

## DMG/DGK Doktorandenkurs

# *Grundlagen und Anwendung der Rietveld Verfeinerung*



R. E. Dinnebier



**März 6 – 9, 2017**

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

*in Kooperation mit den Universitäten  
Tübingen und Stuttgart  
und dem Arbeitskreis Pulverdiffraktometrie der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie*

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

## **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), Fundamentalparameter, komplexe Reflexprofile
- Erstellung von Instrumentenprofilen für Pulverdiffraktometer
- 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)
- Globale Optimierung stapelfehlgeordneter Kristallstrukturen
- Globale und lokale Optimierung der Paarverteilungsfunktion
- Erstellung von Rietveld-Plots für Publikationen

## **Ort und Zeit:**

Treffpunkt am Montag den 6. März 2017, um 8.30 Uhr vor dem Seminarraum 2P4 des MPI-IS (Heisenbergstrasse 3).

Kursdauer ungefähr 9.00 – 15.30 Uhr

## **Referenten:**

Robert E. Dinnebier (MPI, Stuttgart) und Mitarbeiter

## **Kursgebühr:**

60 Euro für Studenten /Doktoranden/ Post-Docs (inklusive Abendbuffet). Studentische DMG Mitglieder

bekommen einen Zuschuss von 50 Euro von der DMG. (Kursgebühr für Teilnehmer aus der Industrie 400 Euro, sofern Plätze frei sind).

### **Anreise:**

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

### **Sprache**

Vorträge in Englisch. Übungen Englisch und Deutsch

### **Übungen**

Für die Übungen ist ein Laptop (Windows 64-bit) mit Administratorrechten erforderlich. Verwendet wird das Programm TOPAS 5/6.

### **Information**

Weitere Informationen und das Anmeldeformular demnächst unter: <http://www.fkf.mpg.de/xray>

### **ECTS**

Für die erfolgreiche Teilnahme an dem Kurs können 2 ECTS (European Credit Transfer System) Punkte vergeben werden (Vorbehaltlich des Bestehens einer schriftlichen Prüfung).

### **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: 0711-689-1241)

### **Teilnehmerzahl**

Etwa 40

### **Anmeldungen bitte per WWW, E-mail oder Fax an folgende Adresse senden:**

Prof. Dr. Robert E. Dinnebier  
Max-Planck Institut für Festkörperforschung  
Heisenbergstrasse 1  
D-70569 Stuttgart  
Deutschland  
Tel: (+49) (0)711 689 1503  
Fax: (+49) (0)711 689 1502  
E-mail: [r.dinnebier@fkf.mpg.de](mailto:r.dinnebier@fkf.mpg.de)  
W W W : <http://www.fkf.mpg.de/xray>

## Organisatorisches:

- Der Workshop wird mit TOPAS 5/6 durchgeführt. Die Firma Bruker-AXS stellt freundlicherweise Demo-Lizenzen auf einen Codemeter-USB-Stick bereit, die dann im **WLAN** Netz zur Verfügung stehen werden. Sollten Sie einen eigenen Dongle für Topas haben, bringen Sie diesen bitte mit.
- Die Teilnahme ist **verbindlich**. Sollten Sie aus irgendeinem Grund nicht teilnehmen können, lassen Sie das den Organisator bitte rechtzeitig wissen, da der Kurs *pro-bono* ist und die Teilnahmegebühren die Kosten decken müssen.
- Die Kaffeepausen werden vom Max-Planck Institut für Festkörperforschung dankenswerterweise finanziert.
- Der Kurs dauert 4 Tage. Mit Rücksicht auf die anderen Teilnehmer und die zu erwartende Warteliste ist es nicht möglich den Kurs nur teilweise zu besuchen.
- Eigene Messdaten können selbstverständlich mitgebracht werden. Aus Zeitgründen können diese aber nur eingeschränkt behandelt werden. Bitte kontaktieren Sie den Kursleiter diesbezüglich rechtzeitig vor Beginn des Kurses.
- Es gibt eine Reisebeihilfe von 50 Euro/ Person für die studentischen Mitglieder der DMG, die nicht am Ort der Veranstaltung wohnen. Studenten, die während des Kurses ihren Beitritt zur DMG erklären, können ebenfalls in den Genuss der Reisebeihilfe kommen. Es ist möglich direkt bei der Registrierung ein DMG Anmeldeformular auszufüllen.
- Bitte stellen Sie sicher, dass Sie am Montag den 6. März spätestens um 8:30 Uhr anwesend sind, damit wir rechtzeitig um 9:00 Uhr anfangen können. **Treffpunkt ist das Foyer des MPI für Intelligente Systeme (ehemals Metallforschung), Heisenbergstrasse 3, vor dem Hörsaal 2P4.**