

Direkte Methoden

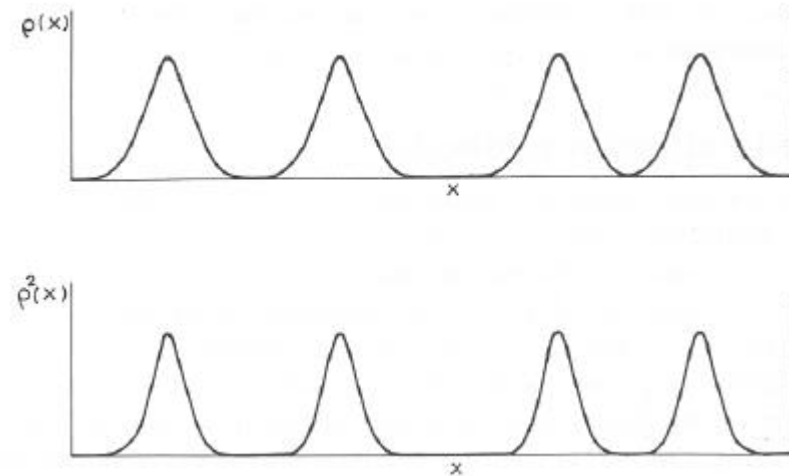
Obwohl im allgemeinen die Phase und die Amplitude einer Welle zwei unabhängige Größen darstellen, können im Falle von Strukturfaktoren diese beiden Größen zueinander in besonderen Beziehungen stehen. Von diesen Beziehungen wird bei den **direkten Methoden** Gebrauch gemacht. Im wesentlichen spielen dabei zwei Eigenschaften der Elektronendichteverteilung eine wichtige Rolle:

- die Elektronendichte ist überall im Raum **positiv**: $\rho(r) \geq 0$
- die Elektronendichte ist **diskret im Raum verteilt** (diskrete Verteilung der Atome)

Aus der zweiten Bedingung („Atomizität“) konnte *Sayre* 1953 eine bedeutende Beziehung herleiten:

Für eine Struktur mit Atomen einer Sorte, die an wohl definierten Plätzen in der Zelle liegen, sind die Funktionen $\rho(r)$ und $\rho^2(r)$ sehr ähnlich und zeigen Maxima an denselben Orten (siehe Beispiel einer 1-dimensionalen Anordnung in der Abbildung).

Vergleich zwischen normaler und „quadratischer“ Elektronendichte



Direkte Methoden: Sayre-Gleichung

Für Kristallstrukturen die aus gleichen (und nicht „überlappenden“) Atomen bestehen, hängen die Phasen hauptsächlich von der Lage der Atome in der Zelle und nicht von der Form der Atome ab. In Übereinstimmung damit liefert sowohl die Elektronendichte als auch die „quadrierte Elektronendichte“ Strukturfaktoren mit gleichen Vorzeichen. Für die Elektronendichte gilt (in abgekürzter Schreibweise mit $\mathbf{r} = x, y, z$ und $\mathbf{h} = h, k, l$):

$$\mathbf{r}(\mathbf{r}) = 1/V \sum_{\mathbf{h}} F_{\mathbf{h}} e^{-i2\mathbf{p}\mathbf{h}\mathbf{r}} \quad \text{und} \quad \mathbf{r}^2(\mathbf{r}) = 1/V \sum_{\mathbf{h}} F_{\mathbf{h}}^q e^{-i2\mathbf{p}\mathbf{h}\mathbf{r}}$$

mit dem hypothetischen Strukturfaktor $F_{\mathbf{h}}^q$ für die quadratische Dichteverteilung.

$$\mathbf{r}^2(\mathbf{r}) = \mathbf{r}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{r}(-\mathbf{r})$$

$$\begin{aligned} &= \left[1/V \sum_{\mathbf{h}} F_{\mathbf{h}} e^{-i2\mathbf{p}\mathbf{h}\mathbf{r}} \right] \left[1/V \sum_{\mathbf{h}} F_{\mathbf{h}} e^{i2\mathbf{p}\mathbf{h}\mathbf{r}} \right] \\ &= 1/V^2 \sum_{\mathbf{h}_1} \sum_{\mathbf{h}_2} F_{\mathbf{h}_1} F_{\mathbf{h}_2} e^{-i2\mathbf{p}(\mathbf{h}_1 - \mathbf{h}_2)\mathbf{r}} \\ &= 1/V \sum_{\mathbf{h}_1} \left\{ 1/V \sum_{\mathbf{h}_2} F_{\mathbf{h}_1} F_{\mathbf{h}_2} \right\} e^{-i2\mathbf{p}(\mathbf{h}_1 - \mathbf{h}_2)\mathbf{r}} \end{aligned}$$

mit $\mathbf{h}_2 = \mathbf{h}'$ und $\mathbf{h}_1 - \mathbf{h}_2 = \mathbf{h}$ bzw. $\mathbf{h}_1 = \mathbf{h} + \mathbf{h}'$ folgt:

$$\mathbf{r}^2(\mathbf{r}) = 1/V \sum_{\mathbf{h}} \left\{ 1/V \sum_{\mathbf{h}'} F_{\mathbf{h}'} F_{\mathbf{h} + \mathbf{h}'} \right\} e^{-i2\mathbf{p}\mathbf{h}\mathbf{r}}$$

mit

$$F_{\mathbf{h}}^q = (1/V) \sum_{\mathbf{h}'} F_{\mathbf{h}'} F_{\mathbf{h} + \mathbf{h}'}$$

Direkte Methoden: Sayre-Gleichung

Aus dem quadratischen Strukturfaktor kann mit Hilfe des Faktors g_h ein normaler Strukturfaktor bestimmt werden:

$$F_h = (1/g_h V) \sum_{h'} F_{h'} F_{h+h'} \quad \text{Sayre-Gleichung}$$

Der Strukturfaktor (bzw. das Vorzeichen des Strukturfaktors S_h) F_h ist also mit der Summe von Produkten anderer Strukturfaktoren verknüpft:

$$S_h = S_{h'} S_{h+h'} \quad \longrightarrow \quad S_{h+h'} = S_h S_{h'}$$

Man findet die gegebene Regel im allgemeinen gut erfüllt, solange die Beträge von F_h , $F_{h'}$ und $F_{h+h'}$ gleichzeitig groß sind.

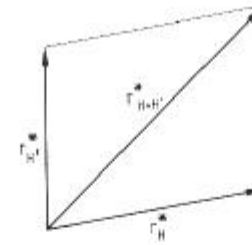
Allgemeine Schreibweise Bestimmung Wahl der Vorzeichen:

$$S_{h_1+h_2, k_1+k_2, l_1+l_2} \approx S_{h_1, k_1, l_1} S_{h_2, k_2, l_2}$$

Diese Beziehung erhielt später von Zachariasen und Karle, Hauptmann eine besser gefestigte statistische Grundlage, und erlaubt eine Phasenbestimmung für Strukturen von bis zu etwa 50 – 100 Atomen pro Elementarzelle.

