

J. Appl. Cryst. (1973). 6, 306

Note on a graphic display version of program ORTEP. By ANDERS G. NORD, *Institute of Inorganic and Physical Chemistry, University of Stockholm, S-10405 Stockholm 50, Sweden*

(Received 8 March 1973; accepted 30 March 1973)

The graphic display version of *ORTEP*, (program *INGRID*), has been modified and speeded up by use of the IBM Graphic Programming Services.

The graphic display version of *ORTEP* (Johnson, 1965) called *INGRID* (Nord, 1971), formerly used the display routine package *GPAK* (Wolpe *et al.*, 1966). However, upon the request of many users, it has now been rewritten to use the IBM Graphic Programming Services (1971) *GPS*. Program *INGRID* is written for an IBM 360/75 computer and an IBM 2250 graphic display unit.

The main features and the flow chart of the program are almost unchanged, but the *GPAK* routines are replaced by 27 *GPS* routines. At each stage of the program, those function keys (FK) which can be used are now lit to avoid mistakes. Whenever the user is requested to do something, a sound is heard from the display unit and a text is displayed.

The program section used to change rotations has also been simplified. After the appropriate FK has been pressed, the three 'old' rotation angles about the axes are displayed. The user may then enter the new rotation angles through the alphanumeric keyboard. Alternatively, depression of another function key instead of the entry of a new angle

value causes the former rotation angle to be retained.

The elapsed CPU time is constantly displayed on the screen. When the program is unloaded two sounds are heard from the display unit. The user can terminate the program at any time. The present version is twice as fast as the old *GPAK* version.

References

- IBM Systems Reference Library (1971). *System/360, Graphic Programming Services for FORTRAN IV*. Form C27-6932.
- JOHNSON, C. K. (1965). *ORTEP*. Report ORNL-3794. Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, USA.
- NORD, A. G. (1971). *J. Appl. Cryst.* 4, 196-201.
- WOLPE, H. *et al.* (1966). An Online System/360 Graphic data processing subroutine package with realtime 2250 input and display. IBM Corp., Kirkeby Center, Los Angeles, California, USA.

Crystallographers

Dr. M. E. Straumanis, Professor Emeritus of Metallurgical Engineering and Senior Research Investigator in the Graduate Center for Materials Research died at his home on March 16, 1973. He had been on the Rolla campus of the University of Missouri for 26 years.

Graduated from the University of Latvia in 1925 as chemical engineer, he early gained recognition for his approach, still used today, to the study of metal corrosion. Associated with the University of Latvia until 1944, he introduced X-ray diffraction techniques there after being introduced to them during a 1931 study period at the Kaiser Wilhelm Institut für Metallforschung. The Straumanis method of precision lattice-parameter measurements was developed some three years later.

A scholarship memorial fund has been established in his name. Further information may be obtained from Professor William J. James, University of Missouri, Rolla, Missouri 65401, U.S.A.

Dr Gen Shirane and Dr John D. Axe of the Brookhaven National Laboratory have received the second Bertram

Eugene Warren Diffraction Physics Award for their work on the dynamics of solid-state phase transformations, employing inelastic neutron scattering. The Award is made every three years for outstanding work during the preceding six-year period in the physics of solids or liquids using X-ray, neutron, or electron diffraction techniques.

Professor G. A. Jeffrey, University of Pittsburgh, has been appointed a Co-editor of *Acta Crystallographica* with effect from 1 August 1973.

Book Reviews

Works intended for notice in this column should be sent direct to the Book-Review Editor (M. M. Woolfson, Physics Department, University of York, Heslington, York YO1 5DD, England). As far as practicable books will be reviewed in a country different from that of publication.

The crystal chemistry and physics of metals and alloys. By W. B. PEARSON. Pp. xix + 806. New York: Wiley Interscience, 1972. Price £13.80.

In an illuminating preface Professor Pearson argues that metal structures

have been treated as poor relations in most books on crystal chemistry. The discussions that have been given in the past seldom extend beyond f.c.c., h.c.p. and b.c.c.. However, nearly seven hundred metal structures have now been reported and a coherent treatment is overdue. This substantial and valuable book, the first monograph of its kind in the English language, provides such a treatment.

The book's 800 pages are divided into a preface, a 'pre-chapter' entitled 'Jargon' and 11 regular chapters; there are 557 figures, 63 tables and 852 references (organized at the end of each chapter), also full subject and formula indexes. There is no separate author index. The term 'metals and alloys' is used in a broad sense and solid solutions and many metal borides, carbides, nitrides and oxides are included in addition to metals and intermetallic compounds. In the first six chapters the various factors influencing the stability of alloy phases are discussed in a systematic manner, starting with a summary of the crystal chemistry of metals and alloys and proceeding through discussions of geometrical, chemical-bond, electrochemical and

energy-band factors. There follows a critical treatment of the various concepts of atomic size, which includes detailed comparison of theory and experiment. The crystal chemistry of metalloids and semi-conductors follows, an area in which Professor Pearson's own contributions are well known.

The remaining two-thirds of the book are given to description and classification of the known metal structures. The classification used is based in the first instance on the various possible arrangements of layer networks of atoms, with atomic coordination used as the secondary criterion. Of the 660 structures considered, 590 can be included in this scheme, the remainder being relegated to the final chapter on 'Idiosyncratic Structures'. The descriptions of the individual structures are necessarily brief but well illustrated and well coordinated with similar structures. This classified catalogue will undoubtedly become an essential part of the reference literature of crystal chemistry.

