

Charge-Flipping

Eine neue Methode zur Lösung des Phasenproblems.

Internes Seminar, 9.1.2007, CR

1. Einleitung
2. Bekannte Lösungswege
 - 2.1. Patterson-Synthesen
 - 2.2. Direkte Methoden
3. Charge-Flipping
 - 3.1. Idee und Algorithmus
 - 3.2. Programme
 - 3.3. Superflip: Programmtechnisches und Demo
4. Zusammenfassung

1. Einleitung

1.1. Das Phasenproblem

Basics:

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^N f_j e^{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)} \quad (1)$$

bzw. in Vektorform:

$$F_{\vec{h}} = \sum_{j=1}^N f_j e^{2\pi i(\vec{h}\vec{x}_j)} \quad (2)$$

mit

- $F_{\vec{h}}$: Strukturfaktor
- $j = 1 \dots N$: Atome in der Elementarzelle
- f_j : Atomformfaktoren = $f(\text{Gesamtelektronenzahl des Atoms}, \lambda, \Theta)$
- e^{\dots} = Phase \mapsto Strukturinformation \vec{x}_j (relative Anordnung der Streuzentren zueinander)

alternativ zu (2) als Integral über das Volumen der Elementarzelle:

$$F_{\vec{h}} = \int_{\text{VEZ}} \rho_{\vec{x}} e^{2\pi i\vec{h}\vec{x}} dV \quad (3)$$

Phasenproblem:

- $F_{\vec{h}}$ nicht messbar, sondern nur Reflex-Intensitäten $I_{\vec{h}} = F_{\vec{h}}^2$
- \mapsto Phaseninformation (bei zentrosymmetrischen Strukturen Vorzeicheninformation) geht verloren

1.2. Prinzip der Fouriertransformation

eindimensional: (Mathe I/II):

- periodische Funktion $f(x)$ (Periode L) \mapsto als Fourier-Reihe entwickelt:

$$f(x) = \sum_n A_n e^{2\pi i \frac{nx}{L}} \quad (4 \text{ a})$$

- mit Fourier-Koeffizienten:

$$A_n = \frac{1}{L} \int f(x) e^{-2\pi i \frac{nx}{L}} dx \quad (3 \text{ a})$$

Übertragung:

- Strukturfaktor F \mapsto periodische Funktion der Elektronendichte $\rho_{\vec{x}}$:

$$F_{\vec{h}} = \int \rho_{\vec{x}} e^{2\pi i \vec{h}\vec{x}} dV \quad (3)$$

- Vergleich mit Prinzip der Fourier-Synthese

- ◇ $F_{\vec{h}}$ sind die Fourierkoeffizienten der periodischen Funktion $\rho_{\vec{x}}$: $\rho_{\vec{x}} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{h}} F_{\vec{h}} e^{-2\pi i \vec{h}\vec{x}} \quad (4)$

- ◇ Elektronendichte = Fourierreihe der F-Werte

- ◇ F-Werte = Fouriertransformierte der Elektronendichte

Anwendung:

- für bekannte F \mapsto Elektronendichtekarte mit (4) berechenbar
- \mapsto Basis jeder Strukturverfeinerung

1.3. Übersicht: realer – reziproker Raum

Raum	reziprok	real
Ort (Koord.)	$\vec{h} = h, k, l$	$\vec{x} = x, y, z$
Amplitude	Strukturfaktor F	Elektronendichte ρ
Symmetrie	11 Laueklassen 81 Beugungssymbole aus F^2 <u>keine</u> Translationssymmetrie	32 Punktgruppen 230 Raumgruppen translationssymmetrisch
	$F_{\vec{h}} = \sum_{j=1}^N f_j e^{2\pi i(\vec{h}\vec{x}_j)} \quad (2)$ $F_{\vec{h}} = \int \rho_{\vec{x}} e^{2\pi i\vec{h}\vec{x}} dV \quad (3)$	$\rho_{\vec{x}} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{h}} F_{\vec{h}} e^{-2\pi i\vec{h}\vec{x}} \quad (4)$

