

## 第10回X線分析講習会「粉末X線リートベルト解析」

主催 日本分析化学会X線分析研究懇談会

共催 東京理科大学生涯学習センター

協賛 日本結晶学会、日本化学会、電気化学会、日本セラミックス協会、応用物理学会、化学工学会、日本金属学会、軽金属学会、日本結晶成長学会、日本鉱物学会、高分子学会、日本材料学会、人工結晶工学会、鉄鋼協会、表面科学会、日本物理学会、日本分析機器工業会、粉体工学会、日本放射光学会、日本薬学会

期日 平成14年2月5日(火)～8日(金)

会場 講義 日本化学会・化学会館7階ホール

(5、6日)東京都千代田区神田駿河台1-5

会場案内 <http://www.chemistry.or.jp/compendium/>

解析実習 東京理科大学近代資料館ターミナル室(03-3260-4271)

(7日) 東京都新宿区神楽坂 1-3

会場案内 <http://www.sut.ac.jp/info/access/kaguacc.html>

実習時間 9:30-17:00

測定実習 ・理学電機 株式会社 応用技術センター東京分析センター

(8日) 東京都昭島市松原町 3-9-12 理学電機(株) 拝島工場内

・株式会社 マックサイエンス X線応用研究部

福井県坂井郡坂井町長屋 78

会場案内 <http://www.rigaku.co.jp/> (講習会案内 X線回折講習会 東京分析センター参照)

<http://www.macscience.co.jp/profil/map2.htm>

概要: 初心者の方々でもX線リートベルト法を実際に使えるようになることを目指して、リートベルト解析に必要な結晶学の基礎、RIETAN-2000の入力データの詳細、解析のこつ、材料解析への応用などについて詳しく講義します。後半では、講義で習ったことについて解析、測定の実習を行い、リートベルト法の徹底理解を目指します。テキストには本講師らが執筆した「粉末X線解析の実際 - リートベルト法入門」(朝倉書店、平成14年2月出版予定)を用い、テキスト代は講義受講費の中に含まれます。

### 講義プログラム(予定)

2月5日(火)

1. リートベルト解析のための結晶学入門 (東工大・応セラ研) 佐々木 聡 9:30-11:30

i) リートベルト解析のための結晶学

- ii) 結晶構造パラメータと結晶構造因子、回折強度、消滅則、結晶構造の論文の読み方
2. リートベルト法（物材機構物質研）泉 富士夫 12:30–13:30  
原理、モデル関数、プロファイル関数、解析の手順とノウハウ
  3. 全回折パターンフィッティング（物材機構物質研）泉 富士夫 13:35–14:35  
Le Bail 法、最大エントロピー法との連携（構造モデルの構築、MPF 法）、放射光データの解析
  4. リートベルト解析の為の回折強度データの収集法（理学電機）藤縄 剛 15:00–16:00  
試料調製の勘所、装置と光学系、測定条件の設定
  5. RIETAN-2000 支援アプリケーション"Visual RIETAN"（理学電機）小澤 哲也 16:10–17:10  
対話 GUI による解析の流れの理解、結晶構造表示、結晶データベースとのリンク、電子密度解析

2月6日（水）

6. リートベルト解析プログラム RIETAN-2000 の入力データ（高工研）神山 崇 9:30–10:30  
実例を通してプログラムに入力するデータを解説する
7. RIETAN-2000 によるリートベルト解析の実際（高工研）神山 崇 10:40–11:50  
解析の進め方、注意点、解けない時の対策、解析例
8. 解析結果の評価（物材機構物質研）泉 富士夫 13:00–14:30  
原子間距離・結合角の計算、抑制条件、結晶化学的考察、結晶構造と電子密度の可視化
9. リートベルト法の材料解析への応用（産総研）秋葉悦男 14:40–16:10  
リチウム 2 次電池材料の解析例（置換固溶、相の同定と定量分析）、水素吸蔵合金（ひずみと結晶子サイズの解析）
10. 粉末結晶構造解析支援ソフトウェア（理学電機）藤縄 剛 16:20–17:20  
結晶構造データベースの利用、結晶系の決定と指数付け、構造モデルの構築（直接法と実空間法）

