

## 講習会「粉末X線解析の実際」

**主催** 日本結晶学会

**共催** 日本分析化学会X線分析研究懇談会

**協賛** 日本化学会、(社)応用物理学会、(社)化学工学会、(社)軽金属学会、(社)高分子学会、鉄鋼協会、日本金属学会、日本結晶成長学会、日本鉱物学会、(社)日本材料学会、日本表面科学会、(社)日本物理学会、(社)日本分析機器工業会、日本放射光学会、(社)日本薬学会、粉体工学会

**期日** 平成17年7月5日(火)9時半~17時半、6日(水)9時~17時半

**会場** 東京理科大学1号館17階記念講堂

東京都新宿区神楽坂1-3 Tel 03-3260-4271

[交通] JR、地下鉄飯田橋駅より徒歩4分。詳細は下記。

**説明** A コースは粉末X線回折法を主として物質の同定、評価に使う人のための初心者向きコースです。これから粉末法を使う人にも最適です。また、薄膜材料の粉末回折についてもわかりやすく紹介します。

B コースは粉末X線回折法を結晶構造解析に使う人のためのコースです。

A コースとB コースは相互に関係が深く、続けて受講することで粉末X線解析をよりよく理解できますが、どちらか片方のコースのみの受講も可能です。

### プログラム (予定)

#### 1日目 (Aコース) 粉末X線回折法の実際

1. 粉末回折パターンはどのようにして作られるか (東理大・理) 中井 泉 9:30-11:00  
回折ピークの位置と強度はどのような意味をもつか、結晶学の基礎、粉末回折パターンをつくる
2. 粉末回折計の上手な使い方 (株リガク) 藤縄 剛 11:10-12:10  
粉末X線回折装置(光学系、X線源、検出器)のしくみとメンテナンス
3. 良質な粉末回折データの測定法 (株リガク) 藤縄 剛 13:10-14:00  
試料調製法、測定条件、構造解析のための測定
4. 粉末回折データの解析技術 (株リガク) 小澤哲也 14:00-16:00
  - 1) 測定データの前処理方法(平滑化、バックグラウンド除去、 $K\alpha_2$ 除去、ピークサーチ、半値幅の算出)、格子定数精密化の原理と計算方法(外挿法、最小二乗法、全パターンフィッティング法)
  - 2) 物質の同定(同定の原理、ICDD-PDFの使い方、自動検索、同定のコツと注意点)
5. 薄膜材料のX線回折による評価技術 (株リガク) 松尾隆二 16:10-17:10  
斜入射、インプレーン回折の実際

## 2日目 (Bコース) 粉末法による結晶構造解析入門

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 9:00-10:30  
結晶構造パラメータと結晶構造因子、回折強度、消滅則、空間群、結晶構造の論文の読み方
2. リートベルト法 (KEK) 神山 崇 10:40-12:10  
原理、モデル関数、プロファイル関数、RIETAN の入力データ、解析の手順とノウハウ
3. VENUS を活用した三次元可視化とパターン分解 (物材機構 物質研) 泉 富士夫 13:10-14:50  
最大エントロピー法 (MEM) 、MEM に基づくパターンフィッティング (MPF) 、結晶構造と電子密度の三次元可視化、Le Bail 法、最大エントロピー・パターンソン法
4. Visual RIETAN によるリートベルト解析の実際 (株リガク) 小澤哲也 15:00-16:00  
入力データ、シミュレーション、解析の実際、結晶構造表示、応用例
5. 未知構造の非経験的構造解析 (産総研 東北センター) 池田卓史 16:10-17:20  
格子を決める、空間群をきめる、構造を解く

### 受講料、定員、締切

A コース、B コースとも 1日 結晶 (共催) 学会会員 8,000 円、協賛学協会会員 10,000 円、  
学生 7,000 円、一般 12,000 円(テキスト代込)

2日間 結晶 (共催) 学会会員 15,000 円、協賛学協会会員 19,000 円、  
学生 12,000 円、一般 22000 円(テキスト代込)

テキスト「粉末X線解析の実際」(朝倉書店)をすでに持っている不要の方は上記から2,000円引き。

なお、同テキストにない新しい部分については、講習会用テキストを全員に配布する

定員：100名 (先着順) 締切 6月20日

### 申し込み方法

参加希望者は以下の a-e の各事項を明記の上、E-mail または Fax にてお申込み下さい。

- a. 参加者氏名
- b. 結晶学会会員番号または日本分析化学会X線分析研究懇談会会員番号/協賛学協会会員の場合所属団体名。結晶学会入会希望の有無 (入会希望ありの場合、本講習会では会員料金を適用します)。入会希望者はホームページから入会申込書をダウンロードして参加申込と一緒に送付してください。
- c. 連絡先 (所属名・郵便番号および所在地・Tel・Fax・E-mail)
- d. 受講区分 A+B コース A コースのみ B コースのみ
- e. 受講料の金額 「粉末X線解析の実際」(朝倉書店) 不要の方は明記してください。

**申込先** 〒112-0012 東京都文京区大塚 3-11-6 大塚三丁目ビル 7F

日本結晶学会事務局 TEL: 03-5940-7640 FAX: 03-5940-7980 E-mail: x-ray05@r-sipec.jp

**問合先** 〒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 3235-2214、E-mail: inakai@rs.kagu.tus.ac.jp]

## ホームページ

日本結晶学会 <http://wwwsoc.nii.ac.jp/crsj/index.html>

X線分析研究懇談会 HP <http://www.nims.go.jp/xray/xbun/index.htm>

泉 富士夫 HP <http://homepage.mac.com/fujioizumi/index.html>

## ◆講習会場の説明

東京理科大学 1号館 17階 記念講堂、特別会議室

<http://www.tus.ac.jp/camp/kagurazaka.html>

飯田橋駅西口改札を出て右手方向（神楽坂方面）に見える白い17階建ての建物です。

最寄り駅

JR 飯田橋駅西口（市ヶ谷寄り）

地下鉄飯田橋駅 B3出口（東京理科大出口）

東京メトロ有楽町線・南北線・東西線、都営大江戸線

地下鉄は有楽町線、南北線が一番便利で、東西線はさらに5分くらい歩きます。