

where θ_B , u_0 , L , ω , v_n and c_x are the Bragg angle, the vibration amplitude, the length of the crystal, the angular frequency, the neutron velocity and the velocity of propagation of ultrasonic waves in the crystal, respectively. The constant parameter $\Delta\theta$, means the angular deviation at the point where the neutron enters the crystal and is determined by setting the crystal with respect to the incident-beam direction. The time-dependent total change in Bragg angle $\Delta Y_j(n)$ was fitted in the simplified form

$$\Delta Y_j(n) = A_j \sin(A_{j+1}n + A_{j+2}), \quad (3)$$

where

$$A_j = \frac{2\pi^3 \Omega u D \tan \theta_B}{\lambda^2 L^2 F_G} \left(\frac{c_x^2}{v_n^2} - \sin^2 \theta_B \right)$$

contains the vibration amplitude u and known constants

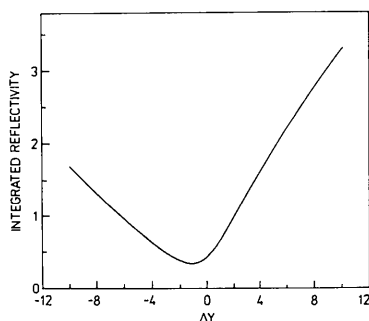


Fig. 3. Theoretical dependence of the integrated reflectivity of an InSb(220) crystal as a function of ΔY for the neutron wavelength $\lambda = 1.02 \text{ \AA}$.

such as the structure factor F_G , the crystal thickness D etc. A_{j+1} and A_{j+2} correspond to the circular frequency and the phase factor, respectively. It should be pointed out that the time $\Delta t = D/(v_n \cos \theta_B)$ which a neutron spends in the crystal is much smaller than the vibration period and consequently the crystal deformation which the neutron meets on its path may be considered homogeneous to a good approximation.

Inspection of Fig. 2 shows a good agreement between the theory and the experimental results. For a better understanding of the results obtained we show the theoretical dependence of the integrated reflectivity on a static deformation ΔY (Fig. 3). Depending on the deformation-gradient direction with respect to the scattering vector, one of the two different wavefields is excited in the crystal. The attenuation coefficients of these wavefields differ from each other and therefore the reflectivity is not symmetric on the ΔY scale with respect to zero (see Fig. 3). In the vibrating crystal, these individual wavefields are excited in each half-period of vibration and for this reason different heights of neighbouring maxima are observed in the spectra displayed in Fig. 2.

References

- GUIGAY, J. P. (1986). *Acta Cryst.* **A42**, 481–483.
 GUIGAY, J. P., MIKULA, P., HOCK, R., BARUCHEL, J. & WAINAL, A. (1990). *Acta Cryst.* **A46**, 821–826.
 KULDA, J. (1984). *Acta Cryst.* **A40**, 120–126.
 KULDA, J. & LUKÁŠ, P. (1989). *Phys. Status Solidi B*, **153**, 435–442.
 KULDA, J., VRÁNA, M. & MIKULA, P. (1988). *Physica (Utrecht)*, **B151**, 122–129.
 LUKÁŠ, P. & KULDA, J. (1987). *Phys. Status Solidi A*, **102**, K57–K60.
 LUKÁŠ, P., KULDA, J., MIKULA, P., SEDLÁKOVÁ, L., ALEXANDROV, Y. A. & VRÁNA, M. (1991). *Acta Cryst.* **A47**, 166–169.

Acta Cryst. (1992). **A48**, 73–76

Strukturverfeinerung des Kompositkristalls im mehrdimensionalen Raum: Identifizierung der verschiedenartig aufgestellten Superraumgruppen. Von KATSUO KATO und MITSUKO ONODA, *Mukizaishitsu Kenkyusho*,* 1-1 Namiki, Tsukuba-shi, Ibaraki-ken 305, Japan

(Eingegangen am 18. Februar 1991; angenommen am 28. August 1991)

Abstract

Different settings of the superspace group of a composite crystal often appear as if they were different superspace groups. To identify them, a method has been developed which includes a transformation of the superspace unit cell into a reduced one and a provisional definition of the reduced cell in higher dimension has been proposed.

