

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

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、東京理科大学生涯学習センター

期日 平成14年2月5日(火)～8日(金)

会場 講義 日本化学会会館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>

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・サイエンス福井工場

福井県坂井郡坂井町長屋78(株) ソディック内

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>

主旨: 初心者でもX線リートベルト法を実際に使えるようにするため、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講義し、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」(朝倉書店、平成14年2月出版予定)を用います。

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
 - 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
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
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 (理学電機株) 藤縄 剛
試料調製の勘所、装置と光学系、測定条件の設定

2月6日(水)

5. 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
実例を通してプログラムに入力するデータを解説する
6. RIETAN-2000 によるリートベルト解析の実際 (高工研) 神山 崇
解析の進め方、注意点、解けない時の対策、解析例
7. 解析結果の評価 (物材機構物質研) 泉 富士夫
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
8. リートベルト法の材料解析への応用 (産総研) 秋葉悦男
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)
9. 粉末結晶構造解析支援ソフトウェア (理学電機株) 藤縄 剛
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)
10. RIETAN-2000 支援アプリケーション"Visual RIETAN" (理学電機株) 小澤 哲也
対話 GUI、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

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日に東京理科大神楽坂校舎で、測定実習は8日に理学電機(東京、定員30名)、(株)マック・サイエンス(福井県坂井郡坂井町、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)、講義のみ2万円(懇談会会員 15,000円、学生9,000円)
解析実習のみ1万円(懇談会会員 8,000円、学生 6,000円)、測定実習のみ1万円(懇談会会員 8,000円)

受付は先着順で、測定実習参加希望の方は、希望先を明記して下さい。

なお、2月4日(月)に日本化学会で行われる講習会「粉末X線解析の実際」に4,000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、粉末回折法全般について徹底理解が得られます。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、規定の参加費の4,000円引きでお申し込みください。

解析実習(2月7日:定員40名) 各自1台のパソコンとデモ版 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」(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
(粉砕と整形、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
(スリットの設定と照射面積、測定範囲、測定間隔、X線管球の選択)
- (4) その他

講義及び解析実習受講者はテキスト「粉末X線解析の実際」(朝倉書店)代込み、測定実習のみ参加の方で希望者は会場にて別途購入(予価5,000円)してください。

講義受講料はテキスト「粉末X線解析の実際」(朝倉書店)代込み。解析、測定実習のみ参加の方で、テキスト入手希望者は、会場にて別途購入(予価5,000円、割引有)してください。

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)5487-2790、FAX:3490-3572、e-mail:ktanaka@jsac.or.jp〕HP: <http://www.nims.go.jp/xray/xbun/index.htm>

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