



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

Präsenzkurs: Moderne Rietveld-Analyse in der praktischen Übung (389/21)

Mit Hygienekonzept

Prof. Dr. Robert E. Dinnebier

- Rietveld Analyse
- Paarverteilungsfunktion
- Strukturbestimmung
- Quantifizierung
- Sequentielle/parametrische Verfeinerungen



23. – 24. September 2021 · Frankfurt am Main

ZIEL

Die Rietveld-Analyse hat in den letzten Jahren gewaltige Fortschritte gemacht, wobei laufend neue Anwendungsfelder erschlossen werden. Ziel des Kurses ist es, den Teilnehmern die moderne Rietveld-Analyse in Theorie und Praxis anhand einer Reihe von ausgearbeiteten Beispielen näherzubringen. Nach dem Kurs sollen die Teilnehmer in der Lage sein, die Möglichkeiten und Grenzen der Methode zu kennen und einfache Rietveld-Analysen selbstständig durchführen zu können.

INHALT

Schwerpunkte des Kurses sind:

- Grundlagen der Rietveld-Analyse
- Reflexprofilfunktionen, Fundamentalparameter, Pawley/LeBail-Fit
- Bestimmung der Instrumentenfunktion
- (An)isotrope Linienverbreiterungen, Mikrostrukturparameter
- Indizierung und Raumgruppenbestimmung
- Korrekturfaktoren und ihre Bedeutung
- Globale anstatt lokaler Optimierung (Kristallstrukturbestimmung)
- Penalty-Funktionen, Constraints, Restraints und Rigid Bodies (RB)
- Rietveld-Verfeinerung und Differenz-Fourier-Analyse
- Quantitative Phasen-Analyse (QPA), Bestimmung des amorphen Anteils
- Sequenzielle und parametrische Rietveld-Verfeinerung
- Modelle zur Beschreibung von Stapelfehlern
- Alternative Beschreibung der Kristallstruktur (Symmetriemethoden)
- Anwendung der Paarverteilungsfunktion (Total scattering)

ZIELGRUPPE

Chemiker, Pharmazeuten, Physiker, Mineralogen, Materialwissenschaftler und Ingenieure aus Forschung, Entwicklung und Qualitätskontrolle, die an Kristallstruktur, Mikrostruktur und Quantifizierung nano- bis mikrokristalliner Pulver interessiert sind

VORKENNTNISSE

Naturwissenschaftliche Grundausbildung; Grundkenntnisse in Kristallographie sind erwünscht.

STOFFVERMITTLUNG

Alle wesentlichen Aspekte werden anhand ausgewählter Kapitel aus dem eigenen Lehrbuch präsentiert sowie durch Gruppenarbeit anhand von Praxisbeispielen gemeinsam erarbeitet. Profifunktionen von Pulverbeugungsreflexen und Effekte der wichtigen Korrekturfaktoren werden zusätzlich mit Mathematica visualisiert. Fragen können jederzeit gestellt werden.

TEILNEHMERZAHL

maximal 12 Personen

Obwohl im Text häufig nur von Chemikern, Teilnehmern etc. die Rede ist, sind damit selbstverständlich alle Geschlechter gemeint.

DONNERSTAG, 23. SEPTEMBER 2021

- 10.00 Begrüßung, Vorstellung, Organisation und Erwartungen der Teilnehmer
- 10.15 Grundlagen: Laue-Funktion, Bragg'sche Gleichung, Debye-Gleichung, Scherrer-Formel, Rietveld-Formel
- 11.00 Reflexprofilfunktionen, Fundamentalparameter, WPPF Methoden (Pawley/LeBail/Rietveld)
- 11.45 Bestimmung der Instrumentenfunktion (mit Übungen)
- 12.30 Mittagspause
- 13.30 (An)isotrope Linienverbreiterungen, Mikrostrukturparameter (mit Übungen)
- 14.30 Kaffeepause
- 15.00 Sinn und Unsinn von Korrekturfaktoren für Reflex-Lage/Profil/Intensität
- 16.00 Indizierung und Raumgruppenbestimmung
- 17.00 Globale anstatt lokaler Optimierung: Kristallstrukturbestimmung mit der Rietveld-Methode (mit Übungen)
- 18.15 Voraussichtliches Ende des ersten Veranstaltungstages

FREITAG, 24. SEPTEMBER 2021

- 8.30 Einsatz von chemischen Wissen in der Rietveld Verfeinerung: Penalty-Funktionen, Constraints, Restraints und Rigid Bodies
- 9.30 Der Superstruktur-Ansatz zur Bestimmung und Verfeinerung von Stapelfehler-behafteten Kristallstrukturen (mit Übungen)
- 10.30 Kaffeepause
- 11.00 Rietveld-basierte Methoden der quantitativen Phasen-Analyse (QPA) mit Bestimmung des amorphen Anteils (mit Übungen)
- 12.30 Mittagspause
- 13.30 Alternative Beschreibung von Kristallstrukturen durch Symmetriemoden (mit Übungen)
- 14.30 Kaffeepause
- 15.00 Verarbeitung großer Datenmengen: Sequenzielle und parametrische Rietveld Verfeinerung
- 16.00 Kombination von Rietveld und PDF Analyse (Total Scattering)
- 17.00 Voraussichtliches Ende der Veranstaltung

Änderungen und Ergänzungen vorbehalten

ANMELDUNG

Melden Sie sich bitte online unter www.gdch.de/38921 bis zum 26.8.2021 (Anmeldeschluss) bei der Gesellschaft Deutscher Chemiker e.V. (GDCh) an.