2. Bekannte Lösungswege

2.1. Patterson-Methode

- älteste Methode, auch ohne Rechner verwendbar
- Idee
 - ◇ analog (4) für $\rho_{\vec{x}}$:

$$\rho_{\vec{x}} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{h}} F_{\vec{h}} e^{-2\pi i \vec{h} \vec{x}} \quad (4)$$

werden statt F einfach F^2 (Messung!) eingesetzt \mapsto neue Funktion (Patterson-Funktion) (mit Ortskoordinaten $u, v, w = \vec{u}$):

$$P_{\vec{u}} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{h}} F_{\vec{h}}^2 e^{-2\pi i \vec{h} \vec{u}} \quad (5)$$

- ◇ durch Einsetzen von (3) für F

$$F_{\vec{h}} = \int \rho_{\vec{x}} e^{2\pi i \vec{h} \vec{x}} dV \quad (3)$$

in (5) folgt für $P_{\vec{u}}$:

$$P_{\vec{u}} = \frac{1}{V} \int_V \rho_{\vec{x}} \rho_{\vec{x} + \vec{u}} dV \quad (6)$$

- ◇ $\mapsto P_{\vec{u}}$ ist Amplitude in einem Vektorraum \vec{u} (Patterson-Raum)

2.1. Übersicht: realer – reziproker – Patterson-Raum

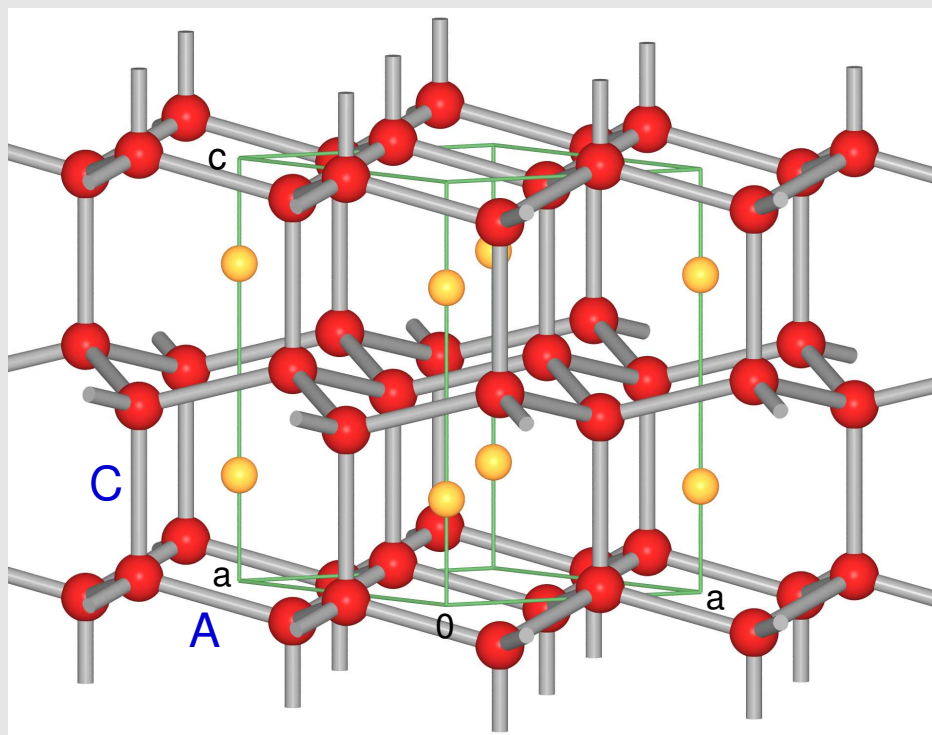
Raum	reziprok	real	Vektor
Ort (Koord.)	$\vec{h} = h, k, l$	$\vec{x} = x, y, z$	$\vec{u} = u, v, w; u = x_1 - x_2 \dots$
Amplitude	Strukturfaktor F	Elektronendichte ρ	Pattersonfunktion P
Symmetrie	11 Laueklassen 81 Beugungssymbole aus F^2 <u>keine</u> Translationssymmetrie	32 Punktgruppen 230 Raumgruppen translationssymmetrisch	24 Pattersongruppen Harker-Geraden; Harker-Schnitte <u>keine</u> Translationssymmetrie
	$F_{\vec{h}} = \sum_{j=1}^N f_j e^{2\pi i(\vec{h}\vec{x}_j)} \quad (2)$ $F_{\vec{h}} = \int \rho_{\vec{x}} e^{2\pi i\vec{h}\vec{x}} dV \quad (3)$	$\rho_{\vec{x}} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{h}} F_{\vec{h}} e^{-2\pi i\vec{h}\vec{x}} \quad (4)$	$P_{\vec{u}} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{h}} F_{\vec{h}}^2 e^{-2\pi i\vec{h}\vec{u}} \quad (5)$ $P_{\vec{u}} = \frac{1}{V} \int_V \rho_{\vec{x}} \rho_{\vec{x}+\vec{u}} dV \quad (6)$

