

Acta Cryst. (1957). **10**, 240

Note sur la structure cristalline de la chloroacétamide. Par J. DEJACE, *Laboratoire de Cristallographie, Université de Liège, Belgique*

(Reçu le 15 décembre 1956)

Nous avons récemment publié une note sur la structure cristalline de la chloroacétamide (Dejace, 1955). Reprenant l'étude du même composé, Penfold & Simpson (1956) signalent quelques divergences entre les deux structures obtenues. Ces divergences proviennent, en majeure partie, du fait que la maille choisie par ces auteurs n'est pas une maille réticulaire. En effet, la maille qu'ils déduisent de la strate équatoriale ($h0l$) ne permet pas d'interpréter la strate supérieure ($h1l$), l'axe A n'étant pas une translation du réseau. A cause de ce choix défectueux, certains centres de symétrie de la projection suivant $[010]$ sont en réalité des axes binaires hélicoïdaux vus par le bout et vice-versa.

Les axes de Penfold & Simpson (A, B, C) sont liés aux axes réels (a, b, c) par les relations vectorielles

$$A = a + \frac{1}{2}c, \quad B = -b, \quad C = -c.$$

Leurs valeurs numériques calculées à partir de a, b, c sont:

$$A = 10,36, \quad B = 5,13, \quad C = 7,41 \text{ Å}, \quad \beta' = 101^\circ 52' \pm 5'.$$

La valeur de β' concorde bien avec celle de Penfold & Simpson ($102 \pm 0,5^\circ$).

Les indices hkl se transforment par les formules

$$H = h + \frac{1}{2}l, \quad K = -k, \quad L = -l,$$

où HKL se rapportent aux axes choisis par Penfold & Simpson. L'indice H sera donc fractionnaire quand l est impair.

Les coordonnées atomiques sont liées par les relations

$$\begin{aligned} x/a &= X/a, \\ y/b &= 0,50 - Y/b, \\ z/c &= 0,25 + \frac{1}{2}X/A - Z/C, \end{aligned}$$

où X, Y, Z sont les coordonnées de Penfold & Simpson.

Le fait signalé par Penfold & Simpson que les coordonnées Z/C de notre publication doivent être divisées par 2 pour concorder avec les leurs est fortuit et provient de ce que vue dans la direction $[010]$, la molécule est presque linéaire.

Les distances entre atomes d'une même molécule et entre deux molécules symétriques par rapport à un centre (liaisons hydrogènes) ne sont pas affectées par le choix défectueux des axes. Par contre, l'arrangement des chaînes l'une par rapport à l'autre est sensiblement modifié. Penfold & Simpson ne mentionnent pas que, dans la structure telle qu'ils la décrivent, la distance entre l'atome de chlore voisin de l'origine ($X/A = 0,115$, $Y/B = 0,181$, $Z/C = 0,130$) et l'atome symétrique par rapport à l'origine est seulement de 3,30 Å; ce qui est trop court pour une liaison de van der Waals. En réalité, le centre de symétrie est remplacé par un axe binaire hélicoïdal et la distance est 3,74 Å.

Deux remarques s'imposent à propos de notre propre publication:

1°. Une erreur d'impression s'est glissée dans le tableau des coordonnées. Il faut lire pour l'atome d'oxygène O_1 ,

$$Y/b = -0,201 \text{ au lieu de } Y/b = 0,201.$$

2°. La légende trop peu explicite de la Fig. 1 peut prêter à confusion. Les deux chaînes moléculaires parallèles à l'axe b qui y sont représentées ne sont pas dans le même plan (102) mais dans deux plans parallèles décalés de la distance $\frac{1}{2}c$.

Bibliographie

- DEJACE, J. (1955). *Acta Cryst.* **8**, 851.
PENFOLD, B. R. & SIMPSON, W. S. (1956). *Acta Cryst.* **9**, 831.

Acta Cryst. (1957). **10**, 240

An X-ray investigation of the reported high-temperature allotropy of ruthenium. By E. O. HALL and J. CRANGLE, *Department of Physics, The University, Sheffield 10, England*

(Received 26 November 1956)

The crystal structure of ruthenium at room temperature has been known for many years to be close-packed hexagonal, but periodically the question of possible allotropy at higher temperatures has been raised.

As a result of measurements on the specific heat of the metal, Jaeger & Rosenbohm (1931) stated that transition points occurred at 1035, 1190 and 1500° C. The same authors later examined the electrical resistivity of ruthenium, and also its thermoelectric behaviour with respect to platinum, and again found these same transition temperatures (Jaeger & Rosenbohm, 1941). The

results were explained in terms of allotropic changes between phases which were designated α , β , γ and δ in order of increasing temperature. No other independent work has confirmed this alleged allotropy. The only X-ray diffraction examination at temperatures other than room temperature was by Owen & Roberts (1937), and this was taken to only 600° C. It is of obvious interest to settle the question of the allotropy by making observations at higher temperatures.

Specimens of high purity ruthenium powder, kindly supplied by Mond Nickel Company Limited, were