



Fig. 3. Morphologie d'un cristal de  $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$  caractérisant de façon indiscutable la classe 23 (Scacchi, 1855*b*; Wulff, 1880).

Pour revenir au nitrate d'argent, il est important de remarquer que les deux atomes indépendants de chaque élément sont dans des positions presque symétriques, et il serait peut-être bon d'examiner de plus près, s'il est possible, par des méthodes spectroscopiques, de mettre en évidence un écart aussi faible entre les positions réelles des deux atomes indépendants et celles de deux atomes qui seraient liés par un centre de symétrie.

Remarquons encore que, dans le cas où subsisterait une ambiguïté, contrairement à l'affirmation de Brooker, les rayons X permettent de résoudre ce problème. Il suffit d'utiliser une longueur d'onde appropriée, permettant de mettre en évidence les effets de dispersion anormale.

## II. Problème du 'cristal parfait'

Brooker affirme que le cristal parfait n'existe pas. Ceci est 'philosophiquement' valable, car, en effet, comme le dit Brooker, on ne peut affirmer que la symétrie bilatérale du corps humain soit réelle. Cependant, la notion de cristal parfait n'est pas une notion de symétrie mais de perfection dans la périodicité du cristal, qui a été mise en évidence par une étude de topographie aux rayons X. Ceci implique à la propagation des rayons X des conditions particulières qui justifient l'utilisation de la théorie dynamique.

D'autres questions de détail peuvent être évoquées. Par exemple, la rotation des plans des groupements  $\text{NO}_3$  (Gibbons & Trotter, 1971) invoquée par Brooker. Nous

pensons que de telles affirmations, basées sur le seul critère des résultats d'affinement des paramètres thermiques de N et O sont, pour le moins, audacieuses. De plus, une correction d'extinction appropriée à l'état du cristal est nécessaire pour être assuré d'une bonne estimation des paramètres thermiques des atomes légers, qui nécessite une valeur très précise des harmoniques de basse fréquence, c'est-à-dire des facteurs de structure correspondant aux faibles valeurs de  $\sin \theta/\lambda$ .

Par ailleurs, nous tenons à signaler que les méthodes d'affinement par moindres carrés peuvent, dans certains cas, permettre d'affiner aisément des hypothèses non conformes à la réalité. Ces méthodes d'affinement ne sont applicables que lorsqu'on est assuré que le modèle est cohérent avec les informations provenant d'autres méthodes (morphologie, topographies, etc.), ce qui a été effectué dans notre travail.

Nous estimons que chaque méthode a ses possibilités et ses limites. Les études spectroscopiques semblent, dans ce cas, ne pas être assez fines pour déterminer la présence d'un centre de symétrie et totalement inadaptées à mettre en évidence l'état parfait du cristal.

## Références

- BIRSTOCK, R. (1967). *Z. Kristallogr.* **124**, 310–334.  
 BROOKER, M. H. (1979). *Acta Cryst.* **B35**, 1538–1539.  
 GIBBONS, C. S. & TROTTER, J. (1971). *J. Chem. Soc. A*, pp. 2058–2062.  
 GROTH, P. (1908*a*). *Chemische Kristallographie*, Tome II, pp. 73–74. Leipzig: Engelmann.  
 GROTH, P. (1908*b*). *Chemische Kristallographie*, Tome II, pp. 104–108. Leipzig: Engelmann.  
 GROTH, P. (1921). *Elemente der Physikalischen und Chemischen Kristallographie*. Munich: Oldenbourg.  
 LINDLEY, P. F. & WOODWARD, P. (1966). *J. Chem. Soc. A*, pp. 123–126.  
 MEYER, P., RIMSKY, A. & CHEVALIER, R. (1978). *Acta Cryst.* **B34**, 1457–1462.  
 NIGGLI, A. (1959). *Z. Kristallogr.* **111**, 269–282.  
 SCACCHI, A. (1855*a*). *Nuovo Cimento*, **1**, 169.  
 SCACCHI, A. (1855*b*). *Nuovo Cimento*, **1**, 170.  
 WULFF, L. (1880). *Z. Kristallogr.* **4**, 126–139.  
 ZACHARIASEN, W. (1928). *Untersuchung über der Kristallstrukturen von Sesquioxides und Verbindungen  $\text{ABO}_3$* , partie 4. Oslo: Skrifter.

