

## Verfeinerung der Kristallstruktur des Malachits, $\text{Cu}_2(\text{OH})_2\text{CO}_3$

VON P. SÜSSE

Mineralogisch-Kristallographisches Institut der Universität Göttingen, 34 Göttingen, Lotzestrasse 16–18, Deutschland

(Eingegangen am 18. April 1966)

The crystal structure of malachite has been refined from three-dimensional photographic data to  $R=0.06_3$  (with isotropic temperature factors). The structure given by Wells in 1951 has been confirmed in principle, the maximum shift of oxygen atoms in space being 0.23 Å. Difference Fourier functions have given indications for the hydrogen positions.

Die Kristallstruktur des Malachits wurde von Wells (1951) bestimmt. Der Zuverlässigkeitsfaktor dieser Strukturbestimmung liegt bei  $R=0,24$ . Eine Neubearbeitung dieses Minerals hatte zum Ziel, neben der Verfeinerung der Parameter der Cu-, O- und C-Atome, nach Möglichkeit die Lage der H-Atome zu bestimmen.

### Kristalldaten und Intensitätsmessung

Malachit kristallisiert monoklin in der Raumgruppe  $P2_1/a$ . Die Gitterkonstanten sind (Nat. Bur. Stand. Rep. 6415, 1959):

$$\begin{aligned} a &= 9,502 \text{ \AA} \\ b &= 11,974 \\ c &= 3,240 \\ \beta &= 98,75^\circ \end{aligned}$$

Bei vier Formeleinheiten in der Elementarzelle ergibt sich eine theoretische Dichte von  $3,983 \text{ g.cm}^{-3}$ . Die experimentelle Dichte wird mit  $4,05 \pm 0,02 \text{ g.cm}^{-3}$  angegeben (Dana's System of Mineralogy, 1963).

Die  $hkl$ -Reflexdaten bis  $\sin \theta/\lambda \approx 0,65 \text{ \AA}^{-1}$  wurden an einem unverzwilligten Kristall (Vorkommen: Schwarzenberg in Sachsen) mit den Ausmassen  $0,04 \times 0,08 \times 0,2 \text{ mm}$  über photometrierte Weissenberg-Equiuinclination-Filmaufnahmen nach der 'multiple-exposure-method' gesammelt. Als Drehachse des Kristalls diente [001]. Die  $hk0$ -,  $hk1$ -, und  $hk2$ -Aufnahmen wurden mit Cu  $K\alpha$ -, die  $hk3$ -Aufnahmen mit Mo  $K\alpha$ -Strahlung gemacht. Extinktions- und Absorptionskorrekturen ( $\mu \cdot \bar{r} = 0,25$ ) wurden nicht vorgenommen. Der Polarisations- und Lorentzfaktor wurde für jeden Reflex numerisch berechnet. Die Intensitäten der Reflexe der einzelnen Schichtlinien wurden mit Hilfe von  $h0l$ -Daten aus Precession-Aufnahmen (Mo  $K\alpha$ -Strahlung) einander angeglichen.

### Die Verfeinerung der Atomparameter

Die Verfeinerung der Struktur wurde über zweidimensionale Fourierdifferenzsynthesen mit abschliessendem dreidimensionalen Least-squares-Refinement durchgeführt. Als Streukurven wurden verwendet:  $f_{\text{Cu}2+}$  für beide Kupferatome,  $f_{\text{O}}$  für Sauerstoffe und Hydroxylgruppen und  $f_{\text{C}}$  für den Kohlenstoff. Alle Werte wurden

