

Table 1. Atomic scattering factors calculated by the use of Slater atomic wave functions

X	X is $\sin \theta/\lambda$ in atomic units															
	0-000	0-025	0-050	0-075	0-100	0-125	0-150	0-175	0-200	0-250	0-300	0-400	0-500	0-600	0-700	0-800
Na <sup>+</sup>	10-00	9-91	9-66	9-26	8-74	8-13	7-46	6-77	6-08	4-80	3-76	2-40	1-77	1-50	1-37	1-28
Na	11-00	10-56	9-81	9-23	8-71	8-11	7-45	6-77	6-08	4-81	3-76	2-40	1-77	1-50	1-37	1-27
Mg <sup>2+</sup>	10-00	9-93	9-74	9-43	9-02	8-52	7-97	7-38	6-77	5-58	4-52	2-96	2-09	1-66	1-45	1-34
Mg	12-00	11-48	10-42	9-55	8-95	8-45	7-93	7-36	6-77	5-59	4-53	2-96	2-09	1-66	1-45	1-34
Al <sup>3+</sup>	10-00	9-95	9-80	9-55	9-22	8-81	8-35	7-84	7-31	6-23	5-21	3-55	2-49	1-89	1-58	1-41
Al	13-00	12-47	11-27	10-11	9-27	8-69	8-23	7-77	7-28	6-24	5-23	3-57	2-49	1-90	1-58	1-41
Si <sup>4+</sup>	10-00	9-96	9-83	9-63	9-36	9-02	8-63	8-20	7-74	6-77	5-81	4-14	2-94	2-19	1-76	1-52
Si	14-00	13-51	12-26	10-89	9-77	9-20	8-47	8-04	7-63	6-75	5-84	4-17	2-96	2-20	1-77	1-52
P	15-00	14-53	13-31	11-82	10-47	9-46	8-77	8-27	7-88	7-13	6-33	4-75	3-46	2-57	2-01	1-67
S	16-00	15-56	14-38	12-84	11-34	10-10	9-19	8-55	8-10	7-40	6-72	5-27	3-96	2-98	2-30	1-87
S <sup>2-</sup>	18-00	17-26	15-37	13-10	11-13	9-74	8-88	8-37	8-03	7-43	6-71	5-26	3-95	2-96	2-29	1-86
Cl	17-00	16-58	15-46	13-92	12-31	10-88	9-76	8-94	8-36	7-60	7-00	5-72	4-45	3-41	2-64	2-11
Cl <sup>-</sup>	18-00	17-48	16-07	14-22	12-35	10-77	9-60	8-80	8-27	7-59	7-01	5-73	4-45	3-40	2-63	2-11
A	18-00	17-61	16-54	15-02	13-35	11-78	10-47	9-46	8-72	7-80	7-21	6-09	4-91	3-84	3-00	2-39
K <sup>+</sup>	18-00	17-70	16-85	15-60	14-15	12-68	11-35	10-22	9-32	8-13	7-41	6-38	5-31	4-27	3-39	2-70
Ca <sup>2+</sup>	18-00	17-76	17-07	16-03	14-78	13-45	12-15	10-99	10-01	8-57	7-68	6-60	5-56	4-64	3-77	3-04

*et al.* give the data for neutral calcium.) For higher  $\sin \theta/\lambda$  the differences are somewhat larger but do not exceed 4%. The positions of maximum difference, which are out of the range of Cu  $K\alpha$  radiation, gradually shift towards larger  $\sin \theta/\lambda$  as the atomic number increases.

(b) Na, Mg<sup>2+</sup> and Si<sup>4+</sup>.—The maximum difference is 5% for Na and decreases as the atomic number increases. The positions of maximum difference are now in the range of Cu  $K\alpha$  radiation and again gradually shift towards larger  $\sin \theta/\lambda$  with increasing atomic number.

(c) Al<sup>3+</sup>.—The maximum difference is somewhat larger (7%). This can be accounted for by the fact that in the electron distribution for Al<sup>3+</sup> used by Berghuis *et al.*, exchange has been neglected. (Compare for instance the old James-Brindley values for Na (Hartree) in *Internationale Tabellen* (1935) and the revised ones (Hartree-Fock) of Berghuis *et al.*)

(d) P and S.—No data are given by Berghuis *et al.* The differences between our values and the self-consistent-field results for Na to Si<sup>4+</sup> on the one hand and for Cl<sup>-</sup> to Ca<sup>2+</sup> on the other, suggest that for P and S the

differences would be small for lower  $\sin \theta/\lambda$  and less than 4% for higher  $\sin \theta/\lambda$ .

The authors wish to express their thanks to Dr R. McWeeny for his interest and encouragement, to Professor E. G. Cox for the opportunity of work in his Department, and to the other members of his laboratory for helpful conversations. One of the authors (Y. T.) thanks Messrs Imperial Chemical Industries Ltd for financial support, and the other (C. H. S.), the Ramsay Memorial Trust for a fellowship.

#### References

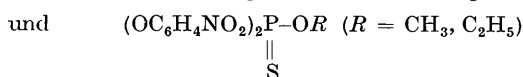
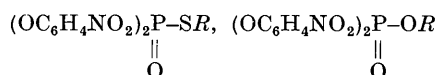
- BERGHUIS, J., HAANAPPEL, IJ. M., POTTERS, M., LOOPSTRA B. O., MACGILLAVRY, C. H. & VEENENDAAL, A. L. (1955). *Acta Cryst.* **8**, 478.  
*Internationale Tabellen zur Bestimmung von Kristallstrukturen* (1935), vol. 2, p. 571. Berlin: Borntraeger.  
 McWEENY, R. (1951). *Acta Cryst.* **4**, 513.  
 SLATER, J. C. (1930). *Phys. Rev.* **36**, 57.