## Book Review

*Works intended for notice in this column should be sent direct to the Book-Review Editor (J. H. Robertson, School of Chemistry, University of Leeds, Leeds LS2 9JT, England). As far as practicable books will be reviewed in a country different from that of publication.*

*Acta Cryst.* (1980). **B36**, 1985–1986

**Atlas of the three-dimensional structure of drugs.** By J. P. TOLLENAERE, H. MOEREELS and L. A. RAYMAEKERS. Pp. xii + 321. Amsterdam: Elsevier/North-Holland Biomedical Press, 1979. Price: US \$62.25, Dfl 145.00.

The stated objective of this atlas is to present crystallographic information on biologically important molecules in a

way which is readily digested by medicinal chemists and which will allow the ready comparison of molecules belonging to the same pharmacological class. It attempts to do this by representing a single molecule of each compound by a three-dimensional drawing, using lines for bonds and small circles to represent atoms, the coordinates of which are taken from crystallographic data. The particular orientation of representation is chosen to illustrate the key features of each molecule; compounds in a similar pharmacological class are depicted with similar spatial orientations. Heteroatoms are emphasized by a colouring code with, for example,

oxygen indicated by red circles. Each compound occupies one page and data on over 250 compounds are contained in the atlas. Besides the crystallographic representation, each page contains the compound name, the molecular formula, a structural formula, and brief notes on the structural features and the pharmacological properties of the compound. Leading references to both the crystallographic and pharmacological literature are also cited. The range of compounds represented in this atlas include cholinergic agents, phenethylamines and catecholamines, H<sub>1</sub>- and H<sub>2</sub>-receptor agonists and antagonists, opiates, antidiarrhoeals, hallucinogenics, anticonvulsants and hypnotics, anti-inflammatory agents and various miscellaneous medicinal chemicals. It excludes such drugs as steroids and antibiotics.

On perusing this atlas – one does not read it – I was impressed by the beauty and simplicity of the drawings since many of the compounds represent a basic challenge to the synthetic organic chemist: what other ways can one combine atoms to hold the key functionalities in the correct orientation in space? Of course, such thoughts lead quickly to the realization that the biologically active conformation of a molecule need not be that found in the crystalline state. Nevertheless, this atlas will help the medicinal chemist to visualize more easily the three-dimensional character of the substances he deals with. The selection of compounds, which the authors declare was done very subjectively, contains examples of most of the more familiar compounds.

This atlas will probably only reach the shelves of institutional libraries as a reference work. That it is necessary is a tribute to the advances made in the area of both medicinal chemistry and crystallography. It is hoped that the time will soon come when such information as is contained in this book is made available on visual computer-graphics systems!

Department of Organic Chemistry  
The University of Leeds  
Leeds LS2 9JT  
England

P. G. SAMMES

*Acta Cryst.* (1980), B36, 1986

### Books Received

*The following books have been received by the Editor. Brief and generally uncritical notices are given of works of marginal crystallographic interest; occasionally a book of fundamental interest is included under this heading because of difficulty in finding a suitable reviewer without great delay.*

**Structure reports for 1978. Vol. 44A. Metals and inorganic compounds.** Edited by J. TROTTER. Pp. vi + 387. Dordrecht: D. Reidel, 1980. Price Dfl 120.00. The most recent, and inclusive, review of *Structure Reports* was by J. Donohue [*Acta Cryst.* (1978), B34, 3847; (1979), A35, 346]. It may be noted here that Reidel Publishing Company took over the publication and sale of this, and all the other publications of the IUCr, previously handled by Bohn, Scheltema and Holkema, from 1 January 1980.

**Liquid crystals.** By S. CHANDRASEKHAR. Pp. x + 342. Cambridge Univ. Press, 1980. Price (soft cover) £8.95. This is the paperback edition of the book originally published in 1975 and reviewed then by G. W. Gray [*Acta Cryst.* (1975), A33, 251].

**The foundations of chemical kinetics.** By E. N. YEREMIN. Pp. 423. Moscow: MIR Publishers, 1980. Price £5.95 (from Central Books, London).

**Optical crystallography** (5th edition). By E. E. WAHLSTROM. Pp. 488. Chichester, England: John Wiley, 1979. Price £12.00. A review of this book, by J. H. Robertson, has been published in the March issue of *Acta Crystallographica*, Section A, page 333.