der Arbeit von Berghuis, Haanappel, Potters, Loopstra, MacGillavry & Veenendaal (1955) entnommen bzw. daraus extrapoliert. Die Verfeinerung durch zweidimensionale Fourierdifferenzsynthesen  $\Delta\rho(xy)$  und  $\Delta\rho(xz)$  führte zu Zuverlässigkeitsfaktoren von  $R(hk0) = 4\%$  und  $R(h0l) = 11\%$ . Eine weitere Verfeinerung der  $z$ -Parameter in der  $h0l$ -Projektion empfahl sich wegen zahlreicher Überlappungen nicht. Die Verfeinerung nach der Methode der Kleinsten Quadrate wurde mit isotropen Temperaturfaktoren, einem einzigen Skalenfaktor und Einheitsgewicht durchgeführt. Von der Einführung anisotroper Temperaturfaktoren wurde abgesehen, da der zur Messung herangezogene Kristall einerseits keine Kugelform hatte und andererseits auch keine Absorptionskorrektur durchgeführt worden war. Nach fünf Verfeinerungszyklen ergab sich ein Zuverlässigkeitsfaktor von  $R(hkl) = 0,06_3$ . Tabelle 1 enthält die beobachteten und berechneten Strukturparameter bezogen auf vier Formeleinheiten. Zur Verfeinerung wurden 579 beobachtete  $hkl$ -Reflexdaten herangezogen. Zwölf Reflexe mit den stärksten Intensitätswerten, die nicht mit Sicherheit genau gemessen werden konnten (in Tabelle 1 in Klammern), wurden bei der Verfeinerung nicht berücksichtigt. Der Rest der insgesamt 690 im Messbereich liegenden Reflexe wurde nicht beobachtet. Diesen Reflexen wurden Werte nach Hamilton (1955) zugeordnet. Sie sind in Tabelle 1 durch ein  $H$  gekennzeichnet. Unter Berücksichtigung aller 690 Daten ergibt sich ein Zuverlässigkeitsfaktor von  $R' = 0,07_2$ . Die Reflexe, die im praktisch nicht messbaren Bereich der Equiuinclination-Aufnahmen um [001] liegen, wurden, soweit es sich um  $h0l$ -Reflexe handelt, durch Daten aus Precession-Aufnahmen ersetzt (in Tabelle 1 durch  $P$  gekennzeichnet). Die übrigen sind durch Sterne bezeichnet. In Tabelle 2 sind die verfeinerten Atomparameter aufgeführt. In Klammern stehen die Werte von Wells (1951). Am grössten sind die Unterschiede in den  $z$ -Parametern des O(1) und O(2) und den  $x, y$ -Parametern des O(H2), was zu Positionsverschiebungen der betreffenden Atome bis  $0,23 \text{ \AA}$  im Raum führt.

### Beschreibung der Struktur

Die Struktur des Malachits ist in den Fig. 1 und 2 dargestellt. Die wichtigsten interatomaren Abstände und



Winkel sind in Tabelle 3 aufgeführt. Die Verfeinerung hat die von Wells (1951) bestimmte Struktur in den wesentlichen Zügen bestätigt. Beide Cu besitzen eine 4+2-Koordination. Die vier kurzen planar-quadratischen Bindungen gehen zu je zwei Sauerstoffen und

Hydroxylgruppen, die sich in Diagonalstellung befinden. Beim Cu(1) verlaufen die um ca. 30% längeren Bindungen ungefähr senkrecht dazu nach je einem Sauerstoff. Vom Cu(2) aus gehen die langen Bindungen zu je einer Hydroxylgruppe und sind nur etwa 20%

Tabelle 2. Die verfeinerten Atomparameter

In Klammern die Werte von Wells (1951).

