

## 2021年度中級者向けZ-Code講習会開催案内

2021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。中級コースは、J-PARC MLFの粉末回折装置を利用して得た回折データの解析経験がある方が対象です。その経験の下に、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の実習を行います。多数の皆様のご参加をお待ちしています。今回も講師の先生方の講義映像を特設サイトに掲載し、それを見て学習するオンデマンド方式にて開催いたします。

開催日時：2021年12月1日(水)【予定】 ～ 2022年2月28日(月)

＜特設サイト開設予定期間。開設期間は申込者に別途ご案内いたします＞

開催方法：予め収録した先生方の講義の映像とテキストを特設サイトに掲載します。参加の方には上記期間内に特設サイトにアクセスしていただき、各先生の講義映像をご覧いただきながら、自ら実習を行っていただきます。期間内は繰り返し視聴が可能です。  
なお、質問はメールでお受けすることになります。

実習の目標：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うことができるようになることをめざします。

必要機材：Windows PC (Windows8.1、Windows10 64bit)、または Mac PC (macOS 10.14以降)

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

共催：茨城県中性子利用研究会

参加費[資料代]:2,000円(中性子産業利用推進協議会以外の民間企業の方のみご負担いただきます。大学、学生、公的研究機関、および中性子産業利用推進協議会の会員企業の方は無料)資料代は申込受付後、指定口座に振り込んでいただきます。振込確認後、特設サイトのURL、ID、パスワードをメールにてご連絡します。

＜資料代振込先＞：常陽銀行 東海支店(普通)1598420 口座名：中性子産業利用推進協議会  
チュウセイサンギョウリョウスイシンキョウギカイ

### 開催内容(プログラム) [ ]内は学習に必要な時間の目安です。

#### ＜講義＞

- 1) 回折結晶学の基礎 [東北大学・木村宏之 / 約90分]
- 2) TOF粉末回折法 [茨城大学・石垣 徹 / 約70分]
- 3) Conographを用いた指数付け [九州大学・富安亮子 / 約40分]

#### ＜実習＞

- 4) Z-RietveldとZ-3Dを用いた結晶構造解析 [KEK・神山 崇 / 約90分]  
Z-RietveldとZ-3Dを組み合わせた結晶構造解析を学びます。角度分散型とTOF型のプロファイル関数について学びます。また、収束させるコツを学びます。  
実習1 実験室X線開設データの解析 LaB<sub>6</sub> LabXRD  
実習2 CeO<sub>2</sub> iMATERIA BSバンクデータの解析
- 5) Z-Rietveldの中級者向け実習(1) [KEK・神山 崇 / 約240分]  
複数相の解析、複数データの同時解析、複雑な制約条件、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3 Li(Ni, Co)O<sub>2</sub> iMATERIA BSバンクデータの解析
- 実習4 TiO<sub>2</sub> iMATERIA BSバンクデータの解析
- 実習5 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> iMATERIA BSバンクデータの解析
- 実習6 LiCoO<sub>2</sub> 原子炉角度分散型データの解析
- 実習7 LiCoO<sub>2</sub> 実験室XRDデータの解析
- 実習8 マルチヒストグラム解析。中性子回折&XRDデータの同時解析
- 実習9 CeO<sub>2</sub> 放射光X線回折データの解析
- 実習10 連続多点データの自動解析
- 実習11 角度分散型中性子回折データの解析 Rb<sub>4</sub>Cu<sub>16</sub>I<sub>7.2</sub>Cl<sub>12.8</sub>

6) Z-Rietveldの中級者向け実習 (2) [CROSS・石川喜久/約120分]

Z-RietveldからZ-MEMへのスムーズな流れを実習します。

実習12 BaTiO<sub>3</sub>のXRDと中性子データの違いを見る。

7) Z-Rietveldの中級者向け実習 (3) [JAEA・萩原雅人/約120分]

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14 : MnF<sub>2</sub>, Co<sub>2</sub>(OD)<sub>3</sub>Br, ErF<sub>3</sub> 整合・非整合磁気構造の解析例

8) Z-Rietveldの中級者向け実習 (4) [KEK・神山 崇/約10分]

有効歪みや有効結晶子サイズの計算方法を学びます。

9) Z-Rietveldの中級者向け実習 (5) [KEK・神山 崇/約10分]

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13 TOFプロファイル関数

10) Z-Rietveldの中級者向け実習 (6) [KEK・神山 崇/約40分]

ローカルパラメータの利用とポーリー法について学びます。

入出力ファイルの中身と利用方法を学びます。

### 【参加申込方法】

下記の申込フォームからお申し込みください。特設サイト掲載期間中は受け付けます：  
ご入力いただいたメールアドレスにお申し込み確認のメールが自動的に送信されます。

[https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSdE4o\\_XSsA-PVLkAS2Yuo9TgSdoz9aLHfGz9L5zbn\\_5S0YaDA/viewform](https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSdE4o_XSsA-PVLkAS2Yuo9TgSdoz9aLHfGz9L5zbn_5S0YaDA/viewform)

返信がご確認いただけない場合、このフォームが利用できない場合には、Eメールにて下記へお申し込みください：

Eメール申込先：中性子産業利用推進協議会 事務局 綿引美知枝

E-mail: [info@j-neutron.com](mailto:info@j-neutron.com)

本文に(1)お名前、(2)ご所属、(3)連絡先(電話番号、E-mail address)

をご記入の上、Eメールにて特設サイト終了前までにお申し込みください。

### 【アンケートのお願い】

参加の皆様には、次回開催の参考とするため、アンケートへの回答をお願いいたします(下記 Google Form: 12月20日頃開設予定)。参加の皆様には2月末に改めてご案内させていただきます。ご協力宜しくお願い致します。

[https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSc0zHS\\_MZBPV85Z3\\_\\_ZtcAA-NeteP6gzXkiTrL\\_CBAQIFrN4Q/viewform](https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSc0zHS_MZBPV85Z3__ZtcAA-NeteP6gzXkiTrL_CBAQIFrN4Q/viewform)

<問合せ先> ご不明な点は下記までお問合せください：

総合科学研究機構中性子科学センター(CROSS) 日比政昭 ([m\\_hibi@cross.or.jp](mailto:m_hibi@cross.or.jp))

以上