

“单晶结构解析（高级班）-孪晶、无序精修及拓扑分析”的培训通知

1. 主题背景和培训必要性

单晶 X 射线衍射是确定物质结构最常见可靠的方法，能够确定物质原子及分子层次的微观结构及空间对称性。近年来，由于晶体结构解析软件 `shelxtl` 和 `olex2` 等的高速发展，常规晶体的结构解析几乎可以靠软件自动化完成，成为一种比较 `routine` 工作。

然而，随着研究人员对各种化合物及晶态材料研究的深入，晶体中出现的孪晶、无序情况逐渐增多。一方面，这类结构的正确识别和解析比较复杂，较大程度上依赖于研究人员的结构解析经验，纯粹依靠软件判断很难完成解析工作；另一方面，孪晶（包括缺面孪晶、非缺面孪晶和孪缺面孪晶）、特别是无序（包括：空位、原子共占据、位置分裂、以及各种形式的缺陷等）较容易出现在一些掺杂体系及相变材料中，通常对材料性能有较大的影响，多数情况下不得不考虑。高维化合物结构纷繁复杂，结构拓扑序是对晶体中分子原子连接方式的进一步抽象，应用拓扑理论可以将复杂的高维结构用简单的拓扑形式表达出来，对简化结构分析，特别是能对二维，三维结构的配位聚合物，金属有机骨架，分子筛材料等的研究带来便捷。

鉴于以上情况，并考虑到熟练处理孪晶、无序结构是晶体结构精修人员从基本水准向高级层次迈进过程中不可逾越的门槛，我们举办本期培训，采用理论讲解和实例练习相结合的方式，通过软件例题操作向学员传授各种孪晶和无序的处理方法，并通过 `topos` 软件传授拓扑分析的详细过程和技术，旨在提高晶体学相关领域研究人员的晶体结构解析水平。

2. 培训主要内容

1. 单晶解析软件 `shelxtl` 操作；
2. 各种结构检测警示（`cif-check alert`）的处理；
3. 孪晶理论及处理实例：
 - a) 缺面孪晶
 - b) 孪缺面孪晶
4. 无序结构及实例分析：
 - a) 簇合物外围有机基团的限定实例

b) 讨论烷(氧)基、芳基等官能团无序、芳香化合物、水、DMF 等客体无序、孪晶无序

c) 官能团、混合价态金属共占位无序处理实例

d) 空间群修正实例

e) 其它无序案例分析

5. 拓扑网络理论及实例分析:

a) 拓扑简化理论及结构简化方式

b) topos 软件界面介绍

c) topos 直接简化及修正

d) topos 氢键模型简化多核结构

3. 与本培训有关的学科和研究领域

晶体工程、配位化学、材料化学、环境化学、药物结构、及与晶体结构有关的其它研究领域。

4. 培训专家介绍

张俊: 博士, 副教授, 毕业于南京大学配位化学国家重点实验室, 任职于安徽建筑大学材料与化学工程学院, 香港科技大学访问学者, 中国晶体学会终生会员。从事金属有机配位聚合物、杂多酸、纳米团簇、有机光学分子等化合物的结构功能关系研究。精通 shelxtl、olex2、topos、topas、diamond 等结构精修及分析软件。由中国科学技术大学出版社出版专著《单晶 X 射线衍射结构解析》。主持国家自然科学基金、中国博士后基金、安徽省自然科学基金等多个项目。具体学术成果详见:

<http://www.ahjzu.edu.cn/chxy/2014/1008/c6493a38386/page.htm>

5. 培训日程表

注: 1. 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 (建议 win7 旗舰版 x86 系统(32 位))。

第一天:	8:30-9:30	学员注册报到, 领取培训资料
孪晶理论及	9:30-10:30	双晶/多面体/晶体对称性、孪晶理论

处理实例	10:30-10:40	茶歇
	10:40-11:40	结构精修-注意事项及问题处理方法讲解
	11:40-12:00	结构精修讨论
	12:00-13:30	午餐
	13:30-15:50	X 射线衍射及结构描述
	15:50-16:00	茶歇
	16:00-17:00	结构精修-孪晶实例 1
	17:00-17:30	结构精修讨论
	18:00	晚餐
第二天： 无序结构现象及实例分析	9:30-10:30	晶体结构中的无序现象及理论
	10:30-10:40	茶歇
	10:40-11:40	软件使用及无序精修实例 1-烷氧链无序 软件使用及无序精修实例 2-混合价态占位
	11:40-12:00	结构精修讨论
	12:00-13:30	午餐
	13:30-15:50	软件使用及无序精修实例 3-杂多酸 keggin 结构无序 软件使用及无序精修实例 4-空间群特例
	15:50-16:00	茶歇
	16:00-17:00	序精修实例 5-簇合物外围环己基限定
	17:00-17:30	结构无序讨论
	18:00	晚餐
第三天： 拓扑网络理论及实例分析	9:00-10:30	拓扑网络理论
	10:30-10:40	茶歇
	10:40-11:40	软件分析-拓扑实例 1
	11:40-12:00	拓扑分析讨论
	12:00-13:30	午餐
	13:30-15:50	软件分析-拓扑实例 2
	15:50-16:00	茶歇



	16:00-17:00	软件分析-拓扑实例 3
	17:00-17:30	拓扑分析讨论
	18:00	晚餐
	培训结束	

6. 培训时间/地点

时间：2019 年 1 月 11-13 日（周五到周日，三整天）

地点：苏州市（详细地点见邮件通知）

7. 培训费用

RMB 5800 (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 2019 年 1 月 4 日前付款则只需支付 RMB 5200。

注：培训经费较困难者，如需申请培训费用折扣，可邮件联系赵女士，需注明所在单位和课题组，简要说明研究方向和已发表的工作。

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



2018 年 11 月 27 日



报名信息表

培训主题： 单晶结构解析（高级班）-孪晶、无序精修及拓扑分析			
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