

imity of two Ba^{2+} ions to each water. The two Ba^{2+} ions and two H atoms are arranged approximately tetrahedrally about oxygen.

It must be understood that in investigating complicated hydrates, the NMR method is rather crude and inhibited with inaccuracies arising from (a) the difficulty encountered in determining the exact orientation of the axis of rotation of the crystal in the magnetic field, (b) the low signal-to-noise ratio observed in most diamagnetic substances which are the ones generally investigated, and (c) overlap of the resonance lines that makes it difficult to determine the positions of maximum absorption of these lines. The experimental uncertainties involved make it pointless to try and apply corrections for the effect of thermal vibrations on the resonance spectra (Pedersen, 1964), or worry about whether the centres of gravity of the lines or the positions of maximum absorption are used to plot the resonance diagram. However, for a quick determination of the approximate positions of hydrogen atoms in many and often complicated

hydrates, the NMR method remains of great value (*cf.* Murty & El Saffar, 1962).

The author wishes to express his thanks to Dr W. R. Busing, Dr R. Chidambaram and Dr H. A. Levy for many valuable suggestions.

References

- MURTY, C. R. K. & EL SAFFAR, Z. M. (1962). *Acta Cryst.* **15**, 536.
 PADMANABHAN, C. M., BUSING, W. R. & LEVY, H. A. (1963). *Acta Cryst.* **16**, A26.
 PAKE, G. E. (1948). *J. Chem. Phys.* **16**, 327.
 PEDERSEN, B. & HOLCOMB, D. F. (1963). *J. Chem. Phys.* **38**, 61.
 PEDERSEN, B. (1964). *J. Chem. Phys.* **41**, 122.
 SILVIDI, A. A. & MCGRATH, J. W. (1960). *J. Chem. Phys.* **32**, 924.

Acta Cryst. (1966). **20**, 311

Ein doppelt gekrümmter Neutronenleiter zur Unterdrückung der höheren Ordnung bei Neutronenbeugungsexperimenten. Von W. SCHMATZ, Institut für Neutronenphysik der KFA Jülich

(Eingegangen am 20. August 1965)

Ein Aufbau von Neutronendiffraktometern am Ende von langen Neutronenleitern würde verschiedene Vorteile mit sich bringen (Maier-Leibnitz, 1966). Der Untergrund am Ausgang eines gekrümmten Neutronenleiters (Maier-Leibnitz & Springer, 1963) ist sehr viel kleiner als für Instrumente in unmittelbarer Reaktornähe. Es entfällt die schwere Abschirmung. Die Instrumente werden flexibler, die Platzverhältnisse günstiger und der Streuwinkelbereich kann bis zu 180° ausgedehnt werden. Wie hier gezeigt wird, lässt sich durch eine geeignete Ausführung des Neutronenleiters zudem noch erreichen, dass die zweite Ordnung vollständig unterdrückt wird.

Bei einem geraden Neutronenleiter (mit z als Achse) gilt für den Öffnungswinkel α des austretenden Neutronenstrahls $\alpha = 2\Delta k/k_z$, wobei $k_z = 2\pi/\lambda$ und $\Delta k = 1,07 \times 10^{-2} \text{ \AA}^{-1}$,

wenn man Nickel als totalreflektierendes Wandmaterial verwendet. Abgesehen von Reflexionsverlusten und anderen Baufehlern des Neutronenleiters ist die Durchlässigkeit D unabhängig von der Wellenlänge konstant gleich eins. Ein einfach gekrümmter Neutronenleiter mit rechteckigem Querschnitt hat die Eigenschaft nach kleineren Wellenlängen hin immer weniger durchlässig zu werden (Maier-Leibnitz & Springer, 1963). In Fig. 1 ist die über den Querschnitt gemittelte Durchlässigkeit D als Funktion der Wellenzahl k_z aufgetragen. Die charakteristische Wellenzahl $k_{z,m}$ ist nach Maier-Leibnitz (1965) durch den Krümmungsradius ϱ und die Breite a des Neutronenleiters gegeben gemäss der Beziehung:

$$k_{z,m} = \Delta k \sqrt{a/2\varrho}$$

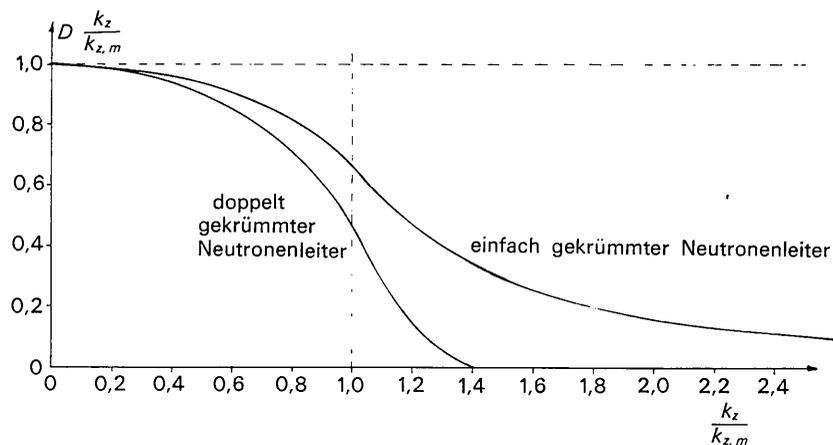


Fig. 1.

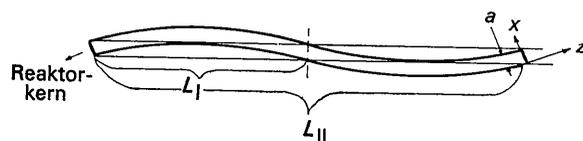


Fig. 2.

Wie in Fig. 2 gezeigt, kann der Neutronenleiter aus zwei entgegengesetzt gekrümmten Teilstücken 'einfacher direkter Sichtweite' zusammengesetzt werden. Durch die Richtungsänderung treffen Neutronen, die im ersten Abschnitt noch unter sehr kleinen Winkeln nur an der gekrümmten Aussenfläche reflektiert wurden (girlandenreflektiert), im zweiten Abschnitt mit zu grossem Winkel auf und gelangen nicht mehr durch den Leiter. Die über den Querschnitt gemittelte Durchlässigkeit für den doppelt gekrümmten Neutronenleiter, zeigt ebenfalls Fig. 1. Für $k_z \geq \sqrt{2}k_{z,m}$ ist die Durchlässigkeit Null. Wählt man $k_z = 0,8 k_{z,m}$, dann ist der Verlust gegenüber einem geraden Neutronenleiter nur 30%. Die in z-Richtung austretenden Neutronen haben am linken und rechten Rand die maximale Wellenzahl $k_z = k_{z,m}$ in der Mitte die maximale Wellenzahl $k_z = \sqrt{2}k_{z,m}$. Die Impulsraumbreite in der k_x -Richtung ist ebenfalls in der Mitte des Strahls am grössten. Der Neutronenstrahl ist bezüglich seiner Impulsraumverteilung symmetrisch zur Mitte

des Strahls, im Gegensatz zum einfach gekrümmten Neutronenleiter (siehe auch Maier-Liebnitz, 1965).

Wie man aus Fig. 2 ersieht, gelangen schnelle Neutronen und γ -Strahlen bestenfalls nach zweimaliger Streuung aus dem Neutronenleiter. Die Anordnung könnte symmetrisch verkürzt werden bis zu $(\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{3}{4}})L_{II}$, jedoch ist dieser Gewinn nicht wesentlich und aus Abschirmungsgründen ist es auf jeden Fall zweckmässig die Baulänge gleich L_{II} zu belassen, auch gilt die Kurve in Fig. 1 exakt nur für $L \geq L_{II}$.

