

the $A+B$ peak has different weight from the A and B peaks taken together. Then the 'accidental' extinction of the (200) reflexion is destroyed and the 200 reflexion may have appreciable intensity, especially if the atoms concerned are heavy so that the value of $\sigma\varphi(x, y)$ becomes comparable with unity. The condition for extinction of a reflexion in the diffraction pattern from a crystal is therefore given more exactly by specifying that the intensity of the reflexion given by the Fourier transform of $\exp\{i\sigma\varphi(x, y)\}$ should be zero.

After taking account of the above remarks, we see that the predictions of the M.T.F. and C.M. treatments are in essential agreement as to which of the kinematic extinction conditions will be retained for the dynamic scattering conditions under consideration, (i.e., when the

incident electron beam is in a principal lattice direction or otherwise when the repetition distance in the beam direction is small) and which of these extinction conditions will not be rigorously maintained. In the latter case the C.M. treatment allows some sort of rough estimate of the intensities of the 'incompletely extinguished' reflexions to be made, but for more quantitative estimates we must await detailed calculations for particular cases.

References

- COWLEY, J. M. & MOODIE, A. F. (1959). *Acta Cryst.* **12**, 360.
 MIYAKE, S., TAKAGI, S. & FUJIMOTO, F. (1960). *Acta Cryst.* **13**, 360.

Acta Cryst. (1961). **14**, 88

Sur la structure de l'alizarine. PAR JEAN GUILHEM, *Laboratoire de Chimie cristallographique du C.N.R.S.*
 1 rue Victor Cousin, Paris, France

(Reçu le 2 avril 1960)

L'Alizarine cristallise par sublimation sous vide en aiguilles de couleur jaune orangé.

La maille monoclinique présente les caractéristiques suivantes:

$$\alpha = 21,04 \pm 0,04, \quad b = 3,75 \pm 0,01, \quad c = 20,12 \pm 0,04 \text{ \AA}, \\ \beta = 104^\circ 30' \pm 10'.$$

Volume de la maille = 1540 \AA^3 .

Nombre de molécules par maille: $Z = 6$.

Une pseudosymétrie orthorhombique provoque une macule très fréquente des cristaux, qui apparaît dans au moins 95% des cas.

Les réflexions ont été observées pour:

$$hkl \text{ à tous les ordres,} \\ h0l \text{ si } h = 2n, \\ 0k0 \text{ si } k = 4.$$

Ces lois d'extinction pourraient correspondre au groupe spatial $P2_1/a$, mais celui-ci exige quatre points homologues par maille alors que six molécules y sont présentes. Par ailleurs, l'asymétrie de la molécule élimine l'hypothèse d'une position spéciale. Nous avons donc été conduits à adopter le groupe spatial non centré Pa , avec deux groupes de trois molécules. L'extinction des taches 010 et 030 serait alors accidentelle.

La faible valeur du paramètre b impliquant l'existence d'une seule couche moléculaire, nous avons abordé en premier lieu l'étude des projections de Patterson et de densité électronique $x0z$.

Les intensités des taches $h0l$ n'ont subi aucune correction d'absorption, le cristal utilisé étant petit (0,4 mm.) et peu absorbant ($\mu = 9,5 \text{ cm.}^{-1}$ pour la radiation utilisée $\text{Cu K}\alpha$).

Le coefficient de température moyen, calculé par la méthode de Wilson, est égal à $4,9 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$.

Sur la demi-projection de Patterson (Fig. 1) les sommets voisins de l'origine forment une figure qui se retrouve affaiblie, mais avec la même orientation autour de deux pseudo-origines situées aux points de coordonnées $(u = \frac{2}{3} \cdot a/2, v = \frac{1}{3} \cdot c)$ et $(u = \frac{1}{3} \cdot a/2, v = \frac{2}{3} \cdot c)$. Ceci ne peut s'expliquer que dans l'hypothèse où les centres des trois

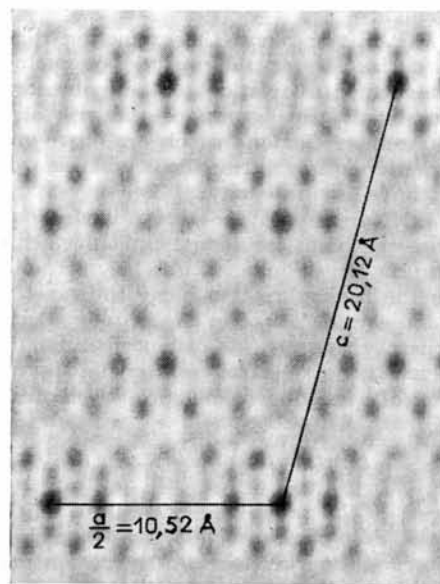


Fig. 1. Projection de Patterson $z0x$ calculée au moyen du photosommateur harmonique de G. v. Eller.

molécules se déduiraient les uns des autres par des translations voisines de $(\frac{2}{3} \cdot a/2, \frac{1}{3} \cdot c)$ et $(\frac{1}{3} \cdot a/2, \frac{2}{3} \cdot c)$.

En outre, les six sommets entourant l'origine indiquent l'existence d'un ensemble de cycles benzéniques inclinés d'environ 25° autour d'un de leurs diamètres perpendiculaire à $0x$.