Einleitung

Um die unbekannte Struktur eines Kompositkristalls zu bestimmen, löst man zunächst die mittleren Strukturen der

Teilsysteme in voneinander getrennten Verfahren. Die Teilstrukturen werden dann in einen mehrdimensionalen Raum eingebettet, um unter einer Superraumgruppe verfeinert zu werden (Janner & Janssen, 1980; Kato, 1990). Die mögliche Superraumgruppe läßt sich aus den Raumgruppen der Teilstrukturen ableiten (Kato & Onoda, 1991b). Hierbei wird die erstere je nach den Aufstellungen der letzteren und/oder nach der Wahl des Minimalsystems verschiedenartig aufgestellt. Bei mehreren, scheinbar verschiedenen Angaben der Superraumgruppen für einen Kompositkristall muß man daher feststellen, ob es sich bloß um verschiedene Aufstellungen der gleichen Superraumgruppe oder aber tatsächlich um verschiedene Superraumgruppen handelt. Hierzu wäre es angebracht, zunächst die mehrdimensionale Elementarzelle in eine reduzierte Zelle zu transformieren und dann die Symmetrioperationen in ihrer entsprechend

* Staatliches Institut für anorganische Materialforschung (National Institute for Research in Inorganic Materials).

Tabelle 1. *Verschiedene Aufstellungen eines Kompositkristalls*

Als Basis des Minimalystems sind anstelle der reziproken Vektoren die entsprechenden realen Gitterparameter angegeben. Die σ -Matrix bezieht sich jedoch auf die reziproke Basis.

Laufende Nummer

- (1) Gitterparameter des Minimalystems, σ -Matrix
 (2) Generator-Elemente der Superraumgruppe
 (3) Z-Matrix, Raumgruppe und Gitterparameter des ersten Teilsystems
 (4) Z-Matrix, Raumgruppe und Gitterparameter des zweiten Teilsystems

1

- (1) $a = 5,817$, $c = 4,233$ Å, $(\frac{1}{3}\frac{1}{3}\frac{1}{3} 1,519)$
 (2) $x, y, z, u; -y, x-y, z, u-y; y, x, z, u+\frac{1}{2}, u$
 (3) $(1\ 0\ 0\ 0 / 0\ 1\ 0\ 0 / 0\ 0\ 1\ 0)$;
 P31c; $a = 5,817$, $c = 4,233$ Å
 (4) $(0\ 0\ 0\ 1 / -1\ 0\ 0\ 1 / 0\ -1\ 0\ 1)$;
 R3m; $a = 5,891$ Å, $\alpha = 117,56^\circ$

2

- (1) $a = 10,075$, $c = 4,233$ Å, $(0\ 0\ 1,519)$
 (2) $x, y, z, u; -y, x-y, z, u; y-x, y, z, u+\frac{1}{2}, u$;
 $x+\frac{1}{3}, y+\frac{2}{3}, z, u+\frac{2}{3}; x+\frac{2}{3}, y+\frac{1}{3}, z, u+\frac{1}{3}$
 (3) $(1\ 0\ 0\ 0 / 0\ 1\ 0\ 0 / 0\ 0\ 1\ 0)$;
 P31c speziell; $a = 10,075$, $c = 4,233$ Å
 (4) $(1\ 0\ 0\ 0 / 0\ 1\ 0\ 0 / 0\ 0\ 0\ 1)$;
 R3m; $a = 10,075$, $c = 2,787$ Å