Atom	$x$	$\sigma(x)$	$y$	$\sigma(y)$	$z$	$\sigma(z)$	$B$ ( $\text{\AA}^2$ )	$\sigma(B)$
Cu(1)	0,49807 (0,50)	0,00018	0,28787 (0,29)	0,00014	0,89313 (0,89)	0,00053	1,08 <sub>2</sub>	0,03 <sub>8</sub>
Cu(2)	0,23229 (0,235)	0,00017	0,39321 (0,39)	0,00014	0,38832 (0,38)	0,00054	1,04 <sub>3</sub>	0,03 <sub>8</sub>
O(1)	0,13123 (0,14)	0,0008 <sub>5</sub>	0,13627 (0,13)	0,0006 <sub>7</sub>	0,3381 (0,28)	0,002 <sub>7</sub>	0,5 <sub>5</sub>	0,1 <sub>4</sub>
O(2)	0,33267 (0,34)	0,0008 <sub>5</sub>	0,23506 (0,24)	0,0006 <sub>6</sub>	0,4446 (0,50)	0,002 <sub>7</sub>	0,5 <sub>3</sub>	0,1 <sub>3</sub>
O(3)	0,33414 (0,33)	0,0008 <sub>6</sub>	0,05557 (0,05)	0,0006 <sub>9</sub>	0,6289 (0,63)	0,002 <sub>7</sub>	0,6 <sub>4</sub>	0,1 <sub>4</sub>
O(H1)	0,09400 (0,09)	0,0008 <sub>3</sub>	0,35169 (0,36)	0,0006 <sub>5</sub>	0,9160 (0,92)	0,002 <sub>6</sub>	0,3 <sub>8</sub>	0,1 <sub>3</sub>
O(H2)	0,37653 (0,39)	0,0008 <sub>1</sub>	0,41610 (0,43)	0,0006 <sub>6</sub>	0,8649 (0,86)	0,002 <sub>5</sub>	0,4 <sub>6</sub>	0,1 <sub>3</sub>
C	0,2666 (0,27)	0,001 <sub>2</sub>	0,14042 (0,13)	0,0009 <sub>5</sub>	0,4710 (0,47)	0,003 <sub>9</sub>	0,5 <sub>2</sub>	0,1 <sub>8</sub>

Tabelle 3. Die wichtigsten interatomaren Abstände und Winkel

## 1. Im Cu(1)-Polyeder

Abstand		Winkel	
O(1*)	1,987 ± 0,008 Å	O(1*) — Cu(1) — O(H2)	88,9 ± 0,3°
O(2)	2,071 ± 0,008	O(H2) — — O(2)	79,8 ± 0,3
Cu(1) O(H1')	1,899 ± 0,008	O(2) — — O(H1')	93,9 ± 0,3
O(H2)	1,915 ± 0,008	O(H1') — — O(1*)	97,2 ± 0,3
O(1')	2,520 ± 0,008	O(1') — — O(H1')	93,2 ± 0,3
O(2*)	2,630 ± 0,008	O(1') — — O(1*)	91,1 ± 0,3
		O(2*) — — O(H2)	78,9 ± 0,3
		O(2*) — — O(2)	86,3 ± 0,3
O(1*) — O(H1')	2,916 ± 0,012	O(H1') — — O(H2)	171,7 ± 2,2
O(1*) — O(H2)	2,733 ± 0,015	O(1*) — — O(2)	168,6 ± 1,6
O(2) — O(H1')	2,906 ± 0,016	O(1') — — O(2*)	171,2 ± 1,6
O(2) — O(H2)	2,560 ± 0,011		

## 2. Im Cu(2)-Polyeder

Abstand		Winkel	
O(2)	2,116 ± 0,008 Å	O(2) — — Cu(2) — O(H2)	78,6 ± 0,3°
O(3')	2,042 ± 0,008	O(H2) — — O(3')	93,8 ± 0,3
Cu(2) O(H1*)	1,924 ± 0,008	O(3') — — O(H1*)	93,1 ± 0,3
O(H2)	1,922 ± 0,008	O(H1*) — — O(2)	94,7 ± 0,3
O(H1)	2,362 ± 0,008	O(H1) — — O(3')	90,9 ± 0,3
O(H2*)	2,353 ± 0,008	O(H1) — — O(H1*)	97,7 ± 0,3
		O(H2*) — — O(2)	82,1 ± 0,3
		O(H2*) — — O(H2)	98,1 ± 0,3
O(3') — O(H1*)	2,880 ± 0,012	O(2) — — O(3')	171,1 ± 2,0
O(3') — O(H2)	2,895 ± 0,014	O(H1*) — — O(H2)	173,2 ± 2,7
O(2) — O(H2)	2,560 ± 0,011	O(H1) — — O(H2*)	174,4 ± 2,7
O(2) — O(H1*)	2,974 ± 0,015		

