

Angewandte Mineralogie / Röntgendiffraktometrie



Modulnummer B 54	Workload 240 h	Umfang 8 LP	Dauer Modul 1 Semester	Turnus Jährlich, Beginn WS
Modulbeauftragter	ADir Dr. Harald Euler			
Anbietende Lehrinheit(en)	Geowissenschaften			
Beteiligte Dozenten	Euler			
Verwendbarkeit des Moduls	Studiengang		Modus	Studiensemester
	B.Sc. Geowissenschaften		Wahlpflicht	5. Semester
Lernziele	<p>Die Studierenden sollen den Einsatz der Röntgen-Pulverdiffraktometrie theoretisch und praktisch erlernen. Dabei werden die Techniken der qualitativen und quantitativen röntgenographischen Phasenanalyse angewendet sowie die Grundlagen und die Anwendung der Rietveld-Methode zur Phasenanalyse und Kristallstrukturbestimmung vermittelt. Die Studierenden sollen dabei in den Übungen selbstständig den vollständigen Gang röntgenographischer Analysen an Pulverproben erlernen, von der Probenpräparation, über die Messung, bis hin zur Reduktion der Rohdaten und der Datenauswertung. Schwerpunktmäßig werden dabei technisch relevante Proben untersucht (einzelne Mineralphasen, Gesteine, Keramiken, Gläser, Zemente, Braun- und Steinkohleflugaschen). Das Seminar dient der Präsentation wissenschaftlicher Sachverhalte aus der Röntgendiffraktometrie (10-minütiger Kurzvortrag).</p>			
Schlüsselkompetenzen	Fähigkeiten im analytischen Experimentieren, interdisziplinäre Anwendung geowissenschaftlicher Methoden, selbstständiges wissenschaftliches Arbeiten			
Inhalte	<p>In diesem Modul soll anhand folgender Lehrinhalte eine intensive Einführung in die Röntgen-Pulverdiffraktometrie gegeben werden:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Erzeugung, Nachweis und Absorption von Röntgenstrahlung (Röntgenröhre, Filter, Monochromatoren, Detektoren) 2. Beugung von Röntgenstrahlen (Laue-Gleichungen, Ewald'sche Konstruktion) 3. Das Kristallgitter (Miller'sche Indizes, Netzebenenabstände) 4. Reziprokes Gitter, Symmetrien, Kristallklassen, Raumgruppen, Auslöschungsregeln 5. Indizierung von Röntgenreflexen bei bekannter und bei unbekannter Elementarzelle und unterschiedlichen Symmetrien 6. Verfeinerung von Gitterkonstanten mit dem Least-Squares-Verfahren 7. Systematische Fehler in 2θ und Intensitätsfehler 8. Probenpräparation und Messung von Pulverdiagrammen (Debye-Scherrer- und Bragg-Brentano-Geometrie) 9. Datenreduktion (Absorptions-, LP- und Untergrundkorrekturen, Glättung, u.a.) 			

	<ol style="list-style-type: none">10. Auswertung von Pulverdiffraktogrammen: Gitterkonstantenbestimmung, Korngrößenbestimmung, Indizierung von Reflexen, qualitative und quantitative röntgenographische Phasenanalyse (Methoden des „Inneren und Äußeren Standards“, Bestimmung des „Amorphen Anteils“), Profilanalyse, berechnete Diffraktogramme11. Rietveld-Methode (Mathematische Grundlagen, Profilverfeinerungsverfahren, Profilkfunktionen, Gütekriterien, Verfeinerungsstrategien, Rietveld-Software (TOPAS 4.2))12. Kristallographische Datenbanken (JCPDS, PDF-2, ICSD, FindIt)13. Präsentation der Ergebnisse
--	--

B 54 Angewandte Mineralogie / Röntgendiffraktometrie

Teilnahme- voraussetzungen	Modul B 02 Kristallographie und Kristallchemie			
Veranstaltungen	Lehrform, Thema (Gruppengröße)	SWS	Workload [h]	LP
B 5401 – WS	Vorlesung (12) Angewandte Mineralogie/Röntgendiffraktometrie	2	90	3
B 5411 – WS B 5412 – WS	Übungen (2 x 6 = 12) zu Angewandte Mineralogie/Röntgendiffraktometrie	1	60	2
B 5421 – WS B 5422 – WS	Praktikum (2 x 6 = 12) zu Angewandte Mineralogie/Röntgendiffraktometrie	2	60	2
B 5433 – WS	Seminar (12) zu speziellen Themen aus der Röntgendiffraktometrie	1	30	1
Unterrichtssprache	Deutsch			
Prüfungsnummer	Prüfungen			
642201541	Klausur (90 min.)	benotet		
Studienleistungen				
u.a. als Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung	Regelmäßige Übungsteilnahme ist Voraussetzung für die Zulassung zur Prüfung. Protokolle zu den Versuchen B 5411/12/13 (20 Seiten) Teilnahme am Seminar mit einem Kurzvortrag (10 Minuten)	unbenotet		
Sonstiges	Literatur: <ul style="list-style-type: none"> - Skript zur Vorlesung - Allmann, R.: Röntgenpulverdiffraktometrie (Springer) - Krischner, H. & Koppelhuber-Bitschnau, B: Röntgenstrukturanalyse und Rietveldmethode (Teubner) - Klug, H.P. & Alexander, L.E.: X-Ray Diffraction Procedures, (John Wiley & Sons) 			