

Inhalt und Zeitplan

Tag	Thema	Dozent
Mo	1. Einleitung	CR
	2. Punktgruppen/Kristallklassen	CR
	2.1. Punktsymmetrie-Elemente/Operationen	
	2.2. Punktgruppen/Kristallklassen	
	2.3. Beispiele	
	Übung zu 2: Punktgruppenbestimmung	MA
Di	3. Kristallographie I	MA
	3.1. Translationssymmetrie	
	3.2. Kristallgitter	
	3.3. Flächen, Richtungen, Punkte im Gitter	
	3.4. Bravais-Gitter	
	4. Kristallographie II	MA
	4.1. Flächengruppen	
	4.2. Raumgruppen und Internationale Tabellen	
	4.3. Symmetrieeoperatoren	
	4.4. Beispiele (Kristallstrukturen, Strukturdiskussion)	
Mi	Übung zu 4.4.: Strukturdiskussion	MA
	5. Prinzip der Beugung, Laue/Bragg-Gleichung, reziprokes Gitter	CR
	6. Experimentelles	MA
	6.1. Erzeugung von Röntgenstrahlung	
	6.2. Monochromatisierung/Fokussierung	
	6.3. Detektion von Röntgenstrahlung	
	Besichtigung der Diffraktometer in der AC	MA/CR
	7. Pulverdiffraktometrie I (Informationen, Indizierung usw.)	MA
	7.1. Methoden und Geometrien	
	7.2. Informationen aus Pulverdiffraktogrammen	
Do	7.3. Indizierungsübung I	MA
	8. Intensitäten, Phasenproblem	MA
	8.1. Atomformfaktor	
	8.2. Strukturfaktor	
	8.3. Phasenproblem	
	8.4. Korrekturfaktoren	
	8.5. Intensitätsberechnung	
Fr	7.3. Indizierungsübung II	MA
	9. Einkristallstrukturbestimmung	CR
	9.1. Datensammlung und -reduktion	
	9.2. Symmetrie im reziproken Raum, Raumgruppenbestimmung	
	9.3. Ansätze zur Lösungen des Phasenproblems	
	9.4. Strukturverfeinerung	

Literatur und Links

- Kursseiten mit Materialien s. Ilias (MA) und http://ruby.chemie.uni-freiburg.de/Vorlesung/m+k_krist_beug.html (CR)
- W. Borchert-Ott: Kristallographie, Eine Einführung für Naturwissenschaftler, Springer, 2009.
- H. Krischner: Einführung in die Röntgenfeinstrukturanalyse, Vieweg, 1987.
- W. Massa: Kristallstrukturbestimmung, Springer 2015.
- C. Giacovazzo (ed.), Fundamentals of Crystallography, IUCr, Oxford.
- International Tables for Crystallographie, IUCR (zum Nachschlagen).
- weitere Literaturangaben, Links zu freien Programmen, Datenbanken etc. in den Einzelkapiteln