Anke Moosbauer
Fortbildungsorganisation

T: +49 69 7917-291
a.moosbauer@gdch.de
www.gdch.de/fortbildung

GEBÜHREN

GDCh-Mitglied € 930,-
Nichtmitglied € 1.010,-

Die Gebühren sind einschließlich Begleitmaterial und GDCh-Zertifikat, Mittagessen, Pausen- und Konferenzgetränken, ausschließlich Unterkunft zu verstehen. Sie unterliegen nicht der Mehrwertsteuerpflicht (Steuerbefreiung nach § 4 Nr. 21.a) bb) UStG).

Die AGB finden Sie unter www.gdch.de/teilnahme.

HINWEIS AUF WEITERE VERANSTALTUNGEN

503/21 **Schwingungsspektroskopie für die chemische Qualitäts- und Prozesskontrolle**

Theorie, Instrumentation und Applikationen für die Raman-, Mittel-Infrarot-, Nah-Infrarot- und Fern-Infrarot Spektroskopie
Leitung: Prof. Dr. Heinz Wilhelm Siesler
14. – 16. September 2021 · Online

334/21 **Grundlagen der praktischen NMR-Spektroskopie für technische Mitarbeiter**

Leitung: Dr. Johannes C. Liermann
14. – 16. September 2021 · Online

335/21 **Fortgeschrittene praktische NMR-Spektroskopie für technische Mitarbeiter**

Leitung: Dr. Johannes C. Liermann
28. – 30. September 2021 · Online

355/21 **Theorie und Praxis der UHPLC**

Leitung: Prof. Dr. Thomas Welsch
11. – 12. November 2021

VERANSTALTUNGSORT

Mercure Hotel & Residenz Frankfurt Messe
Voltastraße 29
60486 Frankfurt am Main
T: +49 69 79260
h1204@accor.com

ANFAHRT

Die Deutsche Bahn bietet attraktive Konditionen für Ihre Anreise zu GDCh-Veranstaltungen an. Informationen erhalten Sie unter www.gdch.de/bahn.

UNTERKUNFT

Für die Teilnehmer haben wir im Veranstaltungshotel unter dem Stichwort „GDCh 389/21“ ein begrenztes Zimmerkontingent zu Sonderkonditionen reserviert. Dieses Kontingent gilt bis zum 1.9.2021. Bitte wenden Sie sich direkt an das Hotel (Adresse und Telefonnummer siehe „Veranstaltungsort“).

Weitere Unterkünfte erfragen Sie bitte bei:

Tourismus+Congress GmbH
Kaiserstraße 56
60329 Frankfurt am Main
T: +49 69 21 230808
info@infofrankfurt.de
www.frankfurt-tourismus.de

Wir weisen ausdrücklich darauf hin, dass die Haftung für bestellte und nicht abgenommene Zimmer beim Besteller liegt.

LEITUNG

Prof. Dr. Robert E. Dinnebier

Max-Planck-Institut für Festkörperforschung
Stuttgart

Robert E. Dinnebier ist seit 2001 beim Max-Planck-Institut für Festkörperforschung beschäftigt, wo er die wissenschaftliche Einrichtung Röntgenographie leitet. Herr Dinnebier unterrichtet Kristallographie an den Universitäten Stuttgart und Tübingen. Sein Hauptforschungsgebiet ist seit über 30 Jahren die Pulverdiffraktometrie mit über 400 Publikationen und mehreren Lehrbüchern. Er ist u.a. Aufsichtsratsmitglied bei ICDD und Vorsitzender des Arbeitskreises Pulverdiffraktometrie der DGK.

REFERENTEN

Prof. Dr. Robert E. Dinnebier MPI-FKF, Stuttgart
(siehe Leitung)

BEGLEITMATERIAL

Die Teilnehmer erhalten während des Kurses schriftliches Begleitmaterial in Form des Lehrbuchs „Rietveld Refinement – Practical Powder Diffraction Pattern Analysis using TOPAS“ (DeGruyter-Lehrbuch), umfangreiche Übungsmaterialien sowie nach erfolgreicher Teilnahme ein GDCh-Zertifikat.

INHOUSE-KURSE**Lokal oder digital**

Individuell, effizient, zeit- und kostensparend –
nutzen Sie das Expertenwissen und unser Know-how
als langjähriger Seminaranbieter, auch für Ihre Inhouse-Kurse
vor Ort oder digital.

Ihre Ansprechpartnerin: Melanie Sakarya
T: +49 69 7917-331 oder fb@gdch.de