



Vorlesung "Diffraktionsmethoden zur Strukturaufklärung"

Wahlpflicht in MES und COS, Vorlesung 2 SWS, 3 ECTS

Gliederung

0. Einführung, Literatur

1. Symmetrie

- 1.1 Symmetrie und Gitter
- 1.2 Koordinaten
- 1.3 Bravaisnetze in 2D
- 1.4 Bravaisgitter in 3D
- 1.5 Symmetriegruppen
- 1.6 Kristallklassen
- 1.7 Raumgruppen
- 1.8 International Tables for Crystallography

2. Beugung

- 2.1 Atom
- 2.2 Bragg
- 2.3 rez. Gitter, Ewald-Konstruktion
- 2.4 Strukturfaktorgleichung
- 2.5 syst Löschungen
- 2.6 Auslenkungsparameter
- 2.7 Neutronen

3. Intensitätsmessung

- 3.1 Röhre, Microsource, Goniometerkopf, Punktdetektor, CCD, CMOS
- 3.2 Verarbeitung und Korrektur der Intensitätsdaten

4. Strukturlösung
  - 4.1 Phasenproblem
  - 4.2 Patterson
  - 4.3 Differenzfourier
  - 4.4 Direkte Methoden
  - 4.5 Dual Space, Charge Flipping
  
5. Verfeinerung
  - 5.1 Gütefaktoren
  - 5.2 Strategien zur Anpassung: DF-Synthesen, Gradienten,  
least squares
  - 5.3 constraints und restraints
  - 5.4 Händigkeit und anomale Dispersion
  
6. Gang einer Strukturbestimmung
  - 6.1 Kristallauswahl
  - 6.2 Zellbestimmung/Datensammlung
  - 6.3 Datenreduktion
  - 6.4 Strukturlösung
  - 6.5 Verfeinerung
  
7. Interpretation von Diffraktionsergebnissen
  - 7.1 Fehler und Standardabweichungen
  - 7.2 Auslenkungsparameter
  - 7.3 Wechselwirkungen im Kristall
  - 7.4 Datenbanken
  
8. Experimentelle Elektronendichte