

## 平成 30 年度中級者向け 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 の中級者向け講習会を 11 月 16 日(金)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 10 です。Mac PC でも受講できます。多くの皆さまの参加をお待ちしています。

開催日時：平成 30 年 11 月 16 日(金)9:15~17:00

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 TEL 03-3254-8787

<http://www.essam.co.jp/hall/kaijo/index.html>

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，総合科学研究機構中性子科学センター

### 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行えるようになることを目指します。内容としては下記の通りです。

- 1) X線回折と中性子回折データのリートベルト解析を行う
- 2) Z-Rietveld 用のファイル（実験室 X 線、放射光など）の作り方を学ぶ
- 3) MEM 解析を行う
- 4) 磁気構造を解析する
- 5) 解析が上手くいかない場合の対処法を学ぶ
- 6) 有効歪みや結晶子サイズを計算する

### 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)

9:20-9:50 Z-Rietveld と Z-3D を用いた結晶構造解析

Z-Rietveld と Z-3D の利用方法の復習を行います。 [LaB6, CeO2\\_iMATERIA](#)

9:50-10:50 回折結晶学の基礎

結晶学の復習を行います。軸の取り方などについて学びます。

10:50-11:50 Z-Rietveld の中級者向け実習(1)

少し高度なリートベルト解析を指導をほとんど受けずに、自分で正しく実施できることを目指します。複数相の解析，複数データの同時解析，原子間距離などの不等式制約条件下でのリートベルト解析を学びます。Z-Rietveld用のファイル（実験室X線、放射光など）の作り方を学びます。LiCoO2\_LabXRD&Reactor, (複数バンク), #4\_TiO2\_iMATERIA, Li(Co, Ni)O2, 不等式制約条件下の例, ヒストグラム作成の例

11:50~12:50 昼 食

12:50-13:35 Z-Rietveld の中級者向け実習(2)  
(つづき)

13:35-15:00 Z-MEM の実習  
Z-Rietveld から Z-MEM へのスムーズな流れを実習します。BaTiO3\_XRD&中性子,C18H17NO2, Naphthalene

15:00~15:10 休 憩

15:10-16:40 Z-Rietveld の中級者向け実習 3  
磁気構造をプロパゲーションベクトルを用いて解析する方法を学びます。リートベルト解析が上手くできなかった時の対処法のいくつかを，エラーを再現させログに記載されているエラーメッセージを読み取りながら学びます。有効歪みや有効結晶子サイズの計算方法を学びます。Al2O3 エラー, MnF2, 歪みの例？

16:40-17:00 質疑応答

17:00 終了

#### <申込み方法>

受講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 11月8日(木)までにお申し込みください。

#### <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

## ＜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/>

