What is the major difference between powder XRD and single crystal XRD?

单晶是对于一个确定的方向，至少某个波长可以提供衍射，可以有二维的衍射结果，而PXRD大多用于确定样品组成

文本, 信件

描述已自动生成

图片包含 照片, 星星

描述已自动生成

According to the authors, what makes this approach different from previous attempts?

引入蒙特卡洛模拟来逐步得出结构，与PXRD比较结果，从而得到最优的模型。

What is Rietveld refinement procedure (Ref 13)?

利用粉末衍射的实验数据来优化模型的程序

What is Monte Carlo method?

产生随机数

How is the Monte Carlo method implemented in this work?

文本

描述已自动生成

生成configurations，利用马尔可夫链生成初始结构

随机移动位置，找寻最低Rwp

How are the unit cell and space group determined?

根据系统消光 systematic absence

文本

描述已自动生成

文本

描述已自动生成

How were the structures generated for p-CH3C4H4SO2NHNH2? and for p-BrC6H4CH2CO2H?

前者使用最大熵法从PXRD里面获取。

后者先在晶胞中有限制的移动Br原子，获得一个合适的位置（根据Rwp），然后考虑Br原子加入刚性体，进行蒙特卡洛移动。移动C6环，找到最佳构型。最后确定氢原子。注意，我们是通过R factor来决定最佳

Why the structures need to be generated in such as a way?

通过蒙特卡洛模拟需要很大的计算量？只能逐步优化结构，降低计算难度

What is the advantage of using Monte Carlo vs. minimization, as discussed in the conclusion remark?

可以优化出全局最优解而不是local

文本

描述已自动生成