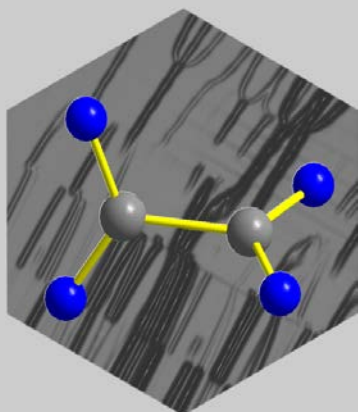


DMG Doktorandenkurs

Grundlagen und Anwendung der Rietveld Verfeinerung



R. E. Dinnebier

März 4 – 7, 2013

Max-Planck-Institut für Festkörperforschung
Heisenbergstrasse 1
D-70569 Stuttgart
Germany

<http://www.fkf.mpg.de/xray>

*In Kooperation mit den Universitäten
Tübingen und Stuttgart*

Kursbeschreibung

Ziel des Intensivkurses ist es, die Grundlagen der Rietveld Methode in Theorie und Praxis zu vermitteln. An Hand von ausgewählten Beispielen soll der gesamte Prozess von der Profilanpassung mittels Fundamentalparameter bis hin zur Bestimmung der Atomlagen mit anschließender Verfeinerung dargelegt werden. Im Einzelnen werden folgende Themen behandelt:

- Grundlagen der Pulverdiffraktometrie
- Whole Powder Pattern-Fitting (WPPF) mit Fundamentalparametern und Berücksichtigung komplexer Reflexprofile
- Korrekte Wahl von Korrekturfaktoren (LP-Faktor, Absorption, Mikroabsorption, Extinktion, Vorzugsorientierung)
- Methoden zur Entwicklung eines Startmodells für die Kristallstruktur.
- Erfolgreiche Anwendung von Penalty-Funktionen, Constraints, Restraints und Rigid Bodies
- Erfolgreiche Erstellung von Rigid Bodies (flexible Polyeder, Moleküle, z-Matrizen)
- Strukturlösungsstrategien mit globalen Optimierungsmethoden im Direktraum und Charge-Flipping.
- Einsatz der Differenz-Fourier Methode in Kombination mit Rietveld-Verfeinerungen.
- Verfeinerung struktureller Details mit Hilfe der Rietveld-Verfeinerung
- Quantitative Phasenanalyse mit der Rietveld-Methode
- Sequentielle und parametrisierte Rietveld-Verfeinerungen in Abhängigkeit externer Variablen.
- Kritischer Betrachtung der Aussagekraft von Kristallstrukturen aus Röntgen-Pulverdaten.
- Erstellung von Rietveld-Plots für Publikationen.

Ort und Zeit:

Treffpunkt am 4. März 2013, um 8.30 vor dem Seminarraum 4D2 des Max-Planck-Institutes für Festkörperforschung. Kursdauer ungefähr 9.00 – 15.30 Uhr

Referenten:

Robert E. Dinnebier (MPI, Stuttgart) und Mitarbeiter

Kursgebühr:

50 Euro für Studenten /Doktoranden/ Post-Docs (inklusive Abendbuffet)

Anreise:

Wegbeschreibungen finden sich auf der Institutswebseite unter: <http://www.fkf.mpg.de/>

Sprache

Deutsch und Englisch

Übungen

Für die Übungen ist ein Laptop (Windows XP, 7) mit Administratorrechten erforderlich. Verwendet wird das Programm TOPAS 4.2.

Information

Weitere Informationen demnächst unter:

<http://www.fkf.mpg.de/xray>

Unterkunft

Eine Liste von Unterkünften in der Umgebung wird online zur Verfügung gestellt. Unterkunft muss von den Teilnehmern selbst gebucht werden. Ein kleines Kontingent an Zimmern steht zudem im Gästehaus des MPI bereit und wird auf der Basis „first-come-first-served“ vergeben. (Tel: 0711-689-0)

Teilnehmerzahl

Max. 15

Anmeldeformular

Ja, ich möchte an dem Doktorandenkurs *Grundlagen und Anwendung der Rietveld Verfeinerung* vom 4.-7. März 2013 in Stuttgart teilnehmen.

Name: _____ Position: _____

Organisation: _____

Adresse: _____

Stadt: _____ Land: _____ Postleitzahl: _____

Telefon #: _____ Fax #: _____

E-mail #: _____

Unterschrift: _____

Die Kursgebühr von 50 Euro (für Studenten/Doktoranden/Post-Docs ist am Tag der Ankunft zu entrichten.

(Kursgebühr für Teilnehmer aus der Industrie 400 Euro, sofern Plätze frei sind)




Bitte schicken Sie das ausgefüllte Anmeldeformular an:

Prof. Dr. Robert Dinnebier
Max-Planck-Institut für Festkörperforschung
Heisenbergstrasse 1
D-70569 Stuttgart
Germany

oder per Fax/ E-mail:

Fax #: (--49) 711-689-1502
E-mail: r.dinnebier@fkf.mpg.de

Wenn Sie Fragen haben:

 #: (--49) 711-689-1503