3. In der CO<sub>3</sub>-Gruppe

Abstand		Winkel	
C — O(1)	1,293 ± 0,024 Å	O(1) — — C — — O(3)	121,4 ± 1,0°
C — O(2)	1,305 ± 0,017	O(3) — — C — — O(2)	120,2 ± 1,3
C — O(3)	1,267 ± 0,017	O(2) — — C — — O(1)	118,4 ± 0,9
O(1) — O(2)	2,232 ± 0,016		
O(2) — O(3)	2,230 ± 0,012		
O(3) — O(1)	2,233 ± 0,016		

länger als die planar-quadratischen. Der relativ lange Cu(2)–O(2)–Abstand innerhalb der planaren Gruppe, bei Wells (1951) 2,07 Å, auf den Zemann (1961) aufmerksam gemacht hat und der in seiner Verfeinerung der  $x, y$ -Parameter mit den Daten von Wells (1951)

bereits in der Projektion  $2,12 \pm 0,04$  Å beträgt, muss nunmehr mit  $2,12 \pm 0,01$  Å angenommen werden. Es ergeben sich somit Unterschiede der Bindungslängen innerhalb der planar-quadratischen Cu-Gruppen bis zu 10%. Ähnliche Verhältnisse wurden z.B. von Flügel-

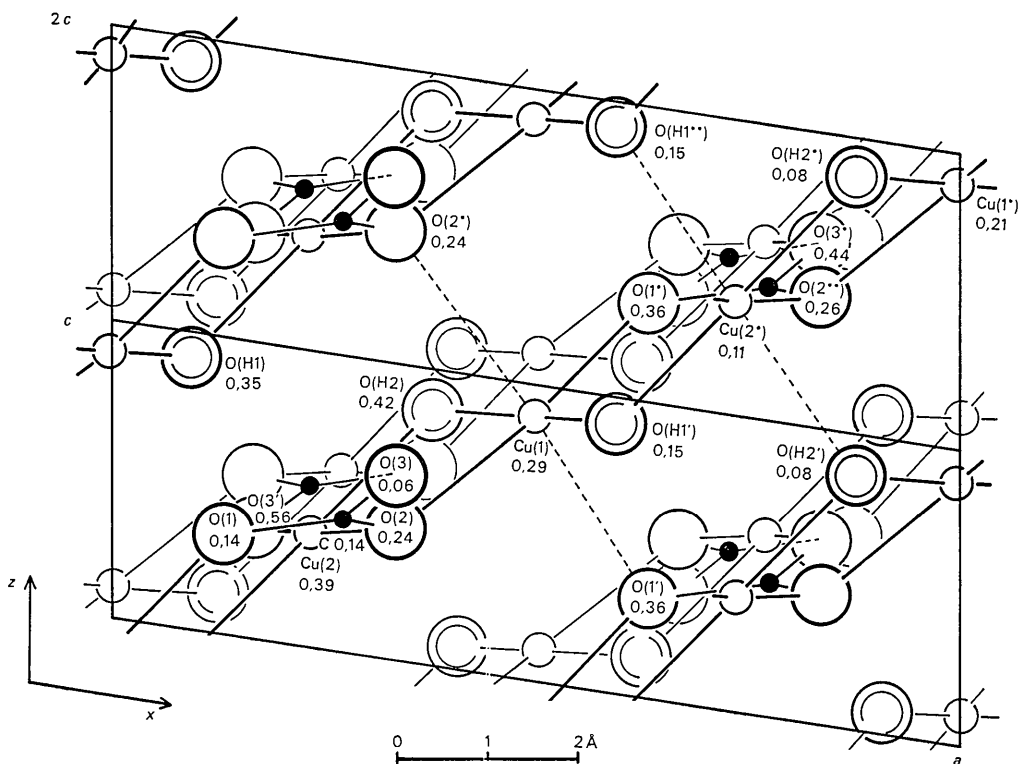