*Acta Cryst.* (1958). **11**, 127

**Zur Kristallographie einiger Organophosphate.** Von F. HANIC und J. A. ČAKAJDOVÁ, *Abteilung für anorganische Chemie des Chemischen Instituts an der Slowakischen Akademie der Wissenschaften, Bratislava, Tschechoslowakei*

(Eingegangen am 19. September 1957)

Wir haben Strukturveränderungen, die durch die Substitution des Sauerstoffs durch ein Schwefelatom verursacht werden, bei den Verbindungen vom Typ



untersucht. Bei diesen Verbindungen ist auch ihre biologische Wirkung bekannt. Die vorläufigen Resultate sind in Tabelle 1 zusammengestellt. Aus Drehaufnahmen (Kalibration mit Al, Cu  $K\alpha = 1538,7 \text{ \AA}$ ) und Präzessionsaufnahmen wurden die Gitterkonstanten ermittelt. Die

Untersuchung der systematischen Auslöschungen wurde auf Präzessions- und Weissenbergaufnahmen bei Reflexionen vom Typ  $hk0$ ,  $h0l$  und  $0kl$  durchgeführt. Die Messwerte für die Dichte  $\rho_{\text{exp}}$  wurden mit Hilfe der Schwefelmethode erhalten. Die nadelförmigen O-aethyl- und S-aethyl-O,O-di-(*p*-nitrophenyl)-Phosphate existieren nur in der Form von Zwillingkristallen. Die Zwillingsfläche ist (100).

Aus der Tabelle 1 ist der Einfluss der Substitution des Sauerstoffs durch eine Schwefelatom ersichtlich. Wenn diese Substitution in der Aethoxy-Gruppe eintritt, ändert sich die Symmetrie der Struktur nicht, und die Gitterkonstanten ändern sich nur sehr wenig. Die Substitution des am Phosphoratom liegenden Sauerstoffatoms durch ein Schwefelatom jedoch, sowie auch die Substitution in

Tabelle 1

Substanz und Formel	Gitterkonstanten	Raumgruppe	$\rho_{\text{exp.}}$ (g.cm. <sup>-3</sup> )	$\rho_{\text{ber.}}$ (g.cm. <sup>-3</sup> )	Z
O-äthyl-di-( <i>p</i> -nitrophenyl)-phosphat (OC <sub>6</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> P-OC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>    O	$a = 16,36, b = 11,88, c = 8,05 \text{ \AA}$ $\beta = 92^\circ 18'$	$P2_1/C$	1,54	1,58	4
S-äthyl-O,O-di-( <i>p</i> -nitrophenyl)-thio-phosphat (OC <sub>6</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> P-SC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>    O	$a = 16,94, b = 11,85, c = 8,06 \text{ \AA}$ $\beta = 95^\circ 26'$	$P2_1/C$	1,55	1,60	4
O-äthyl-O,O-di-( <i>p</i> -nitrophenyl)-thio-phosphat (OC <sub>6</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> P-OC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>    S	$a = 7,16, b = 13,05, c = 12,54 \text{ \AA}$ $\alpha = 127^\circ 27', \beta = 87^\circ 54', \gamma = 104^\circ 14'$	$P1$ oder $P\bar{1}$	1,53	1,55	2
O-methyl-O,O-di-( <i>p</i> -nitrophenyl)-thio-phosphat (OC <sub>6</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> P-OCH <sub>3</sub>    S	$a = 10,50, b = 22,22, c = 7,25 \text{ \AA}$ $\beta = 101^\circ 12'$	$P2_1/C$	1,49	1,49	4
S-methyl-O,O-di-( <i>p</i> -nitrophenyl)-thio-phosphat (OC <sub>6</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> P-SCH <sub>3</sub>    O	$a = 14,47, b = 16,06, c = 7,92 \text{ \AA}$ $\alpha = 71^\circ 50', \beta = 76^\circ 45', \gamma = 95^\circ 21'$	$P1$ oder $P\bar{1}$	1,48	1,50	4

$\rho_{\text{exp.}}$  = experimentelle Messwerte für die Dichte;  $\rho_{\text{ber.}}$  = berechnete Werte für die Dichte.  
Z = Zahl der Moleküle in der Elementarzelle.

der Alkylgruppe sind von Symmetrieveränderungen begleitet. Die ausführliche Untersuchung dieser Verbindungen wird noch fortgesetzt.

Wir danken dem Forschungsinstitut für agrochemische Technologie in Bratislava-Predmestie für die freundliche Überlassung der Kristallpräparate.

## 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).*

### International Union of Crystallography

#### Membership of National Committees

The following *addenda* have been reported to the membership lists of National Committees for Crystallography which were published in this journal last year (*Acta Cryst.* (1957), **10**, 391, 719):

#### Czechoslovakia

J. NOVÁK (Chairman), A. LÍNEK (Secretary), F. HANIC, J. KAŠPAR, A. KOCHANOVSKÁ, J. SEKANINA.

#### Netherlands

Add: R. WESTRIK, E. H. WIEBENGA, P. M. DE WOLFF.

### Fourth International Congress

The authors of paper 7-14 and 7-44 at the above Congress (*Acta Cryst.* 1957), **10**, 798, 814) should read:

7-14 L. BRÚ, M. PEREZ RODRIGUEZ, M. CUBERO & E. MORENO.

7-44. L. BRÚ, M. CUBERO & L. ROLDAN.