

Grundlagen und Anwendung der Rietveld-Verfeinerung

Shortcourse der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft (DMG) zusammen mit der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) - Arbeitskreis Pulverdiffraktometrie

Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Stuttgart, 9.- 12. März 2014

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), Fundamentalparameter, komplexe Reflexprofile
- Erstellung von Instrumentenprofilen für verschiedene Diffraktometer
- Korrekturfaktoren: LP-Faktor, Absorption, Mikroabsorption, Extinktion, Vorzugsorientierung
- Methoden zur Entwicklung eines Startmodells für die Kristallstruktur
- Anwendung von Penalty-Funktionen, Constraints, Restraints etc.
- Erstellung von Rigid Bodies (flexible Polyeder, Moleküle, z-Matrizen)
- Strukturlösungsstrategien, globale Optimierungsmethoden im Direktraum, Charge-Flipping
- Einsatz der Differenz-Fourier-Methode in Kombination mit Rietveld-Verfeinerungen
- Verfeinerung mikrostruktureller Parameter mit Hilfe der Rietveld-Verfeinerung
- Quantitative Phasenanalyse mit der Rietveld-Methode
- Vergleich verschiedener Methoden zur Bestimmung des amorphen Anteils
- Alternative Strukturbeschreibungen mittels Symmetrie- und Rotationsmoden
- Parametrisierung von Rietveld-Verfeinerungen (Makro-Programmierung)
- Die Aussagekraft von Kristallstrukturen aus Röntgen-Pulverbeugungsdaten
- Erstellung von Rietveld-Plots für Publikationen

Leitung: Prof. Dr. Robert E. Dinnebier (MPI, Stuttgart) und Mitarbeiter

Übungen: Für die Übungen ist ein Laptop (Windows XP, 7) mit Administratorrechten erforderlich. Verwendet wird das Programm TOPAS 4.2. Kurssprachen sind Deutsch und Englisch.

Gebühren, Teilnehmerzahl: Ca. 35 Teilnehmer, Studenten/Doktoranden/Post-Docs (inklusive Abendbuffet) 60 €, Interessenten aus der Industrie 400 € (sofern Plätze frei sind).

Nicht ortsansässige studentische DMG-Mitglieder und/oder DGK-Mitglieder können einen Zuschuss zu ihren Reisekosten erhalten.

Credits: Für die erfolgreiche Teilnahme an dem Kurs können 2 ECTS-Punkte vergeben werden (vorbehaltlich des Bestehens einer schriftlichen Prüfung).

Unterkunft: Selbstbuchung erforderlich - eine Liste von Unterkünften in der Umgebung wird online zur Verfügung gestellt. 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).

Rückfragen, Anmeldungen: Weitere Informationen, Anmeldeformular www.fkf.mpg.de/xray, Anmeldungen per FAX oder E-Mail an: Prof. Dr. Robert E. Dinnebier, Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Heisenbergstrasse 1, 70569 Stuttgart, Tel. (+49) (0)711 689 1503, Fax. (+49) (0)711 689 1502, r.dinnebier@fkf.mpg.de