Fig. 1. Projektion zweier Elementarzellen der Struktur auf die Ebene (010). Die langen Kupfer-Anionen-Bindungen sind gestrichelt gezeichnet. Beigefügt sind die auf Hundertstel gerundeten  $y$ -Parameter.

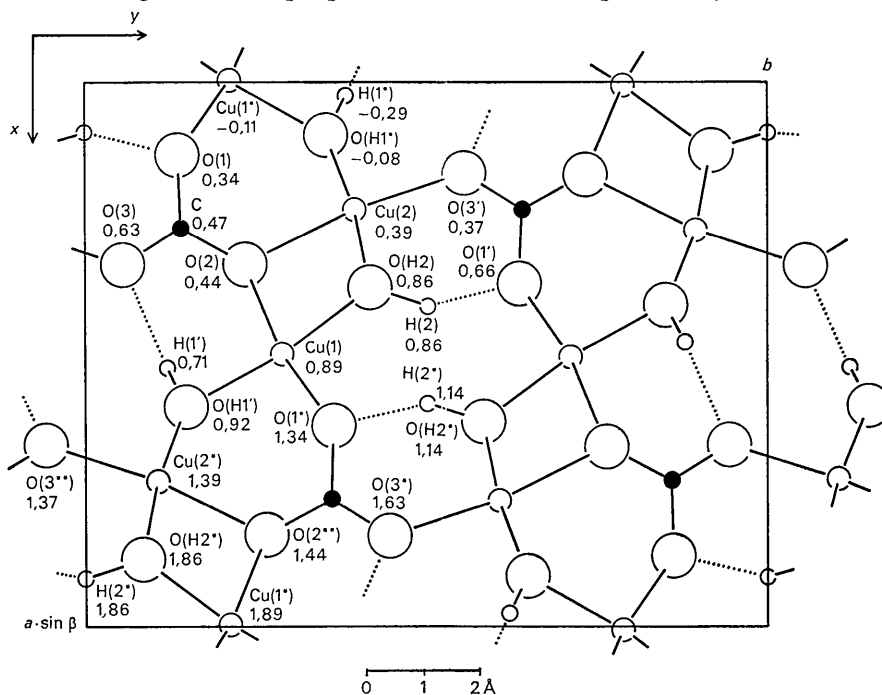


Fig. 2. Projektion einer Schichtebene (201) längs [001]. Diese Projektion enthält alle kurzen Bindungsabstände. Beigefügt sind die gerundeten  $z$ -Parameter.

Kahler (1963) in der Struktur des Dolerophanits und von Cid-Dresdener (1965) in der Struktur des Türkis festgestellt, wobei im Türkis ein planarer Cu–OH–Abstand von 2,11 Å auftritt.

In der  $\text{CO}_3$ -Gruppe sitzt das C im Schwerpunkt des von den Sauerstoffatomen gebildeten gleichseitigen Dreiecks mit einem durchschnittlichen C–O-Abstand von 1,28 Å. Die Summe der Bindungswinkel O–C–O ist praktisch gleich  $360^\circ$ . Unterschiedlich ist die Bindung der einzelnen Anionen zum Kupfer. Die beiden O(H) und das O(2) haben je zwei kurze und einen langen, O(1) hat nur einen kurzen und einen langen und O(3) überhaupt nur einen kurzen Bindungsabstand zum Kupfer.