Direkte Methoden: Sayre-Gleichung

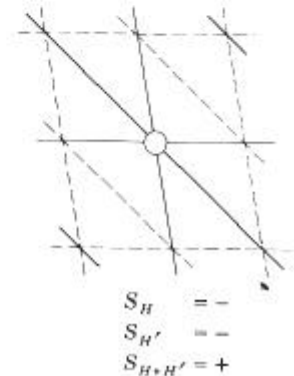
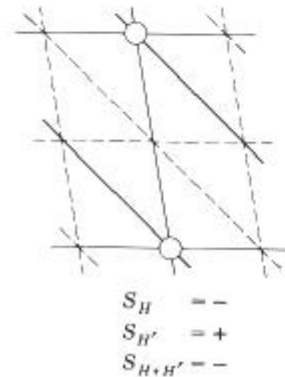
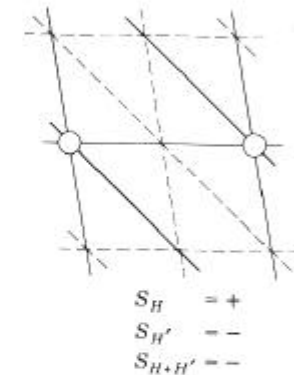
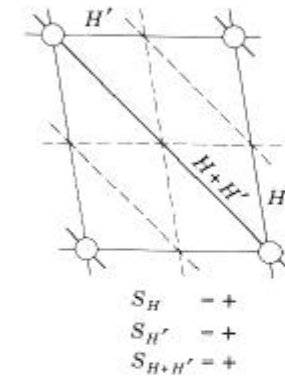
Graphische Veranschaulichung der Sayre-Beziehungen



Jedem der 3 Vektoren $r_{h'}^*$; r_h^* ; $r_{h+h'}^*$ ist ein Ebenensatz von Fourierellen mit der Amplitude F zugeordnet.

In der Abbildung sind die Maxima (—) und die Minima (---) der 3 Fourierwellen im Bereich der Elementarzelle dargestellt.

In den vier Teilbildern sind die vier möglichen Vorzeichenkombinationen zwischen S_h und $S_{h'}$ dargestellt. Wenn F_h und $F_{h'}$ hohe Beträge haben, liefern sie im Schnittpunkt der Wellenmaxima hohe Dichtebeiträge (dargestellt durch Kreise). Das Ergebnis ist dem Ergebnis durch Berechnung analog.



Direkte Methoden: Harker-Kasper-Ungleichungen

Die in der Mathematik als *Chauchy-Schwartzsche-Ungleichung* bekannte Beziehung

$$\left(\sum_{n=1}^{\infty} a_n b_n \right)^2 \leq \sum_{n=1}^{\infty} a_n^2 \sum_{n=1}^{\infty} b_n^2$$

kann auch für Integrale definiert werden. Hierbei wird der Strukturfaktor gegeben durch:

$$F_{h,k,l} = V \iiint \mathbf{r}(x, y, z) e^{i2\mathbf{p}(hx+ky+lz)} dx dy dz$$

Aus praktischen Gründen wird bei dieser Betrachtung die sogenannte **unitäre Strukturamplitude** eingeführt:

$$U_{h,k,l} = F_{h,k,l} / Z$$

Diese Größe hat dieselbe Phase wie $F_{h,k,l}$, aber ihr Betrag ist so festgelegt, dass ihr Maximalwert $F_{000}/Z = 1$ (alle Elektronen streuen im Reflex 000 phasengleich). Der Betrag der unitären Streuamplitude ist daher ein Maß für die Streuausbeute eines Reflexes h,k,l .

Die Anwendung der *Chauchy-Schwartzsche-Ungleichung* auf $U_{h,k,l}$ gibt jetzt in Abhängigkeit der im Kristall vorliegenden Symmetrie einen Satz von Ungleichungen die für die Phasenbestimmung genutzt werden können (siehe Tabelle nächste Seite).

Direkte Methoden: Harker-Kasper-Ungleichungen

Die Harker-Kasper-Ungleichungen geben im wesentlichen Informationen über das Vorzeichen der Strukturfaktoren an (z.B. wichtig für zentrosymmetrische Strukturen mit $\phi = 0$ oder π).

Obwohl es eine große Zahl von Ungleichungen für entsprechende Symmetrieelemente gibt, ist die Anwendung auf komplizierte Strukturen mit mehr als 5 Atomen in der asymmetrischen Einheit der Elementarzelle nicht hinreichend wirksam um alle Phasen zu bestimmen.

=> Kombination mit anderen Bedingungen !

Liste der Harker-Kasper-Ungleichungen für verschiedene Symmetrieelemente

Symmetrieelement c	Einschränkung
1	$ U_{hkl} ^2 \leq 1$
$\bar{1}$	$U_{hkl}^2 \leq \frac{1}{2} + \frac{1}{2} U_{2h\ 2k\ 2l}$
2	$ U_{hkl} ^2 \leq \frac{1}{2} + \frac{1}{2} U_{2h\ 2k\ 0}$
2_1	$ U_{hkl} ^2 \leq \frac{1}{2} + \frac{1}{2} (-1)^l U_{2h\ 2k\ 0}$
$\bar{2} = m$	$ U_{hkl} ^2 \leq \frac{1}{2} + \frac{1}{2} U_{0\ 2k\ 0}$
a	$ U_{hkl} ^2 \leq \frac{1}{2} + \frac{1}{2} (-1)^h U_{0\ 0\ 2l}$
3	$ U_{hkl} ^2 \leq \frac{1}{3} + \frac{2}{3} U_{(h-k)(h+2k)0} \cos 2\pi\phi_{(h-k)(h+2k)0}$
$3_1, 3_2$	$ U_{hkl} ^2 \leq \frac{1}{3} + \frac{2}{3} U_{(h-k)(h+2k)0} \cos 2\pi(\phi_{(h-k)(h+2k)0} + \frac{1}{3}l)$
$\bar{3} = 3 + \bar{1}$	$U_{hkl}^2 \leq \frac{1}{6} + \frac{1}{6} U_{2h\ 2k\ 2l} + \frac{1}{3} U_{h\ k\ 2l} + \frac{1}{3} U_{(h-k)(h+2k)0}$
4	$ U_{hkl} ^2 \leq \frac{1}{4} + \frac{1}{4} U_{2h\ 2k\ 0} + \frac{1}{2} U_{(h-k)(h+k)0}$
$4_1, 4_3$	$ U_{hkl} ^2 \leq \frac{1}{4} + \frac{1}{4} (-1)^l U_{2h\ 2k\ 0} + \frac{1}{2} (\cos 2\pi\frac{1}{4}l) U_{(h-k)(h+k)0}$
4_2	$ U_{hkl} ^2 \leq \frac{1}{4} + \frac{1}{4} U_{2h\ 2k\ 0} + \frac{1}{2} (-1)^l U_{(h-k)(h+k)0}$
$\bar{4}$	$ U_{hkl} ^2 \leq \frac{1}{4} + \frac{1}{4} U_{2h\ 2k\ 0} + \frac{1}{2} U_{(h-k)(h+k)2l} \cos 2\pi\phi_{(h-k)(h+k)2l}$
6	$ U_{hkl} ^2 \leq \frac{1}{6} + \frac{1}{6} U_{2h\ 2k\ 0} + \frac{1}{3} U_{(h-k)(h+2k)0} + \frac{1}{3} U_{hk0}$
$6_1, 6_5$	$ U_{hkl} ^2 \leq \frac{1}{6} + \frac{1}{6} (-1)^l U_{2h\ 2k\ 0} + \frac{1}{3} (\cos 2\pi\frac{1}{3}l) U_{(h-k)(h+2k)0}$ $+ \frac{1}{3} (\cos 2\pi\frac{1}{6}l) U_{hk0}$
$6_2, 6_4$	$ U_{hkl} ^2 \leq \frac{1}{6} + \frac{1}{6} U_{2h\ 2k\ 0} + \frac{1}{3} (\cos 2\pi\frac{1}{3}l) U_{(h-k)(h+2k)0} + \frac{1}{3} (\cos 2\pi\frac{1}{3}l) U_{hk0}$
6_3	$ U_{hkl} ^2 \leq \frac{1}{6} + \frac{1}{6} (-1)^l U_{2h\ 2k\ 0} + \frac{1}{3} U_{(h-k)(h+2k)0} + \frac{1}{3} (-1)^l U_{hk0}$
$\bar{6} = \frac{3}{m}$	$ U_{hkl} ^2 \leq \frac{1}{6} + \frac{1}{6} U_{0\ 0\ 2l} + \frac{1}{3} U_{(h-k)(h+2k)0} \cos 2\pi\phi_{(h-k)(h+2k)0}$ $+ \frac{1}{3} U_{(h-k)(h+2k)2l} \cos 2\pi\phi_{(h-k)(h+2k)2l}$

