

第2回粉末回折法討論会：近年における方法論の発展

20世紀第四四半期においてリートベルト法を起爆剤として発展してきた粉末回折法は、中性子および放射光光源を用いて高分解能回折データが得られるようになり、未知結晶構造解析、リートベルト法による構造精密化、マキシマムエントロピー法を用いた電子密度分布解析等、材料構造解析に必用不可欠な手段となりました。しかし、未知結晶構造解析一つを見ても、伝統的な直接法以外に最近ではモンテカルロ法、シミュレーテッドアニーリング法、遺伝的アルゴリズム等が使用されるようになり、ここ10年間でもその進歩は目を見張るものがあります。

この討論会は、粉末回折法の方法論に重点を置き、新しい応用法、解析精度、可能性等を辛口で討議することを目的としています。また、同時に解析の現場から直接声を聞き、これからの材料構造解析に対して粉末回折法で何ができるかということも討論いたします。

開催要領

会 議：第2回粉末回折法討論会：近年における方法論の発展

日 時：2001年5月10日(木) 1:15PM より、11日(金) 3:45PM まで

受 付：5月10日 12:00 より受付開始

場 所：高エネルギー加速器研究機構・3号館・セミナーホール

住 所：〒305-0801 茨城県つくば市大穂1-1

交 通：以下に記載

参加費：会議は無料

懇親会：レストラン「サンロール」(高エネ機構内) 参加費 ¥3,500 (学生は¥2,500)

主 催：フォトンファクトリー粉末回折ユーザーグループ、粉末中性子回折グループ、
高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所

協 賛：日本結晶学会、日本セラミックス協会

連絡先：〒507-0071 多治見市旭ヶ丘10-6-29

名古屋工業大学・セラミックス基盤工学研究センター・虎谷秀穂

Tel. 0572-27-6811(代表)、27-9960(ダイヤルイン)、FAX 27-6812

E-mail : toraya@crl.nitech.ac.jp

参加申し込み

参加者人数の目処をつけるため、会議および懇親会参加の可否をできるだけご連絡下さい(連絡先は上記)。

会議プログラム

5月10日(木)	
1:15 – 1:30	開会
	データベース
1:30 – 2:30	<p>“Powder Diffraction File – Traditional, New and Future Usage for Computational Materials Science”</p> <p>Camden R. Hubbard (Oak Ridge Nat. Lab.) (30分)</p> <p>「科学技術振興事業団における高機能物質データベースについて」 黒田 潔、多田羅 尚子、陳 迎、吉田 健司、前田 知子、愛宕 隆治 (科学技術振興事業団) (30分)</p>
	未知結晶構造解析
2:30 – 4:10	<p>「粉末X線回折データからの直接法による無機化合物の構造解析」 山根 久典 (東北大) (20分)</p> <p>「直接法と MEM を用いた複合解析による層状ケイ酸塩の未知構造の決定」 池田 卓史 (物質・材料研究機構) (20分)</p> <p>「モンテカルロ法を用いた未知構造物質の解析」 山寄 悟 (INAX・基礎研) (20分)</p> <p>「シミュレーテッドアニーリング法による無機結晶の構造決定」 虎谷 秀穂 (名工大) (20分)</p> <p>「遺伝的アルゴリズムを用いた簡単な有機化合物の粉末データによる構造解法」 東 常行 (理学電機) (20分)</p>
4:10 – 4:30	休憩
	リートベルト解析
4:30 – 6:00	<p>「RIETAN-2000 のポリッシュアップ : Le Bail 解析, CIF, スクリプト」 泉 富士夫 (物質・材料研究機構) (25分)</p> <p>“Structure refinements of phosphates and a vanadate with X-ray, synchrotron X-ray, and TOF neutron diffraction data” Alexei A. Belik (物質・材料研究機構) (20分)</p> <p>「オーダーメイドのリートベルト解析」 八尾 健 (京大) (25分)</p> <p>「リートベルト法の解析精度に関して」 虎谷 秀穂 (名工大) (20分)</p>
6:30 – 8:30	懇親会

