

Acta Cryst. (1967), **22**, 432

Partielle Atomformfaktoren für Kohlenstoff im Valenzzustand ($1s^2 2s 2p^3$) berechnet aus Hartree-Fock-SCF-Funktionen nach Jucys. Von RUDOLF ALLMANN, *Mineralogisches Institut der Universität Marburg, 355 Marburg, Deutschhausstr. 10, Deutschland*

(Eingegangen am 1. August 1966)

Scattering factors for carbon in the valence state are calculated from Hartree-Fock-SCF functions separately for the K and the L shell. Also f^\perp and f^\parallel are given for a single $2p$ electron.

Partielle Atomformfaktoren für die innere und die Valenzschale des Kohlenstoffs wurden bisher von McWeeny (1951, 1954) aus Slater-Orbitalen berechnet und z.B. von Fritchie (1966) für die Berechnung von Formfaktoren gebundener Atome benutzt. Für eigene geplante Berechnungen von Atomformfaktoren unter Berücksichtigung der σ - und π -Bindungselektronen wurden die partiellen Atomformfaktoren von Kohlenstoff aus den genaueren Hartree-Fock-SCF-Funktionen von Jucys (1947) neu berechnet. Nach Moffitt (1954) wurde der Zustand

$$(sxyz, V_4) = (5/16)^5 S^0 + (3/16)^3 S^0 + (3/8)^3 D^0 + (1/8)^1 D^0$$

zur Berechnung der Elektronendichte $\rho(r)$ und der radialen Elektronendichte $U(r) = 4\pi r^2 \cdot \rho(r)$ zugrunde gelegt.

Die Berechnung von $\rho(r)$ und $U(r)$ aus den Werten von Jucys führte Herr D. Hoffmann vom Institut für Physikalische Chemie in Marburg durch. Durch Interpolation mit einem Polynom 7. Grades wurden daraus alle Werte $\rho(r)$ und $U(r)$ bis $r = 12$ a.u. (1 a.u. = 0.5292 Å) in Abständen von 0.01 a.u. berechnet und danach mit Hilfe der Simpson-

Formel die Integrale $f(s) = \int U(r) \frac{\sin sr}{sr} dr$ und $f_{2p}^\perp(s) = \int \rho(r) \left(\frac{\sin sr}{sr} - \cos sr \right) dr$ numerisch gelöst. Bei Erhöhung

der Schrittweite auf 0.02 a.u. änderten sich alle angegebenen Werte um weniger als 0.0002 e. f^\perp und f^\parallel sind die beiden Komponenten des anisotropen Formfaktors eines $2p$ -Elektrons (Bezeichnung nach McWeeny).

Tabelle 1. Partielle Atomformfaktoren für Kohlenstoff im Valenzzustand. $\sin \theta/\lambda$ in Å⁻¹

$\sin \theta/\lambda$	f_{core} ($1s^2$)	f_{shell} ($2s 2p^3$)	f_{total}	$f^\perp(2p)$	$f^\parallel(2p)$
0.00 Å ⁻¹	2.000	4.000	6.000	1.000	1.000
0.05	1.997	3.744	5.741	0.959	0.878
0.10	1.986	3.098	5.084	0.851	0.589
0.15	1.968	2.315	4.283	0.710	0.272
0.20	1.944	1.597	3.541	0.567	0.024
0.25	1.913	1.033	2.946	0.441	-0.132
0.30	1.877	0.630	2.507	0.338	-0.210
0.35	1.836	0.360	2.196	0.258	-0.236
0.40	1.789	0.189	1.978	0.196	-0.232
0.45	1.739	0.085	1.824	0.149	-0.214
0.50	1.686	0.025	1.711	0.114	-0.189
0.55	1.629	-0.006	1.623	0.088	-0.163
0.60	1.571	-0.020	1.551	0.068	-0.139
0.65	1.511	-0.024	1.487	0.053	-0.117
0.70	1.451	-0.024	1.427	0.042	-0.098
0.75	1.390	-0.020	1.370	0.033	-0.082
0.80	1.329	-0.015	1.314	0.026	-0.068
0.85	1.268	-0.009	1.259	0.021	-0.057
0.90	1.209	-0.005	1.204	0.017	-0.048
0.95	1.150	-0.001	1.149	0.014	-0.040
1.00	1.093	0.003	1.096	0.011	-0.033
1.05	1.038	0.005	1.043	0.009	-0.028
1.10	0.984	0.008	0.992	0.008	-0.024
1.15	0.933	0.009	0.942	0.006	-0.020
1.20	0.883	0.011	0.894	0.005	-0.017
1.25	0.836	0.011	0.847	0.004	-0.015
1.30	0.790	0.012	0.802	0.004	-0.013
1.35	0.747	0.012	0.759	0.003	-0.011
1.40	0.706	0.012	0.718	0.003	-0.009
1.45	0.667	0.012	0.679	0.002	-0.008
1.50	0.630	0.012	0.642	0.002	-0.007
2.0	0.355	0.008	0.363	0.000	-0.002
2.5	0.205	0.005	0.210		
3.0	0.123	0.003	0.126		
3.5	0.077	0.002	0.079		
4.0	0.050	0.001	0.051		
4.5	0.034	0.001	0.034		
5.0	0.023	0.001	0.024		
5.5	0.017	0.000	0.017		
6.0	0.012	0.000	0.012		

