

integrated intensities into absolute values, as it was outside the scope of the present study. However, it will be appreciated that the ratio of the measured intensities of the inverse reflexions represents the ratio of the squares of the structure amplitudes, since absorption and other corrections are identical for both the measurements.

The detailed measurements thus confirm that the structure of a dextro-rotatory crystal is the structure *A*, whose atomic coordinates, with respect to a right-handed system of coordinates are those given in § 1. The measurements with the laevo-rotatory crystal showed an exactly inverse trend, and therefore its structure would be the inverse of the one described.

6. Comparison with optical-activity calculation

With the structure *A* (Fig. 1) and the atomic coordinates given in § 1, Ramachandran (1951*b*) has calculated the optical rotatory power (ρ) of the crystal from the known polarizability and optical anisotropy of the O_3 group. While he obtained the correct order of magnitude (ρ calculated is $30^\circ \text{ cm.}^{-1}$, ρ observed is $31.3^\circ \text{ cm.}^{-1}$, for 5893 \AA), we are particularly interested in the sign.

The parameter g (the value of the isotropic gyration tensor) was given as positive in the above paper. However, a recalculation made recently showed that it is negative for the structure *A*, and that the actual value is also slightly different, namely $38.8^\circ \text{ cm.}^{-1}$ for 5893 \AA . The negative sign is inherent even in the earlier calculations, but no stress was laid on the sign then.

Now, the polarizability theory of optical activity (Ramachandran, 1951*a*), on the basis of which the above calculations were made, demands that g and ρ are opposite in sign, if ρ is defined to be positive for a dextro-rotatory crystal. Consequently, it follows that a crystal with the absolute configuration corresponding to structure *A* must be dextro-rotatory, in agreement with direct X-ray determination.

It is thus gratifying to note that the polarizability theory of optical activity leads to the correct absolute

configuration and can therefore be used confidently in those cases where the more direct X-ray method is found to be difficult.

It was noticed that in a review article Wooster (1953) had arrived at an opposite conclusion regarding the sense of the optical activity for the structure *A*. However, he had based his observations on the work of Ramachandran (1951*b*) and on the wrong sign of g given there for sodium chlorate.

The Unicam single crystal goniometer was modified for Geiger-counter measurements, as mentioned in § 4, by Sri S. Raman, and we wish to thank him for making the instrument available to us. We are also grateful to Dr S. Ramaseshan and Sri S. Venkataraman for discussions on the theory of optical activity and to the referee for drawing our attention to an error in the first draft regarding the sign of the gyration tensor components.

References

- ELMORE, W. C. & SANDS, M. (1949). *Electronics*. New York: McGraw-Hill.
- GROTH, P. (1908). *Chemische Kristallographie*, vol. 2. Leipzig: Engelmann.
- International Tables for X-ray Crystallography* (1952), p. 48. Birmingham: Kynoch Press.
- JAMES, R. W. (1948). *The Optical Principles of the Diffraction of X-rays*. London: Bell.
- PEERDEMAN, A. F., BOMMEL, A. J. VAN & BIJVOET, J. M. (1951). *Proc. Acad. Sci. Amst. B*, **54**, 16.
- PETERSON, S. W. (1955). *Nature, Lond.* **176**, 395.
- RAMACHANDRAN, G. N. (1951*a*). *Proc. Indian Acad. Sci. A*, **33**, 217.
- RAMACHANDRAN, G. N. (1951*b*). *Proc. Indian Acad. Sci. A*, **33**, 309.
- RAMACHANDRAN, G. N. & CHANDRASEKHARAN, V. (1951). *Proc. Indian Acad. Sci. A*, **33**, 199.
- SAITO, Y., NAKATSU, K., SHIRO, M. & KUROYA, H. (1955). *Acta Cryst.* **8**, 729.
- TROMMEL, J. & BIJVOET, J. M. (1954). *Acta Cryst.* **7**, 703.
- VIERVOLL, H. & ÖGRIM, O. (1949). *Acta Cryst.* **2**, 279.
- WOOSTER, W. A. (1953). *Rep. Progr. Phys.* **16**, 67.
- ZACHARIASEN, W. H. (1929). *Z. Kristallogr.* **71**, 517.

Short Communications

Contributions intended for publication under this heading should be expressly so marked; they should not exceed about 500 words; they should be forwarded in the usual way to the appropriate Co-editor; they will be published as speedily as possible; and proofs will not generally be submitted to authors. Publication will be quicker if the contributions are without illustrations.

Acta Cryst. (1957). **10**, 675

Ein um das Zentralatom drehbares Tetraedermodell als Hilfsmittel bei der Bestimmung von Kristallstrukturen. VON F. LIEBAU, G. LINDEMANN UND S. NORDMEYER, *Institut für anorganische Chemie der Deutschen Akademie der Wissenschaften zu Berlin, Berlin-Adlershof, Deutschland*

(Eingegangen am 16. Juni 1957)

Bei der Strukturbestimmung einer kristallinen Substanz wird man in der Regel zuerst die Lagen der Atome mit

der höchsten Ordnungszahl und erst später die der leichteren Atome finden. Demzufolge werden in Kristallen

mit tetraedrischen Baugruppen (Silikate, Phosphate, Arsenate usw.) meist die Parameter der schweren Zentralatome bereits bekannt sein, wenn die Lagen der leichteren (meist Sauerstoff-)Atome noch unbestimmt sind. In diesem Stadium der Strukturanalyse leisten Modellüberlegungen und Betrachtungen über Raumbeanspruchung im allgemeinen gute Dienste. Für diesen Zweck haben sich in unserem Institut Tetraeder aus Draht gut bewährt, die um eine im Tetraederschwerpunkt befindliche Holzkugel nach allen Richtungen frei drehbar sind. Da uns keine Literaturangaben über ein derartiges Hilfs-