3

- (1) $a = 5,891$ Å, $\alpha = 117,56^\circ$, $(0,2194\ 0,2194\ 0,2194)$
 (2) $x, y, z, u; z, x, y, u; y, x, z, u+\frac{1}{2}$
 (3) $(1\ 0\ -1\ 0 / 0\ 1\ -1\ 0 / 0\ 0\ 0\ 1)$;
 P31c; $a = 5,817$, $c = 4,233$ Å
 (4) $(1\ 0\ 0\ 0 / 0\ 1\ 0\ 0 / 0\ 0\ 1\ 0)$;
 R3m; $a = 5,891$ Å, $\alpha = 117,56^\circ$

4

- (1) $a = 10,075$, $c = 2,787$ Å, $(0\ 0\ 0,6583)$
 (2) $x, y, z, u; -y, x-y, z, u; y-x, y, z, u+\frac{1}{2}, u$;
 $x+\frac{1}{3}, y+\frac{2}{3}, z+\frac{2}{3}, u; x+\frac{2}{3}, y+\frac{1}{3}, z+\frac{1}{3}, u$
 (3) $(1\ 1\ 0\ 0 / -1\ 2\ 0\ 0 / 0\ 0\ 0\ 1)$;
 P31c; $a = 5,817$, $c = 4,233$ Å
 (4) $(1\ 0\ 0\ 0 / 0\ 1\ 0\ 0 / 0\ 0\ 1\ 0)$;
 R3m; $a = 10,075$, $c = 2,787$ Å

5

- (1) $a = 10,075$, $c = 2,787$ Å, $(0\ 0\ 0,6583)$
 (2) $x, y, z, u; -y, x-y, z, u; y-x, y, z, u+\frac{1}{2}, u$;
 $x+\frac{1}{3}, y+\frac{2}{3}, z+\frac{2}{3}, u; x+\frac{2}{3}, y+\frac{1}{3}, z+\frac{1}{3}, u$
 (3) $(1\ 0\ 0\ 0 / 0\ 1\ 0\ 0 / 0\ 0\ 0\ 1)$;
 P31c speziell; $a = 10,075$, $c = 4,233$ Å
 (4) $(1\ 0\ 0\ 0 / 0\ 1\ 0\ 0 / 0\ 0\ 1\ 0)$;
 R3m; $a = 10,075$, $c = 2,787$ Å

transformierten Darstellung zu vergleichen. Außerdem muß noch verglichen werden, in welche Richtung in bezug auf die reduzierte Zelle die Atombilder laufen. Eine Methode zur Ermittlung der Atombilder ist an anderer Stelle kurz beschrieben (Kato & Onoda, 1991a). Im folgenden Abschnitt soll versucht werden, den Begriff einer dreidimensionalen reduzierten Zelle von Niggli (1928) für den mehrdimensionalen Fall zu erweitern. Das Ergebnis stellt eine vorläufige Lösung dar, die für den ebengenannten Zweck brauchbar erscheint.

Um ein Beispiel anzuführen, sind in Tabelle 1 fünf verschiedene Aufstellungen für $\text{Ba}_x(\text{Pt,Cu})\text{O}_3$ (Ukei, Yamamoto, Watanabe, Shishido & Fukuda, 1992) aufgeführt. Daß es sich bei ihnen um einen und denselben Kompositkristall handelt, sieht man nicht leicht; noch schwieriger wäre es, wenn die Angaben über die Gitterparameter der Teilsysteme fehlten. Vergleicht man diese fünf Superraumgruppen nach dem eben vorgeschlagenen Verfahren miteinander, so stellt man allerdings fest, daß die beiden ersten und die drei letzteren doch voneinander verschieden sind. Es gibt also zwei verschiedene Super-

raumgruppen, die einen Kompositkristall beschreiben. Die beiden sind jedoch zueinander arithmetisch äquivalent (Neubüser, Wondratschek & Bülow, 1971), so daß es eine Matrix T mit ganzzahligen Elementen gibt, die ihre Elemente $\{R|v\}$ durch eine Ähnlichkeitstransformation $\{T^{-1}RT|T^{-1}v\}$ ineinander überführt. Zum Beispiel führt die Matrix

$$T = (-1\ 0\ 1\ 0 / -1\ 1\ 0\ 0 / 0\ 0\ 0\ -1 / -1\ 0\ 0\ 0)$$

die erste Superraumgruppe in Tabelle 1 in die dritte über. Diese Matrix bringt jedoch die vierdimensionale Elementarzelle nicht zur Deckung. Yamamoto (1992) betrachtet die zweite Aufstellung als *natural setting* und schlägt vor, sie als Standard zu verwenden. Das Auslöschungsgesetz erhält bei der dritten die einfachste Form: *hhlm*, *hkkm*, *hkkm*: $m = 2n$.