Direkte Methoden: Harker-Kasper-Ungleichungen

Beispiel für das Symmetrieelement $\bar{1}$

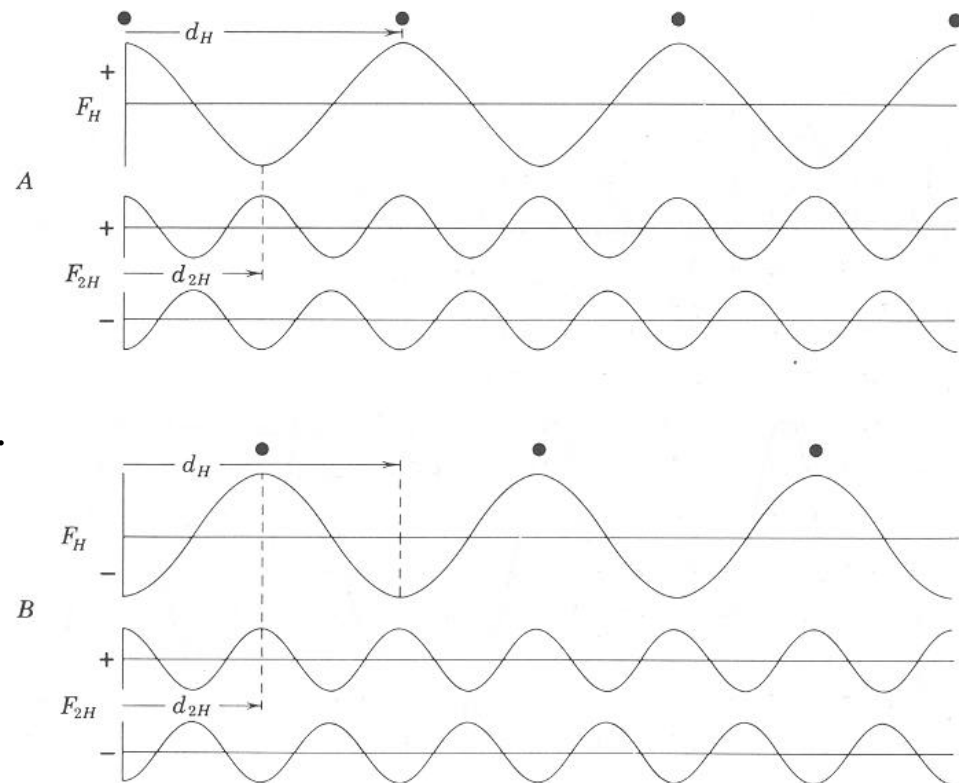
Es gilt die Einschränkung:

$$U_{h,k,l}^2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}U_{2h,2k,2l}$$

Die Größe $U_{h,k,l}^2$ ergibt sich direkt aus dem Messwert $I_{h,k,l}$. Unter bestimmten Umständen lässt sich nun das Vorzeichen von $U_{2h,2k,2l}$ bestimmen (wenn $U_{h,k,l}^2 \geq 1/2$).

Wenn $F_{h,k,l}$, sei es nun positiv oder negativ, genügend groß ist, muss $F_{2h,2k,2l}$ ein positives Vorzeichen besitzen.

Graphische Veranschaulichung der Harker-Kasper-Ungleichungen für eine zentrosymmetrische Struktur



Strukturaufklärung: Beispiel NaCl

Eine der ersten Strukturen, die von Sir Lawrence **Bragg** 1913 gelöst wurde.

Kristalldaten:

System: kubisch

Dimension der

Einheitszelle: $a = 5.638 \text{ \AA}$

$V = 179.2 \text{ \AA}^3$

$\rho = 2.165 \text{ g/cm}^3$

$M_s = 58.44$

$n = 4$

Bedingungen für mögliche

Reflexe: $h+k=2n$; $k+l=2n$ ($l+h=2n$)

Mögliche Raumgruppen:

$F23$, $Fm3$, $F432$, $F\bar{4}3m$, $Fm3m$

Analyse der Symmetrie:

Mit $n = 4$ kann ein Atom (z.B. Na) im Ursprung (0,0,0) positioniert werden.

Die Symmetrie äquivalenten Positionen für Na-Atome sind dann:

$$0,0,0; \quad 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \quad \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}; \quad \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$$

Für F -Gitter gibt es nun zwei Möglichkeiten für die Lage der Cl-Atome:

$$(a) \quad \frac{1}{2}, 0, 0; \quad 0, \frac{1}{2}, 0; \quad 0, 0, \frac{1}{2}; \quad \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$$

$$(b) \quad \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}; \quad \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}; \quad \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}; \quad \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$$

(b) \Rightarrow Laue Symmetrie $m3$: $F23$, $Fm3$

(a) \Rightarrow Laue Symmetrie $m3m$: $F432$, $F\bar{4}3m$, $Fm3m$

Strukturaufklärung: Beispiel NaCl

Strukturfaktorberechnung:

Eine Unterscheidung zwischen dem Strukturmodell (a) und (b) kann über den Vergleich $|F_{\text{obs}}|$ mit $|F_{\text{cal}}|$ erfolgen.

Für ein F -Gitter gilt:

$$F(h, k, l) = 4 \sum_{j=1}^{N/4} f_j \exp[-2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)]$$

Die Struktur des Models (a) ist zentrosymmetrisch:

$$F(h, k, l) = 4\{f_{\text{Na}} + f_{\text{Cl}} \cos 2\mathbf{p}[(h+k+l)/2]\}$$

Für die Struktur des Models (b) gilt:

$$F(h, k, l) = 4\{f_{\text{Na}} + f_{\text{Cl}} \cos 2\mathbf{p}[(h+k+l)/4]\} + 4i\{f_{\text{Cl}} \sin 2\mathbf{p}[(h+k+l)/4]\}$$

h,k,l	F_C(h,k,l) Model (a)	F_C(h,k,l) Model (b)
2,0,0	4(f _{Na} +f _{Cl})	4(f _{Na} -f _{Cl})
2,2,0	4(f _{Na} +f _{Cl})	4(f _{Na} +f _{Cl})
1,1,1	4(f _{Na} -f _{Cl})	4(f _{Na} ² +f _{Cl} ²) ^{1/2}
2,2,2	4(f _{Na} +f _{Cl})	4(f _{Na} -f _{Cl})

Mit $Z_{\text{Na}} = 11$ und $Z_{\text{Cl}} = 17$ können diese berechneten Strukturfaktoren mit den beobachteten F_{obs} verglichen werden (siehe Tabelle nächste Seite).

