

Diagramme de Laue de  $\text{ClO}_3\text{Na}$  montrant les réflexions diffuses. Anticathode de Mo—37 kV.; 14 mA.—7 heures de pose.—Film cylindrique  $R=29$  mm.—Angle du rayon incident avec  $[010]=4,4^\circ$ ; avec  $[100]=90,5^\circ$ .

Les nœuds à facteur de structure nul ne possèdent pas de domaine de diffusion mesurable. La grandeur du domaine de diffusion est en relation avec le facteur de structure, p.ex. le domaine de diffusion 020 est allongé parallèlement à l'axe [100] et atteint dans cette direction une longueur de  $0,25 B_0$  ( $F_{020} = 65$ ), le domaine de diffusion 040 possède dans cette direction la longueur  $0,14 B_0$  ( $F_{040} = 12$ ).

$\theta_i$	$\theta_0 - \theta_i$	$\phi$
- 1,2°	7,4°	12,4°
- 0,8°	7,0°	12,4°
+ 0,8°	5,4°	12,4°
+ 1,2°	5,0°	12,4°
+ 3,2°	3,0°	12,4°
+ 4,2°	2,0°	12,4°
+ 5,2°	1,0°	12,4°
+ 6,6°	-0,4°	12,4°
+ 8,8°	-2,6°	12,4°
+ 10,8°	-4,6°	12,4°
+ 12,8°	-6,6°	12,4°

Nous avons mesuré l'intensité approchée des réflexions diffuses en comparant le temps de pose nécessaire pour obtenir une réflexion de la même intensité quand le cristal est placé dans la position de Bragg. L'ordre de grandeur des intensités diffuses est à peu près le même pour les différents plans. Pour le plan 020 le rapport de l'intensité de la réflexion diffuse pour un angle d'incidence  $\theta_i = 2^\circ$ , à l'intensité de la réflexion de Bragg  $\theta_i = 6^\circ 12'$  est de l'ordre de  $1/14\ 000$ .

*Acta Cryst.* (1948). **1**, 4

## The Structures of Pyrimidines and Purines. I. A Determination of the Structures of 2-amino-4-methyl-6-chloropyrimidine and 2-amino-4, 6-dichloropyrimidine by X-ray Methods

By C. J. B. CLEWS AND W. COCHRAN

*Crystallographic Laboratory, Cavendish Laboratory, Cambridge, England*

(Received 10 October 1947)

The structures of two isomorphous pyrimidines 2-amino-4-methyl-6-chloropyrimidine and 2-amino-4,6-dichloropyrimidine have been studied by X-ray methods. The molecules are based on planar six-membered rings with the C-C and C-N bonds in the ring having approximately 50% double-bond character. It is found that for the compound containing the methyl group, the methyl groups and the chlorine atoms are distributed at random throughout the structure in two chemically, but not crystallographically, equivalent positions in the molecules. The structure is held together by the van der Waals forces between the chlorine atoms of adjacent molecules and by a system of hydrogen bonds.

### Introduction

The pyrimidines and the purines are of considerable importance in relation to a group of biological substances, the nucleic acids, which are phosphoric esters of glucosides. These glucosides are, in turn, composed of sugars not known to occur in any other biological material and of pyrimidine and purine bases. Pyrimidine is a six-membered heterocyclic ring compound containing two nitrogen atoms, and, as in the case of benzene, resonance can occur between a number of

Le phénomène de la réflexion des rayons X en dehors des directions de Bragg admet pour le chlorate de

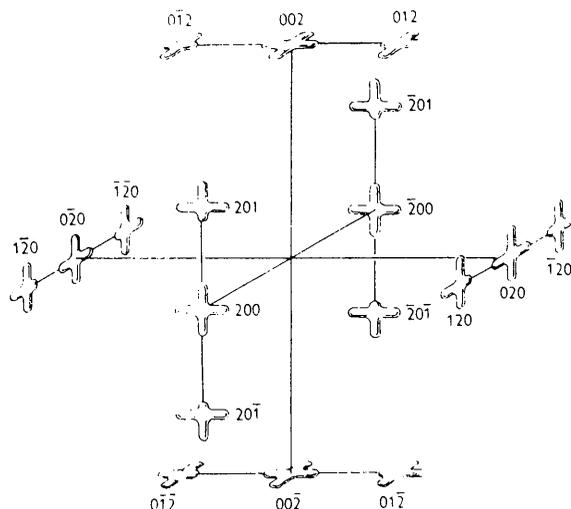


Fig. 2. Forme et position relative des domaines de diffusion des plans (020) et (120)

sodium un centre de symétrie, les phénomènes sont les mêmes sur les deux côtés d'un même plan réticulaire.

### Bibliographie

ZACHARIASEN, W. H. (1929). *Z. Kristallogr.* **71**, 517.

structures, including the two Kekulé structures (I and II):

