

Table 1. *Multiple scattering peaks for forbidden 001 reflexions*

Azimuth (°)	Reflecting planes		Irradiated specimen 2×10^{20} nvt (c.sec ⁻¹)	1 hr annealed		Control specimen (c.sec ⁻¹)	1 hr annealed 1600 °C (c.sec ⁻¹)
				1400 °C (c.sec ⁻¹)	1600 °C (c.sec ⁻¹)		
001 Reflexion							
5.2	10 $\bar{1}2$	10 $\bar{1}3$	54	640	1550	500	430
10.0	20 $\bar{2}2$	20 $\bar{2}1$	18	40	120	75	56
13.1	20 $\bar{2}2$	20 $\bar{2}3$		120	270	170	120
16.8	21 $\bar{3}1$	21 $\bar{3}0$	25	36	160	50	80
18.1	20 $\bar{2}0$	20 $\bar{2}1$	20	40	225	40	85
19.6	10 $\bar{1}1$	10 $\bar{1}0$	250	260	1600	180	450
21.4	12 $\bar{3}1$	12 $\bar{3}0$	25	33	155	60	60
27.4	12 $\bar{3}2$	12 $\bar{3}1$		30	85	50	35
28.4	10 $\bar{1}2$	10 $\bar{1}1$	162	310	1250	250	230
003 reflexion							
3.9	10 $\bar{1}1$	10 $\bar{1}4$		14	34	8	5
8.4	21 $\bar{3}2$	21 $\bar{3}1$		20	57	25	16
8.9	20 $\bar{2}0$	20 $\bar{2}3$		35	120	30	15
9.4	10 $\bar{1}2$	10 $\bar{1}1$	54	175	570	100	121
18.3	20 $\bar{2}1$	20 $\bar{2}2$		7	17	8	5
22.8	10 $\bar{1}3$	10 $\bar{1}0$	35	160	680	60	112
26.0	20 $\bar{2}1$	20 $\bar{2}4$		4	20	6	5
29.7	12 $\bar{3}2$	12 $\bar{3}1$		22	60	20	20
005 reflexion							
5.6	1 $\bar{1}01$	1 $\bar{1}04$		6	15	3	3
7.5	20 $\bar{2}2$	20 $\bar{2}3$		44	84	27	20
16.2	10 $\bar{1}0$	10 $\bar{1}5$	6	83	480	30	100
22.7	20 $\bar{2}4$	20 $\bar{2}1$		5	13	4	4
29.6	1 $\bar{1}03$	1 $\bar{1}02$	17	320	500	63	90

& Hickman, 1963) that the defect concentration in BeO at 2.5×10^{20} nvt (> 1 MeV) is approximately 1.5% and that these defects are present in clusters approximately 50 Å in diameter. The present experiments show that this defect concentration does not destroy the perfection of the crystal sufficiently for double Bragg scattering effects to disappear.

The authors would like to thank Dr S. B. Austerman of Atomics International for supplying the single crystals used in this investigation.

References

- COLE, H., CHAMBERS, F. W. & DUNN, H. M. (1962). *Acta Cryst.* **15**, 138.
 HICKMAN, B. S. & PRYOR, A. W. (1964). *J. Nuclear Mat.* To be published.
 RENNINGER, M. (1937). *Z. Phys.* **106**, 141.
 SABINE, T. M., PRYOR, A. W. & HICKMAN, B. S. (1963). *Phil. Mag.* **8**, 43.
 SABINE, T. M. (1964). *J. Nuclear Mat.* To be published.
 WALKER, D. G., MAYER, R. M. & HICKMAN, B. S. (1964). *J. Nuclear Mat.* To be published.

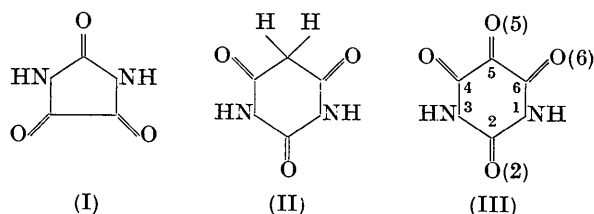
Acta Cryst. (1964). **17**, 1074

La polarité de la liaison carbonyle et la structure cristalline de l'alloxane, de l'acide barbiturique anhydre et des composés analogues. PAR BERNARD PULLMAN, *Université de Paris, Institut de Biologie Physico-Chimique, 13 rue Pierre Curie, Paris 5e, France*

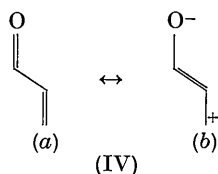
(Reçu le 20 mars 1964)

L'étude de la structure cristalline de certains composés polycarbonylés tels, en particulier, l'acide parabanique (I) (Davies & Blum, 1955), l'acide barbiturique anhydre (II) (Bolton, 1963) et l'alloxane (III) (Bolton, 1964) a permis de mettre en évidence l'existence dans ces cristaux d'approches intermoléculaires particulièrement réduits entre les oxygènes de certains carbonyles et certains carbones du cycle. Cette particularité ne paraît pas se retrouver dans la structure cristalline d'autres bases pyrimidiques ou puriques d'intérêt biologique. Bolton (1964) attribue cet état de choses à la polarité exceptionnellement prononcée des groupes carbonyles im-

pliqués dans les contacts rapprochés. Cet auteur observe toutefois en même temps, que les liaisons en question sont exceptionnellement courtes.



