

Table 1. Comparison of approximations for incoherent scattering

$\sin \theta/\lambda$	f	I_{inc}^*	I_{inc}^\dagger	$I_{inc}(\text{Eq. 3})$	$I_{inc}(\text{Eq. 4})$
$Z=8$					
0	8 ^(a)	0 ^(b)	0 ^(b)	0	0
0.2	5.630	3.700	2.797	4.038	2.370
0.4	3.008	5.811	5.271	6.869	4.992
0.7	1.714	6.542	6.417	7.633	6.286
1.1	1.294	7.130	7.036	7.791	6.706
$Z=32$					
0	32 ^(c)	0 ^(b)	0 ^(b)	0	0
0.2	25.09	8.61	4.75	13.33	6.91
0.4	18.53	16.73	10.02	21.28	13.47
0.7	11.34	22.47	16.59	27.98	20.66
1.1	7.24	25.52	21.90	30.36	24.76

* Without exchange terms. † Including exchange terms.

(a) Freeman (1959a). (b) Freeman (1959b). (c) Berghuis *et al.* (1955).

James suggests that, lacking other information, the individual electronic factors may be replaced by $f_K = f/Z$, where

$$f = \sum_1^Z f_K \quad (2)$$

is the total or atomic scattering factor. Thus, equation (1) becomes

$$I_{inc} = Z - f^2/Z, \quad (3)$$

a form which is used in practice (Furukawa, Orton, Hamor & Williams, 1963).

Equation (3) implies that all f_K contribute equally to f for all angles of scatter. However, electronic scattering factors are markedly affected by the spread of the electronic charge distribution (James, 1958, p. 125); the more concentrated the charge distribution, the more slowly will f_K decrease as $\sin \theta/\lambda$ increases. Furthermore, once an f_K has fallen to zero, it never regains appreciable positive or negative values. Hence, the decline of the total factor f does not result from equal contribution from the various electronic wave functions. Rather, the f_K of outer electrons decay early to zero, while that from inner electrons falls off very slowly.

A better approximation would assign the entire decrease in atomic factor f to outer orbitals. For some number of outer electrons f_K is assumed to be zero, while the f_K of the remaining inner electrons stays at unity, the distribution being such as to satisfy equation (2). There follows that only a number f of electrons (generally a noninteger value) have the f_K of unity, and equation (1) gives

$$I_{inc} = Z - f. \quad (4)$$

This new approximation has a supplementary attraction in cases where exchange terms are important. Equations (3) and (4) give respectively the maximum and minimum phys-

ically possible values of equation (1). Since equation (1) already gives too large an estimate for I_{inc} because of neglect of exchange terms (James, 1958, p. 116), equation (4) has the right trend.

Because both equations (3) and (4) are merely plausible approximations, they should be judged by comparison with more reliable estimates of incoherent scatter. Equation (4) may be expected to work better for the elements of larger atomic number, which have both greater differences among the electronic f_K and more important exchange terms. Oxygen of relatively small $Z=8$ and germanium with $Z=32$ are taken as examples. Table 1 gives quantum-mechanical values of f and I_{inc} (without and including exchange terms) plus the approximate I_{inc} from equations (3) and (4) for some values of $\sin \theta/\lambda$.

The new approximation of equation (4) appears superior for both elements, even if exchange terms are excluded. For the light oxygen atom the minimizing effect of equation (4) is too large, and the estimated I_{inc} falls below the accurate value. By $Z=32$ for germanium, the effect is already reversed, the actual I_{inc} being less than that given by either approximation. Thus, the new approximation is decidedly better for heavier elements, for which it is most often required.

References

- BERGHUIS, J., HAANAPPEL, J. M., POTTERS, M., LOOPSTRA, B. O., MACGILLAVRY, C. H. & VEENENDAAL, A. L. (1955). *Acta Cryst.* **8**, 478.
 FREEMAN, A. J. (1959a). *Acta Cryst.* **12**, 261.
 FREEMAN, A. J. (1959b). *Acta Cryst.* **12**, 929.
 FURUKAWA, K., ORTON, B. R., HAMOR, J. & WILLIAMS, G. I. (1963). *Phil. Mag.* **8**, 141.
 JAMES, R. W. (1958). *The Optical Principles of the Diffraction of X-Rays*. London: Bell.