Strukturaufklärung: Beispiel NaCl

Strukturfaktorberechnung:

Für den Vergleich F_{obs} mit F_c werden die Temperaturfaktoren von $\langle u \rangle^2 = 0.025 \text{ \AA}^2$ für beide Atomsorten berücksichtigt

$$f_B(s) = f(s)e^{-B(\sin q/l)^2}$$

mit $B = 8\pi^2\langle u \rangle^2$

Aus diesem Vergleich für nur wenige Reflexe wird deutlich, dass das Model (a) mit den gemessenen Daten übereinstimmt.

Für den Skalierungsfaktor ergibt sich $K = 0.414$

TABLE 5.1. Observed and Calculated Structure Factor Amplitudes for NaCl

<i>hkl</i>	$ F_o $	$ F_c $	$K F_o $	$\Delta F (= K F_o - F_c)$
200	209.0	81.6	86.5	4.9
400	115.6	45.6	47.9	2.3
600	53.2	25.3	22.0	-3.3
800	26.7	12.7	11.1	-1.6
220	162.9	64.3	67.4	3.1
440	61.5	28.1	25.5	-2.6
660	24.5	10.6	10.1	-0.5
880	4.2	3.1	1.7	-1.4
111	49.7	19.0	20.6	1.6
222	127.7	53.3	52.9	-0.4
333	19.6	7.3	8.1	0.8
444	41.7	18.6	17.3	-1.3
555	4.9	3.7	2.0	-1.7
$\Sigma F_o = 901.2 \quad \Sigma F_c = 373.2 \quad \Sigma K F_o = 373.1 \quad \Sigma \Delta F = 25.5$				

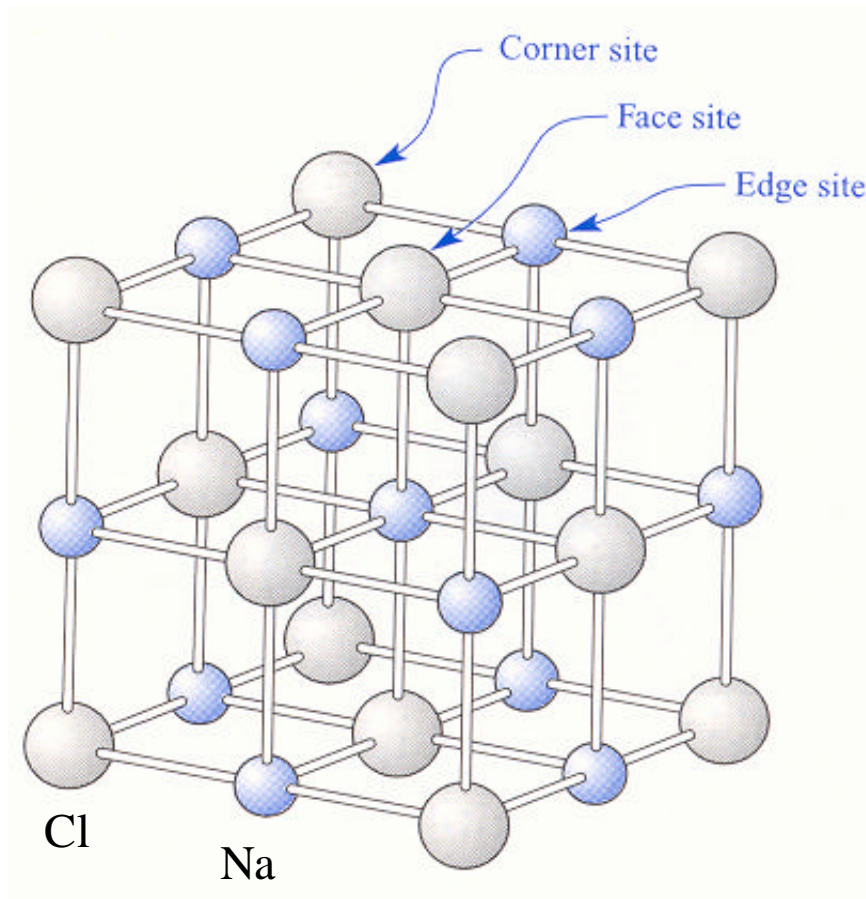
Strukturaufklärung: Beispiel NaCl

Kristallstruktur von NaCl

R-Wert:

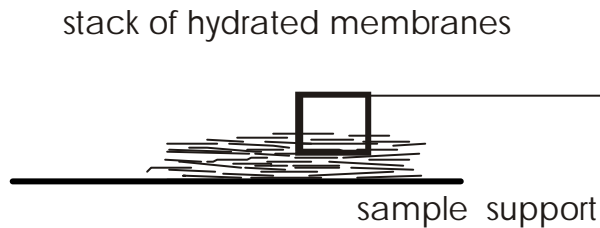
$$R = \frac{\sum \|F_{obs} - F_{calc}\|}{\sum |F_{obs}|}$$

Mit den Werten in der Tabelle (S. 53 unten) ergibt sich ein Wert von $R = 0.068$. Ein solcher Wert deutet auf eine ausreichend gute Übereinstimmung zwischen Model und der experimentell beobachteten Struktur hin.