2.1. Patterson-Funktion: Anwendung

- anschaulich:
 - ◇ Patterson-Maxima an den Orten \vec{u} , wo Kombinationsvektoren 2-er Atome liegen (Vektorraum!)
 - ◇ d.h. erkennbar werden Abstände vom jeweiligen Atom aus gesehen
 - ◇ in vielen Programmen implementiert (z.B. SHELXS-97: PATT)
- Nachteile:
 - ◇ sehr breites Maximum bei $P_{0,0,0}$
 - ◇ Maxima hängen immer von zwei Elektronendichten ab
 - ◇ Maxima sind breiter als bei der Fouriersynthese der F-Werte (Elektronendichtekarten)
 - ◇ sehr viele Peaks, da die Maxima bei Interkombinationsvektoren liegen
- daher i.A. nur geeignet für
 - ◇ Schweratomstrukturen (z.B. Metallkomplexe) (1 Vektor dominiert P)
 - ◇ nach Schweratom-Ersatz auch für Proteine

2.1. Beispiel: SHELXS-97-Input

```
TITL SrIn2
CELL 0.71070 5.009 5.009 8.036 90.0 90.0 120.0
ZERR 2 0.0020 0.0020 0.0040 0.0 0.0 0.0
P 63/M M C,NR.194*CB*
LATT 1
SYMM -Y, X-Y, Z
SYMM Y-X, -X, Z
.....
SYMM X-Y, -Y, .5+Z
SFAC SR IN
UNIT 2 4
OMIT 2
TREF
FMAP 10
HKLF 4 1
```



2.1. Beispiel: SHELXS-97-Output (Auszug I)

Super-sharp Patterson for SrIn2

Maximum = 999.10, minimum = -69.32 highest memory used = 9320 / 3956

0.1 seconds CPU time

Rms Patterson density excluding points close to the origin or an equivalent lattice point is 34.45

	X	Y	Z	Weight	Peak	Sigma	Length
1	0.0000	0.0000	0.0000	24.	999.	29.00	0.00
2	0.0000	0.0000	0.4092	12.	347.	10.07	3.29
3	0.6667	0.3333	0.5000	12.	343.	9.97	4.95
4	0.6667	0.3333	0.2076	6.	253.	7.34	3.34
5	0.6667	0.3333	0.2945	6.	224.	6.49	3.74
6	0.6667	0.3333	0.0870	6.	150.	4.35	2.98
7	0.5000	0.0000	1.0000	8.	48.	1.41	2.50
8	0.5000	0.0000	0.5000	8.	47.	1.36	4.73
9	0.9364	0.1840	0.0000	2.	42.	1.21	1.12

2.1. Beispiel: SHELXS-97-Output (Auszug II)

Patterson vector superposition minimum function for SrIn2

Patt. sup. on vector 1 0.6667 0.3333 0.2076 Height 253. Length 3.34

Maximum = 217.13, minimum = -123.52 highest memory used = 12281 / 7798

58 Superposition peaks employed, maximum height 49.5 and minimum height

Heavy-Atom Location for SrIn2

109 reflections used for structure factor sums

Solution 1 CFOM = 81.78 PATFOM = 99.9 Corr. Coeff. = 90.5 SYMFOM =

Shift to be added to superposition coordinates: 0.3326 1.1656 0.3485

Name	At.No.	x	y	z	s.o.f.	Minimum distances/PATSMF (self first)		
IN1	52.4	0.6667	0.3333	0.4569	0.1667	2.97		
						160.2		
IN2	48.1	1.0000	0.0000	0.2500	0.0833	4.02	3.34	
						169.6	247.6	
SR3	13.3	0.6667	0.3333	0.6546	0.1667	1.53	1.59	2.99
						0.0	64.3	0.0

