Acta Cryst. (1958). 11, 666

The space group of 4:4'-dibromodiphenyl. By F. H. Herbstein, National Physical Research Laboratory, Council for Scientific and Industrial Research, Pretoria, South Africa

(Received 28 May 1958)

Dhar (1946) has presented crystallographic data for the three isomorphous compounds 4:4'-difluorodiphenyl, 4:4'-dichlorodiphenyl and 4:4'-dibromodiphenyl. These crystals are all monoclinic prismatic (Groth, 1905) and were reported to show the systematic absences h00, 0k0, 00l absent for h, k, l odd. The space groups suggested were $P2_1$ or $P2_1/m$, with 8 molecules in the unit cell. If $P2_1$ is correct then these compounds are possibly additional examples of centrosymmetric molecules crystallizing in non-centrosymmetric crystals (Herbstein & Schoening, 1957). As the systematic absences reported by Dhar are unusual it was decided to redetermine the space group of one of these compounds; 4:4'-dibromodiphenyl was chosen because of its availability.

Long straw-coloured needles of 4:4'-dibromodiphenyl, showing oblique extinction, were obtained by slow evaporation of an ethanol-benzene mixture. The cell dimensions and space group were determined from zero and n-layer Weissenberg photographs about [001] (the needle axis) and [010]. The values obtained for the cell dimensions are in reasonable agreement with Dhar's results.

$$a = 15.73 \pm 0.02$$
, $b = 14.18 \pm 0.01$, $c = 9.83 \pm 0.01$ Å, $\beta = 96.7 \pm 0.3^{\circ}$.

(Cu $K\alpha$, $\lambda = 1.5418$ Å). The systematic absences are:

h0l absent for h+l odd. 0k0 absent for k odd.

The space group is thus unequivocally determined as $C_2^5 - P2_1/n$, and the possibility mentioned above does not occur.

In addition to the systematic absences listed, marked pseudo-absences were found on the Weissenberg photographs about [001]. On the hk0 and hk2 photographs the reciprocal-lattice rows are weak for $k=2,6,10,\ldots$, while for the hk1 and hk3 photographs the reciprocallattice rows are weak for $k=4,8,12,\ldots$. These reciprocal-lattice rows, and some others, show continuous streaking in the a^* direction. Streaking along some layer lines of the second kind (i.e. in the c^* direction) has also been noticed on oscillation photographs about [001]. No attempt has been made to study these effects in more detail as this would fall outside the scope of the present investigation.

This paper is published with the permission of the South African Council for Scientific and Industrial Research.

References

DHAR, J. (1946). Indian J. Phys. 20, 154. GROTH, P. (1905). Chemische Krystallographie, vol. 5, p. 8. Leipzig. HERBSTEIN, F. H. & SCHOENING, F. R. L. (1957). Acta Cryst. 10, 657.

Book Reviews

Works intended for notice in this column should be sent direct to the Editor (P. P. Ewald, Polytechnic Institute of Brooklyn, 333, Jay Street, Brooklyn 1, N.Y., U.S.A.). As far as practicable books will be reviewed in a country different from that of publication.

Physical Properties of Crystals. By J. F. NYE. Pp. xv+322 with many figs. and tables. Oxford: Clarendon Press. 1957. Price 50s.

Nachdem C. Hermann 1934 auf die Vorteile der Tensorschreibweise bei kristallphysikalischen Problemen hingewiesen hatte, ist sie aus der mathematischen Behandlung derartiger Aufgaben nicht mehr wegzudenken. Ihre Anwendung zeichnet sich oft durch eine besondere Eleganz aus und die Vertrautheit mit ihr gestattet vorzüglich, in vielen Fällen umfangreiche Rechnungen wesentlich abzukürzen oder ganz zu vermeiden. Eine Einführung in die Darstellung der Kristallphysik durch Tensoren und Matrizen zu geben, die vor allem für Studierende der höheren Semester und Arbeitende auf benachbarten Gebieten der Naturwissenschaft gedacht ist, war das Ziel des Autors. Welchen Wert man in England der Kristallphysik beimisst, ergibt sich am besten aus der Tatsache, dass man neben dem 'Wooster' diese zweite Einführung mit ganz ähnlichen Zielen und verwandter, aber doch in vielem abweichender Darstellung erscheinen lässt.