Dans nos premiers calculs de facteurs de structure, nous n'avons pas tenu compte des oxyhydriles substitués en 1-2. Les centres des noyaux anthraquinoniques dont la formule est figurée ci-dessous furent placés aux points $(0, 0)$, $(\frac{2}{3} \cdot a/2, \frac{1}{3} \cdot c)$, $(\frac{1}{3} \cdot a/2, \frac{2}{3} \cdot c)$ et leurs grands axes parallèlement à $0x$. C'est en effet, parmi les diverses orientations possibles, la seule qui conduise à une reconstitution théorique de la projection de Patterson ayant un aspect voisin de celle qui fut obtenue à partir des données ex-

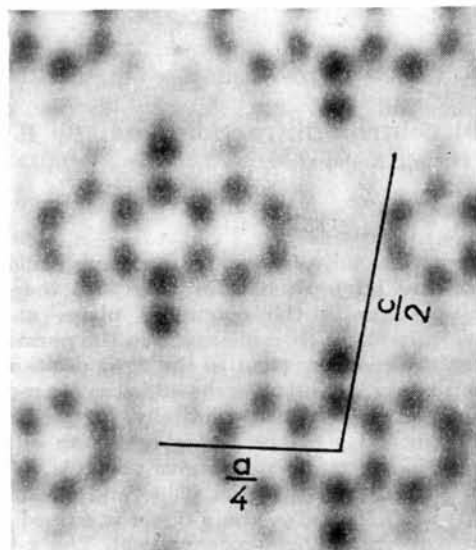


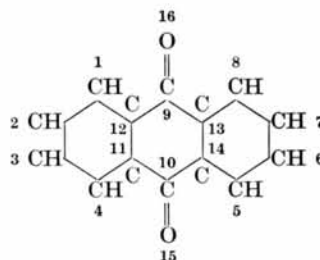
Fig. 2. Projection de densité électronique $z0z$, calculée à partir des premières hypothèses de structure.

périmentales. La projection de densité électronique obtenue dans ces conditions (Fig. 2) possède un centre d'inversion et une symétrie orthorhombique qui en fait n'existent pas. L'homogénéité du fond entre les atomes indique que ceux-ci se trouvent au voisinage de leur position correcte.

L'introduction dans les calculs de tous les atomes d'oxygène supprime le centre d'inversion. Les projections de densité électronique correspondantes devaient nous amener à constater un léger déplacement des deux molé-

Tableau 1. Coordonnées atomiques approximatives au stade actuel avec les conventions de numérotage suivantes

| | Molécule I | | Molécule II | | Molécule III | |
|----|-----------------|---------------|-----------------|---------------|-----------------|---------------|
| | $\frac{x}{a/2}$ | $\frac{z}{c}$ | $\frac{x}{a/2}$ | $\frac{z}{c}$ | $\frac{x}{a/2}$ | $\frac{z}{c}$ |
| 1 | 0,24 | 0,07 | 0,92 | 0,40 | 0,60 | 0,75 |
| 2 | 0,33 | 0,04 | 0,00 | 0,37 | 0,68 | 0,72 |
| 3 | 0,29 | 0,96 | 0,97 | 0,29 | 0,65 | 0,65 |
| 4 | 0,17 | 0,93 | 0,85 | 0,26 | 0,53 | 0,62 |
| 5 | 0,75 | 0,93 | 0,44 | 0,26 | 0,12 | 0,61 |
| 6 | 0,67 | 0,96 | 0,34 | 0,29 | 0,03 | 0,65 |
| 7 | 0,70 | 0,04 | 0,37 | 0,36 | 0,06 | 0,72 |
| 8 | 0,83 | 0,07 | 0,49 | 0,39 | 0,17 | 0,75 |
| 9 | 0,03 | 0,07 | 0,70 | 0,40 | 0,38 | 0,75 |
| 10 | 0,96 | 0,93 | 0,65 | 0,26 | 0,32 | 0,62 |
| 11 | 0,08 | 0,96 | 0,76 | 0,29 | 0,44 | 0,65 |
| 12 | 0,12 | 0,04 | 0,80 | 0,36 | 0,48 | 0,72 |
| 13 | 0,91 | 0,04 | 0,58 | 0,36 | 0,26 | 0,72 |
| 14 | 0,87 | 0,96 | 0,55 | 0,29 | 0,24 | 0,65 |
| 15 | 0,93 | 0,87 | 0,63 | 0,20 | 0,30 | 0,55 |
| 16 | 0,05 | 0,13 | 0,73 | 0,46 | 0,40 | 0,81 |



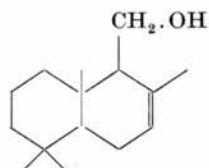
cules non situées à l'origine (Tableau 1). Les essais se poursuivent pour la mise en place définitive des oxyhydriles.

Acta Cryst. (1961). **14**, 89

Cell dimensions and space group of drimenol. By ISABEL GARAYCOCHEA and O. WITTKÉ. *Centro de Investigaciones de Cristalografía, Instituto de Física y Matemáticas, Universidad de Chile, Casilla 2777, Santiago, Chile*

(Received 7 July 1960)

The constitution and absolute stereochemistry of the sesquiterpenoid drimenol $C_{15}H_{26}O$ obtained from the bark of Chilean *Drimys winteri* Forst have been elucidated by Appel, Brooks & Overton (1959) who found the formula:



Oscillation and rotation photographs about the [100], [010] and [001] axes and Weissenberg photographs about the latter were taken using $Cu K\alpha$ radiation ($\lambda = 1.540 \text{ \AA}$). The crystals were found to be orthorhombic with

$$a = 7.23, b = 23.69, c = 7.82 \text{ \AA}.$$

There are 4 molecules per unit cell.

Measured density 1.07 g.cm^{-3} ; calculated density 1.10 g.cm^{-3} .

Systematic absences: $h00$ with h odd,
 $0k0$ with k odd.

Space group: $P2_12_12$.

We thank Dr H. H. Appel and Mr R. P. M. Bond for providing the specimens.

Reference

APPEL, H. H., BROOKS, C. I. W. & OVERTON, K. H. (1959). *J. Chem. Soc.* p. 3322.