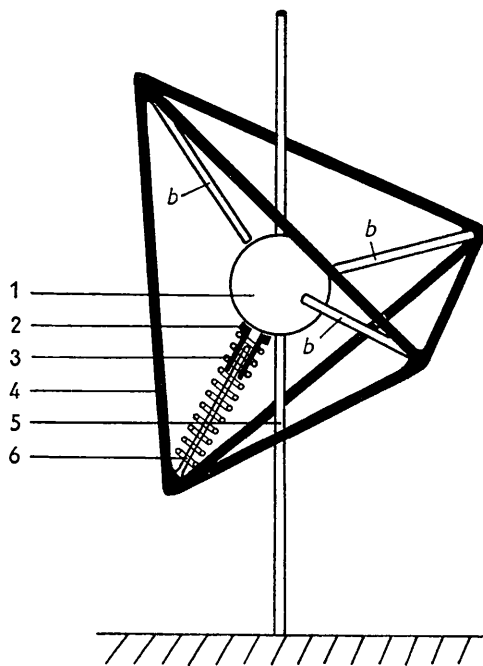


Fig. 1. Skizze eines um den Schwerpunkt drehbaren Tetraeders.
1: Holzkugel; 2: Druckstück; 3: Spiralfeder; 4: Tetraeder;
5: Stab; 6: kurzer Stift; b: längere Stifte.

mittel bekannt sind, halten wir es für nützlich, eine kurze Beschreibung davon zu geben.

Drei Winkel aus Messingdraht werden gebogen und zu einem Tetraeder (4) zusammengelötet (Fig. 1). In die vier Ecken werden kurze Stifte (b) eingelötet, die nach dem Schwerpunkt des Tetraeders zeigen und deren Länge so gewählt wird, dass drei von ihnen auf der Oberfläche der Holzkugel (1) aufsitzen, während der vierte (6) etwas kürzer ist. Über diesen kürzeren Stift wird eine Spiralfeder (3) geschoben, deren eines Ende die Auflagefläche eines Druckstückes (2) gegen die Kugel presst. Die Auflagefläche dieses Druckstückes wird der Oberfläche der Kugel angepasst. Die Holzkugel ist durchbohrt und kann so auf einen Stab (5) aufgezogen werden, dass sie an jeder beliebigen Stelle des Stabes fest sitzt.

Um aus solchen Tetraedern ein Modell zu bauen, werden auf einem Brett die auf eine Ebene projizierten Lagen der Zentralatome markiert und an diesen Stellen je ein Stab eingesteckt. Die Kugeln werden entsprechend der dritten Koordinate des jeweiligen Atoms verschieden hoch an diesen Stäben befestigt. Nunmehr werden die Tetraeder auf die Kugeln gesetzt und lassen sich in jede beliebige Lage verdrehen. Werden die Spiralfedern stark genug gewählt, dann bleiben die Tetraeder in jeder Stellung stehen, ohne ihre Lage durch das eigene Gewicht zu verändern.

Modelle aus solchen Tetraedern eignen sich besonders zum Prüfen, ob bei angenommenen Lagen für die Sauerstoffatome keine zu kurzen O-O-Abstände und, bei gleichzeitiger Berücksichtigung der Metallatome, keine zu kurzen M-O-Abstände auftreten. Durch ein solches Modell lässt sich oft viel Rechenarbeit vermeiden.

Auf ähnliche Weise lassen sich auch drehbare Oktaeder und andere Polyeder anfertigen, doch setzt ihre Verwendung voraus, dass diese Polyeder als hinreichend unverzerrt angenommen werden können, was allerdings nicht immer der Fall sein wird.

Herrn O. Rönsch und Herrn I. Uhlig danken wir für wertvolle praktische Ratschläge und für die Anfertigung der Tetraeder.

Book Reviews

Works intended for notice in this column should be sent direct to the Editor (P. P. Ewald, Polytechnic Institute of Brooklyn, 99, Livingston Street, Brooklyn 2, N. Y., U.S.A.). As far as practicable books will be reviewed in a country different from that of publication.

Anorganische Pigmente und Röntgenstrahlen.

By R. KÖNIG. Pp. xi + 132, with 7 figs., 167 X-ray powder photographs, and 28 tables. Stuttgart: Enke. 1956. Price DM 24.50; bound DM 27.00.

This short monograph is intended to introduce pigment specialists to the uses of X-rays. There is a short section (25 pages) on crystal structure, powder techniques, and interpretation of the photographs, followed by 80 pages on specific pigments and 21 of reproductions (white lines on black background) of powder patterns. The book is well documented, with 271 references, as well as a list of textbooks.

The obvious emphasis is on identification, but the use

of X-rays in studying physical state (particle size, imperfections of various types) is brought out in discussion of the pigments to which it is relevant as well as in the introductory section. The book should be useful in fulfilling its intended purpose, and might be read with interest by many inorganic crystallographers—the classification of crystals by colour is a salutary shock.

There is an index of substances, but not of authors or subjects. A few English words and authors' names are misprinted.

A. J. C. WILSON

Department of Physics
University College
Cardiff, Wales