

use is the determination of the orientation of a molecule, whose approximate shape is known. If the molecule is planar, the procedure is quite simple and straightforward and can be carried out with an accuracy of 2-3°.

The other possible use is the determination of the molecular structure by calculating a molecular Patterson function from the intensity distribution of the extended diffuse areas. Again the method is most effective in the case of planar molecules, where it reduces to a two-dimensional problem. But even in three dimensions it offers two advantages over conventional Patterson methods, namely, the possibility of measuring intensities on a finer mesh than that of the reciprocal lattice, and also the possibility of separating the contributions of the molecules within a unit cell.

Similar extended diffuse areas were first observed in electron diffraction patterns. X-ray diffraction has the distinct advantage that by using an appropriate technique the extended diffuse areas can be studied in sections, which are practically free from disturbing Laue spots and the strong diffuse regions surrounding them.

To be published in *Acta Cryst.*

**S1-15. La densité électronique du milieu cristallin et la diffusion des rayons X par l'agitation thermique des atomes.** Par JEAN LAVAL, *Collège de France, Paris, France.*

L'agitation thermique des atomes fait fluctuer la densité électronique du milieu cristallin. Cette densité ne reste périodique qu'en moyenne dans le temps. Néanmoins, on peut en effectuer l'analyse harmonique au moyen de l'intégrale de Fourier. Outre des composantes stationnaires qui donnent lieu aux réflexions sélectives de Bragg, on trouve des trains d'ondes progressives planes, produits par l'agitation thermique des atomes. Comme les strates cristallines, ces trains d'ondes de densité électronique réfléchissent sélectivement les rayons X. Leur pouvoir diffusant global  $\bar{\omega}$  (par angle solide unitaire et par électron du cristal) peut être exprimé par une série:

$$\bar{\omega} = \bar{\omega}_1 + \bar{\omega}_2 + \dots$$

dont le terme  $\bar{\omega}_n$ , mesure l'intensité des rayons X qui sont rejetés par les réflexions sélectives sur les ondes de densité électronique formées par  $n$  oscillations harmoniques des atomes. Si la fréquence, la forme et l'amplitude des oscillations thermiques sont connues, on peut déduire du pouvoir  $\bar{\omega}$  les modules de facteurs de structure qui, semblables aux facteurs de structure associés aux réflexions sélectives de Bragg, sont déterminés par la densité électronique du milieu cristallin. Les modules de ces facteurs livrent de nouvelles données sur la densité électronique, ils permettent de la définir avec une précision accrue.

**S1-16. Fréquences des oscillations optiques dans la sylvine à 140 °K.** Par M. N. BOCCARA, *Collège de France, Paris, France.*

Par la photométrie des rayons X diffusés par un cristal de sylvine maintenu à 140 °K., nous avons déterminé les fréquences des oscillations 'optiques' ou 'rapides'.

Cette étude a montré que, pour un vecteur d'onde dirigé suivant un axe de symétrie ternaire, les fréquences des oscillations optiques longitudinales sont supérieures à celles des oscillations optiques transversales.

Pour les très grandes longueurs d'onde le rapport des fréquences des oscillations longitudinales et transversales est sensiblement égal à 1,1.

Pour interpréter ces résultats expérimentaux, nous avons décomposé le champ de force qui règne dans le cristal en deux parties:

(1) Un champ de force représenté par des tenseurs assujettis à la symétrie du milieu cristallin rendant compte des interactions à courte distance.

(2) Un champ de force coulombien produit par la polarisation électrique développée par une onde d'agitation thermique.

Ce champ de force est défini à partir des constantes élastiques, de la fréquence d'absorption infra-rouge et de la charge effective des ions supposés rigides et non polarisables.

La charge effective ajustée aux résultats expérimentaux doit être prise égale à 0,3 fois celle d'un électron.

**S1-17. The effect of thermal vibration of gaseous molecules in electron diffraction studies.** By YONEZO MORINO, *Department of Chemistry, Faculty of Science, The University of Tokyo, Tokyo, Japan.*

A general formula for analyzing the electron diffraction halos by gaseous molecules is presented by taking into account the thermal motion of atoms in molecules. The exact meaning of the quantities obtained by electron diffraction, i.e., the atomic distances and their mean square amplitudes, is discussed based on the thermal vibration of polyatomic molecules.

The atomic distances revealed by electron diffraction depend upon the parallel and perpendicular amplitudes as well as the anharmonicity terms in the potential function. Prof. Bastiansen and his co-workers found the interesting relation that the atomic distances between carbon atoms in molecules such as allene, butatriene, and dimethyldiacetylene were shorter than the sum of the individual bond lengths. It can be shown that these differences are mainly due to the perpendicular displacements of the atom pair. The influence of the anharmonicity factors which have the *first-order effect* on the atomic distances is cancelled out by the procedure of taking the difference stated above.

On the other hand the mean square amplitudes obtained can be compared with the values computed by the use of spectroscopically obtained normal modes because the anharmonicity of the potential function of the molecular field gives only a second-order effect on the mean square amplitudes. The agreement between the observed and the calculated values were found to be good. It suggests that the mean square amplitudes will offer additional information for determining the potential field of the molecule. A few examples are presented along this line.

The paper is to be published in *J. Chem. Phys.* or in *Bull. Chem. Soc. Jap.*