Etwa 50 Seiten sind der Einführung gewidmet. Hier werden Vektoren und Tensoren 2. Stufe ausführlich behandelt, die durch ihr Transformationsverhalten definiert werden. Die von Anfang an benutzte Einsteinsche Summationsvorschrift gestattet, wenn man sich einmal an sie gewöhnt hat, eine klare und übersichtliche Schreibweise der Formeln. Ihr besonderer Vorteil besteht in einer gewissen Selbstkontrolle des Kalküls, die eine ganze Reihe sonst möglicher Fehlerquellen ausschliesst. In diesem Buch werden alle Grössen mit tiefstehenden Indizes geschrieben, da die orthogonalen Koordinaten nicht verlassen werden. Hauptachsentransformation, Flächendarstellung und Einfluss der Kristallsymmetrie auf Tensoren zweiter Stufe bilden den weiteren Inhalt der Einführung, wobei auch schiefsymmetrische Tensoren zweiter Stufe und damit axiale Vektoren behandelt

Die sehr ausführliche, sorgfältige Darstellung, die oft

auch auf die Anschauung Bezug nimmt, aber stets streng ist, macht den für das Verständnis der übrigen Kapitel grundlegenden ersten Abschnitt leicht fasslich. Eine kleine Anmerkung zu einem nicht sehr wesentlichen Punkt: Die strenge Unterscheidung zwischen Transformationsmatrix und Tensor zweiter Stufe, wie sie in I, § 3·1 gefordert wird, ist nach Ansicht des Referenten nicht gerechtfertigt. Beide ordnen einem Satz von Vektoren einen anderen Satz zu, und beide sind auf ein Basisvektorensystem bezogen (man beachte etwa das ganz verschiedene Aussehen, das die Transformationsmatrix der dreizähligen Drehachse bei der normalen Aufstellung des kubischen und des rhomboedrischen Systems besitzt).

Die hier, wie auch in den anderen Teilen des Buches eingestreuten, geschickt ausgewählten Übungsaufgaben ermöglichen, den durchgearbeiteten Stoff praktisch anzuwenden und den eigenen Stand zu überprüfen. Die Lösungen der Aufgaben sind am Schluss des Buches aufgeführt. Sehr angenehm empfindet man auch die Zusammenfassung am Schluss jedes Kapitels, in der stichwortartig die wichtigsten Ergebnisse des Kapitels wiederholt werden, wodurch langes Suchen vermieden wird.

Der zweite Teil, etwa 150 Seiten, behandelt mit den Kapiteln Para- und Diamagnetismus, dielektrische Polarisation, Spannungstensor, Verzerrungstensor und Wärmeausdehnung, Piezoelektrizität und Tensoren dritter Stufe, Elastizität und Tensoren vierter Stufe, die Matrix-Methode und Thermodynamik der Kristalleigenschaften im Gleichgewicht die Eigenschaften der Kristalle, die bei thermodynamisch reversiblen Prozessen eine Rolle spielen. Hiervon werden in den ersten Kapiteln die betreffenden Eigenschaften besprochen, wobei, vor allem im Anfang, auch auf die Physik der Vorgänge etwas näher eingegangen wird. Allerdings könnte die physikalische Bedeutung des formal Berechneten oder Eingeführten an der einen oder anderen Stelle vielleicht etwas ausführlicher dargelegt werden. Die beiden letzten Kapitel geben eine Zusammenfassung. Der Tensorschreibweise wird hier die Matrix-Schreibweise gegenübergestellt, nachdem der Leser kurz in das Rechnen mit Matrizen eingeführt wurde. Als Rechenbeispiele werden eine Fehlerbetrachtung und eine Hauptachsentransformation durch sukzessive Approximation vorgerechnet, die besonderen Vorzüge des Rechnens mit Matrizen kommen hierbei augenfällig zum Ausdruck. Das letzte Kapitel bringt die Wechselwirkung und die Zusammenhänge zwischen den einzelnen besprochenen Effekten auf thermodynamischer Grundlage.

