



## Sommerschule "Kristallographie"

### 9. Intensivkurs: "Grundlagen der Einkristallstrukturbestimmung"

vom 19. bis 23. September 2016

im ehem. Kloster [Hardehausen](#) bei Warburg / Westf.



Veranstalter / Dozenten  
Zielgruppe / Inhalte  
Programm  
Lokalität / Unterkunft  
Anmeldung / Gebühren  
Anreise / Hinweise



## 9. Intensivkurs: "Grundlagen der Einkristallstrukturbestimmung"

### Veranstalter

Veranstalter der „Sommerschule Kristallographie“ ist der Arbeitskreis "Molekülverbindungen" der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK).

### Dozenten / Tutoren

Michael Bolte, Frankfurt

Beatrice Braun, Berlin

Ulli Englert, Aachen

Ulrich Flörke, Paderborn

Peter G. Jones, Braunschweig

Martin Nieger, Helsinki

Dieter Schollmeyer, Mainz

Christoph Wölper, Essen

### Organisation

Dr. Ulrich Flörke

Anorganische und Analytische Chemie

Universität Paderborn

Warburgerstr. 100

D-33098 Paderborn

ulrich.floerke@upb.de

Tel.: 05251-602496



## 9. Intensivkurs: "Grundlagen der Einkristallstrukturbestimmung"

Der Kurs richtet sich in erster Linie an den wissenschaftlichen Nachwuchs (Doktoranden, MSc). Er verfolgt das Ziel, Einblicke in die zugrundeliegenden Theorien der Diffraktometrie, Strukturlösung und –verfeinerung zu verschaffen, da dieses Wissen (immer noch, immer mehr) nötig ist, um allgegenwärtige Fallen der heutigen "black-box"-Verfahren zu erkennen und zu vermeiden.

Die Teilnehmer sollten deshalb bereits erste Erfahrungen mit der Strukturanalyse gesammelt haben, um von diesem Kurs maximal zu profitieren.

Neben Vorlesungen, die von Experten gehalten werden, stellt die Erarbeitung des Lehrstoffs in kleinen Tutorengruppen unter Anleitung von erfahrenen Kristallographen einen wesentlichen Aspekt des Kurses dar.

### Inhalte sind u.a. :

**Diffraktometrie:** Kristallauswahl, -montage, -züchtung, Reflexsuche, -indizierung, Orientierungsmatrix, Gitterkonstanten, Messparameter ....

**Integration:** Flächenindizierung, Datenreduktion, Absorptionskorrektur ....

**Strukturfaktoren, Symmetrie:** Intensitätssymmetrie von Beugungsmustern, systematische Auslöschungen, International Tables, Gruppen- / Untergruppenbeziehungen, Raumgruppenbestimmung, E-Werte, anomale Dispersion, E-Wertstatistik ....

**Strukturlösung:** Fouriertransformationen, Patterson, direkte Methoden, Ursprungsfixierung, Problemfälle .....

**Strukturverfeinerung:** Least-Squares-Verfahren, Statistik, Standardabweichung, Fehlordnung, Zwillinge, anisotrope Auslenkungsparameter, absolute Konfiguration, Restraints, Constraints, Wasserstoffatome ....

**Dateninterpretation:** Nichtbindende Wechselwirkungen, chemische Plausibilität, Fehlinterpretationen .....



## 9. Intensivkurs: "Grundlagen der Einkristallstrukturbestimmung"

### Programm (vorläufiger Zeitplan)

Zeit	Montag	Dienstag	Mittwoch	Donnerstag	Freitag
08:00	Anreise	Frühstück	Frühstück	Frühstück	Frühstück
09:00	Anreise und Registrierung	Diffraktometrie (Nieger)	Patterson-Methode (Jones)	Least-Squares Verfahren (Bolte)	(Fehl)Interpretation Nichtbindende WW (Jones)
		Diffraktometrie	Patterson-Methode	Strukturverfeinerung (Flörke)	
12:00	Mittagessen	Mittagessen	Mittagessen	Mittagessen	Mittagessen und Abreise
13:15 13:30	Eröffnung Symmetrie (Englert)	Diffraktometrie	Direkte Methoden (Bolte)	Strukturverfeinerung (Flörke)	
15:00	Kaffeepause	Kaffeepause	Kaffeepause	Kaffeepause	
15:30	Strukturfaktoren (Englert)	Fouriertransformation (Bolte)	Direkte Methoden Dual-Space Methoden (Englert)	Constraints/Restraints Fehlordnung Wasserstoffatome Zwillinge (Schollmeyer)	
18:00	Abendessen	Abendessen	Abendessen	Abendessen	
19:00	Diverse Vergnügungen wie	Wanderung, Kegeln,	Volleyball,	Kristallographie...?	



