

Programm zum Seminar „Vom Kristall zum Reflex und zurück“ (53454) für Studierende im Hauptstudium, Masteranden und Doktoranden

Zeitraum: Mittwoch, 19.02.2025 – 26.03.2025

Uhrzeit: 10:00 Uhr s.t.

Datum/ Raum	Thema	Inhalt
19.2. CH.12.0.18	Symmetrie und Beugung	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Was wird wie gemessen?</li> <li>- Zusammenhang zwischen Kristallstruktur und Beugungsbild</li> </ul>
26.2. H47	Diffraktometer, Datensammlung	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Organisatorisches</li> <li>- Wie ist ein Diffraktometer aufgebaut?</li> <li>- Datensammlung</li> <li>- Vorüberlegungen (welche Wellenlänge ist sinnvoll; Kristallauswahl)</li> <li>- Wie starte ich eine sinnvolle Messung?</li> </ul>
5.3. CH 12.0.17	Datenreduktion, Raumgruppen-bestimmung, Strukturlösung	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Indizierung, Integration</li> <li>- Raumgruppen Bestimmung aus Beugungsdaten</li> <li>- Phasenproblem/Strukturlösung</li> </ul>
12.3. CH 12.0.17	Postprozessierung, Absorptionskorrektur CrysAlisPro	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Schwache vs starke Absorber</li> <li>- Korrekturen</li> </ul>
19.3. CH 12.0.17	Strukturlösung und Verfeinerung mit Olex2	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Strukturverfeinerung</li> <li>- R-Werte und Gewichtungsfaktoren</li> <li>- Beispiele</li> </ul>
26.3. CH 12.0.17	Nützliche Tools, NoSpherA2, Crystallographic Information File	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Olex2 Module</li> <li>- CIF erstellen, Aufbau und Inhalt</li> <li>- Validierung/CheckCIF</li> </ul>