

## 2019年度中級者向けZ-Code講習会

2019年度の粉末構造解析ソフトウェア Z-Code の中級者向け講習会を開催します。J-PARC MLF の粉末回折装置を利用して得られた回折データの解析経験がある方が対象です。その経験の元に、実際に測定された各種結晶構造の回折データを用いて少し高度な解析を実習します。お使いの PC を用いた実習を行いますので、Windows PC をご持参ください。Windows OS は Windows 8.1, 10 です (64 ビット)。Mac PC でも受講できます (macOS 10.12 以降)。多くの皆さまの参加をお待ちしています。

開催日時：2020年3月9日(月)9:20 ～ 3月10日(火)17:00

場所：エッサム神田ホール1号館，2階・多目的ホール  
〒101-0045 東京都千代田区神田鍛冶町3-2-2

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

参加費：

参加費は無料ですが、資料代として¥2,000 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。資料代は当日徴収させていただきます。領収書を発行します。

目標：

文献等の構造情報に基づき、構造パラメータを理解しながら少し高度な構造解析を行えるようになることを目指します。内容としては下記の通りです。

- 1) Conograph を用いて指数づけを行う
- 2) Z-Rietveld と Z-3D を用いて X 線回折データと中性子回折データのリートベルト解析を行う
- 3) Z-Rietveld 用のファイル (実験室 X 線、放射光など) の作り方を学ぶ
- 4) Z-Rietveld と Z-3D を用いて MEM 解析を行う
- 5) Z-Rietveld を用いて磁気構造を解析する
- 6) Z-Rietveld を用いて有効歪みや有効結晶子サイズを計算する
- 7) 解析が上手くいかない場合の対処法を学ぶ

講師：神山 崇，萩原雅人，齊藤高志 (KEK)，石川喜久 (CROSS)  
石垣 徹 (茨城大学)，木村宏之 (東北大学)，富安亮子 (九州大学)

3月9日(月) 9:20-17:00

9:20-9:30 開会挨拶

野間敬 (CROSS)

9:30-11:00 Z-Rietveld と Z-3D を用いた結晶構造解析  
Z-Rietveld と Z-3D の利用方法の復習を行います。  
実習内容：LaB<sub>6</sub>\_LabXRD, CeO<sub>2</sub>\_iMATERIA

11:00-12:00 回折結晶学の基礎

結晶学の復習を行います。軸の取り方などについて学びます。

12:00-13:00 昼 食

13:00-17:00 Z-Rietveld の中級者向け実習 (1)

指導をほとんど受けずに、少し高度なリートベルト解析を自分で正しく実施できることを目指します。複数相の解析、複数データの同時解析、原子間距離などの不等式制約条件下でのリートベルト解析を学びます。Z-Rietveld 用のファイル (実験室 X 線、放射光など) の作り方を学びます。

実習内容 :  $\text{LiCoO}_2$ \_LabXRD&Reactor, (複数バンク), #4\_ $\text{TiO}_2$ \_iMATERIA,  $\text{Li}(\text{Co}, \text{Ni})\text{O}_2$ , 不等式制約条件下の例, ヒストグラム作成の例

17:00 1 日目終了

3 月 10 日(火) 9:30-17:00

9:30-11:30 Z-Rietveld の中級者向け実習 (2)

Z-Rietveld から Z-MEM へのスムーズな流れを実習します。

実習内容 :  $\text{BaTiO}_3$ \_XRD&中性子,  $\text{C}_{18}\text{H}_{17}\text{NO}_2$ , Naphthalene,  $\text{Rb}_4\text{Cu}_{16}(\text{I}, \text{Cl})_{20}$

11:30~12:30 昼 食

12:30-14:00 Z-Rietveld の中級者向け実習 (3)

磁気構造をプロパゲーションベクトルを用いて解析する方法を学びます。

実習内容 :  $\text{MnF}_2$ , 整合・非整合磁気構造の解析例

14:00-14:40 Conograph を用いた指数付けの実習

14:40-14:50 休 憩

14:50-15:30 Z-Rietveld の中級者向け実習 (4)

有効歪みや有効結晶子サイズの計算方法を学びます。実習内容 :  $\text{TiO}_2$

15:30-16:00 Z-Rietveld の中級者向け実習 (5)

リートベルト解析が上手くできなかった時の対処法のいくつかを、エラーを再現させログに記載されているエラーメッセージを読み取りながら学びます。

実習内容 :  $\text{Al}_2\text{O}_3$  エラーの例

16:00-16:50 質疑

16:50-16:55 閉会挨拶 峯村哲郎 (茨城県)

<問合せ先>

ご不明な点は下記までお問い合わせください。

総合科学研究機構中性子科学センター(CROSS)

野間敬 (t\_noma@cross.or.jp)

## 【参加申込み】

下記の申込フォームから3月2日（月）までにお申し込みください。

[https://docs.google.com/forms/d/1HWST\\_lhE15uPO5xRwMpbUJUvo9Q88tChYtnUQ-4eXTA/edit](https://docs.google.com/forms/d/1HWST_lhE15uPO5xRwMpbUJUvo9Q88tChYtnUQ-4eXTA/edit)

ご入力いただいたメールアドレスにお申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 大内 薫

E-mail: [info@j-neutron.com](mailto: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3月2日（月）までにお申し込みください。

## <会場へのアクセス>

### <貸し会議室>

エッサム神田ホール 1号館

東京都千代田区神田鍛冶町 3-2-2

JR 神田駅北口徒歩 1分

東京メトロ銀座線神田駅 3 出口前

<http://www.essam.co.jp/hall/access/>

