

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

Zeitraum: Mi, 18.02.2026 – 1.04.2026

Uhrzeit: 10 Uhr s.t.

Ort: CH 12.0.17

Datum	Thema	Inhalt
18.2.	Diffraktometer, Datensammlung	<ul style="list-style-type: none"><li>- Organisatorisches</li><li>- Wie ist ein Diffraktometer aufgebaut?</li><li>- Datensammlung</li><li>- Vorabüberlegungen (welche Wellenlänge ist sinnvoll; Kristallauswahl)</li><li>- Wie starte ich eine sinnvolle Messung?</li></ul>
25.2.	Symmetrie und Beugung	<ul style="list-style-type: none"><li>- Was wird wie gemessen?</li><li>- Zusammenhang zwischen Kristallstruktur und Beugungsbild</li></ul>
4.3.	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>
11.3.	Strukturlösung und Verfeinerung mit Olex2	<ul style="list-style-type: none"><li>- Strukturverfeinerung</li><li>- R-Werte und Gewichtungsfaktoren</li><li>- Beispiele</li></ul>
18.3.	Postprozessierung, Absorptionskorrektur	<ul style="list-style-type: none"><li>- Schwache vs starke Absorber</li><li>- Korrekturen</li></ul>
1.4.	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>