Auf knapp 40 Seiten beschäftigt sich der dritte Teil mit Eigenschaften der Kristalle, die auch durch Tensoren beschrieben werden, die aber mit Transportprozessen zusammenhängen und daher mit der Thermodynamik irreversibler Prozesse angefasst werden müssen. Es handelt sich um Wärme- und Elektrizitätsleitung und um die Thermoelektrizität, die eingeführt und mit Hilfe des Onsager'schen Prinzips besprochen werden.

Der letzte Abschnitt bringt auf etwa 40 Seiten einige Ausschnitte aus der Kristalloptik, insbesondere werden hier die elektro-optischen Effekte, die Photoelastizität, Elektrostriktion und das optische Drehvermögen von Kristallen abgehandelt.

In einigen Anhangskapiteln werden Vektorformeln, Betrachtungen zur Kristallsymmetrie und Tensortabellen gebracht, sowie einzelne mathematische Berechnungen durchgeführt; insbesondere ist ein längerer Abschnitt der optischen Indikatrix gewidmet.

Das Buch stellt eine ausgezeichnete Einführung in die Rechenmethoden der Tensor- und Matrizenrechnung dar, die klar, sauber und leicht verständlich entwickelt werden. Es ist aussergewöhnlich sorgfältig bearbeitet, wesentliche Druckfehler oder Irrtümer sind dem Referenten nicht aufgefallen. Eine Fülle von Bemerkungen über Dinge, die in der Literatur oft falsch angegeben oder benutzt werden (viergliedrige hexagonale Zonenindizes, die verschiedenen Arten der Pyroelektrizität, elektrooptischer Effekt und Photoelastizität, um nur einige Beispiele zu nennen) ist eingestreut, sodass das Buch auch für den Fortgeschrittenen auf diesem Gebiet einen beträchtlichen Wert als Informationsquelle besitzt. Druck und Ausstattung sind sehr gut.

HANS WONDRATSCHEK

Max-Planck Institut für Silikatforschung Würzburg, Deutschland

Geometrische und physikalische Kristallographie. By F. RAAZ and H. TERTSCH. Pp. xii+ 367 with 384 figs. Vienna: Springer. 3rd ed. 1958. Price 81s. 6d.

The third edition of this well known book differs from the second (Acta Cryst. (1952), 5, 298) by the addition of some chapters on X-ray crystallography, structure determination, and non-optical crystal physics. Even so, the emphasis is still primarily 'classical', and about two-thirds of the book is devoted to morphology and crystal optics.

The treatment of crystal morphology follows conventional lines, and much space is devoted to the systematic discussion of the 32 crystal classes; the modern reader may well find the approach old-fashioned and somewhat unpalatable, and will regret that the Hermann–Mauguin notation, although mentioned, is not systematically used. There are also departures from well established conventions, for example the use of (hkl) to indicate a form. The stereographic projection is well described, but there is no discussion of spherical trigonometry.

The section on crystal optics remains substantially as in the earlier editions, but with a welcome (albeit brief) addition on reflected light. The treatment is very condensed and the novice is likely to need considerable assistance from other sources if he is to master all the topics discussed.

It is in respect of the new material added to this edition that the book is least satisfactory, and it may well be doubted whether the authors were wise in attempting to cover so vast a field within such a limited compass. Lattices, space-group theory (four pages for this, and unconventional symbols for the symmetry elements), Laue, powder, rotation and Weissenberg photographs, the reciprocal lattice, and structure analysis (two pages) are only some of the topics in the 75 pages devoted to X-ray crystallography. Each is discussed so briefly that the account is virtually incomprehensible. There is, too, a lack of sense of proportion: absorption corrections in powder photographs are discussed at relatively great length, and more pages are devoted to the Bragg ioniza-