全体についての質疑応答 17:20–17:50

講義（定員 90 名程度）は 2 月 5、6 日に日本化学会で、解析実習（定員 40 名）は 2 月 7 日に東京理科大学神楽坂校舎で、測定実習は 8 日に希望により理学電機（株）（東京、定員 30 名）と（株）マックサイエ

ンス(福井県、定員 10 名)の 2 カ所に分かれて行います。

参加費 4 日間 4 万円 (懇談会会員 3 万円、協賛学会会員 3 万 4 千円) 講義のみ 2 万円 (懇談会会員 1 万 5 千円、協賛学会会員 1 万 7 千円、学生 9 千円) 解析実習のみ 1 万円 (懇談会・協賛学会会員 8 千円、学生 6 千円) 測定実習のみ 1 万円 (懇談会会員 8 千円、協賛学会会員 9 千円)。

受付は先着順ですのでお早めにお申し込み下さい。なお、測定実習参加希望の方は、理学電機かマックサイエンスか、希望先を明記して下さい。

本講習会に先行して 2 月 4 日 (月) に同所で開催される、日本結晶学会主催の講習会「粉末 X 線解析の実際」に 4 千円引き (テキスト重複のため) で受講いただけます。両者を受講することにより、粉末 X 線解析法全般について徹底理解が得られるでしょう。希望者は、「リートベルト解析講習会参加者」と明記のうえ、主催の日本結晶学会あてにお申し込みください。

解析実習 (2 月 7 日: 定員 40 名) 実習は各自 1 台の PC (Windows 機) とデモ版 Visual-RIETAN および RIETAN-2000 を使って行い、デモ版 Visual-RIETAN (使用期限付) および RIETAN-2000 を収録した CD を無償で配布します。実習は初心者を対象としますので、GUI 付きの Visual-RIETAN の利用が中心になる予定です。

(1) リートベルト解析に必要な結晶学情報の抽出演習

International Tables や結晶構造データベースの使用法、軸や空間群表記の変換

(2) GUI 付き RIETAN によるリートベルト解析

例題 1 件、演習 1 件程度、シュミレーションと精密化の演習

(3) オリジナル RIETAN-2000 による演習

(4) その他

測定実習 (2 月 8 日: 定員 理学電機 30 名、マックサイエンス 10 名) テキスト「粉末 X 線解析の実際 - リートベルト法入門」(朝倉書店)の内容を各メーカーの装置にて実習します。

(1) 試料調製方法

粉碎と整形、試料調整の評価方法

(2) 測定光学系の種類と装置調整

透過法と反射法、光学系と検出器の調整

(3) リートベルト解析に用いる粉末データの測定方法

(4) その他

講義受講料にはテキスト「粉末X線解析の実際 - リートベルト法入門」(朝倉書店)代が含まれますが、解析実習、測定実習のみの参加費にはテキスト代は含まれません。テキストは、講義または解析実習の会場にて販売(予価5千円、15%割引の予定)いたしますので、希望者はお購入下さい。

申込先 〒141-0031 品川区西五反田1-26-2五反田サンハイツ304 日本分析化学会X線分析研究懇談会〔電話:(03)3490-3351、FAX:3490-3572、e-mail:ktanaka@jsac.or.jp〕HP:<http://www.nims.go.jp/xray/xbun/index.htm>

申込方法 別紙申込書に必要事項をご記入のうえ、EメールまたはFAXにてお申し込みください。後日、請求書、振込依頼書をお送りします。

問合せ先 〒162-8601 東京都新宿区神楽坂1-3 東京理科大学理学部応用化学科 中井 泉〔電話:(03)3260-3662、FAX:(03)3235-2214、e-mail:inakai@ch.kagu.sut.ac.jp〕泉 富士夫 HP:<http://homepage.mac.com/fujioizumi/index.html>、X線分析研究懇談会 HP:<http://www.nims.go.jp/xray/xbun/index.htm>