

halides, also can exist in a β modification with a wurtzite structure above 407° C. The intensity of the 101 line, however, is much smaller than one would expect for the wurtzite structure. This high-temperature phase of CuCl is being studied further.

We could observe no further phase transition to a cubic α form in CuCl as is found in the other two halides.

Acta Cryst. (1956). **9**, 539

Unit-cell parameters and space groups for L-cystine, L-cystine hydrochloride and L-cystine hydrobromide. By L. K. STEINRAUF and L. H. JENSEN, *Departments of Biochemistry and Anatomy, University of Washington, Seattle, Washington, U.S.A.*

(Received 16 February 1956)

In connection with the very high specific rotations observed for acid solutions of cystine (Toennies, Lavine & Bennett, 1936), we have found it desirable to study the solid-state structure of cystine and two of its salts, namely, the hydrochloride and hydrobromide. Furthermore, the configuration of the cystinyl group is of importance in protein structure.

We have grown single crystals of L-cystine, L-cystine hydrochloride and L-cystine hydrobromide satisfactory for X-ray structure determination. Unit-cell parameters have been measured from the appropriate oscillation or Weissenberg photographs, using Cu $K\alpha$ radiation. Density (D) and number of molecules per unit cell (Z) as well as the space group (or probable space group) have also been determined. The results follow.

L-Cystine:

$$a_0 = 5.42, c_0 = 56.08 \text{ \AA}; \gamma = 120^\circ.$$

Space group: $P6_122$ (or $P6_522$).

D_0 : 1.677 g.cm.⁻³; D_c : 1.679 g.cm.⁻³.

Z : 6.

L-Cystine hydrochloride:

$$a_0 = 18.61, b_0 = 5.25, c_0 = 7.23 \text{ \AA}; \beta = 103.6^\circ.$$

Space group: $C2$, probable.

D_0 : 1.520 g.cm.⁻³; D_c : 1.515 g.cm.⁻³.

Z : 2.

Acta Cryst. (1956). **9**, 539

Die Kristallstruktur des Natriumhexafluoroantimonats (V). Von GÜNTHER TEUFER,* *Chemisches Staatsinstitut der Universität, Hamburg, Deutschland*

(Eingegangen am 13. März 1956)

Über die Kristallstruktur des NaSbF_6 liegt eine Veröffentlichung von Schrewelius (1938) vor, mit der sich der vorliegende Strukturvorschlag mit Ausnahme der Positionen für die Fluoratome deckt. Die kubische

- References**
- HOSHINO, S. (1952). *J. Phys. Soc. Japan*, **7**, 560.
 KRUG, J. & SIEG, L. (1952). *Z. Naturforsch.* **7a**, 369.
 MIYAKE, S., HOSHINO, S. & TAKENAKA, T. (1952). *J. Phys. Soc. Japan*, **7**, 19.
 VEGARD, L. & SKOFTELAND, G. (1942). *Arch. Math. Naturv.* **45**, 163.

L-Cystine hydrobromide:

$$a_0 = 17.85, b_0 = 5.35, c_0 = 7.48 \text{ \AA}.$$

Space group: $P2_122_1$.

D_0 : 1.870 g.cm.⁻³; D_c : 1.869 g.cm.⁻³.

Z : 2.

The space group we find for L-cystine is the same as that reported by Bernal (1931), and his a_0 , after converting to the same units, agrees very well with ours. On the other hand his c_0 is 3.1% greater than ours.

For L-cystine hydrochloride the X-ray extinctions indicate $C2/m$, $C2$ or Cm . Since the general positions in these space groups are at least fourfold, the molecules must lie in special positions. It seems unlikely that the molecules can have symmetry m or $2/m$ but may have 2. It has, therefore, been assumed that the space group is $C2$. This is the same as that found for $\text{N,N}'$ -diglycyl-L-cystine dihydrate (Yakel & Hughes, 1952).

Integrated intensity data for two-dimensional projections have been collected and work is in progress on these structures.

References

- BERNAL, J. D. (1931). *Z. Kristallogr.* **78**, 363.
 TOENNIES, G., LAVINE, T. F. & BENNETT, M. A. (1936). *J. Biol. Chem.* **112**, 493.
 YAKEL, H. L., JR. & HUGHES, E. W. (1952). *J. Amer. Chem. Soc.* **74**, 6302.

* Jetzt an 2870 Blue Rock Road, Cincinnati 24, Ohio, U.S.A.

dass sich die Fluoratome auf der Verbindungslinie Na-Sb befinden. Die SbF_6 -Baugruppe ist demnach im NaSbF_6 wie der PtCl_6 -Komplex im K_2PtCl_6 angeordnet; die Lage der Kationen ist natürlich eine andere. Das Maximum der Fluoratome entspricht einem Sb-F-Abstand von 1,78 Å, der in guter Übereinstimmung mit dem Sb-F-Abstand von 1,77 Å ist, den Bode & Voss (1951) im KSbF_6 feststellten; aus der Länge der a -Achse berechnet man nach Subtraktion der Na- und F-Ionenradien einen Sb-F-Abstand von 1,782 Å. Schrewelius verwendet in seinem Strukturvorschlag einen Sb-F-Abstand von 1,95 Å und beschreibt die 24 Fluoratome in der allgemeinen Lage x, y, z , da mit dem grösseren Sb-F-Abstand die oben angeführte Struktur nicht möglich ist. Dadurch geht der flächenzentrierte Charakter der Elementarzelle verloren und es müssen schwache Reflexe mit gemischten Indices auftreten. Derartige Reflexe werden jedoch nicht beobachtet, was Schrewelius auf die geringe Intensität der gemischten Reflexe zurückführt; die Möglichkeit, dass die 24 Fluoratome statistisch über eine 96-zählige flächenzentrierte Lage verteilt sind, wird dabei nicht berücksichtigt.

