



## Sommerschule "Kristallographie"

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

vom 23. bis 27. August 2021

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



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



## 11. Intensivkurs: "Grundlagen der Einkristallstrukturbestimmung"

### Veranstalter

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

### Dozenten / Tutoren

Dr. Michael Bolte, Goethe Universität-Frankfurt am Main  
Dr. Beatrice Cula, Humboldt Universität zu Berlin  
Dr. Christian Kleeberg, Technische Universität Braunschweig  
Dr. Daniel Kratzert, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg  
Dr. Martin Nieger, University of Helsinki  
Dr. Dieter Schollmeyer, Johannes Gutenberg-Universität Mainz  
Dr. Christoph Wölper, Universität Duisburg-Essen

### Organisation

Dr. Beatrice Cula  
Institut für Chemie  
Humboldt Universität zu Berlin  
Brook-Taylor-Str. 2  
D-12489 Berlin  
[beatrice.cula@hu-berlin.de](mailto:beatrice.cula@hu-berlin.de)  
Tel.: 030 2093 7444



## 11. 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 .....



## 11. Intensivkurs: "Grundlagen der Einkristallstrukturbestimmung"

### Programm (vorläufiger Zeitplan)

| Zeit  | Montag, 23. 8.               | Dienstag, 24. 8.      | Mittwoch, 25. 8.        | Donnerstag, 26. 8.    | Freitag, 27. 8.      |
|-------|------------------------------|-----------------------|-------------------------|-----------------------|----------------------|
| 8:00  | Anreise                      | Frühstück             | Frühstück               | Frühstück             | Frühstück            |
| 9:00  | Anreise                      | Diffraktometrie       | Patterson-Methode       | Strukturverfeinerung  | (Fehl)Interpretation |
|       | ab ca 10:00<br>Registrierung |                       |                         |                       |                      |
| 12:00 | Mittagessen                  | Mittagessen           | Mittagessen             | Mittagessen           | Mittagessen/Abreise  |
| 13:30 | Eröffnung                    | Diffraktometrie       | Direkte Methoden        | Constraints/Restrains |                      |
|       | Reziprokes Gitter            |                       | Intrinsic Phases        |                       |                      |
|       | Elementare Grundlagen        |                       | Dual-Space-Methoden     |                       |                      |
|       | Symmetrie                    |                       |                         |                       |                      |
| 15:00 | Kaffeepause                  | Kaffeepause           | Kaffeepause             | Kaffeepause           |                      |
| 15:30 | Strukturfaktoren             | Fouriertransformation | Least-Squares Verfahren | Wasserstoffatome      |                      |
|       |                              |                       |                         | Zwillinge             |                      |
| 18:00 | Abendessen                   | Abendessen            | Abendessen              | Abendessen            |                      |



## 11. 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.





## 11. Intensivkurs: "Grundlagen der Einkristallstrukturbestimmung"

### Anmeldung

Interessenten werden gebeten sich möglichst per e-mail [beatrice.cula@hu-berlin.de](mailto:beatrice.cula@hu-berlin.de) zu melden.

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 475,-   |
| - andere Hochschulangehörige   | Euro 495,-   |
| - Teilnehmer aus der Industrie | Nach Anfrage |

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



## 11. 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-Stundentakt) 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.