2.2. Direkte Methoden: Prinzip

- Brute force-Methode zur Phasenbestimmung
- Idee/Grundprinzipien
 - ◇ die Elektronendichte darf an keinem Ort \vec{x} negativ sein ($\rho_{\vec{x}} > 0$)
 - ◇ $\rho_{\vec{x}}$ ist an den Atompositionen konzentriert
- \mapsto Reflexstatistiken
 - ◇ Harker-Kasper-Ungleichungen (1948)
 - ◇ Sayre-Gleichung (1952) (Triplet-Beziehung, TPR)
$$s(\vec{h}_1)s(\vec{h}_2)s(\vec{h}_1 + \vec{h}_2) \approx 1$$

mit:

 - s: Vorzeichen
 - \approx ist mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit (abhängig vom F-Wert)
 - ◇ Quartett-Beziehungen,
- statistische Aussagen zu Beziehung zwischen den Vorzeichen von mindestens 3 Reflexen
- bei nichtzentrosymmetrischen Strukturen komplizierter

2.2. Direkte Methoden: Anwendung (Programm-Prinzip)

1. geschickte Wahl starker Reflexe (große E-Werte)
2. zufällige Wahl von Phasen/Vorzeichen für diese Reflexe
3. Test auf Konsistenz mit den statistischen Aussagen (TPR usw.) \mapsto z.B. CFOM
4. \mapsto schlechte Übereinstimmung \mapsto 2
5. \mapsto gute Übereinstimmung \mapsto Berechnung der Phasen aller Reflexe aus den TPRs usw.
6. Fouriersynthese der E-Werte \mapsto Elektronendichte-Karten
7. Zuordnung der Maxima der Elektronendichte zu Atomen

2.2. Direkte Methoden: Beispiel mit SHELXS-97: Input

```
TITL  SrIn2
CELL  0.71070   5.009   5.009   8.036   90.0   90.0  120.0
ZERR  2          0.0020  0.0020  0.0040   0.0   0.0   0.0
      P 63/M M C,NR.194*CB*
LATT  1
SYMM  -Y,      X-Y,  Z
      . . . . .
SYMM  X-Y,  -Y,   .5+Z
SFAC  SR  IN
UNIT  2  4
OMIT  2
TREF
FMAP  10
HKLF  4  1
```


2.2. Beispiel: SHELXS-97-Output (Auszug I)

SUMMARY OF PARAMETERS FOR SrIn2

```
ESEL Emin 1.200 Emax 5.000 DelU 0.005 renorm 0.700 axis 0
OMIT s 2.00 2theta(lim) 180.0
INIT nn 7 nf 16 s+ 0.800 s- 0.200 wr 0.200
PHAN steps 10 cool 0.900 Boltz 0.400 ns 24 mtp 40 mnqr 10
TREF np 256. nE 24 kapscal 0.900 ntan 2 wn -0.950
FMAP code 10
PLAN npeaks -5 del1 0.500 del2 1.500
MORE verbosity 1
TIME t 9999999.
```

19 Reflections and 95. unique TPR for phase annealing

19 Phases refined using 95. unique TPR

19 Reflections and 95. unique TPR for R(alpha)

0 Unique negative quartets found, 0 used for phase refinement

ONE-PHASE SEMINVARIANTS

h	k	l	E	P+	Phi
-2	4	0	1.865	1.00	
0	2	2	1.656	0.32	
0	4	2	1.693	0.25	
-2	4	4	1.663	0.86	

Expected value of $\text{Sigma}^{-1} = 0.837$

2.2. Beispiel: SHELXS-97-Output (Auszug II)

Following phases held constant with unit weights for the initial 4 weighted tangent cycles (before phase annealing):

h	k	l	E	Phase/Comment
-1	2	0	1.604	random phase
-2	4	0	1.865	0 sigma-1 = 0.997
.....				
-2	4	4	1.663	0 sigma-1 = 0.859