Die Anordnung der Atome erfolgt in der Raumgruppe $Fm\bar{3}m-O_h^2$ in folgenden Punktlagen:

$$\begin{array}{ll} 4 \text{ Sb} & (a) \quad 0, 0, 0; \\ 4 \text{ Na} & (b) \quad \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \\ 24 \text{ F} & (c) \quad x, 0, 0, \text{ mit } x = 0,217. \end{array}$$

Die Exponenten B im Temperaturfaktor für die einzelnen Atome, $\exp(-B \sin^2 \theta/\lambda^2)$, lauten:

$$B(\text{Na}) = B(\text{F}) = 2,7 \text{ \AA}^2, \quad B(\text{Sb}) = 1,35 \text{ \AA}^2.$$

Unter Berücksichtigung aller berechneten und experimentellen Strukturparameter erhält man einen R -Wert (*reliability index*) von 0,095 — einer befriedigenden Übereinstimmung der berechneten und experimentellen Werte entsprechend.

Aus dem Quotienten Molekulargewicht/Dichte ($d_{\text{röntg.}} = 3,134 \text{ g.cm.}^{-3}$) ergibt sich ein experimentell ermitteltes Molvolumen von $82,6 \text{ cm.}^3$, während aus den Biltzschenschen Rauminkrementen (1934) $63,5 \text{ cm.}^3$ folgt. Diese Diskrepanz lässt sich in der Weise deuten, dass die Fluoratome, die in der Position $x, 0, 0$ einen F-F-Abstand von 3,27 Å zwischen benachbarten SbF_6 -Baugruppen aufweisen, sich durch die Schwingung bis zur gegenseitigen Berührung nähern. Aus dem Temperaturfaktor für die Fluoratome berechnet man nach Artmann (1948) eine Schwingungsamplitude von 0,26 Å; demzufolge können sich die Fluoratome optimal bis auf 2,75 Å nähern. Im KSbF_6 beträgt der (konstante) F-F-Abstand zwischen benachbarten SbF_6 -Baugruppen 2,78 Å, aus dem Fluorionradius berechnet man 2,66 Å.

Es ist nun von Interesse, NaSbF_6 bei einer Temperatur zu untersuchen, bei der die Schwingung der Fluoratome 'eingeschlafen' ist. Dieser Effekt liegt bei -40° C. vor. Man erhält jedoch ein Röntgendiagramm, das nicht mehr kubisch zu indizieren ist und bisher nicht aufgeklärt werden konnte. Es hat den Anschein, dass die SbF_6 -Baugruppe, die nicht genau oktaedrisch gebaut ist, wie im KSbF_6 gefunden wurde, beim 'Einschlafen' der Temperaturbewegung der Atome einen Modifikationswechsel verursacht. Bei Zimmertemperatur erscheint jedoch die SbF_6 -Baugruppe durch die Schwingung oktaedrisch gebaut und bedingt dadurch die hoch-symmetrische Struktur des NaSbF_6 .

Referenzen

- ARTMANN, K. (1948). *Z. Phys.* **125**, 298.
 BILTZ, W. (1934). *Raumchemie der festen Stoffe*. Leipzig: Voss.
 BODE, H. & VOSS, E. (1951). *Z. anorg. Chem.* **264**, 144.
 SCHREWELIUS, N. (1938). *Z. anorg. Chem.* **238**, 241.

Notes and News

Announcements and other items of crystallographic interest will be published under this heading at the discretion of the Editorial Board. Copy should be sent direct to the British Co-editor (R. C. Evans, Crystallographic Laboratory, Cavendish Laboratory, Cambridge, England).

Cambridge Summer School in Automatic Computing, 1956

A Summer School in programme design for automatic digital computing machines will be held in the University Mathematical Laboratory at Cambridge, England, during the period 17–28 September 1956. The course will give a basic training in the mathematical use of machines, dealing with the processes employed and their embodiment in programmes which specify the operation in detail. Lectures and practical classes will be held in the design of programmes for the EDSAC, the machine which has been built in the Laboratory. It will be shown how the same principles may be applied in designing programmes for other machines.

A detailed syllabus and form of application for admission may be obtained from G. F. Hickson, Secretary of the Board of Extra-Mural Studies, Stuart House,

Cambridge, to whom the completed application form should be returned not later than 15 June 1956.

Twining in barium titanate crystals

Errors occur in the above Short Communication by E. A. D. White (*Acta Cryst.* (1955), **8**, 845). The three calculated angles for the acute-angled twins should read $37^\circ 52'$, $40^\circ 00'$ and $38^\circ 56'$ respectively.

A note on the calculation of the absorption factors for single crystals with high absorbing power

An error occurs in the above Short Communication by D. Grdenić (*Acta Cryst.* (1952), **5**, 283). In the denominator of the expression for $A(4)$ the sine term should be $\sin \varphi_2/\sin \psi_2$.