Acta Cryst. (1965). **18**, 980

Elastische und thermoelastische Konstanten von Benzalazin, gemessen mit dem Schaefer-Bergmann-Verfahren. Von S. HAUSSÜHL, *Kristallographisches Institut der Universität Freiburg i. Br., Deutschland*

(Eingegangen am 14. Dezember 1964)

Vor kurzem teilten Joshi & Kashyap (1964) elastische Konstanten von Benzalazin mit, die sie aus der diffusen Streuung von Röntgenstrahlen in Anlehnung an ein schon früher von Wooster und Mitarbeiter benutztes Verfahren bestimmt

hatten (siehe Wooster, 1962). Nach diesen Werten würde Benzalazin die höchste bisher bekannte elastische Anisotropie aufweisen ($c_{11} \approx 8c_{22}$); ausserdem würde sich die in [100] schwingende reine Transversalwelle in Richtung [010]

erheblich schneller ausbreiten als eine reine Longitudinalwelle ($c_{66} > c_{22}$). Ein derartiger Effekt war bisher nur an Calciumformiat bekannt geworden (Haussühl, 1963). Deswegen sowie auch um die prinzipielle Bedeutung der vorliegenden röntgenographischen Methode für die Anwendung auf komplizierter gebaute Kristalle zu erkennen, schien es wünschenswert, die elastischen Konstanten von Benzalazin auch mit einer der herkömmlichen Ultraschall-Methoden zu messen. Zu diesem Zweck wurden optisch klare Einkristalle mit Durchmessern von mehreren cm aus Lösungen von Benzalazin in *m*-Xylol durch langsames Verdunsten des Lösungsmittels hergestellt. Diese rhombischen Kristalle (Raumgruppe *Pbcn*) waren nach [001] gestreckt und zeigten die Flächen {110}, {111} und selten auch {010}. Mit dem verbesserten Schaefer-Bergmann-Verfahren (Haussühl, 1957) ergaben sich für 20 °C folgende elastische Konstanten (Einheit: 10^{11} erg. cm^{-3}). In Klammern stehen die Werte von Joshi & Kashyap.

$$c_{11} = 1,428 (4,10), \quad c_{22} = 0,799 (0,52), \quad c_{33} = 0,636 (0,94), \\ c_{44} = 0,240 (0,074), \quad c_{55} = 0,106 (0,67), \quad c_{66} = 0,324 (0,84), \\ c_{12} = 0,511 (1,22), \quad c_{23} = 0,494 (0,66), \quad c_{13} = 0,337 (1,46).$$

Für die Dichte wurde der mit dem Auftriebsverfahren bestimmte Wert $1,186 \text{ g. cm}^{-3}$ eingesetzt. Die thermoelastischen Konstanten $T_{ij} = d \log c_{ij} / dT$ (T Temperatur) für 0 °C sind (Einheit: $10^{-3} / ^\circ\text{C}$):

$$T_{11} = -1,81, \quad T_{22} = -2,06, \quad T_{33} = -2,20, \quad T_{44} = -0,99, \\ T_{55} = -1,70, \quad T_{66} = -2,20, \quad T_{12} = -2,07, \quad T_{23} = -2,30, \\ T_{13} = -1,15.$$

Die relativen maximalen Fehler liegen unter folgenden Schranken:

$$c_{11}, c_{22}, c_{33}: 3 \text{ Promille}; \\ c_{12}, c_{23}, c_{13}, c_{44}, c_{55}, c_{66}: 1 \text{ Prozent.} \\ T_{11}, T_{22}, T_{33}: 3 \text{ Prozent}; \\ T_{12}, T_{23}, T_{13}, T_{44}, T_{55}, T_{66}: 6 \text{ Prozent.}$$