All other phases random with initial weights of 0.200 replaced by $0.2 \cdot \alpha$ (or 1 if less) during first 4 cycles - unit weights for all phases thereafter
128 Parallel refinements, highest memory = 414 / 5520

Try	Ralpha	Nqual	Sigma-1	M(abs)	CFOM	Seminvariants
1420309.	0.756	0.000	0.623	0.573	0.756	++++
597829.	0.035	0.000	1.000	1.230	0.035	+---+
.....						
1702605.	0.035	0.000	1.000	1.230	0.035	+---+

CFOM Range	Frequency
0.000 - 0.020	0
0.020 - 0.040	232
0.040 - 0.060	0
.....	
0.140 - 0.160	0
0.600 - 0.999	24

2.2. Beispiel: SHELXS-97-Output (Auszug III)

E-Fourier for SrIn2

Maximum = 646.79, minimum = -152.38 highest memory used = 8680 / 1741

Heavy-atom assignments:

	x	y	z	s.o.f.	Height
IN1	0.6667	0.3333	0.0456	0.1667	646.8

Peak list optimization

RE = 0.290 for 1 surviving atoms and 41 E-values Highest memory used =

E-Fourier for SrIn2

Maximum = 634.84, minimum = -153.68 highest memory used = 8696 / 1741

Peak list optimization

RE = 0.134 for 2 surviving atoms and 41 E-values Highest memory used =

.....

E-Fourier for SrIn2

Maximum = 600.29, minimum = -141.74 highest memory used = 8720 / 1741

IN1	0.	0.6667	0.3333	0.0456	0.167	3.14	0 1	3.326				
							0 2	3.326	120.8			
							0 3	2.342	49.0	87.9		
							0 4	2.605	30.2	145.1	77.0	
							0 5	1.866	74.4	87.4	108.2	
							1 IN1	2.983	164.6	43.8	121.2	

.....

1	487.	1.0000	0.0000	0.2500	0.083	4.12	0 IN1	3.326				
							0 3	2.514	44.6			
							0 4	1.685	50.6	82.2		

2.2. Direkte Methoden: Vor/Nachteile

Vorteile:

- gute Chance für die meisten Strukturen mit gleichen Streuern (reine Organik, Intermetallisches, Li-Borid-Carbide, ...)
- bei Anwendung von Quartetts recht robust (z.B. bzgl. Symmetriefehlern)
- heute die am meistverwendete Methode bei Standard-Strukturanalysen
- in SHELXS-97 umfassend implementiert (Quartett-Beziehung, Phase-Annealing usw.)

Nachteile:

- Probleme mit zentrosymmetrischen Strukturen (wie auch bei Patterson)
- Lösung von Strukturen
 - ◇ mit mehr als 3 Dimensionen (modulierte Strukturen),
 - ◇ mit extremer dynamischer Fehlordnung von Schweratomen,
 - ◇ aus Pulvern,
 - ◇ von Quasikristallen

