

[CW-AAC.1] <i>X-ray powder diffraction</i>	Röntgenpulver- diffraktometrie	Wahlpflichtmodul	5 - 12 CP (insg.) = 150 - 360 h				3 - 9 SWS
			Kontaktstudium 3 - 9 SWS / 45 - 135 h	Selbststudium 105 - 225 h			
Inhalte							
<p><u>Vorlesung</u>: kristallographische Grundlagen (Kristallsymmetrie, Benutzung der International Tables of Crystallography); Grundlagen der Röntgenbeugung an Pulvern; Aufbau eines Diffraktometers; Probenpräparation; Messverfahren; Indizierung; qualitative und quantitative Phasenanalyse; Bestimmung von Kristallitgröße und Kristallqualität; Bestimmung von amorphen Anteilen in der Probe; Kristallstrukturbestimmung aus Röntgenpulverdiagrammen; Rietveld-Verfeinerung; Untersuchung nanokristalliner und amorpher Festkörper; Paarverteilungsfunktionen; industrielle Anwendungen; Kristallstrukturvorhersage als Methode zur Strukturlösung und zur Überprüfung von aus Pulverdiagrammen bestimmten Kristallstrukturen; Elektronenbeugung (Aufbau eines Transmissions-Elektronenmikroskops, Aufnahmeverfahren, Auswertung von Elektronenbeugungsbildern (kurz)); Historisches; weitere aktuelle Forschungsthemen aus dem Bereich Röntgenpulverdiffraktometrie.</p> <p><u>Praktikum</u> (optional): Messung von Röntgenpulverdiagrammen; Indizierung; Durchführung von qualitativen und quantitativen Phasenanalysen; eventuell Durchführung einer einfachen Kristallstrukturbestimmung</p> <p><u>Seminar</u> (optional): Themen aus dem Bereich der Röntgenstrukturanalyse und der Röntgenpulverdiffraktometrie.</p> <p><i>Die Vorlesung ist verpflichtend. Das Praktikum und das Seminar sind optional.</i></p>							
Lernergebnisse / Kompetenzziele							
<p><u>Vorlesung</u>: Die Studierenden machen sich mit der Röntgenpulverdiffraktometrie als wichtigem Instrument zur Analyse von Festkörpern vertraut. Sie lernen die Bedeutung von Faktoren wie Probenpräparation, Aufnahmeverfahren, Kristallqualität, Kristallitgröße und Textureffekten kennen und sind in der Lage, Röntgenpulverdiagramme auszuwerten und die Ergebnisse einer Kristallstrukturbestimmung aus Pulverdaten zu interpretieren.</p> <p><u>Praktikum</u>: Die Studierenden sind in der Lage, Pulverdiagramme zu messen, quantitative und qualitative Phasenanalysen durchzuführen und die Pulverdiagramme im Hinblick auf verschiedene Fragestellungen detailliert auszuwerten.</p> <p><u>Seminar</u>: Die Studierenden sind in der Lage, sich in ein Thema aus dem Gebiet der Röntgenstrukturanalyse oder der Röntgenpulverdiffraktometrie einzuarbeiten, und dies wiederzugeben.</p>							
Teilnahmevoraussetzungen für Modul bzw. für einzelne Lehrveranstaltungen des Moduls							
Praktikum: Schriftliche Abschlussprüfung zur Vorlesung.							
Empfohlene Voraussetzungen							
Vorlesung Röntgenstrukturanalyse Seminar: Vorheriger oder paralleler Besuch der Vorlesungen Röntgenstrukturanalyse und Röntgenpulverdiffraktometrie							
Organisatorisches							
Für das Praktikum und Seminar ist eine Anmeldung erforderlich. Die Regularien werden zu Beginn des Praktikums bzw. des Seminars bekannt gegeben. Praktikum und Seminar werden je nach organisatorischen Möglichkeiten angeboten.							
Zuordnung des Moduls (Studiengang / Fachbereich)		M.Sc. Chemie / FB14					
Verwendbarkeit des Moduls für andere Studiengänge		B.Sc. Geowissenschaften, M.Sc. Geowissenschaften / FB11; M.Sc. Physik / FB13					
Häufigkeit des Angebots		Vorlesung: Einmal im Jahr (im Wintersemester) Praktikum und Seminar: nach Ankündigung					
Dauer des Moduls		1-2 Semester					
Modulbeauftragte / Modulbeauftragter		Prof. M. U. Schmidt					
Studiennachweise/ ggf. als Prüfungsvorleistungen							
Teilnahmenachweise		Praktikum und Seminar: Regelmäßige und aktive Teilnahme					
Leistungsnachweise		- Praktikum (optional): Protokoll - Seminar (optional): Präsentation (30 Min.) oder Fachgespräch (30 Min.)					
Lehr- / Lernformen		Vorlesung, Seminar, Praktikum					
Unterrichts- / Prüfungssprache		Deutsch					
Modulprüfung		Form / Dauer / ggf. Inhalt					
Modulabschlussprüfung bestehend aus:		Vorlesung: Schriftliche Prüfung (Klausur 120 Min.)					
kumulative Modulprüfung bestehend aus:							
Bildung der Modulnote bei kumulativen Modulprüfungen:							
		LV-Form	SWS	Semester CP			
				1	2	3	4
	Pflicht: Röntgenpulverdiffraktometrie	V	3	5		5	
	Optional: Röntgenpulverdiffraktometrie	P	4	4			
	Optional: Röntgenstrukturanalyse und Röntgenpulverdiffraktometrie	S	2	3			
	SUMME		3 - 9	5 - 12			