Nous voudrions faire remarquer que l'hypothèse sur la grande polarité est incompatible avec l'observation sur la longueur exceptionnellement courte de liaisons en question. En effet, rien qu'en utilisant la représentation courante de la théorie de la mésomérie on peut voir aisément qu'une forte polarité des carbonyles et en particulier une forte accumulation des charges électroniques sur leurs oxygènes résulte dans les molécules conjuguées d'une grande importance des formules ioniques du type (IVb) qui, nécessairement, représentent la liaison carbonyle comme simple, donc longue. Une liaison CO courte ne saurait être très polaire.



Cet état de choses est précisé par l'examen de la distribution de charges électroniques et des indices de liaison mobile dans les composés intéressés. Prenons à titre d'exemple le cas de l'alloxane. Selon les résultats expérimentaux, le contact rapproché a lieu entre O(6) et C(5). La distribution de charges électroniques dans cette molécule, évaluée par la méthode des orbitales moléculaires (Pullman & Pullman, 1963) est représentée par la Fig. 1. On constate que les groupes carbonyles engagés dans ce contact ne sont nullement les groupes les plus polaires de la molécule. Leur polarité est plus faible que celle du groupe C(2)-O(2). Il en est ainsi essentiellement en ce qui concerne la charge négative nette de l'oxygène. La charge positive nette du C(5) est effectivement plus élevée que celle des autres groupes carbonyles de la molécule.

En revanche, les liaisons carbonyles impliquées dans le contact rapproché ont un indice de liaison mobile particulièrement élevé (Fig. 2). En fait cet indice décroît tout à fait parallèlement à l'élongation des différentes liaisons carbonyles de l'alloxane.

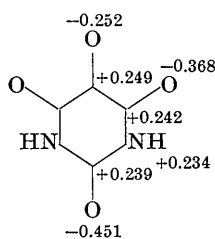


Fig. 1. Charges électroniques nettes dans l'alloxane.

Acta Cryst. (1964). **17**, 1075

A dynamic effect in electron diffraction by molecules. By JON GJØNNES, *Department of Physics, University of Oslo, Norway**

(Received 18 February 1964)

Dynamic scattering within the atoms has been known for some time to contribute to the electron diffraction

* Present address: Department of Physics, University of Melbourne, Australia.

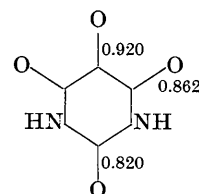


Fig. 2. Indices mobiles de liaisons CO dans l'alloxane.

Le caractère général de cette situation est illustré dans le Tableau 1 qui compare les charges et les indices mobiles des liaisons carbonyles de (I), (II) et (III) qui sont impliqués dans des contacts rapprochés avec des liaisons analogues d'autres purines et pyrimidines d'intérêt biologique.

Tableau 1. *Caractéristiques des liaisons CO* (Pullman & Pullman, 1963)

Composé	Indice mobile	Charge nette du C	Charge nette du O
Acide barbiturique	0,864*	+0,252*	-0,393*
	0,819	+0,239	-0,454
Acide parabanique	0,864*	+0,242*	-0,364*
	0,822	+0,239	-0,447
Cytosine	0,778	+0,204	-0,492
Uracil	0,799	+0,212	-0,456
	0,811	+0,232	-0,463
Acide orotique	0,801	+0,213	-0,452
	0,810	+0,232	-0,464
Guanine	0,796	+0,207	-0,461
Acide urique	0,790	+0,202	-0,467
	0,806	+0,228	-0,469
	0,776	+0,201	-0,499

* Liaisons CO engagées dans les contacts rapprochés.

Il résulte de ce tableau que les liaisons carbonyles impliquées dans les contacts rapprochés sont caractérisées par un indice mobile particulièrement élevé, une charge nette positive sur le carbone impliqué dans le contact également très élevée mais, en revanche, par une charge nette négative relativement très faible sur leur oxygène.

Références

- DAVIES, D. R. & BLUM, J. J. (1955). *Acta Cryst.* **8**, 129.
 BOLTON, W. (1963). *Acta Cryst.* **16**, 166.
 BOLTON, W. (1964). *Acta Cryst.* **17**, 147.
 PULLMAN, B. & PULLMAN, A. (1963). *Quantum Biochemistry*. New York: Wiley's Interscience Division.