

Acta Cryst. (1962). **15**, 813

Histamine. — Preliminary X-ray studies of the crystalline free base. Corrections. By A. C. ANDREWS, FRANK DECOU, *Department of Chemistry*, and R. DEAN DRAGSDORF, *Department of Physics, Kansas State University, Manhattan, Kansas, U.S.A.*

(Received 8 February 1962 and in revised form 9 April 1962)

In the paper by Andrews *et al.* (1961) the calculated d -spacing for the $24\bar{1}$ planes listed in Table 1 should be 2.521 Å. The length of the b axis should be one-half of that given in the paper, i.e., $b = 7.64$ Å. With the latter correction, all k indices should then be one-half those listed. The unit cell has a volume of 302.8 Å³ and contains two molecules.

In addition to the data presented in the paper, $hk0$

and $0kl$ precession photographs have been made. These showed systematic absences for $0k0$ when k is odd. The space group is then $P2_1$.

Reference

ANDREWS, A. C., DECOU, F. & DRAGSDORF, R. D. (1961). *Acta Cryst.* **14**, 1293.

Notes and News

Announcements and other items of crystallographic interest will be published under this heading at the discretion of the Editorial Board. The notes (in duplicate) should be sent to the General Secretary of the International Union of Crystallography (D. W. Smits, Mathematisch Instituut, University of Groningen, Reithdiepskade 4, Groningen, The Netherlands).

Pittsburgh Diffraction Conference

The annual Pittsburgh Diffraction Conference will be held on 7, 8 and 9 November 1962 at the Mellon Institute, Pittsburgh, Pennsylvania. Sessions will be devoted to instrumentation and techniques, structures, metals and alloys, defect lattices and/or radiation damage, with a

special session on X-ray and electron-diffraction microscopy. Professor Dame Kathleen Lonsdale, F.R.S., of the Chemistry Department, University College, London, will be the guest speaker for the Thursday evening meeting. A placement service will be available. Further information can be obtained from W. H. Robinson, Carnegie Institute of Technology, Pittsburgh 13, Pa., U.S.A.

Book Reviews

Works intended for notice in this column should be sent direct to the Editor (A. J. C. Wilson, Department of Physics, University College, Cathays Park, Cardiff, Great Britain). As far as practicable books will be reviewed in a country different from that of publication.

X-ray Metallography. By A. TAYLOR. Pp. VIII + 993. New York: Wiley. 1961. Price 216s.

There are now several good books dealing with the application of X-ray diffraction procedures to metallurgical problems, but in 1945 there were only two available in English. One of these of course was Barrett, and the other was Dr Taylor's 'Introduction to X-Ray Metallography', battered copies of which are still in use in many metallurgical laboratories. This new book should thus be welcomed in the way one greets an old friend, whose mannerisms and foibles are already well appreciated. As is to be expected after fifteen years, there are some signs of middle aged spread, and the author has had to omit 'Introduction' from the title in view of the 993 pages to be found between the covers.

The style and general approach of 'X-Ray Metallography' will already be familiar to readers of the earlier book, but it should be emphasized that this is a completely new book and not a revised edition of the old. No knowledge of X-ray methods or of crystallography is assumed, and most results are developed from first principles. Metallurgical ideas and terminology are also frequently presented *ab initio*, and the author fulfills

his claim that the book is equally suitable for the X-ray crystallographer who wants to get a feeling for the metallurgical applications of his techniques. The later chapters of the book describe in considerable detail the ways in which X-rays are used for such diverse purposes as the determination of phase diagrams, the investigation of crystal perfection, the determination of textures, or the study of phase transformations. It would be easy to criticise the way in which some of the more advanced topics are handled, but most unfair to do so. No really important development seems to have been omitted; selecting almost at random, there are descriptions of X-ray diffractometry, neutron diffraction, electron-probe analysis, the focusing techniques of Guinier and Tennevin and of Lambot, Vassamillet and Dejae, Lang's method of diffraction microradiography, the work of Warren and Averbach on line broadening, and descriptions of numerous investigations on stacking faults, short range order, clustering, etc.

On the theoretical side, one feels that the treatment is a little pedestrian. The reciprocal lattice is introduced in a very sketchy manner, Fourier-transform theory is not used at all, and the space which could be spared for such topics as the theory of dislocations is too brief to

make the description worthwhile. On the other hand, it is difficult to see what useful purpose is served by reproducing standard (112), (111), and (110) as well as (001) projections of cubic crystals, by giving descriptions with photographs of various types of commercially available X-ray equipment, or by including pull-out charts of ASTM grain sizes. All of these could have been 'included out', as also could perhaps some of the detailed description of particular experimental investigations, which has an almost blow by blow aspect at times. However, these are minor criticisms of a generally well written and informative book. There are several appendices, including some very useful numerical tables.