Die Verknüpfung der einzelnen Strukturelemente ist folgendermassen: Die planar-quadratischen Cu-Gruppen bilden zusammen mit der  $\text{CO}_3$ -Gruppe Schichtebenen parallel ( $\bar{2}01$ ). Innerhalb der Schichten bilden die planaren Cu-Gruppen Ketten in Richtung [102], worin Kanten- und Eckenverknüpfung der Quadrate abwechselnd vorkommen, (s. Fig. 2). Alle kurzen Kationen–Anionen–Abstände sowie die Wasserstoffbrücken (s. unten) befinden sich innerhalb der Schichten, während die langen Cu–Anionen–Bindungen normal zu den Schichten verlaufen (s. Fig. 1).

Aus dieser Struktur erklärt sich die gute Spaltbarkeit des Malachits nach ( $\bar{2}01$ ) und die negative Doppelbrechung. Dagegen steht die Tatsache des nadeligen Wachstums in Richtung [001] scheinbar im Widerspruch zur Struktur. Möglicherweise besteht ein ursächlicher Zusammenhang zwischen der Längerstreckung nach [001] und der Zwillingsbildung nach (100) ('Schwalbenschwanzzwillinge'). Einerseits nämlich sind praktisch alle nadeligen Malachite verzwillingt, andererseits haben die wenigen in der Natur beobachteten und beschriebenen unverzwilligten Kristalle keinen nadeligen Habitus, sondern sind mehr oder weniger tafelig ausgebildet (s. z.B. Goldschmidt, 1918).

### Die Lage der H-Atome

Auf der Grundlage der verfeinerten Parameter der Cu-, O- und C-Atome konnte dann versucht werden, wahrscheinliche Positionen für die H-Atome anzugeben. Ultrarot-Spektralaufnahmen hatten Absorptionsbanden bei einer Wellenlänge von  $3,06 \mu$  gezeigt, was auf Wasserstoffbrücken von etwa 2,7 Å hinweist (s. z.B. Glemser, 1961). In der Struktur befinden sich zwei OH–O-Distanzen, die nicht Kanten der Cu-Koordinationspolyeder sind und die die entsprechende Länge

besitzen:  $\text{O}(\text{H}1')\text{--O}(3) = 2,72 \text{ \AA}$  und  $\text{O}(\text{H}2)\text{--O}(1') = 2,74 \text{ \AA}$  (s. Tabelle 5). Folglich wird man die Lage der H-Atome in ungefähr 1 Å Abstand von den O(H) in der Nähe dieser Verbindungslinien vermuten.

Um nach Möglichkeit aus den gemessenen Reflexdaten noch weitere Hinweise zu bekommen, wurde eine dreidimensionale  $F_o - F_c$ -Synthese mit 210 Reflexdaten bis  $\sin \theta/\lambda = 0,4 \text{ \AA}^{-1}$  gerechnet. In diesem Bereich ist der Streuanteil der Wasserstoffe noch relativ hoch, und die mit einer anderen Strahlung gemessenen  $hk3$ -Reflexe brauchen dann nicht berücksichtigt zu werden, da sie ausserhalb dieses Bereiches liegen. Die  $F_o - F_c$ -Synthese zeigt in etwa 1 Å Abstand von den O(H)-Atomen Maxima, die als H-Maxima gedeutet werden können. Das H(2)-Maximum ist mit  $0,8 \text{ e. \AA}^{-3}$  das höchste der ganzen Synthese, während das angenommene H(1)-Maximum mit  $0,5 \text{ e. \AA}^{-3}$  einen unsichereren Beleg darstellt, da sich noch einige weitere Maxima von dieser Höhe in der Synthese befinden, allerdings an Stellen, die für Wasserstoff nicht in Frage kommen und die offenbar Anisotropie- und Absorptionseffekte darstellen, zumal sie in der Nähe von Atompositionen liegen. Eine Strukturfaktorrechnung lieferte nach Einsetzen der H-Atomparameter und einem isotropen Temperaturfaktor von  $B = 4,0 \text{ \AA}^2$  für beide H-Atome eine Senkung des  $R$ -Wertes von 4,9 auf 4,6% für die herangezogenen Reflexdaten. Die  $F_o - F_c$ -Synthese liefert also eine gewisse Stütze dafür, dass sich die H-Atome an den vermuteten Stellen befinden. In Tabelle 4 sind die H-Parameter angegeben. Die Standardabweichungen sind Schätzwerte.