The level of attack is high and there is little repetition of standard material; the approach throughout is physical rather than mathematical. The style is clear but tightly argued. The structures of metals and alloys are seldom determined by a single type of interaction and thus it is more difficult to account for them than for structures where a particular interaction clearly dominates; also their geometries are often intricate. Consequently the demands on the reader are sometimes considerable.

The book is very well produced, the type is clear and the illustrations and tables are excellent. The treatment is thorough, up-to-date (references run to 1970) and comprehensive. The only accidental omission of an apposite reference that I noted was Fasiska & Jeffrey on cementite [*Acta Cryst.* (1965). 19, 463-471]; however, I do regret the (doubtless deliberate) omission of references to the pre-chapter on 'Jargon'. There are a few minor printing errors but none of these will cause any difficulty. I found one word ('prempion', pp. vii, ix) unfamiliar both to me and, more significantly, to Webster's *New International Dictionary*.

Thus this is a book that can be recommended to knowledgeable people in the field as a full and critical summary of current knowledge; beginners will find it useful after some preparatory reading. Scientists who are interested in metal structures in their own right or as the basis for understanding and explaining properties will find Pearson's mono-

graph an indispensable source of facts and ideas for many years to come.

F. H. HERBSTEN

*Department of Chemistry
Technion - Israel Institute of Technology
Haifa
Israel*

Crystallisation. 2-е издание. Дж. У. Маллина (J. W. MULLIN, 2nd edition). Страниц 480. London: Butterworths, 1972. Цена £12.00.

В интенсивном потоке литературы по росту кристаллов книга профессора Королевского колледжа в Лондоне, Дж. У. Маллина, занимает вполне определенное место - она посвящена массовой кристаллизации и росту кристаллов растворов. На этой основе книга в известной степени объединяет как исследования по росту монокристаллов, так и по процессам массовой кристаллизации. Эту особенность книги следует оценить весьма высоко, т.к. специализация (по двум упомянутым направлениям) не миновала даже такую сравнительно узкую область, как образование кристаллов. Вторая важная отличительная черта монографии - в том, что она посвящена росту из низкотемпературных (водных) растворов, который в последнее время наименее тщательно обосуждается в литературе по росту монокристаллов, и который тем не менее не только лежит в основе мощной промышленности получения кристаллических пороков, но и таит в себе целый ряд интереснейших принципиальных научных загадок (например, вопрос о пограничном слое жидкости на границе с кристаллом).

Уже формальные характеристики 2-го издания свидетельствуют о сопоставимости нового материала со старым - как по количеству, так и по значению. Новая книга имеет 480 страниц против 268 в первом издании, т.е. больше него на 80%. Примерно удвоилось и число литературных ссылок. Увеличение книги произошло за счёт новых разделов, посвящённых механизму роста кристаллов из растворов и анализу физическо-химических и технологических процессов, определяющих распределение кристаллов конечного продукта по размерам. Новый материал хорошо сочленён со старым в единое целое. В книге появляется также целый ряд новых парагра-

фов, посвящённых свойствам кристаллов, их несовершенствам, структуре растворов. Особенно следует отметить добавление более чем 30 новых страниц с таблицами, где собраны данные, необходимые каждому исследователю роста из растворов: растворимости, произведения растворимости, активности, теплоты растворения, плотности растворов, коэффициенты диффузии и вязкости и т.д.

В новых разделах, посвящённых механизму и кинетике кристаллизации, отражены последние важнейшие результаты в исследовании роста монокристаллов. Это новые данные о сплошном и спиральном росте, образовании ударных волн плотности ступеней, зависимости скоростей роста грани от пересыщения раствора, влияния примесей на кинетику роста. В новых параграфах книги более последовательно осуществляется попытка создания единой картины роста кристаллических граней, лимитируемого как диффузией в пограничном слое, так и упоминавшимися выше кинетическими процессами. Очень хорошо, что автор приводит зависимости скоростей роста кристаллов от скорости движения раствора, размера кристалла и факторов тепло- и массопереноса. Это зависимости, важные как при выращивании монокристаллов, так и особенно при массовой кристаллизации. Здесь, в частности, приведены результаты автора и его сотрудников по исследованию кинетического, диффузионного и смешанного режимов роста квасцов, температурной зависимости скоростей роста, установлению количественной связи кинетики роста монокристаллов и массовой кристаллизации. Жаль только, что автор не дал сводки кинетических законов роста различных веществ и соответствующих кинетических коэффициентов. Возможно, было бы хорошо более подробно изложить анализ форм роста на основании теории РВС. Сравнительно мало места уделено образованию дефектов в кристаллах при росте из растворов (раздел 'включения', конечно, не исчерпывает всей сложности этой проблемы).

Весьма уместно обсуждение в книге остальдова созревания кристаллов. В связи с проблемой созревания автор упоминает и об укрупнении осадков под действием периодического изменения температуры (пересыщения), которое, по-видимому, работает гораздо более мощным образом, чем поверхностная энергия. К сожалению, данных об этом очень важном и пока что плохо понятом процессе в книге почти нет.

Отличительная особенность стиля изложения научных и технологических вопросов - стремление уста-