

平成 29 年度中級者向け Z-Code 講習会

KEK 物質科学研究所ほかでは、平成 29 年度の粉末構造解析ソフトウェア Z-Code の中級者向け講習会を 11 月 2 日(木)に開催することになりましたのでご案内致します。J-PARC/MLF の粉末構造解析が可能な装置を利用して、回折データの解析経験がある方が対象です。その経験の元に、実際に測定された各種結晶構造の回折データを用いて少し高度な解析を実習します。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, 10 です。多くの皆さまの参加をお待ちしています。

<申込み方法>

参加を希望される方は下記までお申し込みください。

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-neutron.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 10 月 26 日(木)までにお申し込みください。

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, (一財)総合科学研究機構(CROSS 東海)

開催日時：平成 29 年 11 月 2 日(木)9:30~17:00

場所：LMJ 東京研修センター2F 特大会議室

<http://www.lmj-japan.co.jp/kaigishitu/02-1/>

〒113-0033 東京都文京区本郷 1-11-14 小倉ビル

TEL: 03-5842-6690

水道橋駅からのアクセスは下記を参照ください。

<http://www.lmj-japan.co.jp/kaigishitu/02-1/suidobashi.html>

参加費：無料

資料代として 2,000 円いただきます。なお、中性子産業利用推進協議会の会員企業の皆様は無料です。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。

講義概要：

文献等の構造情報に基づき、構造パラメータを理解しながら少し高度な構造解析をほとんど指導を受けずに行えるようになることを目指します。内容としては、

- 1) X線と中性子データをリートベルト解析する
- 2) 構造パラメータや原子間距離等を求め、報告書等の執筆に必要な表記法を学ぶ
- 3) 込み入った制約条件を使いこなす
- 4) MEM 解析を行う
- 5) 磁気構造を解析する

プログラム：

9:15. 開会挨拶 林 眞琴(CROSS)

講師：神山 崇, 米村雅雄, 石川喜久, 萩原雅人 (KEK)

石垣 徹 (茨城大学)
木村宏之 (東北大学)

9:20-10:00 Z-Rietveld と Z-3D を用いた結晶構造解析
Z-Rietveld と Z-3D のおさらいをします.

10:00-10:15 回折結晶学の基礎
結晶学のおさらいをします. 軸の取り方などについて学びます.

10:15-12:05 Z-Rietveld の中級者向け実習
少し高度なリートベルト解析をほとんど指導を受けずに, 自分で正しく実施できることを目指します. 軸の取り方などについて実習を行います. 原子間距離など, 込み入った制約条件を使いこなせることを目指します.

12:05~13:00 昼 食

13:00-14:50 Z-Rietveld/Z-MEM の実習
Z-Rietveld から Z-MEM へのスムーズな流れを最新コードを用いて実習します.

14:50-15:00 休 憩

15:00-16:40 リートベルト解析が上手くできなかった時の対処方法と磁気構造解析
ログに記載されているエラーメッセージの読み取り方を, 実習を通してエラーを再現させながら学びます. また, コリニア, ノンコリニアなどの磁気構造についてプロパゲーションベクトルを用いて解析する方法を習得します.

16:40-17:00 質疑応答

17:00 終 了

<問合せ先>

不明な点がありましたら下記までお問合せください.

茨城県産業利用コーディネーター 峯村哲郎

E-mail: mimemura@ibaraki-neutrons.jp

<LMJ 東京研修センターへのアクセス>

JR総武線水道橋駅東口から、下記の左側地図の赤色のラインに沿って移動してください。水道橋駅東口を出て、JR総武線に対して直角方向に伸びている白山通りの東京ドームと反対側の歩道を北に向かって歩き、松屋の角を右折し、80m行くと、壱岐坂に出ます。右折して80mの右手に小倉ビルがあります。小倉ビルの詳細位置については右側地図を参照してください。赤丸印が小倉ビルです。

下記LMJ東京研修センターのHPの案内をご参照ください。

<http://www.lmj-japan.co.jp/kaigishitu/02-1/suidobashi.html>