Reduzierte Zellen im mehrdimensionalen Raum

Es seien $\mathbf{a}_1^*, \dots, \mathbf{a}_{3+d}^*$ mit $\mathbf{a}_{3+j}^* = \sum_{i=1}^3 \sigma_{ji} \mathbf{a}_i^*$, $j = 1, \dots, d$, die reziproken Basisvektoren ($\in R^3$) des Minimalystems (Janer & Jansen, 1980) und $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ die reale Basis, die den Vektoren $\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*, \mathbf{a}_3^*$ entspricht. Die realen Basisvektoren des $(3+d)$ -dimensionalen Gitters sind

$$\mathbf{a}_i = \left(\mathbf{a}_i, -\sum_{j=1}^d \sigma_{ji} \mathbf{b}_j \right), \quad i = 1, 2, 3, \quad (1)$$

$$\mathbf{a}_{3+j} = (0, \mathbf{b}_j), \quad j = 1, \dots, d.$$

Hierbei stellen \mathbf{b}_j , $j = 1, \dots, d$ beliebige, linear-unabhängige Vektoren in R^d ($R^d \perp R^3$) dar. Nimmt man $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{b}_j = \delta_{ij}$ an, so errechnen sich die Elemente des Maßtensors $s_{ij} \equiv \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j$ wie folgt:

$$s_{ij} = \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j + \sum_{k=1}^d \sigma_{ki} \sigma_{kj}, \quad i, j = 1, 2, 3,$$

$$s_{3+k, j} = s_{j, 3+k} = -\sigma_{kj}, \quad j = 1, 2, 3, k = 1, \dots, d, \quad (2)$$

$$s_{3+k, 3+l} = \delta_{kl}, \quad k, l = 1, \dots, d.$$

Ist das gegebene Gitter nicht primitiv, so wähle man eine primitive Basis und transformiere den Maßtensor. Wir nehmen im weiteren an, daß ein primitives Gitter vorliegt.

Definition 1.

Ein Satz von Basisvektoren eines n -dimensionalen Gitters $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$, $n \geq 2$ heißt *halbreduziert*, wenn die Skalarprodukte $s_{ij} \equiv \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j$, $i, j = 1, \dots, n$ die folgenden Bedingungen erfüllen:

1. Reihenfolge der Basisvektoren:

$$s_{ii} \geq s_{i+1, i+1} \quad \text{für } 1 \leq i < n.$$

2. Partielle Normierung der Richtung:

$$s_{ki} < 0, \quad \text{wenn } s_{ki} \neq 0 \quad \text{für } k < i$$

$$\text{und } s_{li} = 0 \quad \text{für alle } l: k < l < i.$$

3. Majorisierung der Basisvektoren durch die Haupt-raumdiagonale:

$$\sum_{i,j=1}^n s_{ij} \geq s_{11}.$$

4. Nebenbedingungen in Sonderfällen:

4.1. Reihenfolge von Basisvektoren gleicher Länge:

Ist $s_{ii} = s_{i+1,i+1}$ ($1 \leq i < n$) und $|s_{ik}| \neq |s_{i+1,k}|$ sowie $|s_{il}| = |s_{i+1,l}|$ für alle l mit $1 \leq l < k$ und $i \neq l \neq i+1$, so ist $|s_{ik}| < |s_{i+1,k}|$.