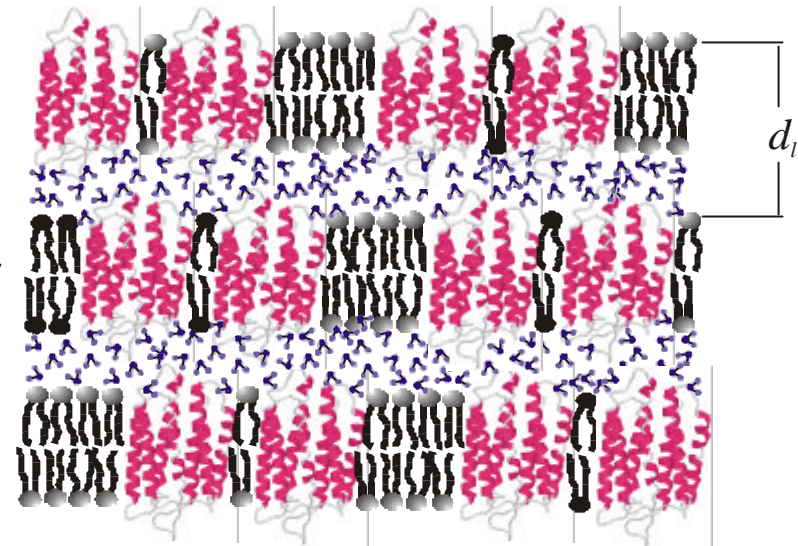


Strukturaufklärung: Bacteriorhodopsin in Purpurmembranen

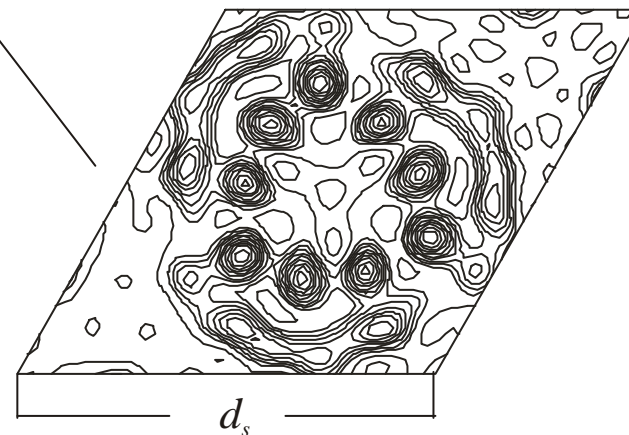
Variation der Hydratisierung
über Umgebungsatmosphäre
mit unterschiedlicher relativer
Luftfeuchtigkeit



side view: stacked membrane layers



top view: in-plane lattice of PM



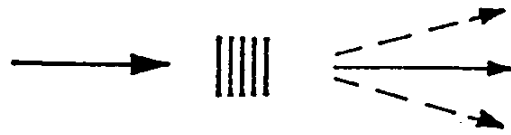
Hydratisierte Membranstapel

- Nahezu physiologische Bedingung für BR
- Probentyp geeignet für zahlreiche Techniken:
Spektroskopie, Streumethoden (Neutronen,
Röntgenstrahlung), etc.

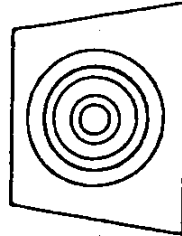
Einzelfragmente: EM

Beugung an Membranstapeln

„senkrechter“ Einfall



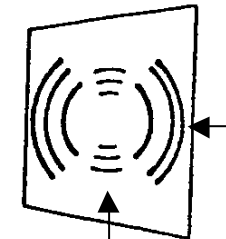
„in-plane“- Reflexe



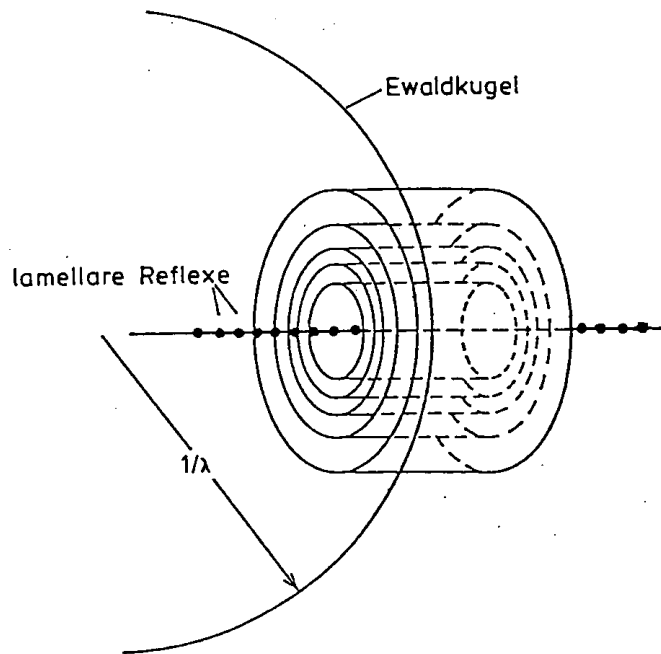
„streifender“ Einfall



„in-plane“- Reflexe



lamellare Reflexe

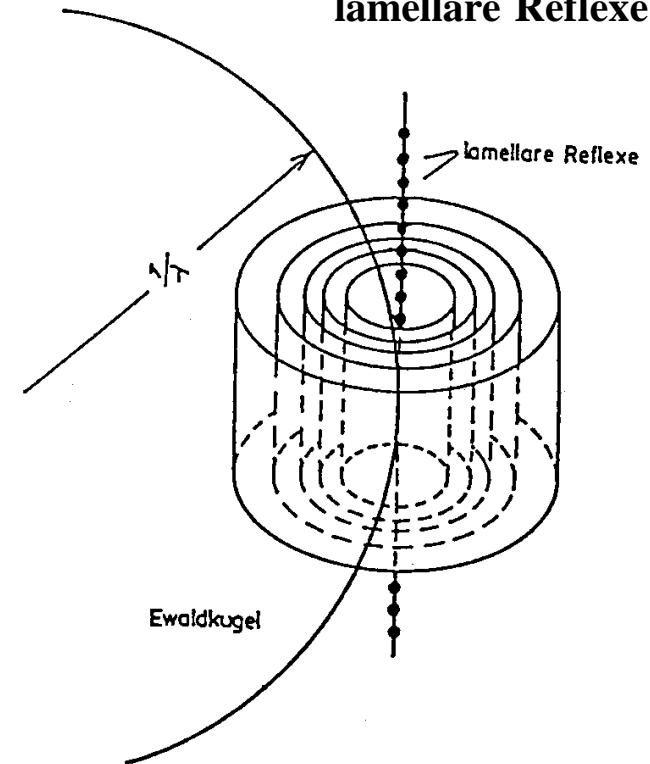


„in-plane“ Reflexe:

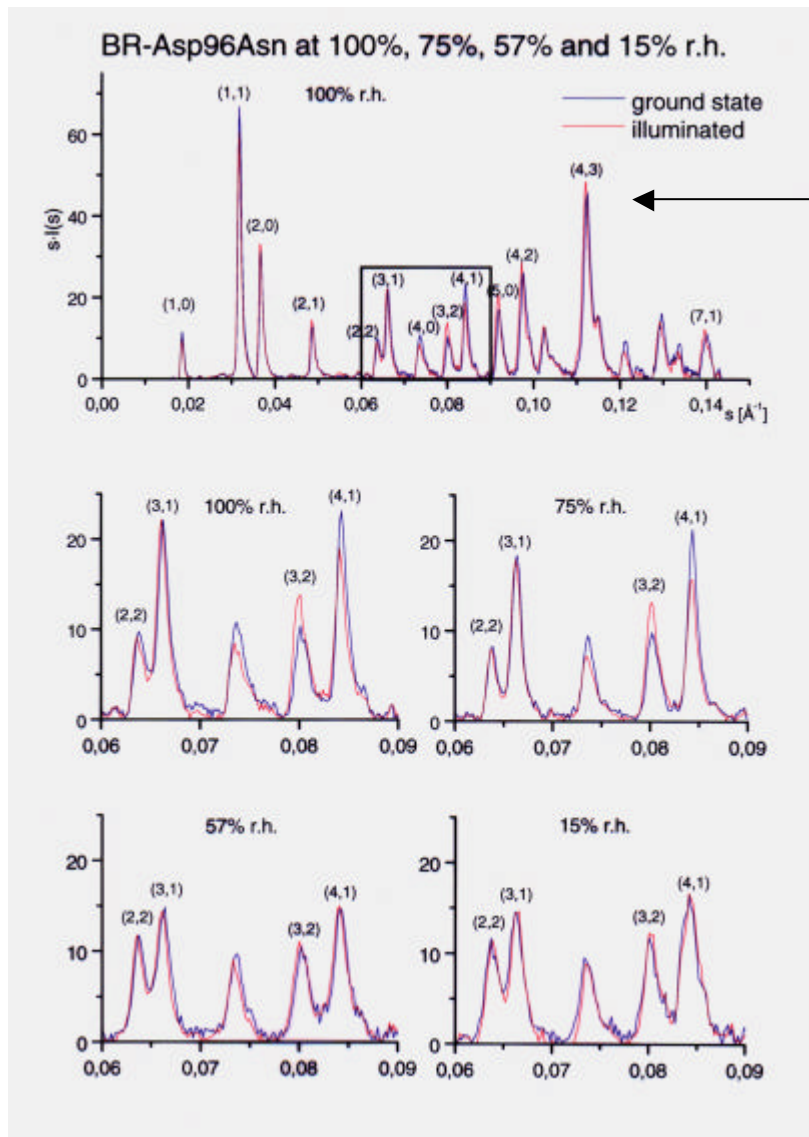
- Ordnung in der Membranebene

lamellare Reflexe:

- Schichtdicke
- Stapelordnung



Strukturaufklärung: Bacteriorhodopsin in Purpurmembranen



Radial integrierte Reflexintensitäten
des indizierten hexagonalen Gitters

Zur weiteren Berechnung der
Elektronendichteverteilung wurden Phasen
benutzt, die mit Hilfe der Elektronen-
mikroskopie gemessen wurden.

Beugungsbilder gemessen mit 2-D Gittern liefern
im allgemeinen auch nur eine 2D Strukturinformation.
=> projizierte Struktur

Projizierte Struktur des Bacteriorhopsins

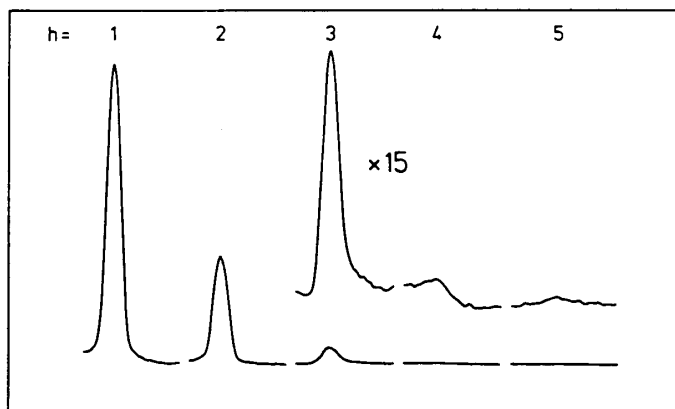


Drei BR Moleküle
(Trimere) in der
Einheitszelle

Elektronendichte der
trans-Membran Helices

Neutronenbeugung an hydratisierten Membranstapeln

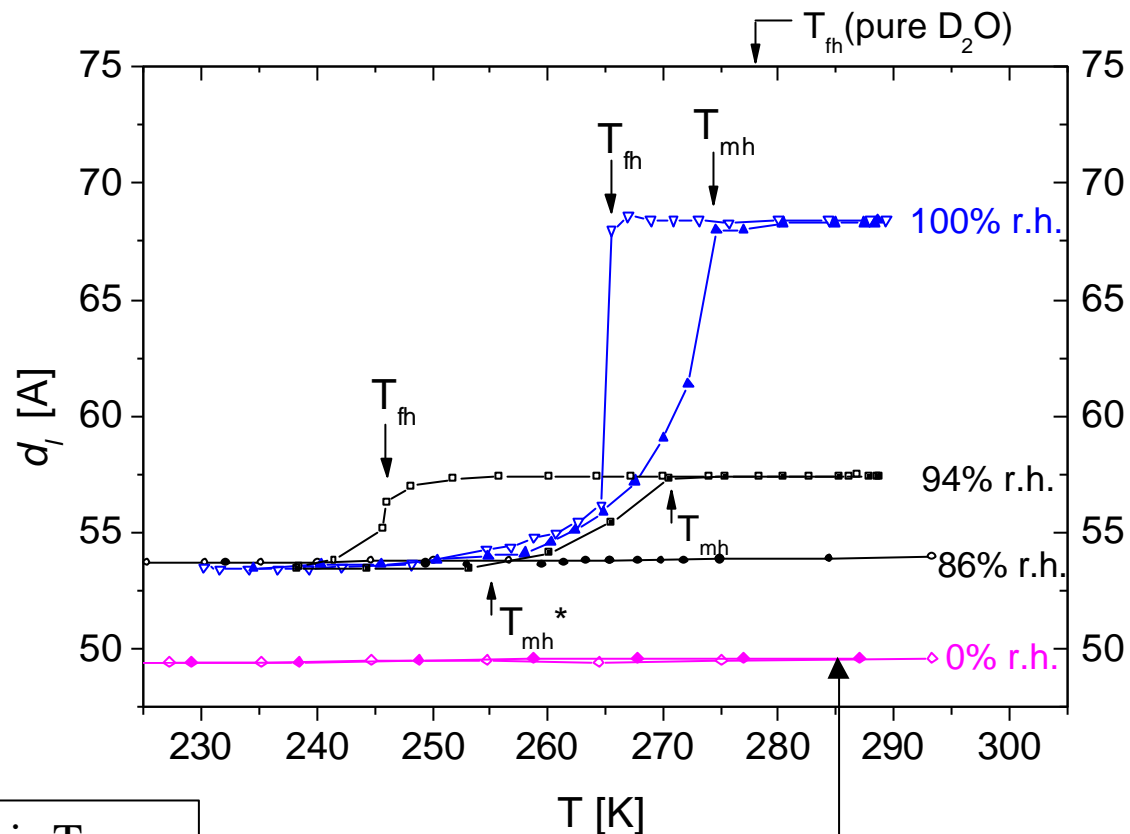
Stapelreflexe



Bestimmung des periodischen Schichtabstandes d_l im Membranstapel

- Hydratwasser wird unterkühlt bis T_{fh} .
- Dehydrierung durch Kühlung
- T_{fh} hängt vom Hydratisierungsgrad ab.