Diese neuen Werte weichen zum überwiegenden Teil um mehr als 100 % von den Angaben von Joshi & Kashyap ab, die für ihre Messungen mit einem Fehler von 15 % rechnen. Diese erhebliche Diskrepanz muss wohl als Zeichen dafür gewertet werden, dass die dort benutzte Methode der Bestimmung elastischer Konstanten aus der diffusen Streuung von Röntgenstrahlen bei komplizierter gebauten Kristallen nur grob qualitative Werte liefern kann. Dass die Dispersion derartig grosse Unterschiede bedingen könnte, muss als unwahrscheinlich angesehen werden, weil frühere Messungen an einfacher gebauten Kristallen wie z. B. Pyrit (Prasad & Wooster, 1956), Zinkblende (Prince & Wooster, 1951), Hexamethylen-tetramin (Ramachandran & Wooster, 1951; Haussühl, 1958) und Diamant (Prince & Wooster, 1953) zum Teil eine viel bessere Übereinstimmung der nach verschiedenen Methoden erzielten Werte erbracht hatten.

Für die quantitative Messung elastischer Konstanten kann daher das von Joshi & Kashyap benutzte Verfahren erst nach einer weiteren Verbesserung der theoretischen Grundlagen und der experimentellen Technik empfohlen werden. Vorläufig versprechen die Ultraschall-Methoden auch bei Kristallen, deren Herstellung in grossen Individuen als schwierig gilt, viel eher einen Erfolg. Auch Versuche zur Miniaturisierung der herkömmlichen Methoden werden zu besseren Resultaten führen.

References

- HAUSSÜHL, S. (1957). *Fortschr. Min.* **35**, 4.
 HAUSSÜHL, S. (1958). *Acta Cryst.* **11**, 58.
 HAUSSÜHL, S. (1963). *Z. Kristallogr.* **118**, 33.
 JOSHI, S. K. & KASHYAP, B. M. S. (1964). *Acta Cryst.* **17**, 629.
 PRASAD, S. C. & WOOSTER, W. A. (1956). *Acta Cryst.* **9**, 169.
 PRINCE, E. & WOOSTER, W. A. (1951). *Acta Cryst.* **4**, 191.
 PRINCE, E. & WOOSTER, W. A. (1953). *Acta Cryst.* **6**, 450.
 RAMACHANDRAN, G. N. & WOOSTER, W. A. (1951). *Acta Cryst.* **4**, 431.
 WOOSTER, W. A. (1962). *Diffuse X-Ray Reflections from Crystals*. Oxford: Clarendon Press.

Notes and News

Announcements and other items of crystallographic interest will be published under this heading at the discretion of the Editorial Board. The notes (in duplicate) should be sent to the General Secretary of the International Union of Crystallography (D. W. Smits, Rekencentrum der Rijksuniversiteit, Grote Appelstraat 11, Groningen, The Netherlands). Publication of an item in a particular issue cannot be guaranteed unless the draft is received 8 weeks before the date of publication.

International Union of Crystallography

World List of Crystallographic Computer Programs Second Edition

The collection of data for the second edition is now in progress. The format is described in the first edition; copies of the format are obtainable from the regional correspondents listed below. Please submit entries already punched on IBM cards where possible; otherwise print or type so as to be clear to a keypunch operator.

ALGOL and FORTRAN programs are best listed under the language name, with indication of machine on which

compiled. Entries should not be submitted for 'one-of-a-kind' machines. Submission of an entry implies that the program is operating properly, and that the authors undertake to supply program decks or tapes, documentation, and operating information on request. (Columns 78-80 on the title card should be punched in confirmation of this). Entries should reach the Editor or one of the regional correspondents by 1 August 1965.

Regional correspondents:

Dr S. Åsbrink, Institute of Inorganic and Physical Chemistry, University of Stockholm, Kungstensgatan 45, Stockholm Va, Sweden.