Tabelle 4. Wasserstoffparameter

Atom	$x$	$y$	$z$
H(1)	$0,02 \pm 0,01$	$0,38 \pm 0,01$	$0,71 \pm 0,05$
H(2)	$0,41 \pm 0,01$	$0,50 \pm 0,01$	$0,86 \pm 0,05$

Nach diesem Ergebnis sitzen die OH-Dipole an der Spitze von verzerrten trigonalen Pyramiden, deren Basis jeweils drei Cu-Atome bilden und deren Kanten von zwei kurzen und einer langen Cu–O(H)-Bindung gebildet werden. Die Richtung der OH-Dipole verläuft ungefähr senkrecht zur Prismenbasis. Winkel und Abstände der H-Bindungen sind in Tabelle 5 aufgeführt. Die kurzen O–H-Abstände liegen bei 1 Å, die H...O-Abstände bei 1,80 Å. Ausserordentlich nahe kommen sich zwei H(2), deren Distanz von 1,8 Å beträchtlich unter der Summe der van der Waals-Radien liegt. Doch ist es gerade das H(2), dessen Position durch ein eindeutiges Maximum in der  $F_o - F_c$ -Synthese relativ gut belegt ist.

Tabelle 5. Abstände und Winkel der H-Bindungen

	Abstand		Winkel
H(1') — O(H1')	$0,92 \pm 0,20 \text{ \AA}$	O(H1') — H(1') — O(3)	$149,0 \pm 18,4^\circ$
H(1') — O(3)	$1,91 \pm 0,24$		
O(H1') — O(3)	$2,715 \pm 0,011$		
H(2) — H(2*)	$1,81 \pm 0,26$		
H(2) — O(H2)	$1,05 \pm 0,14$	O(H2) — H(2) — O(1')	$146,2 \pm 11,0$
H(2) — O(1')	$1,78 \pm 0,13$		
O(H2) — O(1')	$2,738 \pm 0,017$		

Die Rechenarbeiten wurden auf einer IBM-7040-Maschine in Göttingen mit Programmen des Mineralogisch-Kristallographischen Instituts von Frl. v. Merrens, Dr V. Kupčik, Dr K. Sahl und dem Autor durchgeführt. Die Verfeinerung nach der Methode der Kleinsten Quadrate wurde nach dem Programm von Busing, Martin und Levy auf einer IBM-7090-Maschine in München gerechnet.

Herrn Prof. Dr J. Zemann danke ich vielmals für die Anregung zu dieser Arbeit und sein förderndes Interesse an ihrem Fortgang, sowie für das Zurverfügungstellen der Hilfsmittel des Instituts. Malachit-Kristalle stellten freundlicherweise zur Verfügung die Herren Professoren C. Frondel (Cambridge, Mass.), S. Koch (Szeged), H. Meixner (Knappenberg) und die Sammlung der Mineralogischen Anstalten Göttingen. Herrn Prof. Dr W. Hoppe und Herrn Dr R. Huber, München, danke ich für die freundliche Hilfe bei der Durchführung der Kleinst-Quadrate-Verfeinerung.

Mein besonderer Dank gilt der Deutschen Forschungsgemeinschaft, die die Arbeit durch ein Forschungsstipendium und Sachbeihilfen ermöglicht hat.