Membran hydratisiert mit D_2O ,
Kühl-/Heizrate: 5 - 40 K/h

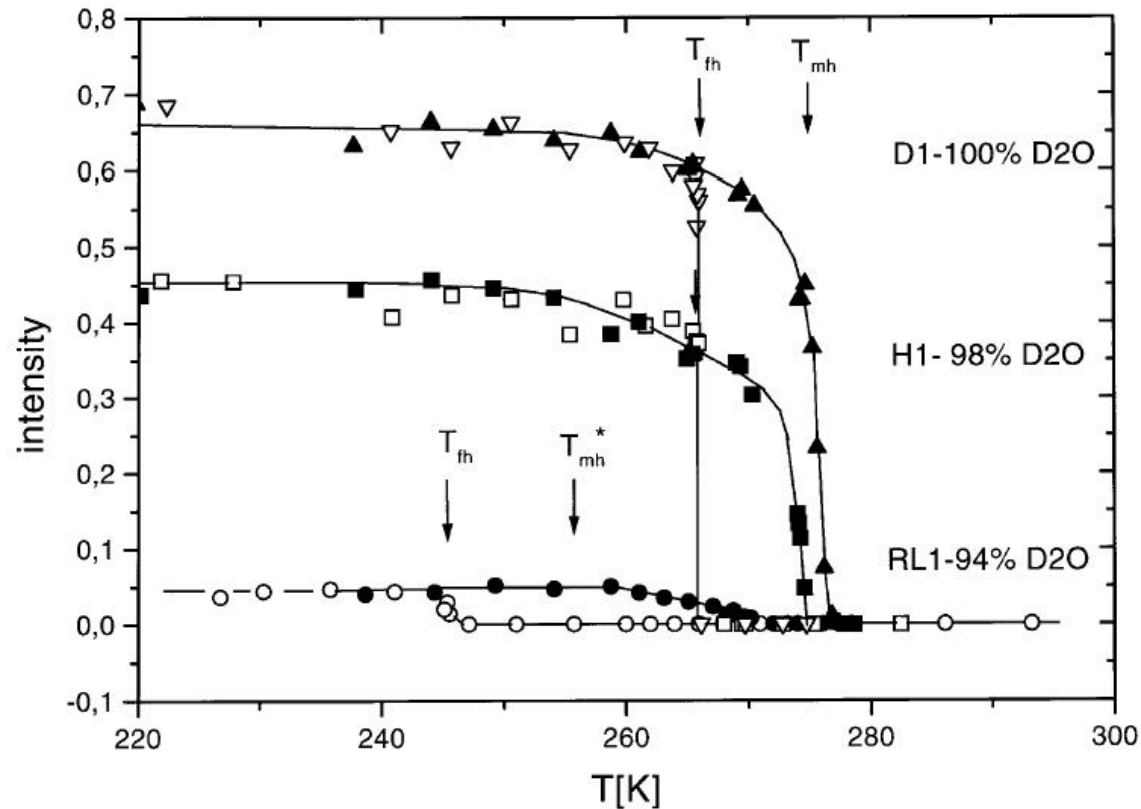


Schichtdicke der reinen Membran ohne Wasser

Neutronenbeugung an hydratisierten Membranstapeln

Eisbildung:

(100)-Reflex des polykristallinen hexagonalen Gitters



Unterhalb von T_{fh} bildet ein Teil des Hydratwassers Eiskristalle aus.



Dieser Teil des Hydratwassers befindet sich dann nicht mehr im inter-Membranbereich.

=> Beobachtbare Abnahme des „lamellaren Spacings“ d_l .

Beispiele der Neutronenstreuung

Magnetische Streuung

Besitzt die Elektronenschale ein resultierendes magnetisches Moment, tritt neben der Kernstreuung eine weitere Streuung durch die Elektronenhülle der Atome auf. Da die Wellenlänge der Neutronen vergleichbar den Ausmaßen der Elektronenhülle ist, zeigt diese **magnetische Neutronenstreuung eine Winkelabhängigkeit**, wie wir Sie von der Röntgenbeugung kennen: $f_m (\sin\theta/\lambda)$.

Die magnetische Streuung führt über Kristallinterferenz nur dann Reflexen, wenn die atomaren Spins geordnet sind.

paramagnetische Substanzen (ungeordnete Spins) => inkohärente Streuung

=> diffuse Untergrundstreuung

ferro-, ferri, und antiferromagnetische Substanzen zeigen in größeren Domänen geordnete Spins (unter best. Beding.) => kohärent Streuung => Reflexintensitäten

Die Strukturfaktoren können für die Kern- und die magnetische Streuung getrennt geschrieben werden:

h^*, k^*, l^* sind die Indizes für
Atome mit magnetischen
Moment

$$F_{Kern}(h, k, l) = \sum_x \sum_y \sum_z f_k e^{2\pi i(hx+ky+lz)}$$

$$F_{magn}(h^*, k^*, l^*) = \sum_x \sum_y \sum_z f_m(s) e^{2\pi i(h^*x+k^*y+l^*z)}$$

Beispiele der Neutronenstreuung

Magnetische Streuung

Für das gemessene Beugungsbild erhält man die Summe aus beiden Anteilen:

$$|F_{tot}(h, k, l)|^2 = |F_{Kern}(h, k, l)|^2 + q^2 |F_{mag}(h, k, l)|^2 \quad \text{mit} \quad q^2 = \sin^2 \alpha$$

und α dem Winkel zwischen der Normalen der reflektierenden Ebene und dem Magnetisierungsvektor. Die Gitterkonstanten des „magnetischen“ und des „strukturellen“ Gitters müssen nicht notwendigerweise übereinstimmen

(=> z.B. magnetische Überstruktur).

In dem Fall der Nichtübereinstimmung sind rein „magnetische Reflexe“ zu beobachten.

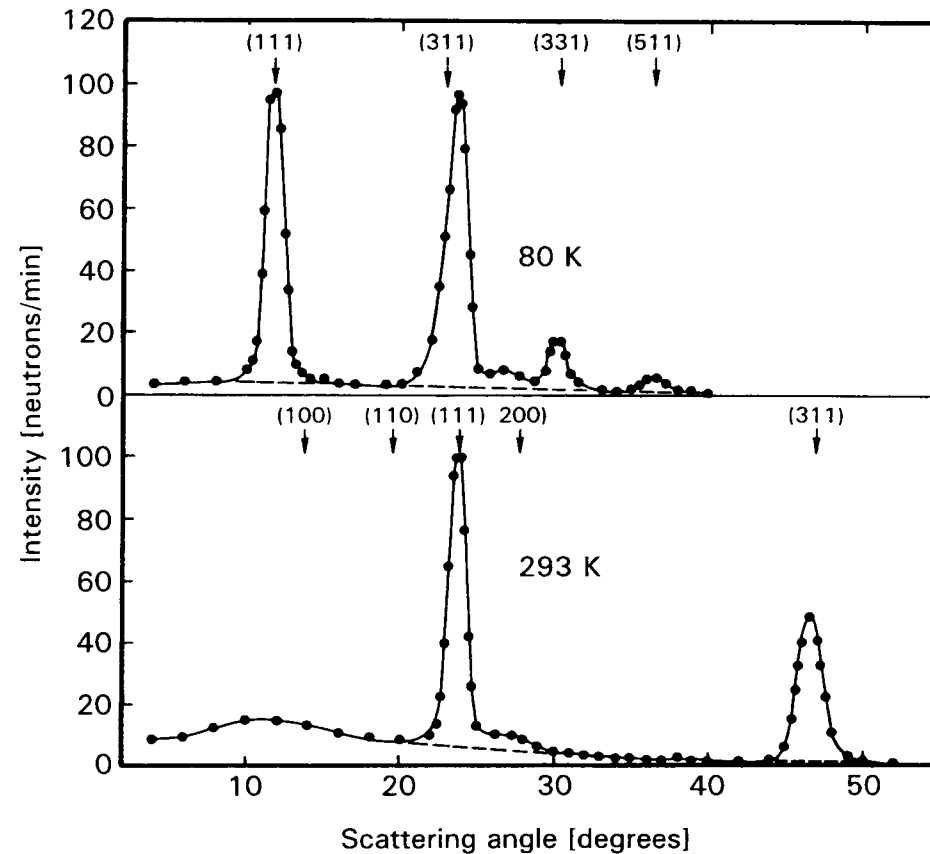
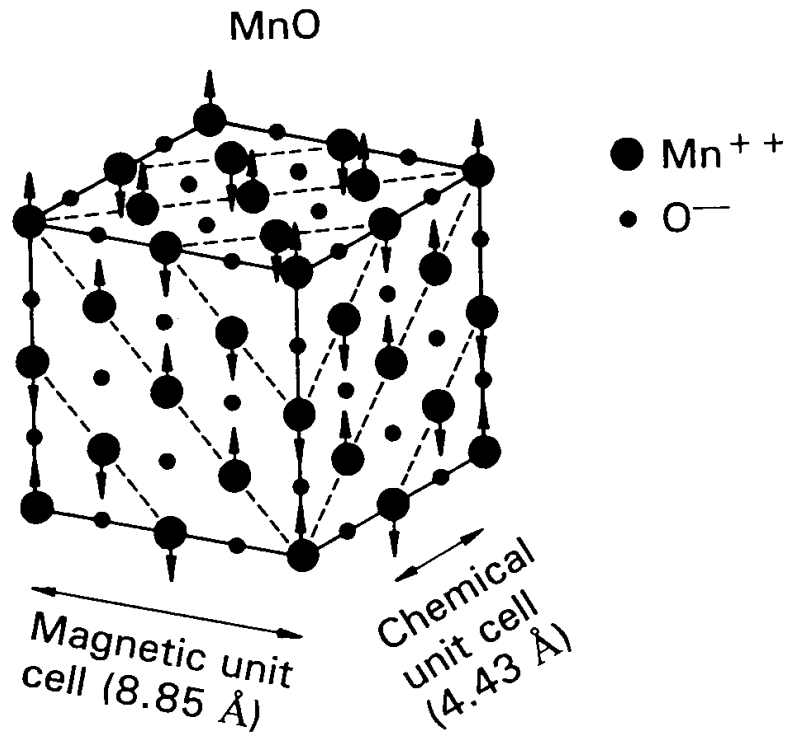
Die magnetische Neutronenstreuung kann wertvolle Informationen über Spindichteverteilungen liefern.

