

Inhalt und Zeitplan

Tag		Kapitel/Themen
Mo	CR	1. Einleitung
	CR	2. Punktgruppen/Kristallklassen 2.1. Punktsymmetrie-Elemente/Operationen 2.2. Punktgruppen/Kristallklassen 2.3. Beispiele
	MA	Übung zu 2: Punktgruppenbestimmung
Di	MA	3. Kristallographie I 3.1. Translationssymmetrie 3.2. Kristallgitter 3.3. Flächen, Richtungen, Punkte im Gitter 3.4. Bravais-Gitter
	MA	4. Kristallographie II 4.1. Flächengruppen 4.2. Raumgruppen und Internationale Tabellen 4.3. Symmetrieeoperatoren 4.4. Beispiele (Kristallstrukturen, Strukturdiskussion)
Mi	MA	Übung zu 4.4.: Strukturdiskussion
	CR	5. Prinzip der Beugung, Laue/Bragg-Gleichung, reziprokes Gitter
	MA	6. Experimentelles 6.1. Erzeugung von Röntgenstrahlung 6.2. Monochromatisierung/Fokussierung 6.3. Detektion von Röntgenstrahlung
	MA/CR	Besichtigung zu 6
	MA	7. Pulverdiffraktometrie I (Informationen, Indizierung usw.) 7.1. Methoden und Geometrien 7.2. Informationen aus Pulverdiffraktogrammen
Do	MA	7.3. Indizierungsübung I
	MA	8. Intensitäten, Phasenproblem 8.1. Atomformfaktor 8.2. Strukturfaktor 8.3. Phasenproblem 8.4. Korrekturfaktoren 8.5. Intensitätsberechnung
Fr	MA	7.3. Indizierungsübung II
	CR	9. Einkristallstrukturbestimmung 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: <http://portal.uni-freiburg.de/fkchemie/lehre> bzw. http://ruby.chemie.uni-freiburg.de/Vorlesung/m+k_krist_beug.html
- 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).
- G. Phillips, University of Wisconsin, Madison (XRAYVIEW3.0)
- Strukturzeichenprogramm DRAWXTL: <http://www.lwfinger.net/drawxtl>
- R. B. Neder, Th. Proffen: <http://www.lks.physik.uni-erlangen.de/diffraction/> (DISCUS)