*Department of Metallurgy
Parks Road
Oxford
England*

J. W. CHRISTIAN

Computing Methods and the Phase Problem in X-ray Analysis. (Report of a Conference Held at Glasgow, August 1960). Un volume de 326 pages édité par R. PEPINSKY, J. M. ROBERTSON et J. C. SPEAKMAN. Oxford, Londres, New-York, Paris: Pergamon Press. 1961. Price 63s.

Dix ans après une première rencontre dont résultait un ouvrage portant le même titre que celui-ci, des cristallographes du monde entier se sont réunis pour discuter des problèmes de calcul que soulève la détermination des structures cristallines. Dix ans, c'est long, surtout si l'on songe au développement 'explosif' des calculatrices à mémoires qui se situe dans cet intervalle.

L'ouvrage comporte vingt-huit contributions dues à des spécialistes éminents et se complète par les discussions auxquelles elles ont donné lieu. Plus de la moitié de ces contributions se rapporte à l'utilisation des machines électroniques, qui sont pléthore.

Il ne s'agit évidemment pas d'un manuel, mais plutôt d'un échantillonnage spontané des préoccupations qui animent les cristallographes, et c'est également là qu'il faut chercher l'intérêt de ce livre.

Tout ce qui concerne la description des machines à mémoire, leurs performances et leur utilisation pour résoudre les problèmes 'classiques' (calcul des séries de Fourier et parachèvement des structures) déroutent quelque peu le lecteur par sa surabondance. Que les auteurs des articles correspondants nous pardonnent de ne pas entrer dans le détail de leurs développements, intéressants pris isolément. Nous avons néanmoins apprécié, pour notre part, la discipline de G. A. Jeffrey, R. Shiono et L. H. Jensen (contribution [3]), qui ont condensé en style télégraphique et sous forme de tableau une expérience considérable acquise par eux-mêmes et différents autres chercheurs au pupitre de la 650 IBM.

Mais les cristallographes achèvent déjà d'adapter au

calcul électronique leurs besoins traditionnels et commencent à penser en fonction des nouvelles possibilités dont ils disposent. Ainsi ([16] et [27]: A. Niggli, V. Vand et R. Pepinsky) la 'méthode du déplacement optimal', destinée à compenser le procédé des moindres carrés lorsqu'il y a moins d'équations de condition que d'inconnues, et qui trouve une première application dans une 'méthode de Monte-Carlo' consistant à émettre des structures arbitraires afin de tendre à se rapprocher de la structure cherchée. Mise en programme, par W. Cochran ([22]), de l'équation de Sayre (basée sur la conviction — non partagée par l'auteur de la présente analyse — que l'utilité des relations de signes compliquées décroît en raison du nombre des atomes présents dans la maille), par M. M. Woolfson ([23]) d'une modification des égalités de Sayre.

Touchant au chapitre des machines à calculer non universelles, notons une courageuse et pertinente défense de A. Niggli en faveur des dispositifs de calcul 'à petite échelle' ([3]). Le diagramme ternaire prétendant lier les notions de précision, d'économie et de maniabilité nous semble cependant plus ingénieux que logique. En [4], description par J. M. Robertson du dispositif mécanique pour le calcul des séries de Fourier qu'il a mis au point à son laboratoire de Glasgow. R. Pepinsky, J. van den Hende et V. Vand écrivent à propos de l'X-RAC un article lucide et tout à leur honneur qui fait penser à un éloge funèbre pour un bon et loyal serviteur.

Côté méthodes proprement dites, les techniques 'directes' sont défendues par E. F. Bertaut ([20]: algèbre des facteurs de structure lorsque l'on fait varier les vecteurs de l'espace réciproque) et H. Hauptman ([21]: présentation de quelques égalités d'application générale pour la recherche des signes ou phases des facteurs de structure). En matière de parachèvements, R. A. Sparks ([17]) expose et compare des différentes façons d'opérer par moindres carrés et d'accélérer la convergence.

Les structures complexes et les protéines sont attaquées par la méthode l'atome lourd (G. A. Sim, [24]), le remplacement isomorphe (R. E. Dickerson, J. C. Kendrew, B. E. Strandberg, [25]), la fonction minimum de Buerger (M. G. Rossmann, [26]). Y. Okaya et R. Pepinsky présentent un développement rationnel pour la résolution des structures non centrées à l'aide de la dispersion anormale ([28]).

Présentation soignée, peu d'erreurs, des sommaires qui facilitent la première lecture: félicitons le comité d'édition.

Avec les machines à mémoire s'est ouverte pour la résolution des structures cristallines une ère nouvelle pleine de promesses. Sera-t-il vraiment nécessaire d'attendre 1970 pour refaire le point? Espérons que non.

*Laboratoire de l'IRChA
12 quai Henri IV
Paris IV^e
France*

G. VON ELLER