5月11日(金)	
9:00-10:30	マキシマムエントロピー法を用いた電子密度分布解析
	「精密電子密度解析により調べた Laves 相金属間化合物の結合形態」 久保田 佳基 (大阪女子大) (20分)
	「回折データのイメージングによる固体中水素の化学結合」 山村 滋典 (北里大) (20分)
	「粉末データによる多極子解析法について」 池田 智宏 (原研) (20分)
	「MEMによる回折データのイメージングについて」 坂田 誠 (名大) (20分)
10:30-12:00	プロファイル解析と不完全結晶
	「装置関数の畳み込みに基づくプロファイル関数を用いた粉末回折ピークのブロードニングの評価」 井田 隆 (名工大) (25分)
	「JSNSプロジェクトのTOF粉末回折装置におけるプロファイルのシミュレーション」 及川 健一 (高エネ機構) (25分)
	「プロファイル解析による積層不整の研究」 小野田 みつ子 (物質・材料研究機構) (40分)
12:00-1:00	昼食
1:00-3:45	材料分野から見た粉末回折法
	「電子デバイスを制する薄膜材料」 古宮 聰 (JASRI) (25分)
	「金属表面反応観察における粉末法への期待」 木村 正雄 (新日鐵・先端技研) (25分)
	「粉末回折法によって水素吸蔵合金はどこまで理解できたか？」 秋葉 悦男 (産業技術総合研究所) (25分)
	休憩
	「チョコレート結晶学」 古谷野 哲夫 (明治製菓) (25分)
	「依頼分析業務からみた粉末法」 藤縄 剛 (理学電機) (25分)
	「粉末回折による材料研究の可能性」 神山 崇 (高エネ機構) (25分)

各種案内

会場などの案内に関しましては、以下をご参照下さい。詳しくは、高エネ機構のホームページ (<http://www.kek.jp>) の共同利用ガイド、生活マニュアルの項をご参照ください。

会場までの交通案内)

- 1) 東京駅八重洲南口より直通高速バス（ニューつくばね号）で「高エネルギー加速器研究機構」前下車、所要時間は 1 時間半。会議開始日の場合、八重洲口発 11:10AM、高エネ機構前着 12:36PM（予定）のバスが利用できます。
 - 2) 東京駅八重洲南口より高速バス（つくば号）でつくばセンター（終点）下車、所要時間 65 分（予定）、八重洲南口より 10 分間隔で発車。つくばセンターより、バスをご利用下さい。
 - 3) 常磐線、荒川沖駅東口、あるいは土浦駅東口下車、バスをご利用下さい。
- 注1) 「ニューつくばね号」は筑波山行き、つくば号は「つくばセンター」行きで、八重洲南口における乗車場では 2 本の待ち行列が平行に並んでいますのでご注意ください。
- 注2) 高エネ機構前で下車した後、構内に入り、正面の道路を真直ぐに約 200m 進んだ所の右手にあるガラス張りの高層の建物が会場建物（1 階）です。

開会時間近辺のバス時刻表

系統	行き先	発駅	着/中継/発駅	着駅
	大学中央・建設研究所	荒川沖駅東口 11:25 11:50	つくばセンター 11:55 12:12	
61	筑波駅		つくばセンター 12:00	高エネ機構前 12:16
18	筑波テクノパーク大穂	土浦駅東口 12:10	つくばセンター 12:32	高エネ機構前 12:51

食事の案内)

構内に食堂があり、食事の時間帯において食事をとれます。食堂の場所は、入り口の守衛所にお尋ね下さい。

宿泊案内)

大学職員および大学院生で、高エネ機構共同利用施設ユーザーの方は、高エネ機構内の共同利用施設宿舎を利用できます。ただし、実験期間中ですので空き室に限りがあります。ご利用を希望の方は、4 月 10 日までに虎谷宛にご連絡下さい。ただし、満室の場合には部屋を予約できませんのでご了承下さい。

高エネルギー加速器研究機構から歩いていける距離（徒歩 30 分）に以下のホテルがあります。なお、このホテルには自転車の貸し出しがあるそうです。ホテルに直接お問い合わせ下さい。
アーバンホテル 〒300-3257 つくば市筑穂 2-1-2 (Tel 0298-77-0001、FAX 0298-77-0700)
シングル 6500 円および 7000 円（35 室程度）

<http://www.urbanhotel.co.jp/index2.html>

その他のホテルはつくばセンター近辺になりますが、それらに関しましては以下のホームページをご参照下さい。

http://www.epochal.or.jp/hotel/hotel_1.html

<http://www.aist.go.jp/ETL/etl/divisions/~7234/prmu2000/hotellist.htm>