

hexagonalen Achsen und  $a = b = 4,72$  nm nach  $d_{\text{eff}} = a/\sqrt{3}$  bestimmt [2]. In einer späteren Arbeit kommen die Autoren zu dem Schluß, daß die Annahme dieser großen Zelle nicht notwendig sei und die Interpretation auf der Basis einer sechsfach kleineren, rechteckigen Einheitszelle vorgenommen werden kann, deren Abmessungen  $a = 1,995$  nm,  $b = 1,152$  nm,  $c = 1,020$  nm (Faserachse) auf einen drastisch kleineren Wert des intermolekularen Kettenabstandes hinweisen [3].

Die von uns erhaltenen Daten sind jedoch auch mit der Annahme einer rechteckigen Einheitszelle nicht verträglich. Die Existenz eines einzigen äquatorialen Reflexes legt vielmehr die Annahme einer hexagonalen Packung geringer Fernordnung nahe. Der Unterschied ist eventuell auf die voneinander abweichenden Herstellungsverfahren zurückzuführen und weist ein weiteres Mal auf die Vielzahl der Anordnungsmöglichkeiten für die Kettenmoleküle hin.

Die erhaltenen Ergebnisse, insbesondere die aus den Beugungsuntersuchungen des PtPS-DNS-Komplexes gewonnenen, müssen als wichtiges Indiz für einen antikooperativen Bindungsmodus gewertet werden, bei dem nur jede zweite potentielle Bindungsstelle belegt werden kann („nearest-neighbour-exclusion“-Modell). Sie deuten ferner auf die totale Entspiralisierung der Helix und Verwirklichung eines leiterartigen Aufbaus der mit Intercalator gesättigten DNS hin.

## Literatur

1. Sobell, H. M., Jain, S. C., Sakore, T. D., Reddy, B. S., Bhandary, K. K., Seshadri, T. P.: In: „Biomolecular Structure, Conformation, Function and Evolution“, Vol. I (R. Srinivasan, ed.) pp. 441–464, Pergamon Press, Oxford (1981)
2. Bond, P. J., Landridge, R., Jenette, K. W., Lippard, S. J.: Proc. Nat. Acad. Sci. USA, **72**, 4825 (1975)
3. Arnott, S., Bond, P. J., Chandrasekaran, R.: Nature **287**, 561 (1980)

K. F. Fischer und G. Schäfer (Fachrichtung Krist., Universität des Saarlandes, Saarbrücken). **Umgehung des Phasenproblems durch Intensitätsmessung bei zwei Wellenlängen. Beispiel: Struktur des Hemimorphit mittels Lambda-Methode.**

Wie bereits gezeigt [1, 2], kann eine azentrische Kristallstruktur ohne Ermittlung der Reflex-Phasen aus Real- und Imaginär-Teil einer Differenz-Patterson-Funktion  $L_{12}(u) = \mathcal{F}[A_{12}(h)]$  mit  $A_{12} = F_{\lambda_1}^2 - F_{\lambda_2}^2$  bestimmt werden, wenn zwei Wellenlängen  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$  verwendet werden, für die  $f'$  eines anomal streuenden Atoms gleich,  $f''$  aber ungleich ist. Diese „Lambda-Methode“ wurde anhand der bekannten und mehrfach verfeinerten Struktur des Minerals Hemimorphit  $\text{Zn}_4[\text{Si}_2\text{O}_7(\text{OH})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ , Raumgr. *Imm2*,  $Z = 2$

[3, 4] mit zwei Meßdatensätzen ( $E_1, E_2$  aus [5]) getestet, die obige Bedingungen für die Zn-Atome erfüllen. 178 Reflexpaare  $A_{12}(h)$  mit  $\sin \theta/\lambda \lesssim 0,47$  dienten zur Berechnung von  $L_{12}(u) = L_{12c}(u) + i \cdot L_{12s}(u)$ . Aus  $L_{12c}(u)$  konnten wie in [5] die Lagen der Zn-Atome („Kantenatome“) eindeutig gefunden werden. Visuelle Auswertung von  $L_{12s}(u)$  ergab die Koordinaten der  $O_1, O_2$  und  $O_4$  Atome mit einer maximalen Abweichung von  $0,15 \text{ \AA}$  gegenüber der verfeinerten Struktur [4]. Mit dem Bildsuchprogramm MINFU wurden alle Sauerstoffatome gefunden. Die Abweichungen waren bei  $O_1, O_2$  und  $O_4$  für  $x$ - und  $y$ -Koordinaten kleiner als  $0,08 \text{ \AA}$ , für die  $z$ -Koordinate etwa  $0,15 \text{ \AA}$ . Für  $O_3$  und  $O_5$ , die beide nahe der in  $L_{12s}(u)$  ausgelöschten Ebene  $z = 0$  liegen, waren die Abweichungen größer (maximal  $0,8 \text{ \AA}$  für die  $z$ -Koordinate von  $O_5$ ). Die Si-Atome konnten aus dem gleichen Grunde nicht sicher gefunden werden. Hierzu wären Messungen bei einer dritten Wellenlänge [2] nötig gewesen.

Das Programm MINFU liefert das Bild der Struktur aus  $L_{12s}(u)$  bei bekannter Lage der Kantenatome. Die Vektoren vom ersten Kantenatom zu den anderen Kantenatomen (einschl. symmetrisch äquivalenter) dienen als Suchvektoren. (Von translatorisch identischen Kantenatomen braucht nur jeweils eines berücksichtigt zu werden). Dem Anfangspunkt der Suchvektoren wird das Minimum des Anfangspunktes und der Endpunkte aller Suchvektoren zugeordnet. Mit diesen Suchvektoren wird der der asymmetrischen Einheit der Elementarzelle entsprechende Teil von  $L_{12s}(u)$  abgefahren. Wenn die Endpunkte der Vektoren außerhalb der asymmetrischen Einheit liegen, werden die zugehörigen Werte von  $L_{12s}(u)$  mit Symmetrieoperationen unter Einschluß der Antizentrosymmetrie erzeugt. Durch die Verwendung von mehreren Suchvektoren wird die Wahrscheinlichkeit, daß „Geisterpeaks“ auftreten, erheblich reduziert.

## Literatur

1. Fischer, K. F., Ribbens, A., Spilker, J., Schäfer, G.: Z. Kristallogr. **156**, 3 (1981)
2. Fischer, K. F.: Z. f. Naturforschung, Teil A, **36a**, 1253–1254 (1981)
3. Mc Donald, W. S., Cruickshank, D. W. J.: Z. Kristallogr. **124**, 180–191 (1967)
4. Hill, R. J., Gibbs, G. V., Craig, J. R.: Z. Kristallogr. **146**, 241–259 (1977)
5. Sakamaki, T., Hosoya, S., Fukamachi, T.: Acta Crystallogr. **A36**, 183 (1980)

F. Frey (Inst. f. Krist. u. Min. der Universität, München), A. Pietraszko (Dep. of Crystallogr., Inst. for Low Temperature and Structure Research, Wroclaw) und C. Zeyen (ILL, Grenoble). **Neutronenstreuuntersuchung der inkommensurablen Phase II des RbLiSO<sub>4</sub>.**

RbLiSO<sub>4</sub> (RLS) besitzt eine pseudohexagonale Struktur ähnlich der NH<sub>4</sub>LiSO<sub>4</sub>-Struktur [1], deren charakteristische Baueinheiten SO<sub>4</sub> und