	30
022	131	-155	6	073	64	64	21
024	95	-84	11	075	49	36	42
026	113	118	10	077	43	75	11
028	34	34	56				
031	142	174	5	080	13	-22	23
033	100	88	10	082	90	102	7
035	19	-17	85	084	54	64	18
037	125	134	9				
039	14	20	63				
040	84	107	6	091	54	-45	40
042	90	75	19	093	56	-55	22
044	33	21	36				
046	37	-27	26				
048	44	-60	12				

Table 3. Interatomic distances in SrZn_2

Zn-2 Zn	2.73 Å	Sr-2 Sr	3.91 Å
-1 Zn	2.75	-2 Sr	3.98
-1 Zn	2.95	-4 Zn	3.28
-2 Sr	3.28	-2 Zn	3.28
-1 Sr	3.28	-2 Zn	3.37
-1 Sr	3.37	-4 Zn	3.52
-2 Sr	3.52		

The results of the least-squares refinements are given in Table 1, the final structure factors are listed in Table 2, and the interatomic distances in Table 3.

The structure is of the same type as that of CeCu_2 reported by Larson & Cromer (1961); the positional parameters as well as the ratios between the cell edges are nearly the same in both structures.

References

- BERGHUIS, J., HAANAPPEL, I.J.M., POTTERS, M., LOOPSTRA, B.O., MACGILLAVRY, C.H. & VEENENDAAL, A.L. (1955). *Acta Cryst.* **8**, 478.
HUGHES, E.W. (1941). *J. Amer. Chem. Soc.* **63**, 1737.
LANGE, J.J. DE, ROBERTSON, J.M. & WOODWARD, I. (1939). *Proc. Roy. Soc. A*, **171**, 398.
LARSON, A.C. & CROMER, D.T. (1961). *Acta Cryst.* **14**, 73.

Acta Cryst. (1964). **17**, 66

Paramètres cristallins et groupe de symétrie de position du sulfite de magnésium trihydraté, $\text{MgSO}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$. Par JEAN-PAUL WENDLING et RAYMOND WEISS, Laboratoire de Chimie Minérale Structurale, Institut de Chimie de l'Université de Strasbourg, B.P. 296, Strasbourg (Bas-Rhin), France

(Reçu le 18 juillet 1963)

Le sulfite de magnésium trihydraté $\text{MgSO}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ cristallise par évaporation d'une solution aqueuse de sulfite acide de magnésium portée à une température voisine de 90 °C, en atmosphère inerte.

Les cristaux appartiennent au système orthorhomlique; la classe de symétrie d'orientation est $mm2$. Ils sont faiblement piézoélectriques. Les formes observées sont:

$\frac{1}{2}\{111\}$, $\frac{1}{2}\{11\bar{1}\}$ et $\{120\}$ avec $a:b:c=1,06:1:0,59$.

Des clichés de cristal tournant autour des axes [100], [010] et [001], des rétrigrammes contenant les nœuds $0kl$, $1kl$, $2kl$, $3kl$, $h0l$, hll , $hk0$ et $hk1$ et un diffractogramme ont conduit à;

$$a = 9,54 \pm 0,02, b = 9,36 \pm 0,02, c = 5,51 \pm 0,01 \text{ \AA};$$

$$a:b:c = 1,019 : 1 : 0,588;$$

$$Z = 3,98 \pm 4 \text{ avec } d_{\text{mes.}} = 2,13;$$

$$\lambda \text{ Cu } K\alpha = 1,5418 \text{ \AA}.$$

Les rétrigrammes ne comportent pas d'extinctions systématiques des nœuds hkl ; le mode de réseau est primitif.

Les nœuds $0kl$ sont systématiquement éteints lorsque la somme $k+l$ est égale à $2n+1$; les nœuds $h0l$ sont systématiquement éteints lorsque l'indice h est égal à $2n+1$.

Le groupe de symétrie de position compatible avec les extinctions relevées et l'effet piézoélectrique observé est; $Pna2_1 (C_{2v}^6)$.

Une étude détaillée de la structure est en cours.