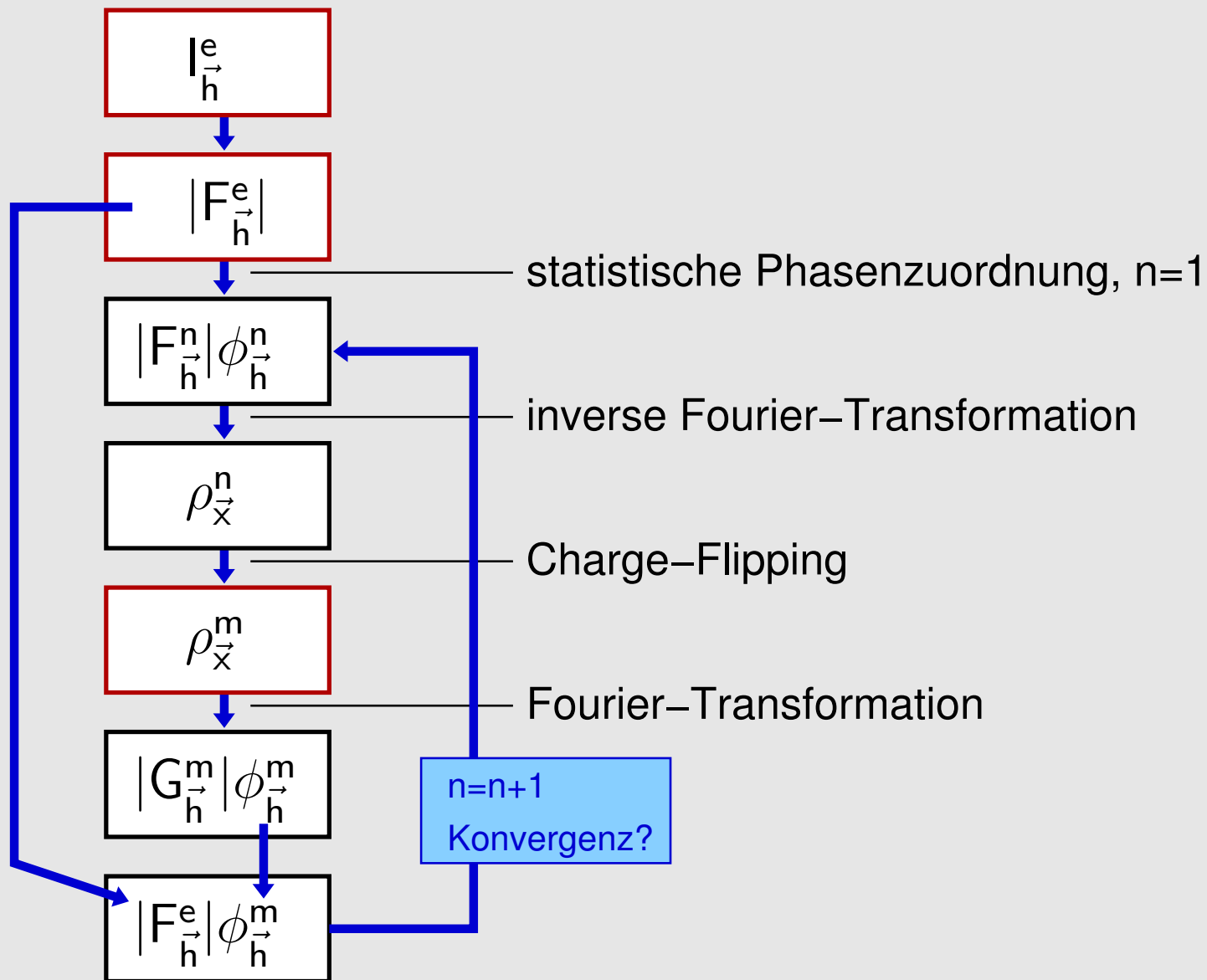
nicht möglich

3. Charge Flipping

3.1. Idee und Algorithmus

- G. Oszlanyi, A. Sütő (2004)
- Ansatz/Idee
 - ◇ die Elektronendichte darf an keinem Ort \vec{x} negativ sein ($\rho_{\vec{x}} > 0$)
- Algorithmus
 1. Start: statistische Phasenzuordnung $\phi_{\vec{h}}^n$ zu allen beobachteten Reflexen \vec{h} (alle anderen Reflexe: $\phi^n=0$; $\phi_{\vec{0}}^n$ kritisch!)
 2. $\rho_{\vec{x}}^n$ mittels inverser Fourier-Transformation (Gl. 4) berechnen (in einem Volumen-Grid von $N_1 \times N_2 \times N_3$ Pixeln)
 3. negative Dichten $\rho_{\vec{x}}^n$ durch positive gleicher Höhe austauschen \mapsto Charge-Flipping \mapsto modifizierte Dichte ($\rho_{\vec{x}}^m$)
 4. aus dieser modifizierten Dichte $\rho_{\vec{x}}^m$ mittels Fourier-Transformation (Gl. 3) temporäre Strukturfaktoren $G_{\vec{h}}^m$ berechnen
 5. durch Kombination der experimentellen Amplituden mit den Phasen von $G_{\vec{h}}^m$ die neuen Strukturfaktoren F^{n+1} für den nächsten Zyklus ermitteln (alle nicht gemessenen Reflexe: $\phi = 0$)
 6. GOTO 2 (Wiederholung der Schritte 2-5 bis zur Konvergenz)

3.1. Charge-Flipping: Flowchart



3.2. Programme

Superflip:

- Superflip = Charge Flipping in Superspace
- Autoren: L. Palatinus, Lausanne
- Fortran 90 (+ FFTW-Library)
- Input:
 - ◊ Datei *.inflip (Instructions inkl. hkl-F-Daten) ↓

Flipper:

- Unterprogramm von PLATON
- Bunt!
- Autor: T. Spek ?
- nur 3D ?
- ????

