

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"> - Was wird wie gemessen? - Zusammenhang zwischen Kristallstruktur und Beugungsbild |
| 26.2. H47 | 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? |
| 5.3. CH 12.0.17 | Datenreduktion, Raumgruppen-bestimmung, Strukturlösung | <ul style="list-style-type: none"> - Indizierung, Integration - Raumgruppen Bestimmung aus Beugungsdaten - Phasenproblem/Strukturlösung |
| 12.3. CH 12.0.17 | Postprozessierung, Absorptionskorrektur CrysAlisPro | <ul style="list-style-type: none"> - Schwache vs starke Absorber - Korrekturen |
| 19.3. CH 12.0.17 | Strukturlösung und Verfeinerung mit Olex2 | <ul style="list-style-type: none"> - Strukturverfeinerung - R-Werte und Gewichtungsfaktoren - Beispiele |
| 26.3. CH 12.0.17 | Nützliche Tools, NoSpherA2, Crystallographic Information File | <ul style="list-style-type: none"> - Olex2 Module - CIF erstellen, Aufbau und Inhalt - Validierung/CheckCIF |