

Modultitel	Kristallstrukturanalyse Crystal Structure Analysis
Modulnummer/-kürzel	CHE 127
Verwendbarkeit	M.Sc. Chemie: Wahlpflichtmodul M.Sc. Lebensmittelchemie: Wahlpflichtmodul
Voraussetzungen für die Teilnahme	Verbindlich: keine Empfohlen: Veranstaltungen zum Thema Festkörper- und Strukturchemie sowie Symmetrie
Modulverantwortliche(r)	Dr. F. Hoffmann
Sprache	Deutsch oder Englisch, i.d.R. Deutsch
Qualifikationsziele	Die Studierenden sollten nach Abschluss des Moduls alle Vorgänge, die beim Durchgang von Röntgenstrahlung durch kristalline Materie passieren, verstanden haben und in der Lage sein, diese zu skizzieren. Die Studierenden sollten nach Abschluss des Moduls die Gesamtheit der Merkmale eines Beugungsmusters erklären können. Die Studierenden sollten nach Abschluss des Moduls die wesentlichen Unterschiede beim experimentellen Aufbau und den experimentellen Anforderungen hinsichtlich der Strukturaufklärung von Kleinmolekülen und biologischen Makromolekülen vergleichend erklären können. Die Studierenden sollten nach Abschluss des Moduls ebenso die Limitationen und Möglichkeiten der Struktur-Funktions-Analyse von Biomakromolekülen unter Nutzung moderner Synchrotrone und freier Elektronenlaser benennen und erklären können. Die Studierenden sollten nach Abschluss des Moduls in der Lage sein, die Programme zur Auswertung von Einkristalldatensätzen von kleinen Molekülen und Biomakromolekülen zu bedienen und die Güte der selbständig verfeinerten Strukturmodelle zu beurteilen.
Inhalt	Entdeckung und Natur der Röntgenstrahlung (W.C. Röntgen), erstes Röntgenbeugungsexperiment an Kristallen durch Max v. Laue, Erzeugung von Röntgenstrahlen durch Röntgenröhren, Synchrotronquellen, Spektrum einer Röntgenröhre, Monochromatisierung von Röntgenstrahlen, Entstehung von Beugungsbildern (Streuung und Interferenz), Braggsches Gesetz und Miller-Indizes, reales und reziprokes Gitter, Symmetrie des Beugungsmusters, Laueklassen, Friedelsches Gesetz, Ewald-Kugel, Intensität von Röntgenreflexen, Atomformfaktor, Temperaturfaktor, Fehlordnungen, Strukturamplitude und -faktor, Eulersche Formel, vom Beugungsbild zur Kristallstruktur, Raumgruppenbestimmung, systematische Auslöschungen, Fouriertransformationen, Phasenproblem, Patterson-Methode, direkte Methoden, Charge-Flipping-Algorithmus, Aufbau und Funktion von Biomakromolekülen, Methoden zur Erzeugung von Proteinkristallen, Phasierungsmethoden zur Lösung des Phasenproblems bei Biomakromolekülen, Iterativer Modellbau und Strukturverfeinerung.

	Praktischer Umgang mit den Programmen ShelXTL, WinGX, Phenix, Coot und Pymol.				
Lehrveranstaltungen und Lehrformen	a) Kristallstrukturanalyse Crystal Structure Analysis (V)	1 SWS			
	b) Praktische Übungen zur Kristallstrukturanalyse Practical Exercises of Crystal Structure Analysis (Ü)	2 SWS			
	c) Kristallstrukturanalyse von Proteinen Crystal Structure Analysis of Proteins (V)	0.5 SWS			
	d) Praktische Übungen zur Strukturanalyse von Proteinen Practical Exercises of Crystal Structure Analysis of Proteins (Ü)	0.5 SWS			
Arbeitsaufwand (Teilleistungen und insgesamt)		LP	P (Std)	S (Std)	PV (Std)
	a) Kristallstrukturanalyse	1,5	14	21	20
	b) Praktische Übungen zur Kristallstrukturanalyse	3	28	28	25
	c) Kristallstrukturanalyse von Proteinen	0.75	7	10	5
	d) Praktische Übungen zur Strukturanalyse von Proteinen	0.75	7	10	5
	Gesamtaufwand	6	56	69	55
Voraussetzungen für Teilnahme an und Art der Studien- und Prüfungsleistungen	Voraussetzungen zur Modulprüfung: keine Art der Modulprüfung: i.d.R. mündliche Prüfung, abweichend Klausur (benotet) Prüfungssprache: i.d.R. Deutsch				
Dauer	1 Semester				
Häufigkeit des Angebots	Jährlich im Sommersemester				
Literatur	W. Borchardt-Ott, „Crystallography“, Springer, 3rd Edition, 2012 F. Hoffmann, „Introduction to Crystallography“, Springer Nature, 1st Edition, 2020 W. Massa, „Kristallstrukturbestimmung“, Springer Spektrum, 8. Aufl., 2016 Li-Ling Ooi, „Principles of X-ray Crystallography“, Oxford University Press, 1st Edition, 2010 W. Clegg, „Crystal Structure Determination“, Oxford University Press, 2nd Edition, 2015 B. Rupp, „Biomolecular Crystallography“, Garland Science, 1 st Edition, 2009				