3.2. Programme: Platon

P L A T O N

A Multipurpose Crystallographic Tool

(C) 1980-2006 A.L.Spek - 40M-Version: 191206

GRAPHICS	GEOM-CALC	VOIDS TWIN	SYMMETRY	ABSORPTION	REPORT	MISC-TOOLS
PLUTONauto	CALC ALL	CALC SOLV	ADDSYM	DELrefABS	VALIDATION	STRUCTURE?
ORTEP/ADP	CALC INTRA	CALC K.P.I	ADDSYM-EQL	ABSPslScan	ASYM-VIEW	FCF2HKL
NEWMAN	CALC INTER	SQUEEZE	ADDSYM-EXT	ABSTompa	FCF-VALID	EXPAND-P1
RING-PLOTS	CALC COORD	CALC-FCF	ADDSYM-PLT	ABSGauss	SUPPLEMMAT	FCF-GENER
PLANE-PLGT	CALC METAL	CONTOUR-SQ	ADDSYM-SHX	ABSxtal	ANALofVAR	HKL-GENER
POLYHEDRA	CALC GEOM	SOLV F3D	NEWSYM	ABSSphere	ByvoetPair	HKL-TRANSF
CONTOUR-DF	CALC HBOND	SOLV PLOT	NONSYM	MULscanABS	ASYM-EXPCT	EXOR-RES
CONTOUR-Fo	CALC TMA	CAVITY-PLT	LEPAGE	SHXABS	ASYM-VALID	ANIS-RES
AutoMolFlt	L.S.-PLANE		DELRED		DLfFourier	RENAME-RES
HKL2Powder	DLhedAngle		MOLSYM		EXPECT-HKL	PDB -pdb
SLmPowderP	AngleLines				CSD-CELL	SPF -eld
RadDistFun	AngleSplLn		ASYM		CSD-QUEST	SHELXL-res
PATTERSON	CremerPapl		ASYMaverFR		CALC OMEGA	CIF -acc
FLIPPER	BondValenc	LePageTwin	SPGRfromEX		CIF-LOCAL	AUTO-RENUM
PLUTONatly	HFIX - RES	TwinRotMat	StructTldy	Xtal Hablt		SYSTEM-S

Xtal Data (RES) srln2.lns- Set 1(1): SrIn2
 Refl Data (HKL) srln2.hkl [NO-DIAC] (0):

Browser - HELP

INSTRUCTION INPUT via KEYBOARD or LEFT-MOUSE-CLICKS (HELP with RIGHT CLICKS)

>>

PLATON MENU

- OptionMenus
- NoMove
- NoDisorder
- Organic
- Round
- Parentheses
- Label-Alias
- R/S-Determ
- Norm-H-bond
- NoSymm
- Twin-Expand
- LstARU Rcel
- LstCellSymm
- ListAtoms
- ListBonds
- LstFlagRadi
- MinQPeakHgt
- MinQPeakDis
- Q-Peak-Incl
- KeyInstruct
- Prev Next
- SAVE-InstrS
- ENTRY-LIST
- Reset End
- Exit
- MenuActive