Ein Dimensionierungsbeispiel für 4 Å - Neutronen möge den Sachverhalt noch veranschaulichen: Gewünscht sei eine Strahlbreite von 3 cm. Mit $k_z = 0,8 k_{z,m}$ berechnet sich nach voriger Gleichung der Krümmungsradius und damit nach Fig. 2 die Länge zu 45 Meter. Der Divergenzwinkel α am Ausgang des Neutronenleiters ist für beide Richtungen senkrecht zum Strahl 50 Winkelminuten bei 4 Å - Neutronen.

Herrn Professor Maier-Liebnitz danke ich für fruchtbare Diskussionen.

Literatur

- MAIER-LEIBNITZ, H. (1966). *Nukleonik*. Erscheint demnächst.
 MAIER-LEIBNITZ, H. & SPRINGER, T. (1963). *J. Nuclear Energy*, A/B 17, 217.

Acta Cryst. (1966). 20, 312

Separation of particle size and lattice strain in integral breadth measurements*. By N. C. HALDER and C. N. J. WAGNER, *Hammond Laboratory, Yale University, New Haven, Connecticut, U.S.A.*

(Received 1 June 1965 and in revised form 7 July 1965)

In the Warren & Averbach (1950, 1952) analysis of line broadening, the Fourier coefficients $A^D(L)$ of the line profiles broadened by lattice strains ϵ_L can be represented to a good approximation by a Gaussian function for small values of ϵ_L , i.e., $A^D(L) \approx \exp[2\pi^2 L^2 \langle \epsilon_L^2 \rangle / d^2]$ where L is the distance normal to the planes of interplanar spacing d . The particle size D_e is the reciprocal of the negative slope of the particle size coefficients $A^P(L)$ versus L curve at $L=0$, and $A^P(L)$ can be approximated by $A^P(L) \approx \exp[-L/D_e]$. The Fourier transforms of $A^D(L)$ and $A^P(L)$ lead to Gaussian and Cauchy line profiles respectively. Recently Schoening (1965) has demonstrated that the integral breadth of a line profile produced by the convolution of a Gaussian profile with a Cauchy profile is

$$b(s) = b^D \exp[-(b^P/\sqrt{\pi}b^D)^2][1 - \text{erf}(b^P/\sqrt{\pi}b^D)], \quad (1)$$

where

$$\text{erf}(b^P/\sqrt{\pi}b^D) = (2/\sqrt{\pi}) \int_0^{b^P/\sqrt{\pi}b^D} \exp(-t^2) dt; \quad (2)$$

b^D and b^P are the integral breadths due to strain and particle size and are given by

$$b^D = 1/\int_{-\infty}^{\infty} A^D(L) dL = 2\epsilon_1/d = \sqrt{2\pi} \langle \epsilon_L^2 \rangle^{1/2} / d \quad (3)$$

and

$$b^P = 1/\int_{-\infty}^{\infty} A^P(L) dL = 1/D_e = 1/2D_e, \quad (4)$$

Table 1. Values of particle sizes and strains in cold-worked silver-10% indium and pure tungsten fillings

Particle size		Warren-Averbach	Equation (5)		Equation (6)
Material	$[hkl]$	D_e	D_e^P	D_e	D_e^G
Ag-10%In	[111]	120 Å	210 Å	105 Å	185 Å
Ag-10%In	[100]	70	155	76	120
W	Isotropic	210	430	215	350
Strains		Warren-Averbach	Equation (5)		Equation (6)
Material	$[hkl]$	$\langle \epsilon_L^2 \rangle^{\ddagger}$	ϵ_L^P	$\langle \epsilon_L^2 \rangle^{\ddagger}$	ϵ_L^G
Ag-10%In	[111]	0.0038	0.0042	0.0034	0.0051
Ag-10%In	[100]	0.0050	0.0083	0.0066	0.0091
W	Isotropic	0.0020	0.0037	0.0030	0.0041