

## Duttonite

Duttonite (Thompson, Roach & Meyrowitz, 1956) has the composition  $V_2O_4 \cdot 2H_2O$ , and is common at the Peanut mine, Montrose County, Colorado. The pale-brown transparent crystals are monoclinic, but show only a slight distortion from a body-centered pseudo-orthorhombic symmetry. A structure was readily determined which is based on single  $VO_6$  octahedral chains, joined into sheets parallel to (100) by sharing vertices (Fig. 1(c)). The crystallographic data and parameters—which give for the ( $hk0$ ) reflections a reliability factor of 0.10—based on the pseudo-space group  $Imcm$ , are as follows:

Symmetry: monoclinic, space group  $I2/c-C_{2h}^6$ .

$$a = 8.80 \pm 0.03, \quad b = 3.95 \pm 0.02, \quad c = 5.96 \pm 0.02 \text{ \AA}, \\ \beta = 90^\circ 40' \pm 5'.$$

Cell content:  $H_8V_4O_{12}$ .

Parameters (in  $Imcm-D_{2h}^{28}$ ):

	$x$	$y$
4 V in (e)	0	0.336
4 O <sub>1</sub> in (e)	0	0.754
8 O <sub>2</sub> in (g)	0.100	$\frac{1}{2}$

In this structure, the vanadium atoms are strongly displaced from the centers of the octahedra, producing a short V—O distance of 1.65 Å. This feature apparently corresponds to the vanadyl ion  $VO^{+2}$ , which is known to exist in aqueous solution. These polarized groups are arranged in alternate directions along the octahedral

chain, thus doubling the normal chain axis repeat unit of 3.0 Å along the  $c$  axis. The oxygen atoms  $O_2$  are hydroxyl groups which are hydrogen bonded into zigzag chains running along the  $b$  axis. The polarity of these chains, when ordered, causes the symmetry to be monoclinic, pseudo-orthorhombic; when the polarity is disordered, as in synthetic preparations, the true symmetry is orthorhombic.

Detailed descriptions of the crystal structure studies of these and other oxide mineral phases and the crystal chemical relationships among them will be published at a later date.

This work is part of a program being conducted by the U.S. Geological Survey on behalf of the Division of Raw Materials of the U.S. Atomic Energy Commission.

## References

- EVANS, H. T., JR. & BLOCK, S. (1953). *Amer. Miner.* **38**, 1242.  
 EVANS, H. T., JR. & MROSE, M. E. (1955). *Amer. Miner.* **40**, 861.  
 STERN, T. W., STIEFF, L., EVANS, H. T., JR. & SHEERWOOD, A. M. (1957). *Amer. Miner.* In the Press.  
 THOMPSON, M. E., ROACH, C. H. & MEYROWITZ, R. (1956). *Science*, **123**, 990.  
 WEEKS, A. D. & THOMPSON, M. E. (1954). *Bull. U.S. Geol. Surv.* 1009-B, 13.

*Acta Cryst.* (1958). **11**, 58

### Elastische Konstanten von Hexamethylentetramin. Von S. HAUSSÜHL, *Mineralogisches Institut der Universität Tübingen, Deutschland*

(Eingegangen am 23. September 1957)

Ramachandran & Wooster (1951) veröffentlichten elastische Konstanten von Hexamethylentetramin, welche sie aus der Messung diffuser Roentgenreflexe bestimmt hatten. Bisher liegen keine Messungen hierüber mit anderen Verfahren vor, sodass es wünschenswert erschien, die Ergebnisse von Ramachandran & Wooster mit den Werten zu vergleichen, die man mit den dynamischen Präzisionsverfahren erhält. Für eine derartige Messung wurde das vom Verfasser (Haussühl, 1956) weiter entwickelte Schaefer-Bergmann-Verfahren benutzt. Hierbei sollte gleichzeitig die Leistungsfähigkeit dieses Verfahrens auch bei dem gegen anisotrope mechanische und thermische Beanspruchung besonders empfindlichen Hexamethylentetramin dargelegt werden.

Die Herstellung der Kristalle erfolgte aus Lösung durch langsames Verdunsten des Lösungsmittels bei ca. 35° C. Als Lösungsmittel wurde nach einem Vorschlag von J. Gahn ein Wasser-Methanol-Gemisch verwendet. Im Laufe von ca. 8 Wochen konnten so wasserklare Kristalle bester optischer Qualität mit einem Durchmesser von ca. 5 cm. gezüchtet werden. In allen Wachstumsversuchen traten nur Rhombendodekaeder-Flächen auf.

Für das Schaefer-Bergmann-Verfahren müssen die Objekte bekanntlich mit einem optisch einwandfreien Flächenpaar für den Durchgang des zu beugenden Lichtes

versehen werden. Hierzu wurden die Kristalle auf alkohol-festen Pechplatten mit Äthylalkohol als Polierflüssigkeit auf die erforderliche optische Güte poliert. Ausserdem wurde — wie schon bei anderen schwer zu polierenden Kristallen — die Politur an einigen Präparaten durch Aufkitten dicker Glasscheiben (einige mm. dick) von optischer Qualität auf die feingeschliffenen Flächen ersetzt. Als Kitt und optisches Kontaktmedium bewährte sich hierbei zähes Fett. Die so erhaltenen Beugungsaufnahmen stehen den an gewöhnlich polierten Präparaten gewonnenen nicht nach. Eine Beeinträchtigung der Messgenauigkeit durch diese dicken Glasplatten tritt nicht einmal bei sehr dünnen Präparaten ein. Eine Politur der Kristalle für das Schaefer-Bergmann-Verfahren ist damit überhaupt überflüssig geworden. Auch das Aufkitten dünner Deckgläschen als Politurersatz ist nicht mehr empfehlenswert.

