

## GDCh- und Chemisches Kolloquium

Der GDCh-Ortsverband Oldenburg und das Institut für Reine und Angewandte Chemie der Carl von Ossietzky Universität Oldenburg laden zu einem Vortrag

**von** Prof. Dr. Reinhart Ahlrichs  
Institut für Physikalische Chemie, Universität Karlsruhe (TH)

**zum Thema** **Rechnergestützte Strukturbestimmung großer Cluster:  
Röntgenbeugung und DFT**

herzlich ein.

**Termin:** **Donnerstag, den 14.12.2006 17 Uhr c.t.**  
Großer Hörsaal der Naturwissenschaften, W3-1-161,  
Carl-von-Ossietzky-Straße 9-11

**Einladender** Prof. Dr. Thorsten Klüner

Röntgenbeugungsmethoden (XRD) sind das mächtigste Instrument quantitativer Strukturanalyse. Die Bedeutung der XRD für die Chemie kann kaum überschätzt werden, da sie die wesentlichen Moleküldaten liefert: Topologie, Bindungsabstände und -winkel und oft auch die chemische Zusammensetzung, wenn andere Methoden der Elementaranalyse versagen. Aber auch XRD-Methoden stoßen an Grenzen, wie die folgende Liste bekannter Probleme zeigt.

1. Kristallfehlordnungen
2. Statistische Verteilung mehrerer Isomere
3. Atome ähnlicher Ordnungszahl

Die dabei auftretenden Probleme können oft mit Hilfe von DFT-Rechnungen geklärt werden, womit Struktur und Zusammensetzung bestimmt werden.

GDCh-Ortsverband Oldenburg  
Der Vorsitzende

Institut für Reine und Angewandte Chemie  
Der Direktor