Structure Solution	deltaR	Npk	Rexor	Nat	Spgr
0.000	10	0.128	10	Amm2	
0.000	10	0.379	10	P3m1	
0.000	10	0.171	8	Amm2	
0.000	10	0.622	9	P3m1	
0.000	10	0.155	7	P6	
0.000	10	0.514	11	P3m1	
0.000	10	0.471	10	P3m1	
0.000	10	0.160	15	Cm	
0.000	10	0.176	7	Amm2	
0.000	10	0.257	15	Cm	
0.000	10	0.245	10	P6mm	
0.000	10	0.484	7	P6mm	
0.000	10	0.457	10	P3m1	
0.000	10	0.131	15	Cm	
0.000	10	0.372	11	P6mm	
0.000	10	0.313	6	P-6mm	
0.000	10	0.300	15	Cm	

h	k	l	250I	0.000	-18.143	217.319	457	0.130
16	72	250I	0.000	-18.143	217.319	457	0.130	
17	49	250I	0.000	-17.818	216.234	458	0.129	
18	85	250I	0.000	-17.563	237.827	456	0.129	

Factor = 0.020, PFullp = 25.0, U150 = 0.020, RFLMX = 0.50, REXMX = 0.30

Spgr: Amm2 Rexor: 0.128 Frg: 5 Nat: 1 Try: 1

P63/mmc N-Iteration

3.3. Superflip: Input

```
title SrIn2
perform CF
##### Keywords influencing the form of the files
outputfile srin2.m80
outputformat m80
expandedlog yes
coverage yes
##### Basic crystallographic information
dimension 3
voxel 80 80 80
cell 5.009 5.009 8.036 90.00 90.0 120.00
symmetry
      x1      x2      x3
endsymmetry
##### Keywords influencing the algorithm
delta AUTO
weakratio 0.000
biso 0.000
randomseed AUTO
searchsymmetry average
##### List of reflections
reflectionlist complete
dataformat intensity
fbegin
-1 0 0 127.67 7.74 0
```

3.3. Superflip: Output-Dateien

Dateien:

- Protokoll-Datei *.sflog
- Elektronendichtekarte, wahlweise im
 - ◇ *.m81-Format (binär, Dichten für JANA)
 - ◇ *.m80-Format (ascii, $F_o + \phi$ für JANA oder DRAWxtl)

```
0 0 0 0 1 0.13078E+04 0.13078E+04 0.13078E+04 0.13078E+04 0.00000E+00
0 0 0 2 1 0.29614E+02 0.29614E+02 0.29614E+02-0.29614E+02-0.19621E-05
0 0 0 4 1 0.59498E+01 0.59498E+01 0.59498E+01-0.59498E+01-0.78840E-06
-2 0 0 -4 1 0.64498E+01 0.64498E+01 0.64498E+01 0.64498E+01-0.92795E-06
-2 0 0 -2 1 0.79498E+01 0.79498E+01 0.79498E+01-0.79498E+01 0.61705E-06
-2 0 0 0 1 0.85922E+02 0.85922E+02 0.85922E+02 0.85922E+02-0.97639E-06
-2 0 0 2 1 0.53184E+02 0.53184E+02 0.53184E+02-0.53184E+02-0.29193E-05
-2 0 0 4 1 0.18844E+02 0.18844E+02 0.18844E+02 0.18844E+02 0.22829E-05
```

Demos:

- SrIn₂ ohne Symmetrie, Ausgabe als *.m81-Datei \mapsto JANA
- SrIn₂ mit Symmetrie, Ausgabe als *.m80-Datei \mapsto DRAWxtl
- Lösung einer modulierten (4-dim.) Struktur, Ausgabe als *.m81-Datei \mapsto JANA

4. Zusammenfassung

- Lösung von 3D-Strukturen
 - ◇ Charge-Flipping (Programm: Superflip) als Alternative/Ergänzung zu
 - ◇ Patterson-Methode (z.B. SHELXS-97)
 - ◇ Direkte Methoden (z.B. SHELXS-97)
- Lösung modulierte Strukturen/Superspace
 - ◇ Alternative zu viel Handarbeit

- Giocovazzo (ed.): Fundamentals in Crystallography, Oxford.
- W. Massa: Einführung in die Kristallstrukturanalyse, Teubner.
- L. Palatinus, Acta Crystallogr. **A60**, 604-610 (2004).
- G. Oszlanyi, A. Sütő, Acta Crystallogr. **A60**, 134-141 (2004).
- G. Oszlanyi, A. Sütő, Acta Crystallogr. **A61**, 147-152 (2005).
- L. Palatinus: SUPERFLIP User Manual (2006).