

“XRD 粉末衍射结构解析和精修”的培训通知

1. 主题背景和培训必要性

获得材料的精确晶体结构非常重要，而晶体结构通常需要通过单晶衍射测试才能获得，但许多情况下，研究人员无法获得材料的单晶衍射数据，或是由于无法生长出合适大小的单晶用于单晶衍射测试，或是由于单晶衍射测试较昂贵。粉末结构解析提供了一种获得精确晶体结构的廉价手段，近年来由于结构解析算法、软件及材料结构数据库的高速发展，从常规粉末衍射仪测得的粉末谱通过解析得到精确晶体结构已不再是难事。

由于实验上粉末衍射谱提供的数据量比单晶衍射的少，因此粉末结构解析的技术过程与单晶结构解析有较大不同。单晶结构解析是通过对实验 hkl 数据处理直接解出晶体结构，而许多情况下，我们仅了解材料的化学成分，有时还有密度等信息，另外还有粉末衍射谱，这时需采用模拟退火(蒙特卡洛)算法得到一个较粗糙的晶体结构，也可在材料数据库中搜索找到一个与实验谱相近的结构，然后进行 Rietveld 精修获得精确的晶体结构。对于精度不够高的 XRD 谱，无法直接获得可靠的晶体结构，这时可采用量化计算进行结构优化，辅助获得精确的晶体结构。

粉末结构解析是一种非主流的获得晶体结构的手段(但非常重要)，目前还没有一个软件包能独立、较好且操作方便友好地处理粉末解析过程中的所有计算(包括：指标化，模拟退火，LeBail (Pawley) 和 Rietveld 精修，基本的量化计算结构优化等)，但已有的粉末衍射处理软件如：Fullprof, GSAS-II, Jana, Endeavour 和量化计算结构优化软件 Material Studio (MS)，VASP 等已经整体上解决了粉末结构解析中的所有技术问题。本培训将通过理论传授和实例训练的方式，以解决实际问题为目的，集各软件之精华，详细讲解粉末结构解析中的各个技术细节和软件实现，为学员提供一个简练的粉末结构解析的解决方案。

另外本培训也将比较精炼地介绍晶体学理论基础，物相鉴定，成分含量分析等与粉末结构解析相关的内容和软件工具(如：Match!, Jade 等)，这对功能陶瓷、医药、工矿企业的研发，实际生产具有较大的实际意义。

2. 培训主要内容

1. 粉末衍射相关的晶体学理论；

2. Jana, Gsas-II, Fullprof, Endeavour 等软件的使用;
3. 指标化获得晶胞参数;
4. LeBail (Pawley) 精修;
5. 模拟退火 (蒙特卡罗) 计算获得粗结构;
6. 结构模型的搜索与构建;
7. Rietveld 精修获得精确晶体结构;
8. 采用 MS (和 VASP) 辅助量化计算进行结构优化
9. 通过粉末衍射谱进行物相鉴定、成分分析等。

3. 与本培训有关的学科和研究领域

晶体学、材料、物理、化学学科、功能陶瓷、医药、工矿企业中凡与材料晶体结构有关的研究领域

4. 培训专家介绍

姜老师: 中科院福建物质结构研究所化学博士, 南京大学物理学博士后, 德国慕尼黑工业大学化学博士后。

5. 培训日程表

注:

1. 考虑到学员可能具有不同的研究方向和基础, 实际培训的具体内容可能有少许变动。
2. 学员需自带笔记本电脑。

第一天	8:30-9:00	学员注册报到, 领取培训资料
晶体学理论、指标化、LeBail 精修	9:00-10:00	粉末衍射晶体学理论 1: 点阵与单胞参数、点群与空间群、倒空间等
	10:00-10:30	茶歇与讨论
	10:30-11:30	粉末衍射晶体学理论 2: 峰形参数、指标化、模拟退火、LeBail 与 Rietveld 精修
	11:30-12:00	茶歇与讨论
	12:00-14:00	午餐

	14:00-15:00	实例训练：粉末谱预处理，指标化；使用的软件：Fullprof, Gsas-II。
	15:00-15:30	茶歇与讨论
	15:30-17:00	实例训练：LeBail 精修 1，使用的软件：Jana, Fullprof；
	17:00-18:00	茶歇与讨论
第二天 LeBail 精修、 结构的 Charge flipping 解析	8:30-11:00	实例训练：LeBail 精修 2；使用的软件：Jana, Fullprof
	11:00-12:00	茶歇与讨论
	12:00-14:00	午餐
	14:00-17:00	实例训练：粉末结构的 Charge flipping 解析；使用的软件：Jana
	17:00-18:00	茶歇与讨论
第三天 模拟退火结构 解析、Rietveld 精修	8:30-11:00	实例训练：模型构建，粉末结构的模拟退火解析；使用的软件：Endeavour, Gsas-II
	11:00-12:00	茶歇与讨论
	12:00-14:00	午餐
	14:00-17:00	实例训练：Rietveld 精修 1；使用的软件：Jana, Fullprof, Gsas-II
	17:00-18:00	茶歇与讨论
第四天 Rietveld 精修、 物相鉴定，成分 含量分析	8:30-11:00	讲解：采用 MS（和 VASP）辅助量化计算进行结构优化的基本过程
	11:00-12:00	茶歇与讨论
	12:00-14:00	午餐
	14:00-17:00	实例训练：物相鉴定，成分含量分析，使用的软件：Match!。
	17:00-18:00	茶歇与讨论
	培训结束	

6. 培训时间/地点



时间：2018年8月20-23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8月6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: XRD 粉末衍射结构解析与精修			
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@shuicaooyun.com