

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

Zeitraum: Mi, 14.02.2024 – 27.03.2024

Uhrzeit: 10 Uhr s.t.

Ort: CH 12.0.16

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