Beispiele:

- Spindichteverteilungen ungepaarter Elektronen (3d bzw. 4f –Elektronen) in MnCO_3 , oder in $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$.
- durch externe Magnetfelder ausgerichtete Spins von paramagnetischen Substanzen (z.B. bei K_2NaCrF_6).

Magnetische Streuung

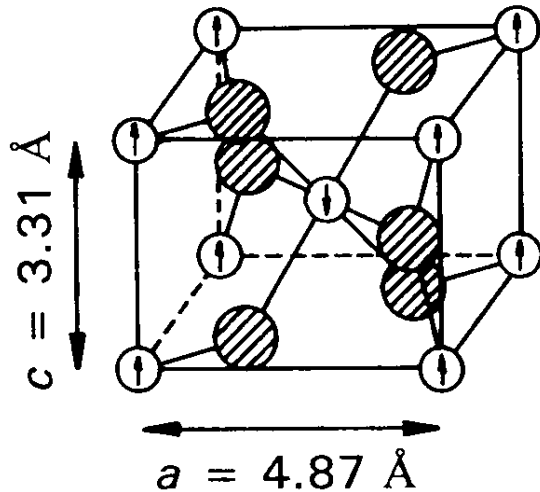
Bespiel: Antiferromagnet MnO



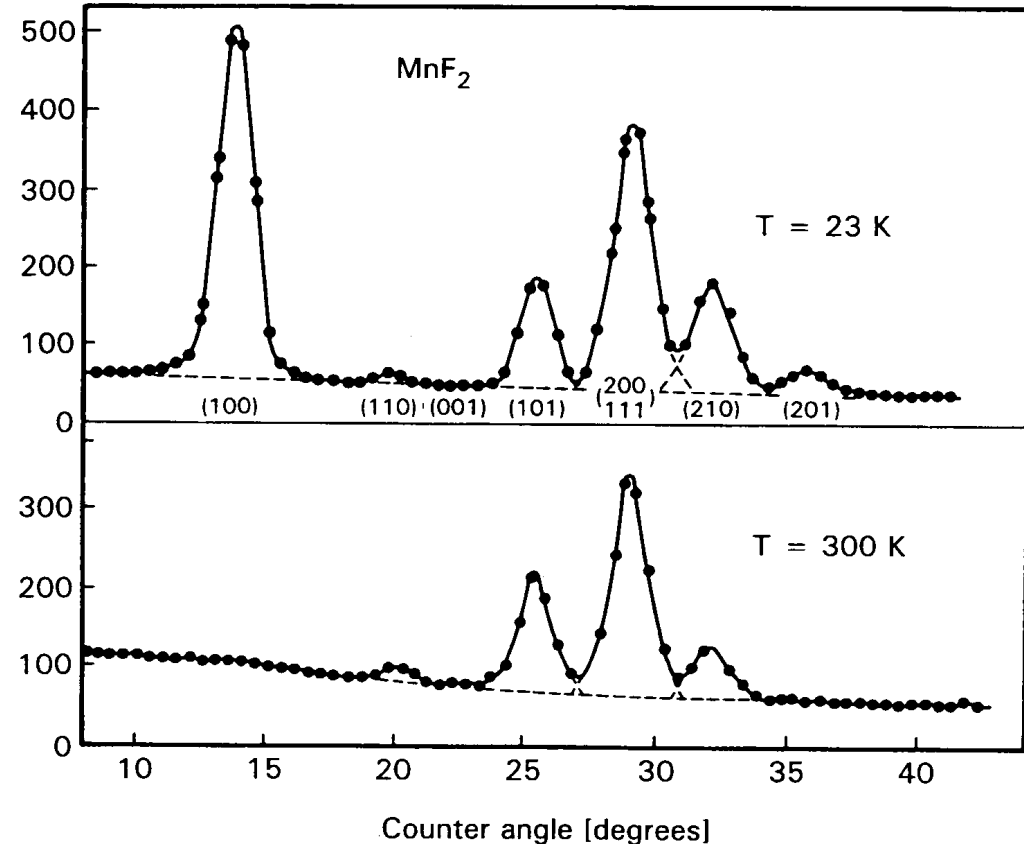
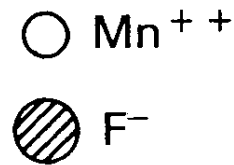
Phasenübergang zum Antiferromagnetismus bei 120 K, oberhalb dieser Temperatur ist MnO paramagnetisch und die magnetische Streuung ist diffus bzw. inkohärent und trägt somit nicht zu den Reflexen bei.

Magnetische Streuung

Beispiel: MnF_2



Gitter: bcc, tetragonal,
innenzentriertes Mn mit
antiparallelem Spin



In der antiferromagnetischen Phase ($T=23 \text{ K}$) kommen die Reflexe (100) und (201) hinzu. Gleichzeitig überlagern die magnetischen Reflexe (111) und (210) die dort schon vorhandenen Strukturreflexe. In diesem Beispiel sind die magnetischen und strukturelle Gitterparameter identisch. Da hier $a \neq c$ gilt zeigen die Reflexe (h,k,l) nicht die gleiche Intensität wie z.B. (l,h,k).