

“单晶结构解析，结构可视化及晶体学数据库使用”培训通知

1. 主题背景和培训必要性

单晶结构解析是表征化合物结构最直观，也是最有效的手段之一。通过单晶结构解析可获得化合物的原子排列信息，能很好地揭示材料深层的结构与性能之间的关系，从而有助于获得重要的学术研究成果，发表高水平的学术论文。目前许多研究工作者，尤其是从事药物合成，MOF，COF，团簇结构设计合成以及新型光电磁晶态材料等研究领域的，对晶体结构解析有重要需求。特别是对一些微小晶体，空间群难以确定、复杂无序、孪晶、手性绝对构型确定等较难解析的晶体结构束手无策。本次培训将在介绍单晶解析理论上，介绍应用目前最新的图形化（GUI）程序 Olex2 平台，通过加载 olex2 自带解析算法，以及 Shelxl2016、superFlip、Sir2014 等单晶结构解析程序解析单晶结构，运用包括经典 Direct Methods, Patterson Method 算法，以及最新发展的 Charge Flipping, Intrinsic Phasing, Structure Expansion 和 Dual Space 算法，展示新算法在结构解析方面的优势，并进一步提供同步辐射测试数据的处理方法；介绍基于 olex2 的最新插件包括 solvent mask, drawplus, reportplus 等的使用，逐步实现晶体的自动解析及自动生成发表文章所需要的各种表格及数据。提供实例讲解晶体结构解析的完整过程，包括如何检查对称性，晶胞转换，处理晶体无序、孪晶；如何利用 Platon 等晶体学程序辅助确定空间群、寻找乘晶矩阵、去除无法确定的溶剂衍射贡献等，以及如何进一步精修，利用 Encifer 完善 CIF 文件信息编辑，获得尽可能消除 A、B 类警告的 checkcif 报告，申请 CCDC 编号等满足文章发表的要求。最后讲解如何绘制晶体结构图，包括晶胞图、ORTEP 图、堆积图，拓扑结构分析等，结合晶体学数据库包括 CCDC、ICSD、Crystallography Open Database、Springer Materials, MaterialsProject 的检索使用，对 CIF 结构信息进行有效的提取、分析与利用，晶体学各种数据格式之间的相互转化。通过本次培训，可以让学员掌握晶体结构解析技术，处理一些常见的晶体结构解析问题，满足日常的晶体结构解析需要，学会绘制晶体图，检索晶体数据库，对晶体结构信息进行有效利用与提取，有助于发表高水平的学术论文。

2. 培训主要内容

1. 系统讲解晶体学解析相关理论基础；

2. 应用 Shelxl2016 程序解析单晶结构;
3. 应用 Olex2 程序解析单晶结构;
4. 应用 Charge Flipping 等新算法解析单晶结构;
5. 常见的晶体解析问题处理 (检查对称性, 晶胞转换, 无序、孪晶、去除溶剂衍射贡献等);
6. 如何完善 CIF 文件信息编辑, 尽可能消除 A、B 类警告;
7. 晶体图的绘制 (晶胞图、ORTEP 图、堆积图、氢键、 π - π 相互作用等);
8. 晶体数据库的检索与使用。

3. 涉及学科和研究领域

化学、材料、能源、物理学科中凡与晶体结构有关的研究领域

4. 培训专家介绍

张老师: 清华大学化学系无机化学博士, 中国科学院大连化学物理研究所助理研究员, 所青年创新促进会会员。主要从事过渡多金属氧簇和贵金属团簇的功能化修饰及其催化性能研究, 目前主持包括国家青年科学基金及辽宁省自然科学基金面上项目等课题, 对于晶体结构解析, 包括传统单晶 X 射线衍射, 同步辐射 X 射线衍射, 粉末衍射及电子衍射方面有多年的研究经历, 作为项目负责人在中国科学院重大科技基础设施平台拥有包括国家同步辐射实验室 EXAFS 实验线站及上海同步辐射光源衍射实验线站相关机时。在衍射技术用于物质结构解析发展方面获得大连市紧缺人才认定。在晶体可视化方面, 有独到的视角, 设计相关研究工作的结构的封面曾经被 *Angew. Chem. Int. Ed.* 及 *nanoscale*, *Nano Research*, *Chem. Commun.* 等国际有影响力的杂志所采用。 *nanoscale*, *Inorg. Chem. Commun.* 等杂志的审稿人, 学术出版社 Cambridge Scholar Publishing 结构与晶体学方面编辑顾问委员会成员。中国化学会会员, 中国晶体学会永久会员, 英国皇家化学会 (MRSC) 会员。

