



Sommerschule "Kristallographie"

11. Intensivkurs: "Grundlagen der Einkristallstrukturbestimmung"

vom 22. bis 26. August 2022

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. Ulrich Flörke, Universität Paderborn
Dr. Christian Kleeberg, Technische Universität Braunschweig
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



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, 22. 8.	Dienstag, 23. 8.	Mittwoch, 24. 8.	Donnerstag, 25. 8.	Freitag, 26. 8.
8:00	Anreise	Frühstück	Frühstück	Frühstück	Frühstück
9:00	Anreise	Datenreduktion	Strukturverfeinerung	Übungen	Validierung
	ab ca 10:00 Registrierung	Fouriertransformation	Übungen		(Fehl)Interpretation
12:00	Mittagessen	Mittagessen	Mittagessen	Mittagessen	Mittagessen/Abreise
13:30	Eröffnung	Patterson-Methode	Constraints/Restraints	Wasserstoffatome	
	Reziprokes Gitter	Direkte Methoden	Fehlordnung	Zwillinge	
	Elementare Grundlagen			Übungen	
	Symmetrie				
15:00	Kaffeepause	Kaffeepause	Kaffeepause	Kaffeepause	
15:30	Strukturfaktoren	Intrinsic Phases	Übungen	Übungen	
	Diffraktometrie	Dual-Space-Methoden			
		Least-Squares Verfahren			
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 zu melden.

Wegen dem beschränkten Corona-Bedingungen im Kloster Hardehausen stehen dieses Jahr **nur 25 Plätze** für Teilnehmer zur Verfügung.

Teilnahmegebühren

Die Teilnahmegebühren betragen für

- | | |
|--------------------------------|--------------|
| - DGK-Mitglieder | Euro 515,- |
| - andere Hochschulangehörige | Euro 545,- |
| - 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.