

2020年度初級者向けZ-Code講習会 Webセミナー

2020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 web で開催します。中性子回折の基礎講義に加えて、Z-Rietveld、Z-3D、Conograph の使い方について講義と実習を通して学びます。Z-Rietveld を用いてマキシマムエントロピー法を用いた解析についてもご紹介いたします。

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 版の実習を行います。Mac 版 (10.13 以降) をご利用の方もご参加ください。Windows OS は Windows 8.1, 10 です (64 ビット)。

開催日時：2020年8月27日(木) 9:20~8月28日(金)17:00

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(CROSS)中性子科学センター

開催方法：総合科学研究機構 B301 会議室から ZOOM で行います。

(参加希望で ZOOM の利用ができない方は中性子産業利用推進協議会までご相談下さい。)

参加費：

参加費は無料ですが、資料 (pdf で配布予定) をご希望の方は¥2,000 いただきます (申込受付後、下記指定口座に振り込んでいただきます)。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。

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する。原子間距離・角度等を正しく求める。結晶模型を描ける。MEM 解析を行い、結果を表示できる。指数付けや磁気構造の解析法を知る。

8月27日(木)9:20-17:00

9:20-9:30 開会挨拶 日比政昭 (CROSS)

9:30-10:30 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 を用いた粉末回折データ解析の概要
神山 崇 (KEK)

11:15-11:45 Z-Rietveld のインストールと動作確認
萩原雅人 (KEK)

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
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
鳥居周輝、神山 崇、萩原雅人、石川喜久 (KEK)
- 17:00 終了

8月28日(金)9:30-17:00

- 9:30-11:30 X線及び中性子回折データのリートベルト解析
(多相解析, マルチヒストグラム・多点測定, 制約条件、原子間距離・角度)
神山 崇 (KEK)
- 11:30-12:30 Conograph を用いた指数付けの方法 (デモ+活用方法)
富安亮子 (九州大学)
- 12:30~13:30 昼 食
- 13:30-15:00 Z-Rietveld を用いた電子密度や拡散乱長密度の求め方
石川喜久 (CROSS)
- 15:00-15:30 Z-Rietveld を用いた有効結晶子サイズや有効歪みの求め方
神山 崇 (KEK)
- 15:30~15:50 休 憩
- 15:50-16:40 Z-Rietveld を用いた磁気構造解析 (デモ+活用方法)
萩原雅人 (KEK)
- 16:40-16:55 質疑
- 16:55-17:00 閉会挨拶
児玉弘則 (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) 日比政昭 (m_hibi@cross.or.jp)

【参加申込み】

下記の申込フォームから8月21日 (金) までにお申し込みください:

<https://docs.google.com/forms/d/1g3SpzNjdKM4azg7sVHgnE9G41KaUN6Gpdlm02SGRCRc/edit>

ご入力いただいたメールアドレスにお申し込み確認のメールが自動的に送信されます。

返信をご確認いただけない場合は、メールにてお申し込みください:

メール申込み先: 中性子産業利用推進協議会 事務局 綿引美知枝

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8月21日 (金) までにお申し込みください。

テキスト代振込先: 口座番号: 常陽銀行 東海支店 (普通) 1598420

口座名: 中性子産業利用推進協議会

チュウセイシサンギョウリヨウスイシンキョウギカイ