

Anhang B

Neutronenbeugung an α -Cr₂P₂O₇

Tabelle B.1 Vergleich von beobachteten ($I_{\text{obs.}}$) und berechneten ($I_{\text{calc.}}$) Intensitäten für die stärkste "magnetischen" Reflexe von α -Cr₂P₂O₇ bei 2K. Primitiv-monokline Elementarzelle: $a = 20,269(3)$, $b = 8,439(1)$ Å, $c = 9,346(2)$ Å, $\beta = 97,195(8)^\circ$; $Z = 12$; Symmetrie der magnetischen Struktur: P-1. Erfasst sind nur Reflexe bei denen $I_{\text{obs.}}$ oder $I_{\text{calc.}}$ bei mindestens 1% des stärksten Reflexes liegt.

h	k	l	2$\theta_{\text{obs.}}$	$I_{\text{obs.}}$¹⁾	$I_{\text{calc.}}$²⁾	h	k	l	2$\theta_{\text{obs.}}$	$I_{\text{obs.}}$¹⁾	$I_{\text{calc.}}$²⁾
2	-1	-1	25,187	37,4	2,65	6	-3	1	62,021	527,33	540,82
2	-1	1	25,187	36,74	2,6	2	2	-3	62,879	16,58	9,21
2	1	-1	27,204	1931,8	2046,03	2	2	3	62,879	16,54	9,19
2	1	1	27,204	1928,8	2042,85	8	1	-1	64,088	81,17	113,25
1	-2	0	29,995	0	38,96	8	1	1	64,088	81,09	113,14
4	-1	-1	34,221	3120,55	3010,94	3	3	-2	64,182	57,96	80,99
4	-1	1	34,221	3120,06	3010,47	3	3	2	64,182	57,88	80,86
5	0	0	34,793	140,37	69,43	0	3	-3	70,62	32,56	40,77
1	-1	-2	36,805	1514,87	1498	0	3	3	70,62	32,54	40,74
1	-1	2	36,805	1515,16	1498,28	6	3	-1	70,775	12,77	15,23
1	-2	2	45,279	15,31	8,53	6	3	1	70,775	12,71	15,16
1	-2	-2	45,279	15,3	8,53	1	-1	-4	71,734	379,3	374,6
5	0	-2	48,792	22,39	14,61	1	-1	4	71,734	379,34	374,64
5	0	2	48,792	22,42	14,63	10	-1	-1	75,553	202,1	166,77
0	3	-1	48,954	633,68	518,89	10	-1	1	75,553	202,06	166,73
0	3	1	48,954	633,28	518,56	6	2	-3	78,7	11,16	13,07
7	0	0	49,49	11,04	11,71	6	2	3	78,7	11,18	13,08
3	2	-2	52,022	12,9	12,98	8	0	-3	79,812	11,02	12,09
3	2	2	52,022	12,94	13,02	8	0	3	79,812	11,03	12,1
5	1	-2	52,718	212,25	239,88	6	-3	-3	81,703	50,77	35,17
5	1	2	52,718	212,01	239,61	6	-3	3	81,703	50,78	35,17
2	1	-3	55,629	134,43	112,09	11	0	0	82,259	17,77	15,83
2	1	3	55,629	134,36	112,03	2	-5	-1	82,604	104,92	101,02
3	-3	2	59,638	249,68	312,06	2	-5	1	82,604	104,95	101,04
3	-3	-2	59,638	249,61	311,98	5	1	-4	83,196	167,06	153,06
4	-1	-3	59,865	76,45	104,92	5	1	4	83,196	166,96	152,97
4	-1	3	59,865	76,44	104,9	8	1	-3	83,561	16,11	14,41
0	2	-3	59,999	8,27	11,96	8	1	3	83,561	16,09	14,4
0	2	3	59,999	8,29	11,98	9	-3	-2	86,532	97,75	90,98
7	-1	-2	61,267	255,64	264,19	9	-3	2	86,532	97,74	90,97
7	-1	2	61,267	255,56	264,11	3	-3	4	88,957	192,88	122,61
6	-3	-1	62,021	527,32	540,8	3	-3	-4	88,957	192,84	122,58

¹⁾ Intensitäten aus Profilfit des Diffraktogramm. ²⁾ Die $I_{\text{calc.}}$ stammen aus Rietveldt-Verfeinerungen mit FULLPROF.