## 9. Intensivkurs: "Grundlagen der Einkristallstrukturbestimmung"

Der Intensivkurs wird in der [Landvolkshochschule Hardehausen](#) bei Scherfede in der Nähe von Warburg / Westfalen stattfinden. Diese befindet sich in einem ehemaligen Kloster in wundervoller, von Wald umschlossener [Umgebung](#) und ist in idealer Weise zur Durchführung einer "Sommerschule" geeignet. Das Haus verfügt über ausreichend Hörsäle, sowie die verschiedensten audiovisuellen Hilfsmittel. Zur Entspannung stehen ein Hallenschwimmbad, eine Turnhalle, eine Kegelbahn, Tischtennisräume sowie eine Weinstube zur Verfügung. Wandermöglichkeiten in der näheren Umgebung können schöner kaum gedacht werden.

Für die **Unterkünfte** stehen den Teilnehmern Einzelzimmer zur Verfügung, die alle mit eigener Dusche und WC ausgestattet sind. Die Benutzung der Freizeitanlagen (Turnhalle, Schwimmbad, Kegelbahn, Tischtennis, etc) ist in den Teilnahmegebühren enthalten.





## 9. Intensivkurs: "Grundlagen der Einkristallstrukturbestimmung"

### Anmeldung

Interessenten werden gebeten sich möglichst per e-mail bei ***ulrich.floerke@upb.de*** zu melden (ansonsten siehe Adresse auf Seite "Veranstalter und Dozenten").

Eine Anmeldebestätigung und ggf. das 2. Zirkular werden dann automatisch zugeschickt.

Wegen der intensiven Unterrichtsform und dem beschränkten Raumangebot im Kloster Hardehausen stehen nur 36 Plätze für Teilnehmer zur Verfügung.

Die Erfahrungen der letzten Sommerschulen haben gezeigt, dass immer weit mehr Anmeldungen vorliegen, als Plätze zur Verfügung stehen. Es wird daher um rechtzeitige Anmeldung gebeten.

### Teilnahmegebühren

Die Teilnahmegebühren betragen für

- |                                |            |
|--------------------------------|------------|
| - DGK-Mitglieder               | Euro 360,- |
| - andere Hochschulangehörige   | Euro 380,- |
| - Teilnehmer aus der Industrie | Euro 490,- |

Die Gebühren beinhalten Vollpension mit 4 Mahlzeiten pro Tag, Kaffee/Tee/Getränke, Einzelzimmer mit Dusche/WC; Tagungsunterlagen.



## 9. Intensivkurs: "Grundlagen der Einkristallstrukturbestimmung"

### Anreise

#### **Mit dem Auto:**

Über die A44 (Dortmund – Kassel) kommend bis Abfahrt „Diemelstadt“. Ab dort auf der B252 Richtung Scherfede, dort abbiegen auf die B68 Richtung Paderborn, dann nach ca 750 m nach links abbiegen Richtung Hardehausen und weiterer Beschilderung folgen.

In Hardehausen dann nach rechts zur „Landvolkshochschule Anton Heinen“ abbiegen und durch das Tor immer geradeaus bis vor das weiße Tagungs- und Verwaltungsgebäude fahren.

#### **Mit der Bahn:**

Strecke Dortmund - Kassel mit IC / ICE (leider kaum noch im 2-Studentakt) oder RE bis „Warburg“. Ab dort zu ermäßigten Gebühren (Stichwort Hardehausen) Taxi.

#### **Weitere Hinweise:**

Sofern Sie vegetarische/vegane Ernährung möchten, setzen Sie sich bitte einige Tage vor Anreise direkt mit dem Empfang Hardehausen, Tel. 05642-982311 in Verbindung.

E-mails können u. U. im Nirvana des Internet verschwinden:

falls Sie auf Anfragen von mir (Flörke) nicht innerhalb von 2-3 Tagen eine Antwort bekommen, ist das Telefon (05251-602496) eine gute Alternative - es sei denn, ich bin im Urlaub ;-).