

平成30年度初級者向けZ-Code講習会

平成30年度の粉末構造解析ソフトウェア Z-Code の初級者向け講習会を開催します。Z-Rietveld と Z-3D, Z-MEM の最新版の使い方について講義と実習を行います。J-PARC MLF の粉末構造回折装置を利用される多くの皆様には是非ご参加いただき、これらの解析ツールを構造解析に活用していただきますようご案内致します。なお、今回は Windows 版だけの実習を行いますので、Windows PC をご持参ください。Windows OS は Windows 7, 8.1, 10 です (64 ビット)。

開催日時：平成 31 月 2 月 7 日(木)9:20～8 日(金)17:00

場所：エッサム神田ホール 1 号館 601 会議室

〒101-0045 東京都千代田区神田鍛冶町 3-2-2

主催：J-PARC センターMLF ディビジョン，KEK 物質構造科学研究所

茨城県，茨城大学フロンティア応用原子科学研究センター

中性子産業利用推進協議会

協賛：総合科学研究機構(CROSS)中性子科学センター

参加費：

参加費は無料ですが、資料代として 2,000¥いただきます。なお、中性子産業利用推進協議会の会員の皆様は無料です。資料代は当日徴収させていただきます。領収書を発行します。

目標：

TOF 粉末中性子回折，原子炉中性子回折，実験室 X 線回折，放射光 X 線回折データのリートベルト解析，X 線と中性子データの同時リートベルト解析を一人で実行できる。制約条件下でのリートベルト解析ができる。構造パラメータやプロファイルパラメータ，補正パラメータ等を理解し，原子間距離・角度等を正しく求める。MEM 解析を行い，結果を表示できる。結晶模型を描けるようにし，簡単な磁気構造も解析できるようにする。論文や報告書を執筆するための表記法を理解する。

2 月 7 日(木)9:20-17:00

9:20-9:30 開会挨拶 林眞琴 (CROSS)

9:30-11:00 回折結晶学の基礎(1)
回折原理 (逆格子，構造因子，粉末結晶回折，単結晶回折)
木村宏之 (東北大学)

10:30-11:00 回折結晶学の基礎(2)
散乱，中性子の発生，分光器，TOF 回折法
石垣 徹 (茨城大学)

11:00-11:15 Z-Rietveld を用いたリートベルト解析の概要
神山 崇 (KEK)

11:15-11:45 Z-Rietveld のインストールと動作確認
米村雅雄(KEK)，石川喜久(CROSS)

11:45～12:45 昼 食

12:45-13:45 回折結晶学の基礎(3)
対称性・空間群，軸変換
木村宏之 (東北大学)

- 13:45-14:45 リートベルト解析を始める (Rietveld 解析+Z-3D 描画)
神山 崇 (KEK)
- 14:45-15:15 実験室 X 線回折データから Z-Rietveld で用いる入出力ファイルを作る
米村雅雄(KEK), 石川喜久(CROSS)
- 15:15~15:30 休 憩
- 15:30-17:00 実用材料を例に TOF 回折データのリートベルト解析を行う
米村雅雄 (KEK)
- 17:00 終了

2月8日(金)9:30-17:00

- 9:30-11:45 X線及び中性子回折データのリートベルト解析を行い, それぞれの特徴を
学ぶ (多相解析, マルチヒストグラム・多点測定, 制約条件)
米村雅雄 (KEK)
- 11:45~12:45 昼 食
- 12:45-13:45 電子密度や拡散乱長密度の求め方を学ぶ (MEM)
石川喜久 (CROSS)
- 13:45-15:00 BaTiO₃の相転移データの解析例
石川喜久 (CROSS)
- 15:00~15:15 休 憩
- 15:15-16:00 プロファイル解析法を学ぶ (粒子径や歪みの求め方(デモ+活用方法))
神山 崇 (KEK)
- 16:00-16:20 原子間距離・角度の求め方 (デモ+得られる価値・活用方法)
神山 崇 (KEK)
- 16:20-16:40 磁気構造解析 (デモ+活用方法)
萩原雅人 (KEK)
- 16:40-16:45 閉会挨拶 富田俊郎 (茨城県)

<問合せ先>

ご不明な点は下記までお問合せください。
総合科学研究機構中性子科学センター(CROSS)
林 眞琴 (m_hayashi@cross.or.jp)

<参加申込み>

申込み先：中性子産業利用推進協議会 事務局 大内 薫
E-mail: info@j-neutrons.com
(1)名前, (2)所属, (3)連絡先(電話番号, E-mail address)
をご記入の上, メールにて 2月20日(月)までにお申込みください。

＜会場へのアクセス＞

＜貸し会議室＞エッサム神田ホール
東京都千代田区神田鍛冶町 3-2-2
JR 神田駅北口徒歩 1分
東京メトロ銀座線神田駅 3 出口前
<http://www.essam.co.jp/hall/access/>