### Literatur

- BERGHUIS, J., HAANAPPEL, IJ. M., POTTERS, M., LOOPSTRA, B. O., MACGILLAVRY, C. H. & VEENENDAAL, A. L. (1955). *Acta Cryst.* **8**, 478.  
 CID-DRESDENER, H. (1965). *Z. Kristallogr.* **121**, 87.  
*Dana's System of Mineralogy* (1963). 7th ed. Vol. 2. New York, London: John Wiley.  
 FLÜGEL-KAHLER, E. (1963). *Acta Cryst.* **16**, 1009.  
 GLEMSE, O. (1961). *Angew. Chem.* **73**, 785.  
 GOLDSCHMIDT, V. (1918). *Atlas der Krystallformen*, Band 5, Tafel 118/19. Heidelberg: Carl Winters Universitätsbuchhandlung.  
 HAMILTON, W. C. (1955). *Acta Cryst.* **8**, 185.  
*Nat. Bur. Stand. Rep.* 6415 (1959). March-April, p. 15.  
 WELLS, A. F. (1951). *Acta Cryst.* **4**, 200.  
 ZEMANN, J. (1961). *Fortschr. Miner.* **39**, 59.

## Short Communications

*Contributions intended for publication under this heading should be expressly so marked; they should not exceed about 1000 words; they should be forwarded in the usual way to the appropriate Co-editor; they will be published as speedily as possible. Publication will be quicker if the contributions are without illustrations.*

*Acta Cryst.* (1967). **22**, 151

**Line profiles of neutron powder-diffraction peaks for structure refinement.\*** By H. M. RIETVELD, *Reactor Centrum Nederland, Petten, The Netherlands*

Received 28 July 1966

A structure refinement procedure is described, which obtains a least-squares fit between the calculated and observed intensities measured at equal angular intervals on a neutron powder-diffractometer. It is shown that the structure parameters are significantly more reliable than those determined by a method using the integrated intensities of overlapping peaks.

While the structure determination from a well resolved powder diffraction diagram often proves to be quite feasible, the inherent presence of overlapping reflexions generally prevents the full use of the available information to refine the structural parameters. An obvious solution is to include as observed data in the least-squares refinement the integrated intensities of the composite diffraction peaks (Rietveld, 1966). A major drawback of such a procedure, however, is the fact that any detail in the profiles of these peaks is lost.

In the case of neutron diffraction, a more direct method to solve this problem was found when it appeared that the peak shapes of the single diffraction peaks obtained from the powder-diffractometer at Petten were Gaussian. The profile of a composite peak can then be regarded as the sum total of the constituent Gaussian peaks representing the individual Bragg reflexions. The contributions of each

of these constituent peaks to the enveloping peak at position  $2\theta_i$  can be written as  $a \cdot \exp \{-4\ln 2(2\theta_i - 2\theta_0)^2/b^2\}$ .

The quantities  $b$  and  $2\theta_0$  in this expression, being respectively the full width at half height (halfwidth) and the position of the peak, can be obtained from an inspection of the diffraction diagram, the unit-cell parameters and the wavelength. The remaining quantity  $a$  is then the only unknown. It is proportional to  $jF^2$ , where  $j$  is the multiplicity of the structure factor  $F$ , the precise relation being as follows.

Equating the area of the Gauss curve to the integrated intensity gives

$$\frac{1}{2}\sqrt{\pi \ln 2} a \cdot b = cjF^2/(\sin 2\theta_0 \sin \theta_0),$$

from which

$$a = 2cjF^2/(b\sqrt{\pi \ln 2} \sin 2\theta_0 \sin \theta_0).$$

Substituting

$$c' = 2c/\sqrt{\pi \ln 2}$$

gives  $a = c'jF^2/(b \sin 2\theta_0 \sin \theta_0)$ , where  $c'$  represents an overall scale factor.

\* Work supported jointly by Reactor Centrum Nederland and Institutt for Atomenergi, Kjeller, Norway.