Tabelle 2. Partielle Atomformfaktoren für Kohlenstoff im Valenzzustand. $\sin \theta/\lambda$ in a.u.⁻¹

$\sin \theta/\lambda$	f_{core} (1s ²)	f_{shell} (2s2p ³)	f_{total}	f_{total} H+I	$f^+(2p)$	$f^-(2p)$
0.000 a.u. ⁻¹	2.000	4.000	6.000	6.000	1.000	1.000
0.025	1.997	3.770	5.767	5.766	0.963	0.891
0.050	1.987	3.181	5.168	5.181	0.865	0.625
0.075	1.971	2.444	4.415	4.426	0.734	0.321
0.100	1.950	1.744	3.693	3.696	0.597	0.070
0.125	1.922	1.172	3.094	3.092	0.474	-0.098
0.150	1.890	0.747	2.636	2.634	0.370	-0.191
0.175	1.852	0.451	2.303	2.300	0.286	-0.231
0.200	1.810	0.254	2.065	2.061	0.221	-0.236
0.225	1.764	0.130	1.894		0.171	-0.225
0.250	1.715	0.054	1.769	1.768	0.132	-0.203
0.275	1.664	0.011	1.674		0.103	-0.179
0.300	1.610	-0.012	1.598	1.597	0.081	-0.155
0.325	1.554	-0.022	1.532		0.063	-0.133
0.350	1.497	-0.025	1.473		0.050	-0.112
0.375	1.440	-0.023	1.417		0.040	-0.095
0.400	1.382	-0.019	1.363	1.364	0.032	-0.080
0.425	1.325	-0.014	1.310		0.026	-0.067
0.450	1.268	-0.010	1.258		0.021	-0.057
0.475	1.211	-0.005	1.206		0.017	-0.048
0.500	1.156	-0.001	1.155	1.155	0.014	-0.041
0.525	1.102	0.002	1.104		0.011	-0.035
0.550	1.049	0.005	1.054		0.009	-0.029
0.575	0.998	0.007	1.006		0.008	-0.025
0.600	0.949	0.009	0.958	0.959	0.007	-0.021
0.625	0.902	0.010	0.912		0.006	-0.018
0.650	0.856	0.011	0.867		0.005	-0.016
0.675	0.812	0.012	0.824		0.004	-0.014
0.700	0.770	0.012	0.782	0.783	0.003	-0.012
0.725	0.730	0.012	0.743		0.003	-0.010
0.750	0.692	0.012	0.704		0.002	-0.009
1.00	0.402	0.009	0.412		0.001	-0.002
1.25	0.238	0.006	0.243			
1.50	0.145	0.004	0.149			
1.75	0.092	0.002	0.094			
2.00	0.060	0.002	0.062			
2.25	0.041	0.001	0.042			
2.50	0.028	0.001	0.029			
2.75	0.020	0.001	0.021			
3.00	0.015	0.000	0.015			

Die Ergebnisse sind in Tabelle 1 für $\sin \theta/\lambda$ in Å⁻¹ und in Tabelle 2 in a.u.⁻¹ angegeben. Die Werte f_{total} stimmen gut mit den Werten von Hoerni & Ibers (1954) überein, die ebenfalls aus Hartree-Fock-Funktionen berechnet wurden. Die maximale Abweichung zu diesen Werten beträgt 0,013 e (siehe Spalte H+I in Tabelle 2, und C (valence) in den *International Tables for X-ray Crystallography*, 1962). Die Abweichungen von den Werten McWeenys sind bedeutend grösser (bis zu 0.165 e).

Literatur

- HOERNI, J. A. & IBERS, J. A. (1954). *Acta Cryst.* **7**, 744.
International Tables for X-ray Crystallography (1962).
 Vol. III. Table 3.3.1A, p.202. Birmingham: Kynoch Press.
 JUCYS, A. (1947). *J. Phys. USSR*, **11**, 49.
 MOFFITT, W. (1954). *Rep. Progr. Phys.* **17**, 173.
 MCWEENY, R. (1951). *Acta Cryst.* **4**, 513.
 MCWEENY, R. (1954). *Acta Cryst.* **7**, 180.