4.2. Reihenfolge bei Längengleichheit mit einer Flächendiagonale:

Ist $1 \leq i, j, k \leq n$ und $i < j$ mit $2|s_{ij}| = s_{jj}$ und für $i \neq k \neq j$ gilt nicht ($s_{ij}s_{jk}s_{ki} \geq 0$ und $2|s_{ik}| = |s_{jk}|$) und ist für alle l : $1 \leq l < k$ und $i \neq l \neq j$: ($s_{ij}s_{jl}s_{li} \geq 0$ und $2|s_{il}| = |s_{jl}|$), so ist $s_{ij}s_{jk}s_{ki} \geq 0$ und $2|s_{ik}| > |s_{jk}|$.

4.3. Bedingung der längeren Flächendiagonale:

Ist

$$\sum_{i,j=1}^n s_{ij} = s_{11}$$

und für k mit $1 < k \leq n$:

$$s_{11} + s_{kk} + 2s_{1k} \neq \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq k \neq j}}^n s_{ij}$$

und ist für alle l mit $1 < l < k$:

$$s_{11} + s_{ll} + 2s_{1l} = \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq l \neq j}}^n s_{ij},$$

so ist

$$s_{11} + s_{kk} + 2s_{1k} > \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq k \neq j}}^n s_{ij}.$$

Wir sagen kurz: 'wir *halb*reduzieren ein Gitter', wenn wir dessen Basis in eine halbreduzierte Basis transformieren.

Definition 2.

Wir *reduzieren* ein zweidimensionales Gitter, indem wir es halbreduzieren. Ein n -dimensionales Gitter mit der Basis a_1, \dots, a_n , $n \geq 3$ *reduzieren* wir dadurch, daß wir zunächst die $(n-1)$ -dimensionalen Teilgitter mit der Basis $a_1, \dots, a_{i-1}, a_{i+1}, \dots, a_n$ für $i = 1, \dots, n$ in dieser Reihenfolge nacheinander reduzieren und dann das n -dimensionale Gitter mit den hieraus sich ergebenden, gegebenenfalls neuen Basisvektoren halbreduzieren.

Definition 3.

Ein n -dimensionales Gitter ($n \geq 2$) heißt *reduziert*, wenn eine Reduzierung gemäß Definition 2 die ursprüngliche Basis reproduziert.

Die beiden ersten Bedingungen in Definition 1 legen die Reihenfolge und das Vorzeichen der einzelnen Basisvektoren fest. Die dritte fordert, daß die Haupttraumdiagonale nicht kürzer als die längste (d.h. die erste) Zellkante sein darf. Ist diese Bedingung nicht erfüllt, so kehre man nötigenfalls die Richtung der ersteren um und nehme sie, anstelle der letzteren, als den neuen Basisvektor. Die Nebenbedingungen stellen eine sinngemäße Verallgemeinerung der Nigglichschen dar. Die ersten von ihnen entscheidet die Reihenfolge von zwei Basisvektoren gleicher Länge je nach ihren Winkeln zu einem bestimmten dritten Vektor. Sind die (i, j) -Flächendiagonale ($i < j$) und

der j -te Vektor gleich lang, so bestimmt die zweite Nebenbedingung, welche von ihnen zum j -ten Basisvektor zu wählen ist. Wenn die Haupttraumdiagonale und die längste Zellkante gleiche Längen besitzen, so wählt man den endgültigen Basisvektor dadurch, daß man bei einem bestimmten k die $(1, k)$ -Flächendiagonale und die $(n-1)$ -dimensionale $(1, \dots, k-1, k+1, \dots, n)$ -Raumdiagonale ihren Längen nach vergleicht. Die beiden letztgenannten Diagonalen vertauschen ihre Rollen gegeneinander, wenn man die erste Zellkante durch die Haupttraumdiagonale in umgekehrter Richtung ersetzt; die dritte Nebenbedingung schreibt vor, daß die längere die Flächendiagonale sein muß.