Aus der Messung der Ausbreitungsgeschwindigkeiten elastischer Wellen in den Richtungen [100] und [110] wurden die elastischen Konstanten in bekannter Weise ermittelt. Hierzu war allerdings noch eine Neubestimmung der Dichte von Hexamethylentetramin erforderlich. Die Messungen mit dem Auftriebsverfahren an grossen Kristallen ergaben  $D_{22^\circ C.} = 1,3394 \text{ g.cm.}^{-3}$ . Als Auftriebsflüssigkeit diente mit Hexamethylentetramin

gesättigtes Schwerbenzin. Es resultierten folgende elastische Konstanten für 22° C.:

$$c_{11} = 1,643 \times 10^{11}, \quad c_{12} = 0,433 \times 10^{11}, \quad c_{44} = 0,515 \times 10^{11} \text{ erg.cm.}^{-3}.$$

(Fehler bei  $c_{11}$  bzw.  $c_{12}$  und  $c_{44}$  unter 0,3% bzw. 2,5% und 1%).

Die von Ramachandran & Wooster erzielten Werte sind:

$$c_{11} = 1,5 \times 10^{11}, \quad c_{12} = 0,3 \times 10^{11}, \quad c_{44} = 0,7 \times 10^{11} \text{ erg.cm.}^{-3}.$$

Die Übereinstimmung ist befriedigend, wenngleich nicht ganz innerhalb der Fehlerschätzung von Ramachandran & Wooster.

#### References

- HAUSSÜHL, S. (1957). *Fortschr. Min.* **35**, 4.  
 RAMACHANDRAN, G. N. & WOOSTER, W. A. (1951). *Acta Cryst.* **4**, 431.

## 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).*

### Kristallografiya

A complete English translation of this journal is now available (see *Acta Cryst.* (1957), **10**, 608). The publication of contents lists in these columns is therefore discontinued.

### The structure of the chromium sulphides

An error occurs in the above article by F. Jellinek (*Acta Cryst.* (1957), **10**, 620). On p. 628 the last two lines in the penultimate paragraph in the left-hand column should read 'and  $\text{Fe}_7\text{S}_8$ , but to ferrimagnetism in  $\text{Fe}_7\text{Se}_8$  (Okazaki & Hirakawa, 1956).'

## 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 1, N.Y., U.S.A.). As far as practicable books will be reviewed in a country different from that of publication.*

**Handbuch der Physik: Encyclopaedia of Physics. Band 32. Structural Research.** Edited by S. FLÜGGE. Pp. vii+663 with 373 figs. Berlin; Göttingen; Heidelberg: Springer. 1957. Price DM. 144.00.

This volume of the *Encyclopedia of Physics* covers the principles and practice of structural research by diffraction of X-rays, electrons and neutrons in six articles by specialists in the field.

The first article, about 100 pages in length, is entitled 'Experimental methods for the determination of crystal structure by X-rays'. The authors are A. Guinier and G. von Eller.

Of the four sections, the first describes the different types of cameras used to record the diffraction patterns from single crystals and from powders, and a few pages are given over to the use of counter diffractometers. In the second section methods of intensity measurement are surveyed, and the corrections required to give values of  $|F|^2$  from the X-ray intensities are outlined. An account of the theory and practice of crystal-structure analysis follows. It includes some very attractive illustrations of the use of von Eller's photographic method for the evaluation of two-dimensional Fourier series. This section is heavily biased in favour of analogue machines and makes no mention of high-speed electronic digital computers, with which the future of crystallographic com-

puting certainly lies. The last section is concerned with such topics as the determination of crystallinity and of the texture of solids, the identification of materials by X-ray methods, and the measurement of internal stresses in metals.

The authors have done very well in presenting such a readable survey of the more important applications of X-ray diffraction in a relatively small space. This article is in French.

The second article, by J. Bouman, is entitled 'Theoretical principles of structural research by X-rays', and extends over some 140 pages. The treatment is rather heavy in places, and this is not an article for the novice. From the elementary theory of diffraction and the analysis of simple structures the author proceeds to lattice theory and the properties of the reciprocal lattice. The present writers were pleased to find that the properties of Fourier transforms, and their importance for the theory of diffraction, were discussed at an early stage in this article, but felt that even more use could have been made of them. A section is devoted to the discussion of the symmetry of structures; a surprisingly full treatment is achieved in the space of some 20 pages. The topics dealt with next come under the heading of fundamental concepts in X-ray scattering, the most important being a discussion of dispersion. There follows a section devoted to diffraction by small crystals, a discussion of the dynamical theory, of extinction and of absorption, and of