

metrical objects consist of comparatively well-defined peaks, separated by regions of low intensity (see Fig. 1); diffraction patterns of objects without a centre of symmetry are hazier and have larger regions of medium intensity (see Fig. 2). This arises because the phase in the diffraction pattern of a centrosymmetrical object can only change in units of π and the amplitude must pass through zero at each change; continuous change of phase can occur in the diffraction pattern of a non-centrosymmetrical object without a directly related amplitude change.

This characteristic difference provides a useful visual demonstration (in two dimensions) of the optical basis of Wilson's statistical theories of the effect of a centre of symmetry on the distribution of X-ray intensities (Wilson, 1949). Optical diffraction patterns are the Fourier transforms of the two-dimensional objects from which they are derived. If, therefore, the object is made

to represent the projected contents of a single unit cell of a crystal, the corresponding zone of X-ray intensities can be evaluated by sampling the optical diffraction pattern at the points of the reciprocal lattice.

Obviously the chance of obtaining a very low or very high intensity when this sampling is done on a pattern of the type represented by Fig. 1 is greater than if it is done on one of the type shown in Fig. 2, whereas the chance of a medium intensity is greater for patterns like Fig. 2. The full range of intensities cannot be recorded on a single photograph but the difference in proportion of very low intensities is very marked in the figures shown here.

References

- LIPSON, H. & TAYLOR, C. A. (1951). *Acta Cryst.* **4**, 458.
TAYLOR, C. A. & LIPSON, H. (1951). *Nature, Lond.*, **167**, 809.
WILSON, A. J. C. (1949). *Research, Lond.*, **2**, 246.

Acta Cryst (1952). **5**, 142

Sur la structure de l'indigo et de ses dérivés. Par HÉLÈNE VON ELLER, *Service de Radiocristallographie du Laboratoire de Chimie C, Sorbonne, Paris, France*

(Reçu le 12 juin 1951)

La sublimation de l'indigo, du thiaindigo et du sélénindigo, à la pression atmosphérique et à différentes températures, nous a permis d'obtenir une seule forme

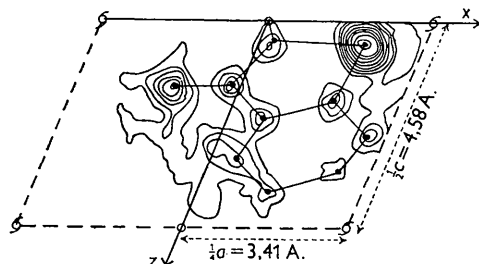


Fig. 1. Sélénindigo extinction droite; projection de Fourier-Bragg $z0x$.

cristalline pour le premier composé, deux formes pour le second et au moins trois pour le troisième. Tous les cristaux se présentent en minces plaquettes allongées. Seules les formes mentionnées dans le Tableau 1 ont été retenues en vue d'une analyse structurale.

Les paramètres des mailles élémentaires de l'indigo et du sélénindigo à extinction droite, d'une part, et ceux du thiaindigo et du sélénindigo à extinction oblique, d'autre part, étant très voisins, nous laissent prévoir que ces cristaux sont respectivement isomorphes. Les différentes mailles élémentaires contiennent deux molécules. Ces molécules sont donc centrosymétriques et s'identifient à celles de l'isomère éthylénique *trans*. Ceci avait déjà été mis en évidence, pour l'indigo, par Reis & Schneider (1928).

Les projections de Patterson $z0x$, $x0y$ et $y0z$ du sélénindigo à extinction droite fournissent immédiatement les coordonnées de l'atome de sélénium:

$$x = 0,161, \quad y = 0,222, \quad z = 0,053.$$

La méthode de l'atome lourd conduit, en particulier, à la projection de Fourier-Bragg $z0x$ (Fig. 1) sur laquelle il apparaît clairement que la molécule correspond bien à l'isomère éthylénique *trans*.

Bibliographie

- REIS, A. & SCHNEIDER, E. (1928). *Z. Kristallogr.* **68**, 543.

Tableau 1

	Face prépondérante	Direction d'extinction	Groupe spatial	a (Å)	b (Å)	c (Å)	β (°)	d_c	d_m	n
Indigo, extinction droite	(001)	$\parallel$ à 010	$P2_1/a$	12,3 ₁	5,7 ₅	9,3 ₂	116	1,48	1,48	2
Thiaindigo, extinction droite	(100)	$\parallel$ à 010	$P2_1/a$	20,2	3,9 ₂	7,8 ₂	93	1,59	1,56	2
Thiaindigo, extinction oblique	(010)	34° de 001	$P2_1/a$	7,8 ₂	20,4	3,8 ₇	102	1,57	1,57	2
Sélénindigo, extinction droite	(001)	$\parallel$ à 010	$P2_1/a$	13,6 ₆	5,9 ₂	9,1 ₇	113	1,90	1,91	2
Sélénindigo, extinction oblique	(010)	36° de 001	$P2_1/a$	7,8	21,2	4,06	109	2,04	2,15	2