Nach der zweiten Definition erfolgt ein Reduktionsverfahren rekursiv, was dessen Programmierung* erheblich erleichtert. Da die Nebenbedingungen in Definition 1 willkürliche Regelungen darstellen, kann es bei $n > 3$ vorkommen, daß ein im niedrigdimensionalen Teilraum einmal hergestellter reduzierter Zustand im Laufe der weiteren Reduktion wieder zerstört wird. Darum erscheint es notwendig, die Reihenfolge der Teilreduktionen fest vorzuschreiben. Die dritte Definition fordert nur, daß der Maßtensor durch das definitionsgemäße Reduktionsverfahren im Endeffekt unverändert durchkommt; sie verlangt nicht, daß er während des Reduktionsverfahrens stets unverändert bleibt.

Das Reduktionsverfahren liefert ein eindeutiges Ergebnis, wenn die Halbreduktion in jedem Teilraum ein solches ergibt. Diese Voraussetzung ist bei $n \leq 3$ immer und bei $n \geq 4$ nur dann erfüllt, wenn es auf die Sonderfälle nicht ankommt. Daß sie bei $n \geq 4$ nicht immer erfüllt ist, geht aus den folgenden Beispielen hervor:

(1) Die Maßtensoren

$$\begin{pmatrix} 120 & -30 & -30 & -31 \\ -30 & 120 & -31 & -29 \\ -30 & -31 & 120 & -29 \\ -31 & -29 & -29 & 120 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} 120 & -29 & -30 & -31 \\ -29 & 120 & -31 & -29 \\ -30 & -31 & 120 & -30 \\ -31 & -29 & -30 & 120 \end{pmatrix}$$

und

$$\begin{pmatrix} 120 & -29 & -29 & -31 \\ -29 & 120 & -31 & -30 \\ -29 & -31 & 120 & -30 \\ -31 & -30 & -30 & 120 \end{pmatrix}$$

sind alle halbreduziert; die beiden letztgenannten sind sogar definitionsgemäß reduziert. Eine Permutation der Zeilen und Spalten (13)(24) führt jedoch den ersten und den zweiten ineinander über; der zweite und der dritte lassen

* Der Quelltext (Common Lisp) und die kurze Beschreibung der Dateneingabe sind bei dem British Library Document Supply Centre (Supplementary Publication No. SUP 54539: 48 pp.) hinterlegt. Kopien sind erhältlich durch: The Technical Editor, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, England.

sich durch (12)(34) ineinander überführen. Das Reduktionsergebnis hängt daher von der Ausgangsform ab.

(2) Da der Maßtensor

$$\begin{pmatrix} 10 & 0 & -0,1 & -0,2 \\ 0 & 10 & -0,2 & 0,5 \\ -0,1 & -0,2 & 10 & -0,2 \\ -0,2 & 0,5 & -0,2 & 1 \end{pmatrix}$$

bei $i=2, j=4, k=1$ die Bedingung 4.2 der Definition 1 nicht erfüllt, erfolgt eine Transformation $a_2 \leftrightarrow a_2 - a_4$, um sie zu erfüllen. Eine hierauf folgende Transformation, die die Bedingungen 4.1 und 2 veranlassen, führt ihn jedoch in seine Ausgangsform über. Er läßt sich also nicht durch eine endliche Anzahl von Schritten halbreduzieren.

(3) Die Maßtensoren

$$\begin{pmatrix} 10 & -1 & -1 & 0,2 \\ -1 & 10 & -2 & 0,1 \\ -1 & -2 & 10 & -0,1 \\ 0,2 & 0,1 & -0,1 & 1 \end{pmatrix}$$

und

$$\begin{pmatrix} 10 & -1 & -1 & -0,2 \\ -1 & 10 & -2 & 0,1 \\ -1 & -2 & 10 & -0,1 \\ -0,2 & 0,1 & -0,1 & 1 \end{pmatrix}$$

stellen ein gleiches Gitter dar, weil das Vertauschen $a_2 \leftrightarrow a_3$ und der Vorzeichenwechsel von a_4 sie ineinander überführen. Ein Reduktionsversuch gerät jedoch in eine Totschleife, in der die beiden Matrizen alternierend als Zwischenergebnis auftreten. Diese Schwierigkeiten rühren davon her, daß die Bedingung 4.1 die Reihenfolge von a_2 und a_3 im vierdimensionalen Raum nicht eindeutig festlegt.

