

**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
<b>18.2.</b>	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>
<b>25.2.</b>	Symmetrie und Beugung	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Was wird wie gemessen?</li> <li>- Zusammenhang zwischen Kristallstruktur und Beugungsbild</li> </ul>
<b>4.3.</b>	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>
<b>11.3.</b>	Strukturlösung und Verfeinerung mit Olex2	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Strukturverfeinerung</li> <li>- R-Werte und Gewichtungsfaktoren</li> <li>- Beispiele</li> </ul>
<b>18.3.</b>	Postprozessierung, Absorptionskorrektur	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Schwache vs starke Absorber</li> <li>- Korrekturen</li> </ul>
<b>1.4.</b>	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>