5. 培训日程表

注:

1. 实际培训安排可能有少许变动。
2. 学员需自带笔记本电脑。

3. 学员也可以提前将自己研究的相关数据，例子，问题反馈给我们，我们制定相应的日程安排来完成这次培训。

第一天	8:30-9:00	学员注册报到，领取培训资料
	9:00-9:50	衍射技术发展及结构解析基础
	9:50-10:00	茶歇
	10:00-11:20	单晶结构解析相关文献及经典专著讲解
	11:20-11:30	茶歇
	11:30-12:00	答疑与讨论
	12:00-13:30	午餐
	13:30-14:30	单晶测试及衍射图像信号处理，数据收集还原过程
	14:30-14:40	茶歇
	14:40-16:10	CIF 文件详细讲解
	16:10-16:20	茶歇
	16:20-17:30	结构解析新理论及算法
	17:30-18:00	答疑与讨论
第二天	9:00-10:30	讲解 Shelxtl 各模块使用方法：XPREP, XT, XD, XS, XL, XP, XCIF
	10:30-10:40	茶歇
	10:40-12:00	实例讲解与实践训练，掌握 Shelxtl 单晶结构解析的基本方法和通用流程
	12:00-13:30	午餐
	13:30-15:30	用 XP 画图（晶胞图、堆积图、ORTEP 图等）
	15:30-15:40	茶歇
	15:40-17:30	实例讲解与实践训练
	17:30-18:00	答疑与讨论
第三天	9:00-10:30	使用 Olex2 及新算法 Intrinsic Phasing 等最新算法进行晶体解析与精修

	10:30-10:40	茶歇
	10:40-12:00	实例讲解与实践训练
	12:00-13:30	午餐
	13:30-15:30	检查对称性、晶胞转换、无序、孪晶、去除溶剂衍射贡献等处理
	15:30-15:40	茶歇
	15:40-17:30	实例讲解与实践训练
	17:30-18:00	答疑与讨论
第四天	9:00-10:30	其他辅助解析软件 Platon 等的运用 辅助寻找乘晶矩阵，确定空间群，空间群变换
	10:30-10:40	茶歇
	10:40-12:00	实例讲解与实践训练，基于 olex2 最新插件功能包括 solvent mask, drawplus, reportplus 等的使用
	12:00-13:30	午餐
	13:30-15:30	晶体可视化软件 Diamond Mecurry 的综合运用
	15:30-15:40	茶歇
	15:40-17:30	晶体学数据库的检索使用
	17:30-18:00	答疑与讨论
	培训结束	

6. 培训时间/地点

时间：2018 年 7 月 16-19 日（周一至周四，四整天）

地点：福州市（详细地点见邮件通知）

7. 培训费用

RMB 5000 (包括培训费、餐费，不包含差旅及住宿费)，限 28 人；

报名费可现场支付，若 2018 年 7 月 2 日前付款则只需支付 RMB 4600。



8. 汇款账户

账户名：福州水草云信息咨询有限公司

账户：1402029109601062247

开户行：中国工商银行福州洪山支行

9. 报名参加

填写报名表(见下页)，并发送到邮箱： service@shuicaoyun.com

或通过网站提交报名： www.shuicaoyun.com

10. 联系方式

Mobile: 15205019786 赵女士

Email: service@shuicaoyun.com



报名信息表

培训主题：单晶结构解析，结构可视化及晶体学数据库使用			
学员信息			
姓名*		单位*	
邮箱*		电话*	
支付培训费*	银行转账, or 现场支付	发票抬头*	
学员类别	研究生，老师，公司职员， or 其它人员	从事的研究 方向	

注：*为必填项，请将此表发送到邮箱：service@shuicaoyun.com