(4) Man stelle sich eine dreidimensional modulierte, ortho-

rhombische Struktur mit $a=5, b=6, c=7 \text{ \AA}$ und $\sigma=(0,200/00,30/000,1)$ vor. Das sechsdimensionale Gitter sei allseitig flächenzentriert: $(0,0,0,0,0,0; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. Ein Versuch, dieses Gitter zu reduzieren, scheitert an einer Totschleife. Die Ursache ist ähnlich wie bei (3).

Trotz der eben aufgeführten Mängel ist das Reduktionsverfahren durchaus brauchbar, solange es für die Identifizierung mehrerer verschiedenartig aufgestellten Superraumgruppen einer modulierten Struktur bzw. eines Kompositkristalls benutzt wird. Da in diesem Anwendungsbereich praktisch immer $s_{ii} \gg 1$ ($i=1, 2, 3$) gilt, treten diejenigen Maßtensoren wie in Beispiel (1) auf keinen Fall auf. Bei den Beispielen (2) und (3) handelt es sich um triklinen Strukturen. Die zufällige, unwahrscheinliche Übereinstimmung der Tensorelemente ist die Ursache der Schwierigkeiten. Dagegen zeigt Beispiel (4), daß die vorliegende Methode total versagt und eine Verschärfung bzw. Verfeinerung der Nebenbedingungen dringend nötig ist.

Wir danken Herrn Dr. A. Yamamoto für wertvolle Diskussionen.

Literatur

- JANNER, A. & JANSSEN, T. (1980). *Acta Cryst.* **A36**, 399–408, 408–415.
 KATO, K. (1990). *Acta Cryst.* **B46**, 39–44.
 KATO, K. & ONODA, M. (1991a). *Acta Cryst.* **A47**, 55–56.
 KATO, K. & ONODA, M. (1991b). *Acta Cryst.* **A47**, 448–449.
 NEUBÜSER, J., WONDRATSCHEK, H. & BÜLOW, R. (1971). *Acta Cryst.* **A27**, 517–520.
 NIGGLI, P. (1928). *Krystallographische und strukturtheoretische Grundbegriffe. Handbuch der Experimentalphysik*, Bd 7, 1. Teil, herausg. von W. WIEN & F. HARMS, S. 112–113. Leipzig: Akademische Verlagsgesellschaft.
 UKEL, K., YAMAMOTO, A., WATANABE, Y., SHISHIDO, T. & FUKUDA, T. (1992). *Acta Cryst.* Vorgelegt.
 YAMAMOTO, A. (1992). *Acta Cryst.* Vorgelegt.

Notes & News

Acta Cryst. (1992). **A48**, 76–77

AsCA '92, Singapore, 13–16 November 1992 Inaugural Conference of the Asian Crystallographic Association

First circular

AsCA '92 is the inaugural conference of the Asian Crystallographic Association (AsCA). It is jointly sponsored by the Crystallographic Society of Japan and the Society for Crystallographers in Australia, with financial support from various organizations including the International Union of Crystallography.

AsCA was founded in 1987 for the promotion and collaboration of crystallographic activities in Asia. It represents 17 crystallographic organizations from this region and is a Regional Associate of the International Union of Crystallography. This conference is intended to fulfil one of its prime functions: the promotion of better communication and contacts between Asian crystallographers.

For advance details contact:

Professor N. Kasai
 Chairman, International Organizing Committee
 Department of Applied Chemistry
 Osaka University
 2-1 Yamadaoka
 Suita, Osaka 565
 Japan
 Fax: +81 6 876 4754

Dr E. N. Maslen
 Chairman, International Programme Committee
 Crystallography Centre
 University of Western Australia
 Nedlands
 Perth 6009
 Australia
 Fax: +61 9 380 1014